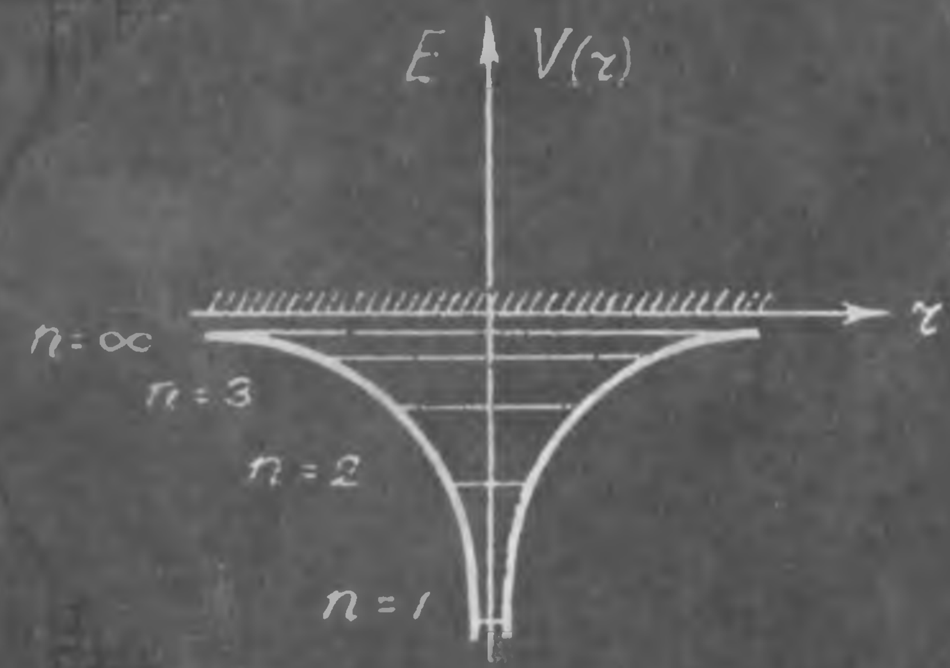
Ғ. Ҳ. ҲОШИМОВ
Р. Я. РАСУЛОВ
Н. Ҳ. ЙЎЛДОШЕВ

КВАНТ МЕХАНИКАСИ АСОСЛАРИ



Ғ. Ҳ. ҲОШИМОВ, Р. Я. РАСУЛОВ, Н. Х. ЙУЛДОШЕВ

КВАНТ МЕХАНИКАСИ АСОСЛАРИ

Ўзбекистон Республикаси Халқ таълими вазирлиги педагогика олий ўқув юртларининг физика ва физика-математика факультетлари талабалари учун ўқув қўлланма сифатида рухсат этган

ТОШКЕНТ «ЎҚИТУВЧИ» 1995

Тақризчилар: Физика-математика фанлари доктори,
профессор Т. М. Мирзамаҳмудов;
профессор А. У. Раҳимов

Мазкур қўлланма «Норелятивистик квант механикаси» асосларини ўз ичига олган бўлиб, мавзу танлаш ва уларни баён қилишда педагогика институтларининг ўқув дастурига амал қилинди. Норелятивистик квант механикасида ўрганиладиган ҳодисаларнинг физик моҳиятини очишга ва квант назарияси тушунчаларига кўпроқ эътибор берилди. Математик амаллардан ҳодисаларни тушунтириш учун зарур даражадагина фойдаланилди.

Ушбу қўлланма педагогика институтларининг талабалари учун мўлжалланган.

$Х\ \dfrac{1604050000-185}{353\ (04)-95}\ 43-94$

ISBN 5-64502263-7

СЎЗ БОШИ

Ҳозирги давр талабларига жавоб бера оладиган миллий кадрлар тайёрлаш муаммоси республикамиз халқ таълими олдига биринчи навбатда юқори савия ва дид билан ўзбек тилида ёзилган дарслик ва ўқув қўлланмалари яратишни бош вазифа қилиб қўйди. Мазкур қўлланмада педагогика институтларининг «Физика ва информатика», «Физика ва математика», «Физика ва астрономия» кабн мутахассисликларга мўлжалланган «Квант механикаси асослари» баён этилади. Ушбу қўлланмани яратишда муаллифлар шу кунгача квант механикасидан мавжуд ўқув дастурларига мос келадиган ўзбек тилида ёзилган қўлланма йўқлигини ҳисобга олдилар ва Улуғбек номидаги Фарғона давлат педагогика институтининг физика ва математика факультети талабаларига қатор йиллар мобайнида ўқиган лекцияларини асос қилиб олдилар.

Китобнинг дастлабки бобларида «Квант назариясининг экспериментал асослари» (абсолют қора жисм нурланиш қонуниятлари, ёруғликнинг элементар квант назарияси, зарраларнинг тўлқин хоссалари), «Квант механикасининг математик аппарати» (Эрмит операторлари, операторларнинг ўртача қиймати, ноаниқликлар муносабати) ҳамда Шредингер тенгламалари баён қилинади. Сўнгра «квант механикасида симметрия ва сақланиш қонунлари», «тасаввурлар назарияси»га қисқача тўхталиб, «бир ўлчовли фазодаги ҳаракат»га доир қатор масалалар (зарраманинг эркин ҳаракати, туннель эффекти, потенциал чуқурлик ичидаги ҳаракати, чизиқли гармоник осциллятор) ва атом физикасининг фундаментал асосини ташкил этувчи «марказий симметрик потенциал майдондаги ҳаракатнинг умумий назарияси» келтирилади. «Қўзғалишлар назарияси», «Нурланишнинг феноменологик квант назарияси», «Электрон спини», «Айнан ўхшаш заррачалар системаси», «Электр ва магнит майдондаги атом», «Мураккаб атомларнинг тузилиши» алоҳида бобларда баён этилган. «Релятивистик квант механикасининг элементлари» га битта боб ажратилди, холос. Бу ва IV, V, IX бобларга киритилган айрим материаллардан семинар ва мустақил машғулотларда фойдаланиш мақсадга мувофиқ деб ҳисоблаймиз.

Мавзу танлаш ва уларни баён қилишда педагогика институтларининг дастурига мувофиқ норелятивистик квант механикаси билан ўрганиладиган ҳодисаларнинг физик моҳиятини очишга ва квант назарияси (микродунёни характерловчи) тушунчаларига кўпроқ эътибор бердик. Сонли масалаларни ҳисоблашга ҳам ҳаракат қилдик. Математик аппаратдан мавзуни тушунтириш учун зарурий даражадагина фойдаландик.

Ушбу қўлланма квант механикасидан системали равишда ўзбек тилида ёзилаётган биринчи китоб бўлаётганлиги учун у айрим хато ва камчиликлардан ҳоли бўлмаса керак деб ўйлаймиз. Муаллифлар китобнинг кейинги нашрлари сифатини яхшилашга имкон берадиган қимматли таклиф ва мулоҳазаларнини юборувчи китобхонларга чексиз миннатдорчилик билдирадилар.

Китоб ҳақидаги фикр ва мулоҳазаларингизни қуйидаги адресга юборинг: 700129, *Тошкент шаҳар, Навоий кўчаси, 30. «Ўқитувчи» нашриётининг физика-математика адабиёти таҳририяти.*

КИРИШ

Квант механикаси[1] *ҳозирги замон назарий физикасининг муҳим бўлимларидан бўлиб, микрозарралар* (электрон, протон ва бошқа элементар зарралар, атомлар, молекулалар, атом ядролари) *ва улар системасининг ҳаракат қонунларини, бу ҳаракатларни тавсифлаш усулларини ўрганади.* Унинг ёрдамида заррачалар ва системани характерловчи катталиклар билан тажрибада бевосита ўлчанадиган катталиклар ўртасидаги муносабатлар ҳисоблаб топилади.

Маълумки, Ньютон механикасининг муҳим иккита камчилиги мавжуд. Биринчидан, у тезлиги ёруғлик тезлигига яқин жисмларнинг ҳаракати учун яроқсиздир. Бу ҳолда Эйнштейннинг махсус нисбийлик назарияси асосида қурилган релятивистик механика методларидан фойдаланиш талаб этилади. Иккинчидан, Ньютон механикаси ва шунингдек, уни хусусий ҳол сифатида ўз ичига олувчи релятивистик механика (ҳар иккаласига қуйида биз *классик механика* деб мурожаат қиламиз) микрозарралар ҳаракатини ўрганишга тадбиқ этилганда кўпинча тажрибага мос тушадиган натижалар бермайди. Квант механикаси микрозаррачалар дунёсини физик тавсифлашнинг умумийроқ назарияси бўлиб, текширилаётган масалаларда таъсир ўлчовидаги (эрг.сек) физик катталиклар Планк доимийси h га қараганда жуда катта бўлган хусусий ҳолларда классик механикага ўтади. Уни одатда кичик тезликларда ($v/c \ll 1$) ўринли бўлган *норелятивистик* ва махсус нисбийлик назарияси талабларини қаноатлантирадиган *релятивистик* квант механикаларига бўлиб ўрганилади. Норелятивистик квант механикаси бу-

[1] Баъзи адабиётларда «Тўлқин механикаси» деган номланиш ҳам учраб туради.

тунлай тугал ва мантиқий қарама-қаршиликсиз назариядир. Бундан фарқли ўлароқ, релятивистик квант механикаси ҳозирча тугалланмаган, майдонлар назарияси дуч келган принципиал қийинчиликлардан ҳоли бўлмаган назария ҳисобланади. Шу сабабдан ҳамда педагогика институтларининг ўқув программасини эътиборга олиб китобда релятивистик квант механикаси элементларига қисқача тўхталиб, *майдонларнинг квант назариясига* ўрин берилмаган.

Квант механикаси қонунлари ҳозирги замон модда тузилишининг фундаментал асосини ташкил этиши мутахассисларда шубҳа туғдирмайди. Бу таълимот узоқ йиллардан бери муаммо бўлиб келган атомлар ва атом ядроларининг тузилишини, химиявий боғланишлар табиатини, элементлар Менделеев даврий системасининг моҳиятини, элементар заррачалар хусусиятларини, қолаверса, жуда кўп сондаги оптик, электромагнит, акустик ва бошқа физик ҳодисаларни тўғри тушунтира олди. У бир қатор макроскопик ҳодисаларни, жумладан, газлар ва қаттиқ жисмлар иссиқлик сиғимининг температурага боғланишини, қаттиқ жисмлар (металлар, ярим ўтказгичлар, диэлектриклар) тузилиши ва хоссаларини тушуниб етишга имкон берди. Ферромагнетизм, ўта оқувчанлик, ўта ўтказувчанлик каби машҳур ҳодисалар фақат квант механикаси ёрдамидагина ўзларининг тўғри талқинларини топди. Астрофизиканинг оқ миттилар, нейтрон юлдузлар, қора доғлар сингари объектларининг табиати, юлдузлар ва Қуёш бағрида кечадиган термоядровий синтез реакцияларининг механизми квант назарияси томонидан мунтазам кетма-кетликда очиб берилди. Жозефсон эффекти, Холлнинг квант эффекти каби ҳодисаларда макроскопик объектларнинг фақат квант механикаси қонунлари амал қиладиган характерлари намоён бўлади. Давримизнинг энг муҳим кашфиётлари очилаётган молекуляр биология фанида ҳам квант назарияси кенг қўлланилмоқда. Ҳозирги замон фан-техникаси ривожланишида кескин бурилиш ясаган квант электроникаси, радиоэлектроника ва оптоэлектроникасининг фундаментал асосларини квант механикаси ташкил этади.

Асримизда рўй берган қатор буюк техник ютуқлар квант механикаси билан боғлиқдир. Масалан, ядро реакторларининг, қудратли тезлатгичлар ва замонавий микроэлектроника қурилмаларининг ишлаш принциплари асосида квант механикаси қонунлари ётади. Ер шароитида бошқариладиган термоядровий реакцияларни амалга ошириш, ажойиб хусусиятли магнетик, сегнетоэлектрик, ярим ўтказгич, ўта ўтказгич моддалар топиш ва улар асосида энг янги асбоблар яратиш квант механикасига таяниб иш кўришни тақозо этади. Шундай қилиб квант механикаси бизнинг моддий дунё тузилиши ҳақидаги тасаввурларимизни тубдан ўзгартирибгина қолмасдан, балки инсон турмуш тарзига кучли таъсир ўтказаётган «инженер»лик фанига ҳам айланиб қолди.

Квант механикасининг яратилиши ва ривожланиши ҳақида қисқача тарихий маълумот

XIX аср охири ва XX аср бошларида классик физика доирасида туриб тушунтириб бўлмайдиган бир қатор тажриба маълумотлари тўпланди. Уларни олишда ўрганилган ҳодисаларни бир қарашда гўё ўзаро боғлиқ бўлмаган икки группага ажратиш мумкин эди. Биринчи группа ҳодисалардан (абсолют қора жисм нурланиши, фотоэффект, Комптон эффекти, секин электронлар дастасида дифракция) ёруғлик ва микрозарралар оқимининг икки ёқламалик — дуалистик табиати келиб чиқса, иккинчиси эса (атомларни мураккаб тузилганлигини тасдиқловчи тажрибалар, атомларнинг нурланиш ва ютилиш чизиқли спектрлари) классик тасаввурларга таяниб тургун атомлар мавжудлигини ва уларнинг оптик спектрларидаги қонуниятларни асослаб бўлмаслиги билан боғлиқ эди. Ана шу икки группа ҳодисалар ўртасидаги боғланишни топишга ва уларни ягона нуқтаи назардан тушунтира оладиган назария яратишга бўлган уринишлар охир-оқибатда квант механикасининг туғилишига сабаб бўлди.

Бошқа кўпчилик илмий йўналишлардан фарқли улароқ квант механикасининг туғилиш санасини аниқ кўрсатиш мумкин. 1900 йил октябрь ойида машҳур немис физиги Макс Планк томонидан классик физикага ёт бўлган *квантлар* тушунчаси киритилди. У абсолют қора жисмларнинг тажрибага мос келадиган назариясини қуриш учун *осциллятор* (мувозанат вазият атрофида тебранувчи заррача) *энергияси дискрет* (узуқ-узуқ) *ўзгаради,* яъни *квантлашган* бўлади деган гипотезани илгари сурди. Классик электродинамика ва статистик физика қонунларига кўра киздирилган жисмлар чиқарувчи электромагнит нурланиш интенсивлиги частотага қараб ўсиб бориши керак (инглиз физиклари Жон Рэлей, Жеймс Жинс), тажрибада эса маълум характерли частота қийматидан сўнг интенсивлик экспоненциал равишда камайиб бориши кузатилади. Бу қарама-қаршиликни енгиш учун Планк ўзининг феноменологик квантлар назариясини қурди. У топган формула нурланиш интенсивлигини температура ва частотага қараб ўзгаришини тажрибага тўла мос ҳолда ифодалайди.

Квантлар назариясини вужудга келишидаги иккинчи муҳим қадамни 1905 йилда буюк назариётчи физик Альберт Эйнштейн қўйди. У Планк ғояларини ривожлантира бориб *ёруғлик квантлари* гипотезасини ўртага ташлади: ёруғлик нурланиши ва ютилиши жараёнларигина дискрет бўлиб қолмасдан, унинг ўзи ҳам алоҳида порциялар — ёруғлик квантлари шаклида тарқалади, яъни ёруғлик алоҳида зарралар оқимидан иборат. Ёруғлик кванти кейинчалик фотон (америкалик физико-химик Гильберт Льюис, 1929 йил) деб номланди. Фотон энергияси частотага пропорционал бўлиб, тинчликда массага эга эмас. Эйнштейн бу гипотезага таяниб, ёруғликнинг тўлқин назарияси доирасида муаммо ҳисобланган фотоэффектнинг тажрибада топилган қонуниятларини тўлиқ тушунтириб берди. Шуниси қизиқки, ёруғликнинг корпускуляр табиати ҳақидаги ўтган асрда унутилиб юборилган Ньютон ғоясининг янгитдан туғилиши бўлган ёруғлик квантлари гипотезаси Планк дискретлигининг механик системалардан электромагнит майдонга табиий равишда кўчирилиши эканлигини физиклар дарҳол тушуниб етмадилар: Эйнштейннинг фотонлар назарияси 1922 йилда америкалик физик Артур Комптоннинг рентген нурларини эркин электронларда сочилиши бўйича ўтказган экспериментларидан сўнг тўлиқ ғалаба қозонди. Фотон $\varepsilon = h\nu$ энергия билан бир қаторда $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c}$ (ν — частота, λ — тўлқин узунлик, c — ёруғлик тезлиги) импульсга ҳам эга бўлиши исботланди. Ёруғликнинг икки ёқламали: корпускуляр — тўлқин табиати узил-кесил қабул қилинди.

Эйнштейн 1907 йилда Планк ғояларини умумлаштириб қаттиқ жисмлар иссиқлик сиғимининг 1-квант назариясини қурди. У қуйидаги мулоҳазаларга таянди:

қаттиқ жисмларда иссиқлик ҳаракати асосан атомларнинг тебранишига келтирилади; шунинг учун иссиқлик ҳодисаларини ўрганишда қаттиқ жисм турли частоталарда тебранаётган осцилляторлар тўпламига динамик эквивалент, бундай осцилляторлар энергияси ҳам квантлашган. Юқори температураларда моляр иссиқлик сиғим учун Эйнштейн назариясидан классик физикада маълум бўлган Дюлонг-Пти қонуни, паст температураларда эса машҳур «экспоненциал» қонуният келиб чиқади. Эйнштейн назариясини турли аниқликлар киритиш йўли билан ривожлантириб, 1912 йилда немис физиклари Петер Дебай, Макс Борн ва Т. Карманлар кристалл қаттиқ жисмлар иссиқлик сиғимининг тажрибага мос келган квант назариясини яратдилар.

1913 йилда 27 ёшли даниялик физик Нильс Борнинг «Атомлар ва молекулаларнинг тузилиши ҳақида» номли илмий мақоласи эълон қилинди. Бу ишда Бор Планкнинг осциллятор энергияси қийматларини квантлашиши ҳақидаги гипотезасини атомнинг 1911 йилда инглиз физиги Эрнст Резерфорд таклиф этган планетар моделини назарий асослашга тадбиқ этди. Бу моделга кўра атомнинг деярли бутун массаси унинг мусбат зарядли жуда кичик ўлчамдаги ($\sim 10^{-14}$ м) марказий соҳаси — атом ядросига тўпланган, манфий зарядли электронлар эса ядро атрофида турли орбиталар бўйлаб айланиб юрадилар. Электронларнинг бундай ҳаракатини текширишга классик физика қонунлари қўлланганда турғун атомлар мавжуд бўлмайди, деган парадокс (мантиққа зид) натижа олинди. Ҳақиқатан, электроннинг орбитал ҳаракатида тезланиш ҳамма вақт нолдан фарқли. Классик электродинамикага биноан эса тезланиш билан ҳаракатланаётган зарядли заррача электромагнит тўлқин нурлатади. Шунинг учун электрон ўз энергиясини узлуксиз равишда йўқота бориб, охир-оқибатда $\sim 10^{-8}$ сек вақт ичида ядрога қулаб тушиши керак. Бироқ бу хулосага қарама-қарши улароқ турғун атомлар табиатда мавжуддир. Демак, классик физика атомдаги электронлар ҳаракати учун яроқсиздир. Атомлар турғунлигини тушунтириш учун Бор ажиб бир зеҳнлилик билан қуйидаги гипотезага келди: электрон атомда маълум квантлашиш шартини қаноатлантирувчи (таъсир катталиги Планк доимийси h га каррали бўлган) орбиталар бўйлаб ҳаракатланади. Бундай *стационар орбитада (энергетик ҳолатда)* электрон ёруғлик квантлари чиқармайди. Ёруғлик нурланиши фақатгина электроннинг бир орбитадан бошқасига, яъни бир энергетик сатҳдан қуйидагисига ўтиши натижасида юз беради. Бор бу гипотеза асосида водород атоми ва водородсимон ионларнинг нурланиш спектрал чизиқларининг частоталарини юқори аниқлик билан ҳисоблаб топишга имкон берувчи формулани олди. Атомлар квантлашган энергетик сатҳларининг мавжудлиги 1913 йилдаёқ Франк-Герц тажрибасида бевосита исботланди.

Кейинги ўн йилликда бир қатор атом ҳодисалар муваффақият билан тушунтириб берилди. Масалан, 1915—1916 йилларда немис физиги Арнольд Зоммерфельд Бор назариясини ривожлантириб, водород атоми спектрининг нозик структураси назариясини қурди (радиал ва азимутал квант сонлари тушунчасини киритди), ўз ватандоши Петер Дебай билан биргаликда Зееман эффектини тушунтиришга фазовий квантлашиш шартини қўллади ва биринчи бўлиб, магнит квант сони тушунчасидан фойдаланди. А. Эйнштейн атом системаларнинг спонтан ва мажбурий нурланиш эҳтимолликлари коэффициентларини киритди ва назарий равишда индукцияланган нурланишни башорат қилди: 1921 йилда Н. Бор химиявий элементлар даврий системасининг асосий хусусиятларини тушунтириб берди.

Француз физиги Луи де-Бройль 1924 йилда Бор постулатларининг моҳиятини тушунтириш максадида ўша давр физикларини ўта таажжубга солган гипотезани ўртага ташлади: *моддий заррача ҳаракатига маълум тўлқин тарқалиши мос келади,* масалан, электрон ҳам корпускуляр, ҳам тўлқин хусусиятга эга: бошқача айтганда ёруғлик учун Эйнштейн таклиф қилган корпускуляр-тўлқин дуализми бир хил даражада электрон ва бошқа ҳар қандай заррачалар учун ҳам ўринлидир. Эйнштейннинг ёруғлик кванти учун ёзган муносабатдан фойдаланиб де-Бройль заррача импульси p ва унинг эркин ҳаракатига мос келган монохроматик тўлқин (де-Бройль тўлқини) нинг узунлиги λ орасидаги $\lambda = h/p$ боғланишни топди. Де-Бройль тўлқинининг табиати механик ёки электромагнит тўлқинларникидан фарқ қилиб статистик характерга эга (Макс Борн 1926 йил). Электронларнинг тўлқин хоссалари 1927 йилда америкалик физиклар Клинтон Дэвиссон ва Лестер Жермер тажрибасида кузатилди. Кейинрок тўлқин хоссалар атомлар ва ҳатто молекулалар дасталарида ҳам топилди ва де-Бройль гипотезаси тажрибада тўлиқ тасдиқланди.

Тажриба натижаларини тушунтиришда маълум муваффақиятларга эришган бўлишига қарамай, Планк-Бор квант назариялари мантиқий ички қарама-қаршиликдан холи эмас эди: бир томондан Ньютон механикаси асосларидан фойдаланилса, бошқа томондан эса унга ва классик электродинамикага мутлақо бегона бўлган қандайдир сунъий квантлашиш қоидалари қўлланиларди. Бунинг устига Бор назарияси мураккаб атомлар хусусиятларини тушунтиришга ожизлик қилди, нурланиш интенсивликларини қатъий ҳисоблашда катта қийинчиликларга дуч келди. Шу сабабдан электрон ва бошқа микрозарраларнинг корпускуляр-тўлқин хоссаларини биргаликда эътиборга олиб ташқи майдонлардаги ҳаракатини тўғри ва батафсил ифодаловчи назария зарур бўлиб қолди. 1925 йилда немис физиги Вернер Гейзенберг бу йўлда илк қадам қўйди. Унинг ҳаракат тенгламаларида электрон координатаси ва тезликлари ўрнига маълум абстракт алгебраик катталиклар — матрицалар қатнашади, тажрибада кузатиладиган физик катталиклар (масалан, нурланиш частоталари ва интенсивликлари) ва матрицалар орасидаги боғланиш учун содда қоидалар берилди. Гейзенбергнинг бу ишлари ватандошлари Макс Борн ва Паскуаль Иорданлар (1926) томонидан ривожлантирилди. Шундай қилиб *матрицавий механика* вужудга келди.

1926 йилда австриялик назариётчи физик Эрвин Шредингер фақат эркин микрозарраларнинг тўлқин ҳаракати (де-Бройль тўлқинлари) нигина эмас, балки ихтиёрий ташқи майдон таъсиридаги заррача ҳаракатини ифодаловчи машҳур *тўлқин тенгламасини* берди. *Тўлқин функцияси* учун ёзилган бу тенгламани Шредингер водород атомидаги электрон ҳаракатига қўллади. Борнинг сирли туюлган квантлашиш қоидалари эндиликда электрон ҳаракатларини ифодаловчи турғун де-Бройль тўлқинларининг мавжудлик шартлари сифатида табиий равишда ўз-ўзидан келиб чиқди. Ана шундай йўл билан *тўлқин механикаси* юзага келди. Тез орада Шредингер матрицавий ва тўлқин механикалар математик жиҳатдан эквивалент эканлигини исбот қилди. Микрозарралар ҳаракатини ўрганувчи янги механика умумий бир ном билан *квант механика-*

си деб атала бошланди. Шредингернинг тўлқин тенгламаси *норелятивистик квант механикасининг* асосий тенгламаси ҳисобланади. 1928 йилда инглиз физиги Поль Дирак Шредингер тенгламасини умумлаштириб, махсус нисбийлик назарияси талабларини қаноатлантирадиган релятивистик тўлқин тенгламасини ҳосил қилди. Дирак тенгламаси *релятивистик квант механикасининг* энг муҳим тенгламаларидан бири бўлиб, хусусан, электрон-позитрон жуфти туғилиши мумкинлигини башорат этди.

Гейзенберг 1927 йилда квант механикаси тенгламаларининг физик маъносини ёритиб берувчи *ноаниқликлар муносабатини* топди. Бу муносабатга кўра, жумладан, микрозарра координатасини аниқ ўлчашга уриниш унинг импульсини ноаниқ бўлиб қолишига олиб келади ёки аксинча ва демак, классик траектория тушунчасидан микрозарра ҳаракатини ўрганишда фойдаланиш мумкин эмас. Н. Бор Гейзенбергнинг бу ишларини ривожлантириб *тўлдирувчанликнинг умумий принципини* илгари сурди ва микродунё хоссаларини эҳтимолли тавсифлаш зарурлигини кўрсатди. Физикада биринчи марта макроскопик системадаги ҳодисаларнигина эмас, балки алоҳида олинган микрозарра ҳаракатини ҳам статистик характерда ўрганиш методи юзага келди.

Бир қатор атом ҳодисаларни, биринчи навбатда, атомлар нурланиш спектрларини синчиклаб ўрганиш электрон хоссаларини тўлиқ ифодалаш учун уни электр заряд ва массадан ташқари ички (хусусий) импульс моменти — *спин* билан ҳам характерлаш зарурлигига олиб келди. Электрон $\hbar/2$ хусусий механик момент ва $e_0\hbar/2m_0c$ ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$, e_0, m_0 — электрон заряди ва массаси) хусусий магнит моментга эгалиги тўғрисидаги гипотеза 1925 йилда америкалик физиклар Сэмюэл Гаудсмит ва Жорж Уленбеклар томонидан ўртага ташланган эди. Электроннинг спин назарияси швейцариялик физик Вольфганг Паули ишларида кенг ривожлантирилди. У электрон спинини ҳисобга олиш натижасида атомлар, молекулалар, атом ядролари ва қаттиқ жисмлар назарияларида ҳал қилувчи аҳамият касб этган ўзининг тақиқланиш принципини (*Паули принципи* 1925 йил) кашф этишга муваффақ бўлди. Паули принципига мувофиқ ихтиёрий атом системада айни бир квант ҳолатда биттадан ортиқ электрон бўлиши мумкин эмас. Электрон спинининг мавжудлиги атомлар спектрининг мультиплет (нозик) структурасини, Зееман эффектини, атомлар электрон қобиқларининг тўлиб бориш тартибини, ферромагнетизм ва бошқа жуда кўп ҳодисаларни тўғри тушунтириб берди. Бу ерда шуни қайд қилмоқ кераккн, агар норелятивистик квант механикасининг математик аппаратига спин тушунчаси Паули томонидан феноменологик равишда киритилган бўлса, Диракнинг релятивистик тўлқин тенгламасидан электрон спинга ва спин магнит моментга эга бўлиши бевосита келиб чиқади.

Атом тузилишини ўрганиш умуман айтганда, ўз моҳиятига кўра кўп жисм масаласи бўлиб, дастлабки пайтдан бошлаб квант механикасини ўзаро таъсирлашувчи кўп сондаги зарралар системасига тадбиқ этишни талаб этарди. 1926 йилда В. Гейзенберг алмашинув энергияси тушунчасини киритиб гелий атомининг квант назариясини қурди, немис назариётчи-физиги Вальтер Гайтлер ва инглиз физиги Гейнц Лондон 1927 йилда биринчи бўлиб водород молекуласини тақрибий ҳисоблаш йўлини ишлаб чиқдилар. Ана шу тариқа *квант химияси* вужудга кела бошлади. Кўп электронли системанинг квант механикасига металлар ва ярим ўтказгичлар назариясида ҳам кескин эҳтиёж сезилди. П. Диракнинг кўрсатишича (1926 йил) спини $\hbar/2$ га тоқ каррали зарралар системасининг тўлқин функцияси икки зарра координаталарини алмаштиришга нисбатан антисимметрик (Ферми-Дирак статистикаси), спини $\hbar$ га каррали зарралар системаси учун эса симметрик (Бозе-Эйнштейн статистикаси) бўлади. Тез орада оғир атомлар электрон қобиқларини ҳисоблашга имкон берадиган статистик модель (америка физиги Левелин Томас ва Э. Ферми, 1927—1928 йиллар) ва ўз-ўзига мослашган майдон методи (инглиз физиги Дуглас Хартри ва В. Фок, 1928—1930 йиллар) яратилди.

Квант механикасини қаттиқ жисмлар физикасига қўллаш жуда кўп сондаги электромагнит, оптик, иссиқлик ва бошқа ҳодисаларни тўғри тушунтириш имконини берди. Масалан, 1928 йили А. Зоммерфельд металлдаги ўтказувчанлик электронларини Ферми-Дирак статистикасига бўйсунадиган идеал газ сифатида қараб, металларнинг биринчи квант назариясини қурди ва электронлар гази туфайли юзага чиқадиган иссиқлик сиғим нима сабабдан жуда пастлигини аниқлаб берди. Кристалл жисмлар физикасининг энг марказий назарияларидан бўлган *зонавий назария* асослари ва *кристалл потенциал майдони назарияси* 1928—1930 йилларда Феликс Блох (АҚШ), Марсель Бриллюэн (Франция) ва Ханс Бете (Германия)лар томонидан ишлаб чиқилди. Инглиз физиги Алан Вильсон қаттиқ жисмларни зонавий назария асосида металлар, ярим ўтказгичлар ва диэлектрикларга ажратди, «донор» ва «акцептор» электр ўтказувчанлик ҳақидаги тасаввурларни киритиб ярим ўтказгичларнинг квант назариясини яратди (1931 й.) Кристалл панжара ҳаракати билан боғлиқ бўлган иссиқлик ўтказувчанликнинг квант назарияси инглиз физиги Рудольф Пайерлс ишларида ўз аксини топди (1931 йил). Металлар ўта ўтказувчанлигининг қатъий микроскопик назарияси фақат 1967 йилга келиб ишлаб чиқилди (Жон Бардин. Леон Купер ва Жон Шреффер (БКШ, АҚШ,). Купер эффектига кўра спинлари қарама-қарши бўлган икки электрон кристалл панжара тебранишлари воситасида таъсирлашиб, боғланган ҳолат ташкил этишлари мумкин. Бундай Купер жуфтининг электр заряди $-2e_0$ га тенг. 1987 йилда кўп компонентали керамикаларда кашф этилган юқори температурали ўта ўтказувчанлик ҳам кўп заррачалар квант механикаси доирасида ўз талқинини топиши керак деб ҳисобланмоқда.

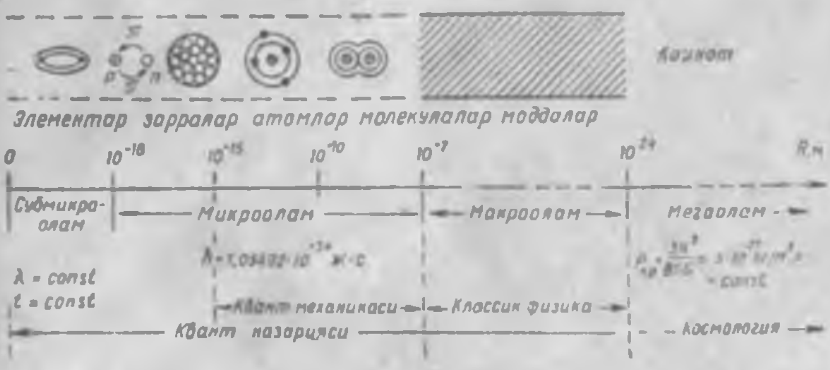
Шундай қилиб, асримизнинг 20-йилларида туғилган квант механикаси кенг доирадаги физик ҳодисаларга муваффақият билан қўлланилди. Кейинги даврларда норелятивистик назария математик аппарат ва турли масалаларни сонли ҳисоблаш методларини такомиллаштириш йўлидан ривожланиб келмоқда. Квант назариясининг ҳозирги замон физикаси тасаввурларини тубдан ўзгартирган охирги тантаналари релятивистик квант механикаси ютуқлари билан боғланган.

I БОБ.

КВАНТ НАЗАРИЯСИНИНГ ЭКСПЕРИМЕНТАЛ АСОСЛАРИ

1-§. КВАНТ МЕХАНИКАСИ ВА УНИНГ ФИЗИКА ФАНИДАГИ УРНИ

Маълумки, физика фани материянинг энг оддий ҳаракатларини ўрганади. Материя кўринишн хилма-хил бўлиб, чексиз кичик объектлардан тортиб то Коинот галактикаларигача бўлиши мумкин. Тарихан инсон дастлаб ўзини ўраб олган кўзга кўринадиган атроф-муҳитни мукаммал ўрганган. Бунда у маълум қонуниятлар, тушунчалар яратди. Ана шу илмий бисоти билан у ўзидан узоқда жойлашган Коинот жисмларининг ҳаракатини ва атроф-муҳитнинг кўзга кўринмас қисмларини ўрганишга киришди. Аммо ҳар қайси соҳаларнинг ўзига хос хусусиятларини эътиборга олиш натижасида физика фанининг янги бўлимлари найдо бўлди. Шулардан бири квант механикаси бўлиб, у асримизнинг 20- йилларида шакллана бошлади. Квант механикасининг физика фанидаги тутган ўрнини ва қўлланиш чегарасини олам масштаби (ўлчами) тушунчасида тасаввур қилайлик. Ҳозирги кунда инсон ўз тафаккури, фан



1,1- расм. Физикада масофаларнинг нисбий масштаблар схемаси.

ва техника ютуқлари ёрдамида узунликни энг кичик 10^{-18} м (электрон ўлчами) дан бошлаб энг катта 10^{26} м (Коинот чегараси) гача ўлчай олади. Бу бир бутун олам учун умумий (универсал) қонуниятлар йўқлиги туфайли уни хусусиятларига қараб қуйидаги тўртта соҳага шартли равишда бўлиш мумкин (1.1- расм):

I соҳа $0 \leqslant R \leqslant 10^{-18}$ бўлиб, уни субмикроолам дейилади;

II соҳа 10^{-18}м $\leqslant R \leqslant 10^{-7}$ м бўлиб, уни микроолам дейилади;

III соҳа 10^{-7}м $\leqslant R \leqslant 10^{24}$ м бўлиб, уни макроолам дейилади;

IV соҳа 10^{24} м $\leqslant R \leqslant \infty$ бўлиб, уни мегаолам дейилади.

Ҳар қайси олам ўзининг фундаментал доимийсига эга бўлиб, бу катталик мазкур оламдаги физик катталикларининг ўлчов бирлиги ҳисобланади. Шу билан бирга бу фундаментал доимийлик бир оламдан иккинчи оламга ўтиш чегарасини билдиради Субмикроолам ўлчами электрон ўлчамидан (10^{-18} м) кичик бўлган соҳалар бўлиб, техник қийинчиликларга кўра амалий жиҳатдан ўрганилмаган. Назарий ҳисоблашларга қараганда бу соҳада вақт ва фазо тушунчаси ўз маъносини йўқотади. Бу соҳада узунликнинг фундаментал доимийси бўлиши керак, аммо ҳозирча у аниқланмаган. Макроолам хусусиятлари, у ердаги ҳаракат қонуниятлари классик физика томонидан бошқа соҳаларга қараганда нисбатан мукаммал ўрганилган. Мегаолам физиканинг космология бўлими томонидан ўрганилмоқда. Микроолам электрон ўлчамидан (10^{-18} м) бошлаб молекула ўлчамигача (10^{-7} м) бўлган соҳани ўз ичига олади. Ўлчами шу оралиққа мос келган барча заррачалар (элементар заррачалар, ядро, атом, молекула ва ҳоказо) *микрозаррачалар* дейилади. Биз уларни қисқача заррачалар деб ҳам юритамиз. Бу соҳанинг бошқа соҳалардан тубдан фарқ қилдирувчи хусусиятлари бор. Уларнинг асосийлари қуйидагилардан иборат:

а) микроолам заррачалари бир вақтнинг ўзида ҳам тўлқин, ҳам корпускуляр хусусиятга эга бўлади;

б) микроолам структураси макрооламникига ўхшаш узлуксиз бўлмай, балки дискрет (узлукли) дир;

в) микрооламда заррачаларни характерловчи физик катталиклар кўпинча дискрет қийматлар олади;

г) микроолам Планк доимийси деб аталувчи

$$\hbar = 1{,}05492 \cdot 10^{-34}\ Ж \cdot с$$

фундаментал доимийликка эга. Кўпгина физик катталиклар $\hbar$ бирлигида ўлчанади;

д) микрооламда макрооламга хос бўлган траектория тушунчаси йўқ. Унинг ўрнига микрооламда зарранинг фазони бирор элементида маълум вақт моментида бўлиш эҳтимоллиги ишлатилади;

е) микрооламда заррача ҳолатини ўрганиш эҳтимоллик назариясига асосланганлиги туфайли у статистик характерга эга. Аммо у макрооламга хос бўлган классик статистикадан тубдан фарқ қилади. Классик статистика кўп заррачали системаларга хос бўлса, микрооламда ҳар бир заррача ҳолати ҳам статистик маънога эга бўлиши мумкин.

Микрооламнинг юқорида қайд этилган объектив хусусиятларини ўзида акс эттирувчи физиканинг бўлими квант механикасидир. Квант механикаси микроолам заррачаларининг ҳаракати билан боғлиқ бўлган ҳодисаларни ўрганади. Равшанки, ҳар қандай макрожисм хоссалари уни ташкил этган заррачалар хусусиятлари билан узвий боғлиқдир. Шу боисдан квант механикаси микроолам хусусиятларини ўрганиш жараёнида классик физика ҳал эта олмаган макроолам хусусиятларини асослаб беради.

Квант механикаси XX аср физикасининг энг ривожланган соҳаси бўлиб, фан ва техниканинг ҳамма соҳаларига кириб бормоқда. Модда тузилишининг фундаментал асоси ҳисобланади. Ҳозирги замон ядро энергетикасининг ривожи, лазер нурларининг кенг қўлланилиши, ўта ўтказувчанлик назарияси квант механикасининг маҳсулидир.

Квант механикаси норелятивистик (заррача тезлиги ёруғлик тезлигидан жуда кичик ва спини ҳисобга олинмайдиган) ва релятивистик (заррача тезлиги ёруғлик тезлигига яқин, спинга эга) квант механикасига бўлинади. Мазкур китобда асосан релятивистик бўлмаган квант механикасининг назарияси баён этилган.

2-§. АТОМ МАСШТАБИДАГИ ФИЗИК ҲОДИСАЛАРНИ ЎРГАНИШДА КЛАССИК ФИЗИКАНИНГ АСОССИЗЛИГИ. КВАНТЛАНИШ ТУШУНЧАСИНИНГ ПАЙДО БЎЛИШИ

Физика фанининг кўпгина бўлимлари тажриба натижаларини тушунтириш жараёнида пайдо бўлган, ривожланган ва мукаммал назария кўринишини олған. Квант механикасининг пайдо бўлишини тақозо этган табиат ҳодисаларининг энг муҳимлари бўлиб фотоэффект, комптон эффекти, ёруғлик флуктуацияси, атомнинг мураккаб тузилганлиги, абсолют қора жисмнинг иссиқлик нурланиши ва бошқалар ҳисобланади. XIX асрнинг охирларида фанда пайдо бўлган бундай муаммоли ҳодисалар мавжуд классик физика қонунлари асосида ўз ечимини топа олмади. Муаммоли тарафи шунда эдики, бу ҳодисалар атроф-муҳитни ўраб олган материянинг ички хусусиятларига, жараённи бевосита кузатиб бўлмайдиган микрооламга хос бўлиб, уни ҳал қилиш учун ўша пайтларда фанга ёт бўлган тушунчалар киритилишини талаб қилар эди. Бу тушунчалар эса албатта ҳодисаларнинг туб моҳиятидан келиб чиқиши лозим эди. Ана шундай янги тушунча — абсолют қора жисмнинг нурланиш назариясини яратишда Макс Планк (1900 й.) томонидан микрообъектлар энергиясининг квантланиши бўлди. Абсолют қора жисмнинг иссиқлик нурланиши юқорида қайд этилган ҳодисаларни тушунтиришда, фаннинг янги бўлими — квант механикасининг пайдо бўлишида асосий туртки бўлди.

Абсолют қора жисм нурланишининг классик назарияси. Умумий физика курсидан маълумки, абсолют қора жисм деб ўзига тушган ҳар қандай тўлқин узунликдаги электромагнит тўлқинни тўла ютувчи жисмга айтилади. Гарчи абсолют қора, ялтироқ ёки тиниқ жисм табиатда топилмаса ҳам хусусияти шунга яқин бўлган жисмлар бўлади. Ўзидан иссиқликни ўтказмайдиган материалдан ясалган, *a* тирқишли, сферик шаклдаги (2.1- расм) жисм абсолют қора жисм хусусиятига эга. Чунки унинг тирқишидан ўтган нур ички сиртда бир неча бор қайтиб, ҳар қайтишда энергиясини йўқота бориб, оқибатда тўла ютилади. Шундай жисмни маълум температурагача қиздирсак, унинг ичида термодинамик мувозанатли нурланиш ҳосил бўлади. Тажрибадан маълум бўлишича, нурланиш энергиясининг спектрал зичлиги $\rho_\omega(T)$ нурланиш частотаси ω ортиши билан ортади ва ω нинг маълум (T нинг ҳар бир қиймати учун алоҳида) $\omega = \omega_0$ қийматида сўнг ω ортиши билан $\rho_\omega(T)$ камаяди. Назариянинг вазифаси бу тажриба натижасини (2.2- расм) тушунтириш ва

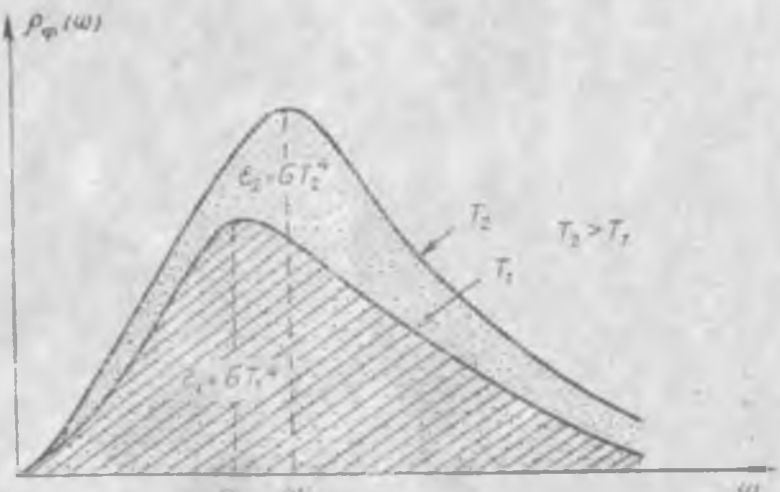
$$\rho_\omega(T) = f(\omega, T) \qquad (2.1)$$

боғлашишни аниқлашдан иборат эди. Шу мақсадда кўп уринишлар бўлди. Термодинамика қонунига асосан Г. Кирхгоф мувозанатли нурланишнинг умумий қонунларини — берилган температурада нурланиш энергиясининг спектрал зичлиги ($\rho_\omega(T)$) қора жисм моддасининг табиатига боғлиқ эмаслигини ҳамда қора жисм нурланиш қобилиятининг нур ютиш қобилиятига нисбати $\rho_\omega(T)$ га пропорционаллигини аниқлади. Стефан-Больцман абсолют қора жисм юза бирлигидан вақт бирлиги ичида сочилган нурланиш энергияси ε температуранинг тўртинчи даражасига тўғри пропорционал

2.1- расм. Абсолют қора жисм модели.

$$\varepsilon = \sigma T^4 \qquad (2.2)$$

эканлигини топди. Бу ерда $\sigma = 5{,}6697 \cdot 10^{-8}\ \frac{Ж}{м^2 \cdot с \cdot К^4}$. Стефан-



2.2- расм. Абсолют қора жисмнинг нурланиш спектри.

Больцман қонуни 2.2- расмдаги эгри чизиқ остидаги юзага сон жиҳатдан тенг бўлса ҳам (2.1) боғланишни изоҳлай олмайди.

Статистик физика қонунларига асосланиб В. Вин нурланиш энергияси спектрал зичлигининг максимумини аниқлади:

$$\lambda_{max}\cdot T = 2{,}8979\cdot 10^{-3}\ [\text{м}\cdot\text{К}]. \qquad (2.3)$$

Бу қонунга биноан нурланиш энергиясининг максимумига тўғри келган тўлқин узунлик қора жисм температурасига тескари пропорционал экан. Шу сабабдан температура ортиши билан 2.2- расмдаги энергетик максимум ўнг (катта частота) томонга силжийди.

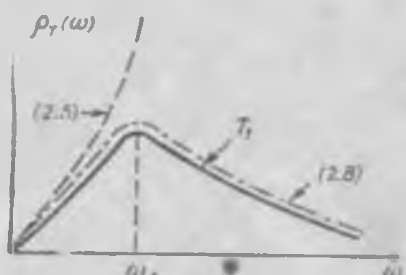
Релей ва Жинс электродинамика, статистик физика ва умуман классик физиканинг барча ютуқларидан фойдаланиб, абсолют қора жисмни осцилляторлар тўпламидан иборат деб қараб, нурланиш энергиясининг спектрал зичлиги учун қуйидаги натижани аниқлашди:

$$\rho_\omega(T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} < E >. \qquad (2.4)$$

Бу ерда c — ёруғликнинг вакуумдаги тезлиги, ω — осцилляторнинг тебраниш частотаси, $<E>$ — битта осцилляторнинг ўртача энергияси. Больцман теоремасига биноан, ҳар бир эркинлик даража сонига ўртача $k_Б T/2$ миқдорда энергия тўғри келади. Тебранма ҳаракат қилаётган заррача иккита эркинлик даража сонига эга бўлганлиги сабабли $<E> = k_Б T$ (бу ерда $k_Б$ — Больцман доимийси). Буни ҳисобга олсак (2.4) формула

$$\rho_\omega(T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_Б T \qquad (2.5)$$

кўринишга келади. Аниқланган (2.5) назарий натижа тажриба билан солиштирилганда у частотанинг кичик қийматларида ($\omega \ll k_Б T$) тажрибага мос келиб, юқори частоталарда (ультрабинафша соҳада) тажрибага мутлақо зид келади (2.3- расм). Бу ҳолни «ультрабинафшавий ҳало-



2.3- расм. Абсолют қора жисм нурланишининг экспериментал (туташ чизиқ) ва назарий спектрларини таққослаш.

кат» дейилади. Шундай килиб классик физика тушунчаларига асосланган (2.2)—(2.5) назарий ифодалар тажриба натижаларини кисман тушунтирсалар ҳам $\rho_\omega(T)$ нинг берилган температурада ω га боғлиқлигини аниқлай олмади. Бу масала муаммолигича қолди. Бундай натижалар классик физика абсолют қора жисм нурланишининг тажрибага мос келувчи умумий қонуниятини аниқлашга ожиз эканлигини кўрсатди.

Абсолют қора жисм нурланиши учун Планк назарияси. Классик физика намояндаларидан фарқли равишда М. Планк осциллятор томонидан нурланаётган энергия узлуксиз бўлмасдан дискрет бўлсин деб қабул қилди. Шунинг учун осциллятор энергиясини қуйидагича олинади:

$$E = n \cdot \hbar\omega. \tag{2.6}$$

Бу ерда $n = 1, 2, 3, \ldots$ қийматларни олади ва *квант сони* деб юритилади, ω — осцилляторнинг тебраниш частотаси, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ — Планк доимийси ($h = 6{,}62491 \cdot 10^{-34}$ Ж · с).

Шундай қилиб, Планк томонидан классик физикага ёт бўлган янги тушунча—микрообъект энергиясининг квантланиши киритилди ҳамда микро- ва макрооламнинг чегаравий доимийси $\hbar$ аниқланди.

Статистик физика қонунларига биноан (2.6) ифоданинг ўртача қиймати

$$<E> = \frac{\hbar\omega}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_Б T} - 1} \tag{2.7}$$

га тенг бўлади. Буни (1.4) га қўйсак,

$$\rho_\omega(T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_Б T} - 1} \tag{2.8}$$

келиб чиқади. (2.8) Планк формуласи дейилади ва у тажрибадан олинган натижага (ω нинг катта ва кичик қийматларнда ҳам) яхши мос келади (2.3- расм). Бу борада шуни таъкидлаш ўринлики, тажриба ҳақиқат мезонидир. Назариянинг тажрибага мос келиши эса унинг яратилишига асос қилиб олинган тушунчаларнинг тўғрилигидан далолат беради. Демак, квантлашиш тушунчаси абсолют қора жисмни ташкил этган осцилляторларнинг, яъни микрообъектларнинг объектив хусусиятидир

Планк формуласи (2.8) тажрибага мос келиш билан бирга, у умумий ҳамдир. Бунга қуйидаги амалларни бажариш билан ишонч ҳосил қилиш мумкин:

а) (2.8) ифодани ω нинг барча ўзгариш соҳаси бўйича интеграллласак

$$\varepsilon = \int_0^{\infty} \rho_\omega(T)\, d\omega = \frac{\pi^2 k_Б^4 T^4}{15\, c^3 \hbar^4} \tag{2.9}$$

—Стефан-Больцман қонуни келиб чиқади;

б) (2.8) ифодадан $\frac{d\rho_\omega(T)}{d\omega} = 0$ тенгламага асосан $\rho_\omega(T)$ нинг максимуми ($\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ алмаштириш қилиб)

$$\eta e^\eta = 5(e^\eta - 1) \tag{2.10}$$

трансцендент тенгламадан аниқланади. У η нинг $\eta = \frac{2\pi \hbar c}{k_Б T \lambda_{max}} = 4{,}96$ қийматида қаноатланади. Бу эса Вин қонунидир;

в) (2.8) ифодадаги экспоненциал функцияни ω нинг $\hbar\omega \ll k_Б T$ шартни қаноатлантирувчи қийматларида қаторга ёйсак, Релей ва Жинс қонуни (2.5) келиб чиқади.

3-§. ЁРУҒЛИКНИНГ ЭЛЕМЕНТАР КВАНТ НАЗАРИЯСИ

Юқорида қайд этганимиздек, бир қанча ҳодисаларни, жумладан фотоэффект, Комптон эффекти, атомнинг нурланиш ва нур ютишини ёруғликнинг тўлқин табиати ёрдамида тушунтириб бўлмайди. Бундай ҳодисаларни изоҳлаш учун ёруғликнинг квант назарияси (Планк томонидан фанга киритилган нурланиш энергиясининг квантлашиш хусусияти) асос қилиб олинади. А. Эйнштейннинг (1905 й.) таклифига биноан ёруғлик кванти

$$\varepsilon = \hbar\omega \tag{3.1}$$

энергия ва

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \tag{3.2}$$

импульсга ҳам эга бўлиши керак. Бу ерда $\vec{k}$ — тўлқин вектори бўлиб, йўналиши ёруғлик тарқалиш йўналишини кўрсатади. Унинг X, Y, Z ўқлари бўйича ташкил этувчиларини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\alpha,\ k_y = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\beta,\ k_z = \frac{2\pi}{\lambda}\cos\gamma,$$

α, β, γ — ёруғлик тарқалиши йўналиши билан X, Y, Z ўқлари орасидаги бурчаклар, λ — ёруғлик тўлқин узунлиги. Кейинчалик энергияси (3.1), импульси (3.2) формулалар билан аниқланувчи ёруғлик квантига Г. Льюис (1926 й.) *фотон* деб ном берди.

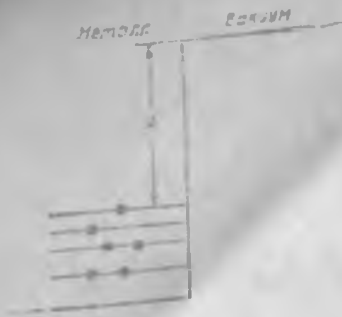
Фараз қилайлик, фотон энергияси E, импульси $\vec{p}$ бўлган заррача билан тўқнашсин. Тўқнашиш натижасида заррача ҳамда фотоннинг энергия ва импульслари ўзгаради. Ўзаро тўқнашиш жараёни учун энергия ва импульснинг сақланиш қонунлари ўринли бўлади:

$$\hbar\omega_0 + E_0' = \hbar\omega + E, \tag{3.3}$$

$$\hbar\vec{k}_0 + \vec{p}_0 = \hbar\vec{k} + \vec{p}. \tag{3.4}$$

Бу ерда $\hbar\omega_0$, E_0 ва $\hbar\vec{k}_0$, $\vec{p}_0$ — мос ҳолда фотон ва заррачанинг тўқнашгунгача энергиялари ва импульслари: $\hbar\omega$, E ва $\hbar\vec{k}$, $\vec{p}$ худди шу катталикларнинг тўқнашишидан кейинги қийматлари. (3.3) ва (3.4) ифодалар ёрдамида қуйидаги ҳодисаларни изоҳлаш мумкин: а) $\omega = 0$ (бу ҳолда $\vec{k} = 0$) бу $\hbar\omega_0$ энергияли ёруғлик квантининг ютилишидир; б) $\omega_0 = 0$ (бу ҳолда $\vec{k}_0 = 0$). Бу $\hbar\omega$ энергияли ёруғлик квантининг нурланишидир; в) $\omega \neq 0$, $\omega_0 \neq 0$. Бу ҳолда $\hbar\omega_0$ энергияли ва $\hbar\vec{k}_0$ импульсли ёруғлик кванти тўқнашиш туфайли сочилиб, бошқа ёруғлик квантига ($\hbar\omega$, $\hbar\vec{k}$) айланади.

Ёруғлик квант назариясининг туб маъноси шундан иборатки, юқоридаги ҳодисаларда, яъни ютилишда, нурланишда ва сочилишда энергия ва импульснинг ўзгариши ихтиёрий бўлмай, квантлашган бўлади. Шундай қилиб, ҳозирги замон таълимотига кўра ёруғлик кванти бир вақтнинг ўзида ҳам тўлқин, ҳам корпускуляр хусусиятига эга бўлган динамик заррачадир. У фақат тўлқиндан иборат эмас, чунки унинг энергияси частотага пропорционал. Тўлқин майдонининг энергияси эса тўлқин амплитудаси билан аниқланади. Амплитуда билан частота ўртасида ҳеч қандай боғланиш йўқ. Демак, фотон энергияси тўлқин каби амплитудага боғлиқ эмас. Тинч ҳолатда мавжуд бўла олмаслиги сабабидан фотон корпускула ҳам эмас. (3.1) ва (3.2) формулалар фотоннинг корпускуляр ва тўлқин хусусиятини ўзаро боғловчи асосий тенгламалардир. Шундай қилиб, *ёруғлик иккиланган хусусиятга — тўлқин-корпускуляр дуализмига эга.* Унинг тарқалишида тўлқин хусусияти кўпроқ намоён булса, бирор микрозаррача билан тўқнашишида корпускулярлик хусусияти кўпроқ аҳамиятли бўлади. Битта объектга хос булган бу икки хусусият микроoламнинг объектив хусусияти булиб, уларни бир-биридан ажратиб бўлмайди, аксинча улар бир-бирини тулдиради.

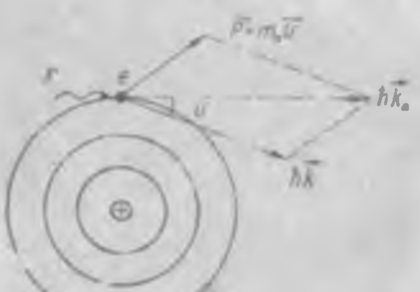


3.1-расм. Металлдан электроннинг чиқиш ишини схематик курсатиш.

А. Эйнштейн томонидан яратилган ёруғликнинг квант назарияси фотоэффект, Комптон эффекти ҳодисаларини, атомнинг нурланиши ва нур ютишини туғри тушунтиришга имкон берди. Маълумки, *ташқи фотоэффект* деилганда ёруғлик таъсирида металлдан электронни уриб чиқарилиши (3.1-расм) тушунилади. А. Эйнштейн энергиянинг сақланиш қонуни (3.3) га асосланиб фотоэффект учун

$$\hbar\omega = A + \frac{m_0 v^2}{2} \tag{3.5}$$

қонуниятни аниқлади. Бу ерда $\hbar\omega$ — металлга тушаётган ёруғлик квантининг энергияси, A — электроннинг металлдан чиқиш иши, $\frac{m_0 v^2}{2}$ — уриб чиқарилган электроннинг вакуумдаги кинетик энергияси. Топилган (3.5) қонуният тажрибага тўла мос келади ва фотоэффектнинг бошқа қонуниятларини ҳам тушунтиришга имкон беради.



3.2-расм. Комптон эффектини тушунтиришга доир схема. γ-фотоннинг сочилиш бурчаги.

Комптон эффекти эркин электронларда ёруғликнинг тўлқин узунлигини ўзгартириб (3.2-расм) сочилишидир. Бу ҳодисани туғри тушунтириш учун энергия (3.3) ва импульс (3.4) нинг сақланиш қонунидан фойдаланиш лозим. У ҳолда ёруғлик тўлқин узунлигининг ўзгариши

$$\Delta\lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_0 c}\sin^2\frac{\theta}{2} \qquad (3.6)$$

муносабатдан аниқланади.

Ёруглик оқимининг фотонлардан иборатлиги С. И. Вавилов тажрибасида ҳам исботланди. Бу тажрибада ёруғлик оқимининг флуктуацияси кузатилди. Флуктуация ҳодисаси эса кўп заррачали системаларга хос статистик хусусиятдир. Демак, ёруғлик оқими фотонлардан иборат. Шундай қилиб, ёруғликнинг Ньютондан кейинги замонда рад этилган корпускуляр хусусияти янги мазмунда бир-бири билан қарама-қарши икки хусусиятнинг фалсафий умумийлигида тикланди.

4- §. ЗАРРАЧАЛАРНИНГ ТЎЛҚИН ХУСУСИЯТЛАРИ

1. Де Бройль тўлқини. Ёруғликнинг корпускулярлик хусусияти эътибордан четда қолгани каби заррачанинг тўлқин хусусиятига ҳам назар қилинмади. Бунга биринчи марта эътибор берган Луи де Бройль А. Эйнштейннинг ёруғлик кванти учун ёзилган

$$E = \hbar\omega, \qquad (4.1)$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad (4.2)$$

муносабатлари микрозаррачаларга ҳам хос бўлиши керак деган қарорга келди. Шунга асосланиб де Бройль E энергияли ва $\vec{p}$ импульсли ҳар қандай эркин заррачанинг ҳаракатини қуйидаги

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})} \qquad (4.3)$$

ясси тўлқиннинг тарқалиши билан боғлади. Бу ерда $\vec{r}$ — фазо ихтиёрий нуқтасининг радиус вектори, t — вақт (4.1) ва (4.2) ни эътиборга олиб, (4.3) ни қуйидагича қайта ёзиш мумкин:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\,\vec{r})} \qquad (4.4)$$

Бу заррача ҳаракатига мос келтирилаётган бундай тўлқин *де Бройль тўлқини* деб юритилади. Электромагнит тўлқинидан фарқли равишда де Бройль тўлқини бўш фазода хам дисперсияланади. (4.3) ифодадаги $\varphi = \omega t - \vec{k}\,\vec{r}$ га тўлқиннинг фазаси дейилади. Бир ўлчовли фазода тарқалаётган тўлқин фазасининг конкрет бирор қийматини олайлик:

$$\omega t - kx = \text{const}. \tag{4.5}$$

Албатта, бу фаза вақт ўтиши билан x ўқи бўйлаб кўчиб боради. Бу ердан

$$v_ф = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon \cdot \mu}} \tag{4.6}$$

бўлиб, унга *тўлқиннинг фазавий тезлиги* дейилади. (4.6) формулада c — ёруғлик тезлиги, ε, μ — муҳитнинг электр ва магнит сингдирувчанлиги. Энди тўлқин хусусиятга эга бўлган заррачанинг фазавий тезлигини аниқлайлик. Маълумки нисбийлик назариясига кўра заррача энергияси E унинг импульси $\vec{p}$ билан қуйидагича

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} \tag{4.7}$$

боғланган. $v \ll c$ шартида (4.7) ифодани қаторга ёйсак

$$E = m_0 c^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_0} + \ldots \tag{4.8.}$$

келиб чиқади. Бу ерда m_0 — заррачанинг тинч ҳолатдаги массаси. (4.1) ва (4.2) ни ҳисобга олсак, (4.8) дан

$$\omega = \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2 m_0} + \ldots \tag{4.9}$$

ҳосил бўлади. Демак, $v_ф = \frac{\omega}{k} = f(k)$, яъни заррача учун фазавий тезлик k га боғлиқ ($k = \frac{2\pi}{\lambda}$ орқали λ га боғлиқ). Бошқача айтганда, де Бройль тўлқини ҳатто бўшлиқда ҳам дисперсияга эга.

Энди заррача ҳаракати билан тўлқин тарқалиши ўртасидаги боғланишни аниқлайлик. Бунинг учун тўлқиннинг частотаси қатъий монохроматик эмас, балки частоталари бир-бирига яқин бўлган (4.3) каби тўлқинлар суперпозициясидан иборат деб қабул қилайлик. Бундай тўлқинни *тўлқинлар группаси* дейилади. Уни x ўқи йўналишида тарқалаётган ҳол учун қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\Psi(x, t) = \int\limits_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \psi_0(k)\, e^{-i(\omega t - kx)}\, dk. \tag{4.10}$$

Бу ерда $k_0 = 2\pi \lambda_0$ — тўлқин сони, $\psi_0(k)$ — координата ва вақтга боғлиқ бўлмаган, аммо k ёки ω нинг етарлича секин ўзгарувчан функцияси. Шунинг учун уни интегралдан ташқарига чиқарамиз. Частота ω ни k нинг функцияси сифатида қараб, (4.9) ни $(k-k_0)$ нинг даражаси бўйича қаторга ёямиз:

$$\omega=\omega_0+\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}(k-k_0)+\ \dots \qquad (4.11)$$

(4.11) ни эътиборга олган ҳолда (4.10) дан

$$\Psi(x,t)=\psi_0(x,t)e^{-i(\omega_0 t-k_0 x)} \qquad (4.12)$$

натижага эга бўламиз. Бу ерда

$$\Psi_0(x,t)=2\psi_0(k_0)=\frac{\sin\left\{\left[\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t-x\right]\Delta k\right\}}{\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t-x} \qquad (4.13)$$

функция вақт ва координатага боғлиқ ҳолда етарлича секин ўзгарувчи бўлиб, тўлқин группасининг амплитудасидир. Шунинг учун (4.12) формула билан ифодаланувчи тўлқинни деярли монохроматик дейиш мумкин, $\varphi=\omega_0 t-k_0 x$ бундай тўлқиннинг фазаси бўлади. (4.13) формула билан аниқланувчи амплитуда максимум бўлган нуқтанинг координатасини аниқлайлик. Бу тўлқин группасининг маркази бўлади. (4.13) ифодадан кўринадики,

$$\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t-x=0 \qquad (4.14)$$

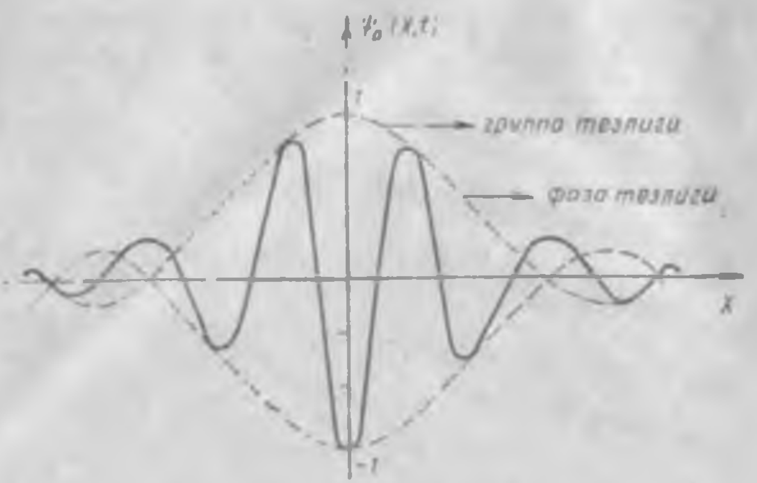
бўлганда $\left(\lim\limits_{\varphi\to 0}\frac{\sin\varphi}{\varphi}=1\right)$ тўлқин группасининг амплитудаси $\Psi_0(x,\ t)$ максимумга эришади. Бу нуқтанинг тезлиги қаралаётган тўлқин группаси марказининг тезлиги ёки қисқача *группавий тезлик* ($v_{гр}$) дейилади. Группавий тезлик (4.14) тенгламадан топилади:

$$v_{гр}=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}. \qquad (4.15)$$

Заррачанинг ҳаракати де Бройль тўлқини ёрдамида ифодаланса, унинг частотаси (4.9) га биноан k га ночизиқли боғлиқ бўлганлиги сабабли группавий ва фазавий тезликлари ўзаро фарқланди (4.1-расм). (4.9) ни ҳисобга олсак, группа тезлигини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$v_{гр}=\frac{d}{dk}\left(\frac{m_0c^2}{\hbar}+\frac{\hbar k^2}{2m_0}+\ \dots\right)=\frac{\hbar k}{m_0}+\ \dots \qquad (4.16)$$

(4.16) ни ва $p=m_0 v$ ни эътиборга олсак

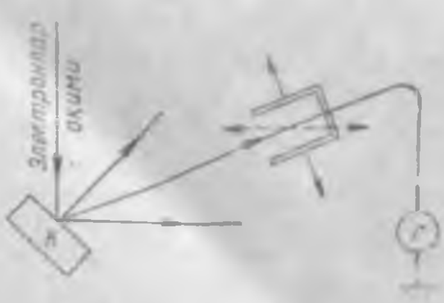


4.1- расм. Тўлқин группасининг фазавий тақсимоти.

$$v_{гр} = \frac{p}{m_0} = \frac{m_0 v}{m_0} = v \qquad (4.17)$$

бўлиб, группа тезлиги заррачанинг тезлиги v га тенг бўлар экан. Шундай қилиб тўлқин группаси марказининг тезлиги ($v_{гр}$) заррачанинг тезлигига (v) тенгдир. Аммо бу натижалардан микроoламда заррачани тўлқин тўплами (пакети) дан иборат бўлади деб тушуниш нотўғри бўлур эди. Чунки тўлқин группасини ташкил этган ҳар бир тўлқин ҳатто бўшлиқда ҳам дисперсияга учраганлиги, яъни турли тезлик билан тарқалиши туфайли вақт ўтиши билан у группадан ажралиб чиқиб кетади. Бошқача айтганда, тўлқин группасининг ўлчами вақт ўтиши билан катталашиб бораверади. Тўлқин группаси бир жинсли бўлмаган муҳитда тарқалганда унинг дисперсияси янада кучли бўлади. Шунинг учун микрозаррачани айнан тўлқинлар тўпламидан иборат деб қабул қилиш нотўғридир. Унинг фазодаги ҳаракати тўлқиннинг тарқалишига ўхшаш бўлиши мумкин. Аммо ҳар бир ўлчашда заррача бир бутун моддий объект сифатида намоён бўлади. Шунинг учун тўлқин ва корпускуляр хусусиятга эга бўлган заррачанинг ҳаракатида тўлқинлик хусусияти кўпроқ намоён бўлса, унинг бирор бошқа объект билан тўқнашишида эса (жумладан ҳар қандай ўлчаш ўзаро таъсирга асосланган) корпускулярлик хусусияти асосий бўлади деб тушуниш тўғрироқ бўлади. Ҳар иккала хусусият бир-биридан ажралмасдир. Тўлқин ва корпускуляр тушунчалар микрооламда диалектик бирлашади. Улар бир-бири билан Планк доимийси орқали боғланган ($E = \hbar\omega$, $p = \frac{\hbar}{\lambda}$) (4.13) ифодадан

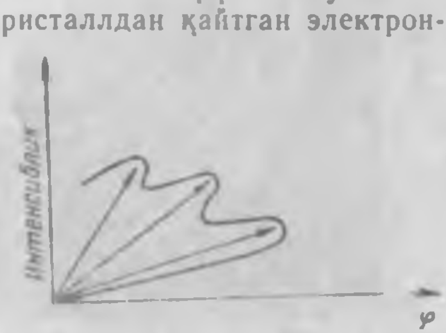
$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{mv}. \quad (4.18)$$



4.2-расм. Дэвиссон-Жермер тажрибасининг схемаси.

Бунга де Бройль тўлқинининг узунлиги дейилади. Заррачанинг тўлқин хусусиятга эга бўлиши механик тасаввурларга тамоман ёт бўлиб, унинг тўғрилигини фақат тажриба исботлаши мумкин. Табиатидан қатъи назар ҳар қандай тўлқин учун интерференция ва дифракция ҳодисаси хосдир.

2. Заррачалар дифракцияси. Дэвиссон ва Жермерлар (1927) электронлар оқимининг кристалл сиртида сочилишини тажрибада текшираётиб (4.2-расм), сочилган электронлар интенсивлиги фазода нотекис тақсимланганлигини аниқлашди. Бу тўлқинга хос хусусият эди. Монокристалл K дан қайтган электронлар оқими Φ Фарадей цилиндрига тушиб электр токини ҳосил қилади. Гальванометр (Γ) нинг кўрсатишига қараб токнинг қийматини, яъни қайтган электронлар интенсивлигини баҳолаш мумкин. Φ цилиндр бир-бирига тик бўлган ўқлар бўйича силжиш имкониятига эга. Уни ҳар хил йўналишларда силжитиб K монокристаллдан қайтган электронлар интенсивлигининг фазодаги тақсимотини аниқлаш мумкин. Тажрибадан аниқланишича K монокристаллдан қайтган электронлар маълум йўналишларда максимумларга ва минимумларга эга бўлган (4.3-расм). Максимумларнинг тартиби қуйидагича:



4.3-расм. Монокристалл сиртидан қайтган моноэнергетик электронлар оқимининг фазовий тақсимоти.

$$d \cdot \sin\varphi = n\lambda \tag{4.19}$$

шартни қаноатлантиради. Бу ерда d — кристалл панжарасининг доимийси (берилган материал учун ўзгармасдир), φ — дифракцион максимумларни кузатиш бурчаги, n — максимумлар тартиби, λ — кристаллга тушаётган электрон тўлқин узунлиги. Электроннинг тезлиги v ни электр потенциаллар фарқи U орқали ифодаласак (4.19) формуладаги тўлқин узунлиги λ ни электр ўлчов асбоблари ёрдамида аниқлаш мумкин бўлган қуйидаги

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{U}},\ \mathring{A} \tag{4.20}$$

ифодага эга бўламиз. Буни эътиборга олиб (4.19) ни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\sqrt{U}\sin\varphi = n\,\mathrm{const} \tag{4.21}$$

4.4- расм. Электронлар дастасининг юпқа поликристалл қатламидан ўтишда хосил қилган дифракцион манзараси.

Шундай қилиб, берилган Қ монокристаллдан қайтаётган электронлар, электр кучланиши, электроннинг тўлқин узунлигига боғлиқ ҳалда фазонинг қайси йўналишларида максимумга ва минимумга эга бўлишини (4.19) ва (4.20) формулалар ёрдамида олдиндан айтиб бериш ва уни тажриба билан таққослаш мумкин. Тажриба натижалари заррача (4.18) тўлқин узунликка эга деб топилган (4.19) ва (4.20) натижаларни, яъни де Бройль гипотезасини тўла тасдиқлади. Электронлар дифракцияси Дэвиссон ва Жермер биринчи тажрибасида (4.2- расм) монокристаллнинг сиртидан қайтиши туфайли кузатилган. Тартаковский ва Томсонлар (1928) электронларнинг поликристаллдан дифракциясини текширишди. Бу ҳолда электронлар оқими юпқа поликристалл парда (пленка) дан ўтказилган. Пардада кристаллчалар бетартиб жойлашганлиги сабабли электронлар дифракцияси фазовий бўлиб, рентген нурлари дифракцияси учун аниқланган

4.5- расм. Водород (H_2) молекулаларининг литий фторид (Li F) кристалидан қайтишдаги дифракцион манзараси

$$2d \sin \varphi = n\lambda \qquad (4.22)$$

Вульф—Брегглар шартини қаноатлантиради. Бу ҳолда ҳам λ ни (4.20) формула ёрдамида аниқлаш мумкин. Экранга тушган электронлар интенсивлиги концентрик ҳалқалар кўринишида (ёруғлик дифракциясига ўхшаш) бўлган (4.4- расм). Штерн ва Эстерман гелий ($_2He^4$) атоми ва водород (H_2) молекуласини LiF — литий фторид кристалидан қайтган дифракциясини кузатишган (4.5- расм). Бу ҳолда атом ва молекулалар қиздириш йўли билан тезлаштирилади, уларнинг кристалл сиртидан қайтгандаги интенсивлиги эса сезгир мо нометрлар ёрдамида аниқланади. Шунингдек, нейтронларнинг дифракцияси ҳам тажрибада текшириб кўрилган.

Юқорида келтирилган тажриба натижалари де Бройль гипотезасининг тўғрилигини — микрозаррачалар корпускулярлик хусусияти билан бир қаторда тўлқин хусусиятига ҳам эга эканликларини тўла исботлади. Тажриба натижаларидан кўринадики, тўлқин хусусият фақат электронга эмас, протон, нейтронларга, атом ва молекулаларга, умуман ҳамма микрозаррачаларга хосдир. Шундай қилиб, бир вақтнинг ўзида заррачанинг ҳам корпускуляр, ҳам тўлқин хусусиятга эга бўлиши микрооламнинг объектив хусусияти эканлигидан келиб чиқади.

5-§. МИКРООЛАМ СТРУКТУРАСИНИНГ ДИСКРЕТЛИГИ

Физика фани оламни, унинг узлуксиз хоссаларини ўрганишдан бошлаган. Масалан, қаттиқ жисм, суюқлик, газ ва бошқа агрегат ҳолатларининг физик хусусиятларини ўрганишда улар узлуксиз деб қаралган. Аммо материя тузилишини чуқурроқ ўргана бошласак, унинг хусусиятларини уни ташкил этган заррачалар хусусияти билан боғласак, микрооламнинг ўзига хос янги-янги хусусиятлари пайдо бўла бошлайди. Ана шундай хусусиятлардан бири микроолам структурасининг дискретлигидир. Ҳозирги кунда ҳаммага равшанки, узлуксиз деб ҳисобланган модда алоҳида микрозаррачалардан—молекулалардан, молекулалар эса атомлардан, атомлар ўз навбатида «элементар» заррачалардан ташкил топгандир. «Элементар» деб аталган заррачаларнинг тури ҳозир 400 дан ортиқ. Заррачаларнинг ҳаракати билан боғлиқ бўлган ва чизиқли ўлчами $R \leqslant 10^{-7}$м бўлган соҳаларни микроолам деймиз (1-§ га қаранг). Микроолам структураси дискрет. Модда хусусиятини ўрганишда уни узлуксиз муҳит деб олган бўлсак, атом ва молекула хоссаларини текширишда уни ташкил этган заррачалар — электрон, ядро (протон, нейтронлар) ни узлуксиз объект (қурилма) деб ҳисоблаймиз. Аслида элементар зарралар ҳам мураккаб дискрет структурага эга (масалан, адронлар кварклардан ташкил топган). Уларнинг тинч ҳолатдаги массаси ҳам турлича, 0 дан (фотон, нейтрино) то бир неча юз МэВ гача бўлади[1].

Норелятивистик квант механикаси ўрганадиган соҳада заррачаларнинг энергияси ва бу энергиянинг ўзгариши зар-

---

[1] Микрооламда масса кўпинча $E = mc^2$ — Эйнштейн муносабатидан фойдаланиб, энергетик бирликда ҳам ўлчанади.

рачанинг релятивистик квант механикаси ўрганадиган соҳадаги энергияси $E = m_0c^2$ дан, яъни унинг тинч ҳолатдаги хусусий энергиясидан кўп марта кичикдир. Квант механикасининг бу қисмида заррача тезлиги ёруғлик тезлиги c дан жуда кичик ($v \ll c$) деб қаралади. Ҳаракат тезлиги ёруғлик тезлигига яқин бўлган заррачалар (тезлатгичлардаги, космик нурлар таркибидаги заррачалар)нинг хусусиятларини релятивистик квант механикаси ўрганади. Микроолам дискретлигини ўрганиш узоқ тарихга эга. У Бальмер (1885 й.) томонидан водород атомининг нурланиши чизиқли ($\omega_n = 2\pi cR\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$ бўлишини топишдан бошлаб, (R — Ридберг доимийси) элементар заррачаларни кашф этилишигача давом этади. Микроолам структурасининг дискретлиги атом тузилишини ўрганишда янада яққол сезилади. Ҳаммага маълумки, Э. Резерфорд (1911 й.) α (гелий атомининг ядроси) — заррачасининг бошқа элемент атомларида сочилишини ҳам назарий, ҳам тажриба йўли билан ўрганиб, атомнинг ядровий моделини таклиф этди. Тажриба натижаларига кўра атомнинг ўлчамлари 10^{-10} м, ядроси эса 10^{-15} м тартибидадир. Атом массасининг 99,94 %и ядрода жойлашган, ядро заряди мусбат, унинг атрофида эса манфий зарядли электронлар ҳаракат қилади. Ҳар қандай атомда мусбат ва манфий зарядлар ўзаро тенг бўлиб, у нейтрал бўлади. Ўз навбатида ядро протон ва нейтронлардан иборат бўлиб, ўзига хос микроoламни ташкил этади. Микроолам заррачалари ўзига хос хусусиятларга эга: улар бир-биридан заряди (электрон заряди бирлигида), массаси, спини (хусусий ҳаракат миқдори моменти $\hbar$ бирлигида), турғунлиги (яшаш вақти), фундаментал ўзаро таъсирларда қатнашишлари, ички структураси ва бошқа хусусиятлари билан тубдан фарқ қилади. Шу билан бирга бир хил турга кирувчи заррачалар айнан ўхшашдир, яъни бир хил физик параметрларга (зарядга, массага, спинга ва ҳ. к.) эга. Микроолам заррачалари бир-бирига айланиб турадилар. Бу жараёнда заррачаларни характерловчи жуда кўп параметрларнинг йиғинди қиймати ўзгармайди. Масалан, заряд миқдори, энергия, импульс, импульс моменти. Уларни ҳаракат интеграли деб юритадилар. Айрим (универсал) динамик катталикларининг заррачалар ўзаро таъсирида сақланиши фазо ва вақтнинг симметрияси туфайлидир. Вақтнинг бир жинслиги (турли вақт оралиғида тажриба натижаларининг бир хил бўлиши) энергиянинг сақланиш қонунига, фазонинг бир жинслилиги (фазонинг ҳар бир нуқтаси тенг ҳуқуқлилиги) импульснинг сақланиш қонунига, унинг изотроплиги эса (фазонинг ҳамма йўналишн тенг кучлилиги) импульс моментининг сақланиш қонунига олиб келади (батафсил ҳолда IV бобга қаранг). Бу қонунлар билан классик физикадан танишмиз. Демак, уларни характерловчи катталиклар универсал динамик катталиклар бўлиб, микрооламда ҳам ўз маъносини сақлайди.

Аммо микрооламда бу катталиклар дискрет қийматлар олади. Шундай қилиб, микроолам структураси ва уни характерловчи катталиклар дискрет бўладн. Тажрибага асосланган, аммо классик физикага зид бўлган микрооламнинг бу хусусиятларини назарий йўл билан тушунтиришга биринчи марта Н. Бор (1913й.) ҳаракат қилди. У атомнинг тажрибада исботланган планетар модели билан классик физикани келиштириш мақсадида постулатлар кашф этди:

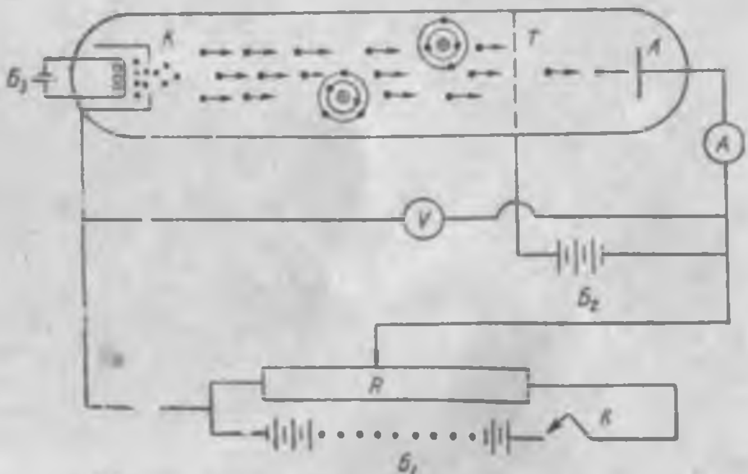
1. Электронлар ядро атрофида стационар орбиталар бўйлаб ҳаракат қилади. Бу орбиталар электроннинг импульс моментини дискретлик шарти

$$\oint p_x dx = 2\pi n\hbar$$

дан аниқланади ($\oint$ — орбита контури бўйлаб интеграл маъносини англатади).

2. Электрон бир стационар ҳолатдан иккннчи стационар ҳолатга ўтганда атом нур ютнши ёки нур чиқариши мумкин. Нурланиш (ёки ютилиш) энергняси қуйидагича аниқланади:

$$\hbar\omega = E_n - E_k.$$



5.1-расм. Франк — Герц тажрибасининг схемаси.

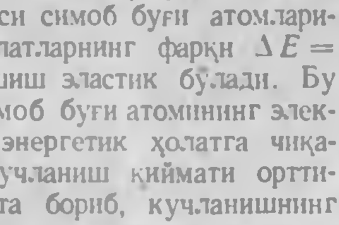
Шундай қилиб, Н. Борнинг ярим классик ва ярим квант назарияси атом ядроси атрофида дискрет стационар энергетик ҳолатлар бўлишини кўрсатди. Ҳақиқатан ҳам атомда шундай дискрет энергетик ҳолатлар мавжудлигини Франк ва Герц (1914 й.) тажрибада аниқладилар. Бунинг учун улар симоб буғи тўлдирилган идиш олиб, ундан электр токи ўтказдилар (5.1- расм). Катоддан чиққан электронлар маълум энергияга эга. Бу энергия катод ва анод оралиғига қўйилган кучланиш ёрдамида бошқарилади. Кучланиш ортиши билан электрон энергияси ҳам ортади. Кучланиш U маълум бўлса, электроннинг энергияси қуйидаги формула ёрдамида

$$E_e = \frac{m_0 v^2}{2} = e_0 U$$

аниқланиши мумкин. Катоддан чиқиб анод томон йўналган электрон ўз йўлида симоб буғи атомлари билан тўқнашади. Тўқнашиш эластик бўлса, электрон энергия йўқотмасдан анодга етиб боради. Буни анод токининг миқдоридан билиш мумкин. Агар электроннинг энергияси симоб буғи атомларидаги икки стационар энергетик ҳолатларнинг фарқи $\Delta E = E_1 - E_2$ дан кичик бўлса, тўқнашиш эластик бўлади. Бу ҳолда катоддан чиққан электрон симоб буғи атомининг электрони билан тўқнашиб уни юқори энергетик ҳолатга чиқариб қўйишга энергияси етмайди. Кучланиш қиймати орттирилса, электрон энергияси ҳам орта бориб, кучланишнинг маълум U_0 қийматида

$$E_e \simeq \Delta E = E_1 - E_2$$

бўлади. Бу ҳолда тўқнашиш эластик бўлмайди. Катоддан анодга бораётган электрон симоб буғи атомининг электрони билан тўқнашиб, уни юқори энергетик сатҳга ўтказади. Ўзининг энергияси камайиб анодга етиб бора олмай тўр электродга тутилиб қолади. Демак, ноэластик тўқнашишлар юз бераётганда анодга етиб бораётган электронлар сони камаяди. Шунинг учун анод токи ҳам камаяди. Тажрибанинг кўрсатишича бу эффект электрон 4,9 эВ энергияга эришганда юз берар экан (5.2- расм).

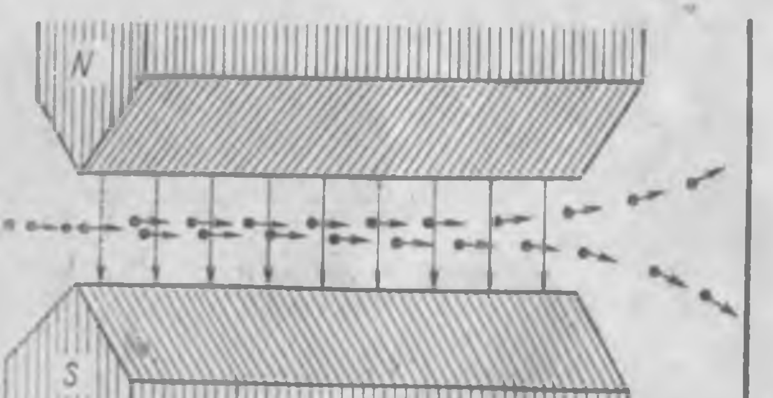


5.2- расм. Франк — Герц тажрибасида анод токининг кучланишга боғланиш графиги.

Электродлар орасидаги кучланишни яна орттириб борсак анод токи ҳам мос ҳолда орта бошлайди, чунки ноэластик тўқнашиш туфайли энергиясини йўқотган электрон яна қўшимча энергия олиб анодга етиб бора бошлайди. Электродлар орасидаги кучланиш электронга $9{,}8=2\times4{,}9$ эВ энергия бериш даражасига етганда яна анод токининг кескин камайиши кузатилади. Бу ҳолда электрон симоб буғи атомининг электрони билан икки каррали тўқнашиши натижасида энергия йўқотади. Шундай қилиб симоб буғи атомлари стационар энергетик ҳолатларга эга экан. Бунга электронлар билан тўқнашиш туфайли қўзғатилган ҳолатга ўтган симоб буғи атомларининг нурланиш энергиясини ўлчаб ишонч ҳосил қилиш мумкин. Атом нурланиш частотаси $\hbar$ бирлигида аниқланганда у катоддан анодга кетаётган электрон йўқотган энергияга сон жиҳатдан тенг бўлиб чиққан. Франк ва Герц тажрибаси микрооламда дискрет энергетик ҳолатлар мавжудлигини исботлади. Бундай тажрибалар жуда кўп. Улардан яна бири Штерн ва Герлах (1921 й.) тажрибасидир. Улар атомдаги электронларнинг айланма ҳаракатдаги импульс моментлари энергияга ўхшаш дискрет қийматлар олишини кўрсатишди.

Штерн ва Герлах кучли бир жинсли бўлмаган магнит майдонидан атомлар дастасини ўтказишди. Магнит майдон куч чизиқлари атомлар оқимига тик йўналган. Атом магнит моментига эга бўлса, унга ташқи магнит майдони томонидан

$$\mathcal{F} = -\mu \frac{\partial B}{\partial r} \cos\alpha$$



5.3- расм. Штерн ва Герлах тажрибасининг схемаси.

куч таъсир этади. Бу ерда μ — атомнинг магнит моменти, B — ташқи магнит майдон кучланганлиги, $\frac{\partial B}{\partial z}$ — унинг градиенти, α — атом магнит моменти йўналиши билан ташқи магнит майдон йўналиши орасидаги бурчак (5.3-расм). Агар атомнинг магнит моменти дискрет қиймат олмаса, унга таъсир этувчи куч 0 дан $\pm F_{max}$ гача турли қийматлар қабул қилиши мумкин ва натижада атом магнит майдонидан ўтгандан сўнг дастлабки йўналишидан ҳар хил бурчакка бурилади. Аммо тажрибада атомлар дастаси магнит майдони таъсирида фақат икки қисмга ($\cos\alpha = \pm 1$) ажраган. Демак, атомнинг магнит моменти унинг энергияси каби дискрет қийматлар олади. Тажриба натижасига кўра

$$\mu = \mu_0 = \frac{e_0\hbar}{2m_0c} = 9{,}3\cdot 10^{-21}\ \frac{\text{эрг}}{\text{гаусс}}$$

бўлиб, μ_0 — Бор магнетони номини олди. Кейинги тажрибалар шуни кўрсатдики, барча атомлар ва молекулалар 0 ёки μ_0 га бутун сонга каррали магнит моментга эгадирлар.

Юқорида қайд этилган тажриба фактларининг ҳаммаси микроолам хусусиятн ўзгача эканлигини, ундаги заррачалар ва заррачаларни характерловчи физик катталиклар дискрет бўлишини (квантлашишини) кўрсатади. Табиийки, микроооламдаги ҳодисаларни тушунтирувчи назария—квант механикаси бу хусусиятларни эътиборга олиши керак.

Хулоса қилиб, шуни айтиш лозимки, Планк доимийси $\hbar$ микроолам дискретлигининг ўлчов бирлигига айланди. Энергия, импульс, импульс моменти, спин ва заррача ҳолатини характерловчи бошқа физик катталиклар $\hbar$ бирлигида ўлчанади. Планк доимийси $\hbar$ электрон массаси m_0 ва заряди e_0 комбинациясидан қуйидаги узунлик ўлчовини ҳосил қилиш мумкин:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2}.$$

Бунга доимий катталиклар (m_0, e_0, $\hbar$) нинг сон қийматларини қўйсак, $a_0 = 0{,}53\cdot 10^{-10}$ м бўлиб (водород атомида биринчи Бор радиуси) атомнинг ўлчами тартибидаги катталик келиб чиқади.

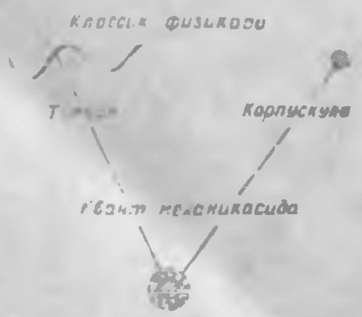
Шундай қилиб, Планк доимийси микроолам дискрет структурасида квантлашиш қадами ҳисобланади.

6-§. ТЎЛҚИН-КОРПУСКУЛЯР ДУАЛИЗМИ

Квант механикасининг асосий тенгламалари ва қонунларини (III боб) баён қилишдан аввал заррачаларнинг асосий хусусиятларидан бири бўлган тўлқин ва корпускуляр дуализми, унинг маъноси билан яна бир бор танишамиз. Микроолам структурасининг дискретлиги, ундаги заррачалар ҳолатини аниқловчи физик катталикларнинг квантлашиши билан бир қаторда заррачаларнинг бир-биридан ажралмас бўлган тўлқин-корпускуляр хусусиятлари квант механикасидагина ўрганиладиган материянинг махсус физик томонларидир.

Классик физикада тўлқин ва корпускуляр ҳаракат турлари батафсил ўрганилган. Биринчиси эластик муҳитда тебранишларнинг тарқалишини англатса, иккинчиси — заррачанинг динамика қонунларига бўйсуниб ҳаракатланишини билдиради. Тўлқин тарқалиши бу бирор муҳитнинг ҳаракати, муҳит бор жойда тўлқин бор. Шунинг учун ҳаракатнинг бу турида фазонинг бирор нуқтасига боғлиқ (локал) бўлган заррача йўқ. Аммо ҳаракатнинг иккинчи турида m массали заррача фазонинг бирор қисмида «боғлиқ» ҳолда, яъни аниқ координаталарга эга бўлган ҳолда мавжуд бўлиши мумкин. Бундай ҳаракат ўз траекториясига эга. Демак, классик физикада тўлқин тарқалиши ва корпусканинг ҳаракати бир-биридан тубдан фарқ қилувчи ҳодисалардир. Квант механикасида эса ҳаракатнинг бу икки тури ўртасидаги тафовут олинади. Корпускуланинг ҳаракатини ўрганишда биз уни ташкил этган заррачаларнинг ҳаракатини эътиборга олмадик. Аммо корпускуланинг, яъни макрожисмнинг жуда кўп хусусиятлари (шакли, нурланиши, электр ўтказувчанлиги, магнит хусусиятлари, иссиқлик ўтказувчанлиги ва ҳ.к.) уни ташкил этган заррачалар ҳаракатига ва хусусиятига боғлиқ. Макрожисм хусусияти корпускуляр бўлса, уни ташкил этган заррачаларнинг хусусияти ҳам тўлқин, ҳам корпускуляр табиатли бўлади. Шундай қилиб, классик физикада тўлқин ва корпускуляр ҳаракат — ҳаракатнинг икки тури сифатида мустақил мавжуд бўлса, микроолам заррачаларида бу ҳар иккала хусусият якка объектга диалектик бирлашади. Шуларни эътиборга олган назариягина материя хусусиятларини тўғри тушунтира олади. Заррачанинг тўлқин хусусиятини характерловчи параметрлар (частота ω ва тўлқин узунлиги λ ёки тўлқин сони k унинг корпускуляр хусусиятини характерловчи параметрлар (энергия E ва импульс p) билан Планк доимийси орқали ўзаро боғлиқ:

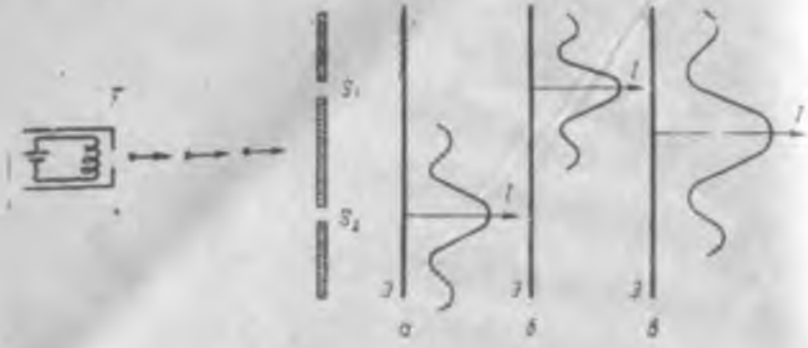
$$E = \hbar\omega, \quad p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}.$$



6.1- расм. Тулқин ва корпускуляр хусусиятларнинг квант механикасида диалектик бирлашиши.

Юқорида айтилган тўлқин-корпускуляр дуализми (иккиланма хусусият) фотонга ҳам хосдир. Шундай қилиб, классик физика нуқтаи назаридан бир-биридан тубдан фарқ қилувчи электромагнит тўлқин ва корпускула квант механикада бир хил тўлқин-корпускуляр хусусиятга эга бўлади (6.1- расм). Классик физикадаги корпускуляр тушунчасини микрооламга олиб кириш қанчалик ноўрин бўлса, тўлқин тушунчасини микрооламга киритиш ҳам шунчалик ўринсиздир. Бу ҳар иккала атаманинг (биз ўрганиб қолганлигимиз сабабли) микрооламга кириши материя ҳаракатини ўрганишни макрооламдан бошланганлиги туфайлидир. Шунинг учун бу атамалардан микрооламда классик физикадаги маънода эмас, балки микрообъектнинг бир хусусияти сифатида тушуниш лозим. Микроолам зарраchaларининг (жумладан фотоннинг ҳам) ҳаракатида тўлқин хусусияти кўпроқ намоён бўлса, унинг бир бошқа объект билан тўқнашишида корпускулярлик хусусияти кучлироқ бўлади. Аммо бу ҳар иккала хусусият бир-биридан ажралмас, бири иккинчисини тўлдирувчи бўлади. Бу микроoламнинг объекти хусусиятини тушунишда қуйидаги тажрибалар ҳам ёрдам беради.

Фабрикант (1949 й.) раҳбарлигидаги олимлар электронлар оқими йўлига S_1 ва S_2 тирқиши бўлган тўсиқ жойлаштирдилар (6.2- расм). Тирқишдан ўтган зарраchaлар люминесценцияланувчи $Э$ экранга тушиб из қолдиради. Дастлаб S_1 тирқиш берк бўлсин. Электронлар S_2 тирқишдан ўтишда дифракцияланиб, $Э$ экраннинг S_1 тирқиши рўпарасида дифракцион манзара (6.2- *а* расм) ҳосил қилади. Агар тирқиш доиравий бўлса $Э$ экрандаги электронларнинг ўрни концентрик ҳалқалардан иборат бўлади. Сўнгра S_2 тирқишни беркитиб S_1 тирқишни очсак, 6.2- *а* расмдагига ўхшаш дифракцион манзара S_1



6.2- расм. Электронлар дастасининг икки қўшни тирқиш орқали ўтишда дифракцияланишга оид (Фабрикант тажрибаси).

тирқиш рўпарасида ҳосил бўлади (6.2- *б* расм). Агарда иккала тирқишни бирданига очсак, биринчи (*а*) ва иккинчи (*б*) кўринишдаги дифракцион манзараларнинг механик қўшилиши ҳосил бўлмай, балки ҳар иккала тирқишдан ягона интерференцион манзара юзага келади (6.2- *в* расм). Манбадан келаётган электронлар сонини жуда озайтирсак ҳам юқоридаги ҳодисалар такрорланади. Энди фикран тасаввур қилайлик. Тирқишларнинг ҳар иккаласи ҳам очиқ бўлиб, уларга якка ҳолда электронлар келаётган бўлсин. Электронлар биттадан келганда (6.2- *в* расмда кўрсатилган) интенсивлик тақсимоти бирданига ҳосил бўлмайди, балки узоқ вақт давомида тирқишлардан якка тартибда ўтиб *Э* экранга тушган заррачалар ўрнини фикран бирлаштира борсак, охир-оқибатда интенсивлик тақсимоти 6.2- *в* расмдагидек бўлади. Қуйидагича савол туғилиши мумкин: заррачалар тирқишлардан биттадан ўтганда нима учун 6.2- расмдаги (*а*) ва (*б*) тасвирлар ҳосил бўлмай (*в*) тасвир ҳосил бўлади, битта заррача иккита тирқишга бўлиниб ўтадими? Жавоб: Йўқ, заррача бир бутун микрообъектдир. У ҳар иккала тирқиш очиқ бўлганда уларнинг фақат биттасидан ўтади. (Тирқишларга детектор ўрнатиб бунга ишонч ҳосил қилса бўлади.) Аммо тирқишдан ўтгандан кейинги фазодаги ҳаракатга (демак *Э* экрандаги тақсимотга) албатта иккинчи тирқиш ҳам таъсир этади. Битта заррача тўлқин группаси ҳам эмас. Агар шундай бўлганда тирқишлардан 100 та (фараз қилайлик) заррача ўтганда (*в*) таъсир тасвир ҳосил бўлса, заррачалар биттадан ўтганда интенсивлиги 100 баробар кучсизроқ бўлган яна шу тасвир ҳосил бўлиши керак эди. Аммо бу ҳол кузатилмайди. Экранга тушганда у бир бутун заррача сифатида урилади, битта жойда чақнаш ҳосил бўлади. Бу фикрий тажриба Фабрикант раҳбарлигида амалга оширилган тажрибанинг (яъни реал ҳодисанинг) идеаллашгани бўлиб, ҳақиқатга яқиндир.

Яна битта фикрий тажрибани муҳокама қилайлик. Фараз қилайлик, қўлимизда сифатли ишланган милтиқ ва идеал бир хил тайёрланган ўқлар бўлсин. Милтиқни нишонга мўлжаллаб бирор массив жисмга маҳкамлаб қўйилган бўлсин (акс таъсирни ҳисобга олган ҳолда), ўқлар ҳар отишда нишонга аниқ тегиши мумкин. Ўқ-корпускула, шу сабабли унинг траекториясини ва нишоннинг қаерига бориб тушишини классик физика қонунларига биноан аниқ айтса бўлади. Энди фараз қилайлик, ўқ (тирқиш, милтиқ ҳам) кичрайиб микроолам заррачасига айлансин. У ҳолда отилган «микроўқ» ҳар доим нишоннинг бир нуқтасига тушмайди. Бу ҳолдаги отиш (отувчи хар қанча тажрибали бўлса ҳам) тажрибасиз ва мўлжали аниқ бўлмаган овчининг ишига ўхшайди Ҳар бир отишда экранда чақнаш ҳосил бўлади. Демак, «микроўқ» экраннинг бир жойига бориб тушади. Аммо энди бу микроўқни экраннинг қаерига бориб тушишини бирор эҳтимоллик билан айтиш мумкин. Бошқача айтганда «микроўқ» экраннинг қаерига бориб тушишини эҳтимоллик назарияси ёрдамида топиш мумкин. Узоқ вақт отиш туфайли экранда ҳосил бўлган «микроўқ»лар изларини бирлаштирсак концентрик ҳалқалар ҳосил бўлади (6.3- расм). Бу микрозаррачанинг дифракциясидир.

6.3- расм. Кичик доиравий тирқишдан ўтаётган «микроўқлар» дифракциясига оид хаёлий тажриба схемаси.

Юқоридаги айтилганлардан шундай хулоса қилиш мумкин. Тўлқин хусусият заррачалар группасигагина эмас, балки битта заррачага ҳам хосдир. Заррачанинг тарқалиши тўлқиннинг тарқалиши билан экранга бориб тушиш жойи эҳтимоллик назарияси билан, экранга урилиши эса корпускуляр хусусиятн билан аниқланади. Микрообъектнинг ўзига хос иккиланма хусусияти туфайли унинг координатаси ва импульсини бир вақтда аниқ ўлчаб бўлмайди. Бу ноаниқлик ўлчов асбобининг камчилиги ёки тажриба ўтказувчининг малакасизлигидан келиб чиқмайди. У микрооламнинг объектив хусусиятидир. Бу хусусият назарий йўл билан Гейзенберг (1927 й.) томонидан исботланган ва квант механикасининг фундаментал тушунчаларидан бири ҳисобланади.

Зарранинг тўлқин-корпускуляр дуализми квант механикасида траектория тушунчаси, заррача ҳолатини кўргазмали қилиш каби классик физикага хос терминларни маъносиз эканлигини кўрсатади. Аммо бу ўқувчига квант механикаси фанини ўрганишда психологик тўсиқ бўлмаслиги керак. Квант механикаси қонунлари содда ва изчил бўлиб, уни ўрганишда микрооламга хос бўлган заррачанинг тўлқин ва корпускуляр хусусиятини, траекториянинг ўринсизлигини, ноаниқлик принципининг объективлигини назарда тутиш лозим.

7-§. КВАНТ МЕХАНИКАСИДА ҲОЛАТ ВА КУЗАТИШ

Микроолам хусусиятлари билан қисқача танишдик. Энди уни ташкил этган заррачалар ҳолатини фазо ва вақтда қандай тавсифлаш мумкинлиги билан ҳамда заррачаларни характерловчи физик катталикларни аниқлаш усуллари билан танишайлик. Юқорида қайд этганимиздек, биз микроолам хусусиятларини ўрганишга классик физикада ўрганилган тушунчалар билан кириб бормоқчимиз. Уларнинг айримлари микрооламда ўринсиз ёки ўринли эканлиги ҳақида қисқача 6- § да айтилди. Шунинг учун квант механикаси тушунчалари доимо классик физика тушунчалари билан солиштириб борилади.

Микрооламнинг ўзига хос хусусиятларга эга эканлиги уни ташкил этган заррачалар ҳолатини ва физик катталикларни аниқлашда албатта ўз таъсирини кўрсатади. Мазкур параграфда заррача ҳолатини тасвирлаш ва заррачани характерловчи физик катталиклар. уларни бир вақтда кузатиш усуллари билан танишамиз.

1. Микросистема ҳолатини тасвирлаш. Ҳар қандай назариянинг асосида у ўрганадиган системанинг ҳолатини тасвирлаш (баён қилиш, аниқлаш) усули муҳим ўрин тутади. Бу масала классик физикада жуда соддадир. Моддий нуқта берилган вақт моментида (t) фазонинг бирор нуқтасида (яъни x_0, y_0, z_0 координаталарга эга) бўлса, ихтиёрий вақт моментидан (t_1) сўнг унинг фазодаги ҳолатини (x_1, y_1, z_1) аниқлаш, импульсини (тезлигини) топиш мумкин. Унинг охирги ҳолати билан дастлабки ҳолатини бир-бири билан ҳаракат тенгламаси орқали боғлаш мумкин. Демак, классик физикада бошланғич ҳолат маълум бўлса, ихтиёрий вақт моментида (лаҳзасида) заррачанинг координатаси ва импульсини аниқлаш мумкин бўлади. Бунга классик физикадаги сабабиятлик принципи дейилади.

Квант механикасида ҳодисаларни эволюцион ўзгаришини бундай сабабият принципи асосида ифодалаб бўлмайди, чунки вақтнинг бирор моментида фазонинг берилган dV ҳажм элементида аниқланган заррача ҳолати унга берилаётган ташқи таъсир доимий бўлса, вақт ўтиши билан ўзгармаслиги керак.

Квант механикасида заррача тўлқин-корпускуляр хусусиятга эга бўлганлиги туфайли бир вақтда унинг координатини ва импульсини аниқлаб бўлмайди. Шунинг учун квант механикасида заррача ҳолати статистик маънода тўлқин функцияси Ψ орқали ифодаланади. Умуман олганда Ψ функцияси x, y, z ва t га боғлиқ бўлиб комплекс бўлиши мумкин. Қисқа ёзиш мақсадида фақат x, y, z га боғлиқ бўлган функцияни Ψ билан ва x, y, z, t га боғлиқ бўлган функцияни $\Psi(t)$ билан белгилаймиз.

2. Квант механикасининг статистик характери. Ψ ва $\Psi(t)$ функциялар ёрдамида аниқланадиган $|\Psi|^2$ ёки $|\Psi(t)|^2$ шу функциялар аниқланган соҳада заррача топилиши эҳтимоллигининг зичлигидир. Ҳақиқатан ҳам Ψ функцияси аниқланган дейлик. У ҳолда шундай Ψ функцияли заррачанинг $dx\,dy\,dz = dV$ ҳажм элементида топилиш эҳтимоллиги dw қуйидаги формула билан аниқланади:

$$dw = |\Psi|^2\, dV = \Psi\Psi^*\, dV. \qquad (7.1)$$

Бу ерда $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ бўлиб, Ψ^* функцияси Ψ функциясидаги $i = \sqrt{-1}$ ни $-i$ билан (эҳтимоллик ҳақиқий сон кўринишида аниқланади) алмаштириш туфайли ҳосил бўлади, яъни Ψ^* функцияси Ψ функциясининг комплекс қўшмасидир. (7.1) формуладан

$$\frac{dw}{dV} = |\Psi|^2 = \Psi\Psi^* \qquad (7.2)$$

заррача топилиш эҳтимоллигининг зичлигидир. Худди шунингдек $\Psi(t)$ функцияси учун ҳам (7.2) формулага ўхшаш ифодани ёзиш мумкин:

$$dw\ (t) = |\Psi\ (t)|^2\ dV. \tag{7.3}$$

Бу формула асосида $\Psi\,(t)$ тўлқин функцияси заррачанинг dV фазо элементида t вақт моментида топилиш эҳтимоллигини аниқлайди. Кейинчалик (12- §) аниқ бўладики, Ψ функция ёрдамида заррачани фазонинг dV ҳажм элементида топиш эҳтимоллигинигина эмас, балки заррача ҳолатини характерловчи физик катталикни ўлчаш эҳтимоллигини ҳам топиш мумкин. (7.1) ва (7.2) формулаларни x, y, z ўзгарувчиларининг барча ўзгариш соҳаси бўйича интеграллсак, эҳтимолликларнинг йиғиндиси ишончли ҳодиса учун 1 га тенг бўлганлиги сабабли

$$\int dw = \int |\Psi|^2 dV = 1 \tag{7.4}$$

ва

$$\int dw\ (t) = \int |\Psi\ (t)|^2 dV = 1 \tag{7.5}$$

шарт келиб чиқади. Бу шартни қаноатлантирувчи ψ ва $\Psi\,(t)$ функцияларни нормалланган функциялар дейилади. Бу шартлар дискрет спектрли ҳолатлар учун ўринли бўлиб, интеграллаш чегараси билан чекланган соҳада ҳолати ψ ёки $\Psi\,(t)$ функция билан характерланувчи заррачанинг албатта топилишини билдиради.

ψ — функция ёрдамида заррачанинг dv ҳажми элементида бўлиши эҳтимоллик назарияси ёрдамида аниқланиши квант механикаси қонунларининг статистик характерини англатади. Классик физикада статистик текшириш методи кўп заррачали системаларга қўлланилади ва заррачалар сони етарли кичик бўлганда бу метод ўз кучини йўқотади (масалан температура тушунчаси). Квант физикасида эса юқоридаги натижалардан кўринадики, битта заррачанинг ҳолати ҳам статистик метод билан аниқланади.

8- §. КВАНТ МЕХАНИКАСИДА СУПЕРПОЗИЦИЯ ПРИНЦИПИ

Квант механикасида қўлланиладиган муҳим физик қонунлардан бири *ҳолатларнинг суперпозиция принципидир*. Уни қуйидагича тушуниш лозим. Фараз қилайлик, Шредингер тенгламаларини ечиб система ҳолатини ифодаловчи Ψ_1, Ψ_2 функцияларини аниқладик. Агар система (заррача ёки заррачалар тўплами) Ψ_1 ва Ψ_2 функциялар билан аниқланувчи ҳолатларда бўла олса, у албатта бу икки ҳолат чизиқли комбинациясидан иборат бўлган

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 \qquad (8.1)$$

холатда ҳам бўла олади. Бу ердаги C_1 ва C_2 лар мос ҳолда Ψ_1 ва Ψ_2 хусусий ҳолатлар амплитудасини аниқловчи катталик бўлиб, умумий ҳолда комплекс сонлардир. (8.1) формула квант механикасида ҳолатлар суперпозициясининг математик ифодасидир. Агар ҳолатлар сони кўп бўлса (8.1) ифодани қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + \ldots + C_\nu \Psi_\nu + \ldots = \sum_\nu C_\nu \Psi_\nu \qquad (8.2)$$

Бу мураккаб ҳолат функциясидир. Агар суперпозицияланувчи ҳолатлар бир-биридан, масалан, импульс бўйича чексиз кичик қийматга фарқ қилса, (8.2) формулани интеграл орқали ифодалаш мумкин:

$$\Psi = \int C_{\vec{p}} \Psi_{\vec{p}}\, dp_x\, dp_y\, dp_z. \qquad (8.3)$$

Суперпозиция принципи классик физикада ҳам учрайди. Масалан, фазода электр майдонини бир неча нуқтавий зарядлар ҳосил қилган бўлса, фазонинг ихтиёрий нуқтасидаги электр майдон кучланганлиги ҳар бир нуқтавий заряднинг шу нуқтадаги электр майдон кучланганликларининг геометрик йиғиндисидан иборат бўлади. Шундай йўл билан диполь, квадруполь майдонлари ҳисобланади. Квант механикасидаги суперпозиция принципи классик физикадаги суперпозиция принципидан тубдан фарқ қилади. Масалан, заррача Ψ_1 ҳолатда бўлганда уни характерловчи катталик L_1 бўлсин, Ψ_2 ҳолатда — L_2 бўлсин. Система (8.1) формула билан аниқланувчи Ψ ҳолатда бўлганда уни характерловчи параметр L_1 ва L_2 нинг комбинациясидан (классик физикадагига ўхшаш) иборат бўлмайди. Бу янги Ψ ҳолатда ҳам системани характерловчи параметр L_1 ёки L_2 бўлади. Қайси бирини бўлиш (ёки ўлчаш)да кўпроқ топилиши эҳтимоллиги C_1 ва C_2—коэффициентлар ўртасидаги нисбатга боғлиқ. Яна бир мисол. Классик физикада иккита тебранишнинг суперпозицияси туфайли янги қўшилувчи тебранишлардан физик катталикларн билан фарқ қилувчи тебранма ҳаракат ҳосил бўлади. Квант механикасида эса иккита бир хил ҳолатнинг қўшилиши ҳолат функциясини бирор доимий қийматга кўпайтмасига тенг кучли. Демак, бу ҳолда янги ҳолат вужудга келмайди.

Квант механикасининг суперпозиция принципи тажрибаларда тасдиқланган бўлиб, системанинг ҳар қандай ҳолатини кўп миқдордаги ҳолатлар суперпозицияси кўринишида ифодалаш мумкинлигини ёки берилган квант системаси учун ўзаро суперпозицияланувчи ҳолат функцияларини ҳосил қилиш мумкинлигини кўрсатади.

9- §. МИКРООЛАМДА ФИЗИК КАТТАЛИКЛАРНИ ЎЛЧАШ

Физика фани тажрибага асослангандир. Тажриба ҳодисаларини тўғри тушунтириш уларнинг ички узвий боғланишларини, умумий асосларини аниқлаш квант механикасининг асосий вазифаси хисобланади. Назарий натижаларни тажриба билан таққослаш амалда физик катталикларни ўлчаш йўли билан бажарилади. Аммо микрооламда ўлчаш жараёни катта муаммодир. Чунки ўлчов асбоблари, табиий, классик физика қонунларига бўйсунувчи макрообъектлардир. Микроолам заррачалари эса ўзига хос хусусиятли квант механикаси қонунларига итоат қилувчи объектлардир. Ҳар қандай ўлчаш эса ўзаро таъсирга асосланган. Демак, микроолам заррачаларининг физик катталикларини ўлчаш классик ва квант физикаси қонунларига бўйсунувчи иккита объектни тўқнашиши туфайли амалга ошади. Ана шундай тўқнашишларни тўғри акс эттирадиган фундаментал тенгламаларнинг йўқлиги ўлчаш туфайли микрооламнинг объектив катталикларини аниқлашни қийинлаштиради.

Иккинчи томондан микрозаррача физик катталикларининг (масалан, p_x, p_y, p_z, x, y, z, t, E, . . .) барчасини ҳам бир вақтда ўлчаб бўлмайди. Классик физикада эса корпускуланинг координатини (x) ва у билан канонник қўшма бўлган импульсни (p_x) бир вақтда аниқ ўлчаш мумкин. Микрооламда заррача ҳолатини (Ψ ҳолат функциясини) аниқловчи параметрлар бир-бирини инкор қилувчи группаларга бўлинадиларки, уларни бир вақтда ўлчаб бўлмайди. Бундай параметрлар учун Гейзенбергнинг ноаниқлик муносабатлари мавжуд. Аммо квант механикасида заррача ҳолатини қисман аниқловчи бир группа параметрларни (масалан, x, y, z) иккинчи группа параметрлар (масалан, p_x, p_y, p_z) тўлдиради. Натижада заррача ҳолатини аниқлаш учун тўла параметрлар (x, y, z, p_x, p_y, p_z) тўпламига эга бўламиз. Бунга квант механикасида тўлдириш принципи дейилади. Бу принципни Н. Бор асослаган. Унинг фикрича микрозаррача ҳолатини характерловчи динамик ўзгарувчилар бир-бирини тўлдирувчи иккита синфга, фазо — вақт параметрларига ва импульс—энергетик параметрларга бўлинади. Ўлчаш жараёнида бу параметрлар бир-

бирини инкор этади. Шунинг учун бу икки группа параметрларни бир вақтда ўлчовчи асбоблар алоҳида-алоҳида бўлиши керак. Ўлчов асбоблари заррачани ҳолатларига қараб ажратади (спектрал анализ) ва унга қўшимча бўлган детектор заррачанинг қайси ҳолатда эканлигини аниқлайди. Албатта, ўлчаш жараёнида классик ўлчов асбоби заррача ҳолатига кучли таъсир ўтказмаслиги керак. Шундай қилиб, квант механикасидаги ўлчов жараёни микроҳодисадан бошланиб макроҳодиса билан тугайди.

I бобга доир масалалар

1. Нурлатиш қобилияти $5{,}7 \cdot 10^{-4}$ Вт/м^2 бўлган жисм иссиқлик нурланиши спектридаги энг катта эҳтимоллик билан чиқариладиган тўлқин узунлигини аниқланг.

Ж а в о б и: $2{,}9 \cdot 10^{-6}$м.

2. Абсолют қора сиртли, зичлиги ρ ва радиуси r бўлган металл шарча температураси $0K$ га яқин ҳолда доимий тутиб турилган ва ҳавоси сўриб олинган идишга туширилган. Агар шарчанинг иссиқлик сиғими C_V, бошланғич температураси T_0 бўлса, қанча вақтдан сўнг унинг температураси n марта камаяди.

Ж а в о б и: $t = C_V \rho r\, (n^3 - 1)/96T_0^3$

3. Планк формуласи ёрдамида Стефан-Больцман ва Виннинг силжиш қонунларини ҳосил қилинг.

4. Атом $v \ll c$ тезлик билан ҳаракатланаётган пайтда ўз ҳаракат йўналишига θ бурчак остида фотон чиқаради. Фотон частотасининг Доплер силжиши нисбий катталигини топинг.

Ж а в о б и: $\dfrac{\omega' - \omega}{\omega'} \approx \dfrac{v}{c} \cos\theta.$

5. Электроннинг де Бройль тўлқин узунлиги унинг Комптон тўлқин узунлигига тенг бўлгандаги кинетик энергиясини аниқланг.

Ж а в о б и: $T = m_0c^2\, (\sqrt{1 + 4\pi^2} - 1) = 2{,}74$ МэВ.

6. Максвелл тақсимотидан фойдаланиб газ молекулаларининг де Бройль тўлқин узунликлари бўйича тақсимот функциясини ва энг катта эҳтимолли тўлқин узунликни топинг.

Ж а в о б и: $f(\lambda) \sim \lambda^{-4} e^{-2\lambda_0^2/\lambda^2}$, $\lambda_0^2 = \pi\hbar/\sqrt{mk_Б T}$.

7. X ўқи бўйлаб эркин ҳаракатланаётган микрозаррачага частоталари (ω_0, $\omega_0 + \Delta\omega$) оралиқда ётган тўлқинлар группаси мос келади деб ҳисоблаб, $\Delta p_x \cdot \Delta x \geqslant \hbar$ ва $\Delta E \cdot \Delta t \geqslant \hbar$ ноаниқликлар муносабатларини келтириб чиқаринг.

8. Импульси p бўлган заррачага мос келган тўлқинлар группасининг бўшлиқда амалий жиҳатдан бутунлай тарқалиб кетиш (дисперсияга учраш) вақтини ҳисобланг.

$$\text{Ж а в о б и: } t \approx \frac{p^2}{\hbar \frac{d^2E}{dp^2}}.$$

9. Ноаниқликлар муносабатидан фойдаланиб водород атомининг асосий ҳолатида электронни боғланиш энергиясини ва ядродан турган масофасини баҳоланг.

$$\text{Ж а в о б и: } E_{\text{бог}} \approx \frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^2} = 13{,}6 \text{ эВ}, \quad a_0 \approx \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2} = 0{,}53 \text{Å}.$$

10. Массаси m бўлган заррача $U = kr^2/2$ — марказий симметрик потенциал майдонда доиравий орбита бўйлаб ҳаракатланади. Борнинг квантлашиш шартидан фойдаланиб заррачанинг рухсат этилган энергетик сатҳларини аниқланг.

$$\text{Ж а в о б и: } E_n = n\hbar\omega, \ \omega = \sqrt{k/m}, \ n = 1, 2, \ \ldots$$

11. Водород атоми нурланишининг Лайман, Бальмер, Пашен, Брикетт ва Пфунд сериялари ўзаро қопланадими? Буни спектрнинг тўлқин узунликлари шкаласида тасвирланг.

12. Бор-Зоммерфельднинг квантлашиш шартидан фойдаланиб уч ўлчовли гармоник осцилляторнинг энергетик спектрини аниқланг.

$$\text{Ж а в о б и: } E_{n_1 n_2 n_3} = \sum_{i=1}^{3} n_i \hbar \omega_i, \ \omega_i = k/m_i$$

$$n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \ldots$$

13. Агар ясси тўлқинлар суперпозицияси

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ik_0 x}, & -l < x < l; \\ 0, & -l > x > l \end{cases}$$

тўлқин функцияси билан ифодаланса, тўлқин сонларининг спектрини топинг.

$$\text{Ж а в о б и: } \Delta k = k - k_0 \approx 2\pi/l.$$

14. Заррачанинг x координатасини микроскоп ёрдамида ўлчаш унинг импульсида $\Delta p_x \approx \hbar/\Delta x$ ноаниқлик киритишини исботланг.

II БОБ.

КВАНТ МЕХАНИКАСИНИНГ МАТЕМАТИК АППАРАТИ

10-§. ЧИЗИҚЛИ ОПЕРАТОРЛАР

Назарий физиканинг асосий вазифаларидан бири аниқланган қонуниятларни математик ифодаларга келтиришдир. Бунинг учун мос математик аппаратдан фойдаланиш лозим. Квант механикасининг тушунчалари, қонуниятлари ўзига хос бўлганидек, унинг математик аппарати ҳам махсусдир. Квант механикасида *операторлар* билан иш кўрилади. Заррача ҳолатини характерловчи ҳар бир физик катталик ўз операторига эга. Классик физикада бирор қонуниятни математик тилда ёзиш учун функционал боғланишдан фойдаланилади. Масалан, абсолют қора жисмнинг юза бирлигидан вақт бирлиги ичида сочилган нурланиш энергияси ε температуранинг $\varepsilon = f(t)$ функцияси тарзида ёки $\varepsilon = \delta T^4$ аналитик кўринишда берилади. Бу боғланиш ёрдамида T га қийматлар бериб, ε нинг унга мос сон қийматлари аниқланади. Демак, функция бир сон қиймат билан иккинчи сон қийматни ўзаро боғлайди.

Квант механикасидаги операторлар эса бир функция билан иккинчи функцияни ўзаро боғлайди. Операторларни устида «$\wedge$» белгиси бўлган ҳарфлар билан ифодалаш қабул қилинган. Шундай қилиб, оператор деб φ функциядан Ψ функцияга ўтиш қоидасига айтилади:

$$\Psi = \hat{K}\varphi, \tag{10.1}$$

$\hat{K}$ — оператор; у турли хил математик операторлар: кўпайтириш, дифференциаллаш, даражага кўтариш, ўрин алмаштириш ва ҳоказо бўлиши мумкин. (10.1) кўринишдаги боғланиш $\hat{K}$ операторн билан φ функцияга таъсир этсак, Ψ функция ҳосил бўлади, деб ўқилиши керак.

Квант механикасида чизиқли операторлар билан иш кўрилади, чунки шундай операторлар билан заррача ҳолатини аниқловчи функцияга таъсир этиш туфайли квант механикасининг асосий қоидаларидан бири бўлган суперпозиция принципи бузилмайди. Қуйидаги

$$\hat{K}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2) = C_1\hat{K}\varphi_1 + C_2\hat{K}\varphi_2 \tag{10.2}$$

шартни қаноатлантирувчи $\hat{K}$ операторига *чизиқли оператор* дейилади. Бу ерда φ_1, φ_2 лар ихтиёрий функциялар, C_1 ва C_2 ихтиёрий ўзгармас катталиклар.

1. Операторлар алгебраси. Чизиқли операторлар устида айрим амалларни кўрайлик. Агар ихтиёрий φ функция учун қуйидаги тенглик

$$\hat{K}\varphi = \hat{Л}\varphi + \hat{G}\varphi = (\hat{Л} + \hat{G})\varphi \tag{10.3}$$

ўринли бўлса, у ҳолда $\hat{K}$ операторни $\hat{Л}$ ва $\hat{G}$ операторларининг йиғиндиси дейилади, яъни

$$\hat{K} = \hat{Л} + \hat{G}. \tag{10.4}$$

Агарда ихтиёрий φ функция учун қуйидаги тенглик

$$\hat{K}\varphi = \hat{Л}\varphi - \hat{G}\varphi = (\hat{Л} - \hat{G})\varphi \tag{10.5}$$

бажарилса, у ҳолда $\hat{K}$ операторини $Л$ ва $\hat{G}$ операторларининг айирмаси дейилади:

$$\hat{K} = \hat{Л} - \hat{G} \tag{10.6}$$

Қуйидаги

$$\hat{K} = \hat{Л}\hat{G} \tag{10.7}$$

кўринишда операторларнинг кўпайтмасини ҳам аниқлаш мумкин. Кўпайтма операторлар билан φ функциясига икки хил таъсир этиш мумкин: (10.7) шаклда аввал $\hat{G}$ оператори билан φ функцияга таъсир этиб, сўнгра чиққан натижага $\hat{Л}$ оператори билан таъсир этамиз:

$$\hat{K}\varphi = \hat{Л}(\hat{G}\varphi). \tag{10.8}$$

Аксинча, φ функцияга аввал $\hat{Л}$ оператори билан, сўнгра ҳосил бўлган натижага $\hat{G}$ оператори билан таъсир этсак,

$$\hat{K}'\varphi = \hat{G}(\hat{Л}\varphi). \tag{10.9}$$

Умуман олганда $\hat{K} \neq \hat{K}'$, аммо баъзан ҳар иккала ҳолда аниқланган натижа ўзаро тенг бўлиши ҳам мумкин. Бу ҳолда $\hat{Л}$ ва $\hat{G}$ операторларини ўзаро *коммутацияланувчи операторлар* дейилади. Мисол учун $\hat{Л} = 5$, $\hat{G} = \frac{d^2}{dx^2}$ бўлсин. У ҳолда

$$\hat{Л}(\hat{G}\varphi) = 5\left(\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right) = 5\frac{d^2\varphi}{dx^2}$$

ва

$$\hat{G}(\hat{Л}\varphi) = \frac{d^2}{dx^2}(5\varphi) = 5\frac{d^2\varphi}{dx^2}.$$

Демак, бундай мисолларда

$$\hat{Л}(\hat{G}\varphi) = \hat{G}(\hat{Л}\varphi). \tag{10.10}$$

Агарда (10.7) кўпайтма оператор билан ихтиёрий φ функцияга таъсир этишимиз туфайли ҳосил бўлган натижа, $\hat{Л}$ ва $\hat{G}$ операторларнинг таъсир этиш тартибига боғлиқ бўлса, бу операторларни ўзаро *коммутацияланмайдиган операторлар* дейилади. Масалан, $\hat{Л} = x^3$, $\hat{G} = \frac{d^2}{dx^2}$ бўлсин.

У ҳолда

$$\hat{Л}(\hat{G}\varphi) = \frac{d^2}{dx^2}(x^3\varphi) = \frac{d}{dx}\left(3x^2\varphi + x^3\frac{d\varphi}{dx}\right) =$$

ва

$$= 6x\varphi + 6x^2\frac{d\varphi}{dx} + x^3\frac{d^2\varphi}{dx^2}.$$

Демак,

$$\hat{Л}(\hat{G}\varphi) \neq \hat{G}(\hat{Л}\varphi).$$

Қуйидаги

$$[Л, \hat{G}] = \hat{Л}\hat{G} - \hat{G}\hat{Л} \qquad (10.11)$$

операторга $\hat{Л}$ ва G операторларининг коммутатори дейилади. Агар

$$\hat{Л}\hat{G} = -\hat{G}\hat{Л} \qquad (10.12)$$

шарт бажарилса, $\hat{Л}$ ва $\hat{G}$ операторларни антикоммутациялашувчи операторлар деб номланади.

Одатда

$$[\hat{Л}, \hat{G}]_+ = \hat{Л}\hat{G} + \hat{G}\hat{Л} \qquad (10.13)$$

$\hat{Л}$ ва $\hat{G}$ операторларининг антикоммутатори дейилади.

2. Операторнинг хусусий қиймати. G оператори билан узлуксиз, чекли ва бир қийматли бўлган функциясига таъсир этганимизда яна шу функциянинг ўзи бирор доимий сонга кўпайтирилган ҳолда ҳосил бўлиши мумкин:

$$G\varphi = g\varphi. \qquad (10.14)$$

Бу ҳолда g катталикни $\hat{G}$ операторининг *хусусий қиймати*, φ функцияси эса G операторининг g хусусий қийматига мос келган *хусусий функцияси* дейилади.

Масалан, $\hat{G} = d^2/dx^2$, $\varphi = \sin 5x$ бўлсин.

У ҳолда

$$\hat{G}\varphi = \frac{d^2}{dx^2}\sin 5x = -25\sin 5x = -25\varphi.$$

Демак, $y = -25$. Одатда $\hat{G}$ операторининг хусусий қийматини ҳам оператор ($\wedge$) белгисиз ўша ҳарф билан белгилаш қабул қилинган. G операторнинг хусусий қиймати кўп бўлиши мумкин. Уларнинг барчасини $\hat{G}$ операторнинг *хусусий қийматлар спектри* дейилади. Муайян масалалар шартига боғлиқ равишда хусусий қийматлар спектри дискрет, узлуксиз ёки аралаш қийматлар тўпламидан иборат бўлади. Агар операторнинг битта хусусий қийматига бир нечта хусусий функция ($\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_\nu$) тўғри келса, у ҳолда *турланиш (айниш)* мавжуд дейилади. Турли хил хусусий функциялар сонини (ν) *турланиш даражаси* дейилади. Квант механикасида сақланувчи физик катталикнинг хусусий функциялари тўплами системанинг тўла ҳолатини ифодалайди. Шунинг учун ҳар қандай функцияни хусусий функциялар тўлиқ тўплами бўйича қаторга ёйиб ёзиш мумкин: $\Psi = \sum\limits_\nu C_\nu \Psi_\nu$. Бу ерда C_ν— доимий сон, Ψ_ν— хусусий функциялар.

Юқорида қайд этилгандек ҳар бир физик катталик ўзининг операторига эга. Заррачанинг ҳолат функцияси бу операторнинг хусусий функцияси бўлади. Заррача параметрини ўлчашда бу оператор хусусий қийматларидан бири аниқланади. Унинг эҳтимоллиги $|C_\nu|^2$ га тенгдир.

11-§. ЭРМИТ ОПЕРАТОРЛАРИ

Квант механикасида заррача характеристикаси бўладиган ҳар бир физик катталикка маълум оператор мос келади. Суперпозиция принципи бузилмаслиги учун оператор чизиқли бўлиши керак. Чизиқли оператор физик катталикнинг ҳақиқий қийматини ифодалаши учун

$$\int \Psi^* \hat{G}\varphi\, dV = \int \varphi\, \hat{G}^* \Psi^*\, dV \tag{11.1}$$

шартни қаноатлантириш керак.

Бундай операторларни *эрмит, ўз-ўзига қўшма* операторлар дейилади. Бу ерда φ ва Ψ ихтиёрий функция бўлиб, интеграл ўзгарувчиларнинг барча ўзгариши соҳаси бўйича олинади. Эрмит операторлари қуйидаги хусусиятларга эга:

а) Эрмит операторининг хусусий қиймати ҳақиқий сондир, яъни

$$G^* = G. \tag{11.2}$$

Операторнинг хусусий қиймат ва хусусий функцияси таърифига кўра эрмит операторлари учун

$$\hat{G}\Psi = G\Psi \tag{11.3}$$

ва

$$\hat{G}^*\Psi = G^*\Psi \tag{11.4}$$

ларни ёзиш мумкин. Бу ерда (11.1) шартга мувофиқ (G ва G^* хусусий қийматлар бўлганлиги учун интеграл ишораси ташқарисига чиқарилади) агар $\varphi = \Psi$ деб олсак,

$$G\int \Psi^* \Psi dV = G^* \int \Psi^* \Psi dV$$

$$G^* = G$$

келиб чиқади;

б) Эрмит операторларининг турли хусусий қийматларига мос келган турли хусусий функциялари ўзаро ортогоналдирлар. Агар иккита функция φ ва Ψ лар скаляр кўпайтмасининг барча бир-бирига боғлиқ бўлмаган ўзгарувчилар бўйича интеграли нолга тенг бўлса, улар ўзаро ортогонал бўлади.

Фараз қилайлик, G эрмит операторининг G_ν ва G_k хусусий қийматларига мос келган хусусий функциялари мос ҳолда φ_ν ва φ_k бўлсин. У ҳолда бу икки функциянинг ортогоналлик шарти қуйидагича ёзилади:

$$\int \varphi_\nu^* \varphi_k dV = 0, \ \nu \neq k. \tag{11.6}$$

Буни исботлаш учун (11.1) шартдан фойдаланамиз. ν ва k хусусий қийматлар учун уни қуйидагича ёзиш мумкин

$$\int \varphi_\nu^* G_k \varphi_k dV = \int \varphi_k G_\nu^* \varphi_\nu^* dV.$$

Бу ерда

$$(G_k - G_\nu^*)\int \varphi_\nu^* \varphi_k dV = 0$$

ёки (11.2) ни ҳисобга олсак,

$$(G_k - G_\nu) \int \varphi_\nu^* \varphi_k dV = 0. \tag{11.7}$$

Шартга кўра $G_k \neq G_\nu$ бўлганлиги сабабли (11.7) тенглик ўринли бўлиши учун қуйидаги шарт бажарилиши керак:

$$\int \varphi_\nu^* \varphi_k dV = 0. \tag{11.8}$$

Бу φ_ν ва φ_k функцияларнинг ортогоналлик шартидир. Система ҳолатини ифодаловчи φ_k функциялари нормаллашган бўлиши шартлиги бизга маълум (7- §). φ функциялар учун аниқланган бу ҳар иккала шартни умумлаштириб қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\int \varphi_\nu^* \varphi_k dV = \delta_{\nu k} = \begin{cases} 1, & \nu = k, \\ 0, & \nu \neq k. \end{cases} \tag{11.9}$$

Бу φ_ν хусусий функцияларнинг *ортонормалланганлик шарти* дейилади.

12- §. ОПЕРАТОРЛАРНИНГ ЎРТАЧА ҚИЙМАТИ

Юқорида қайд этганимиздек, квант механикасида ҳар бир физик катталик ўз операторига эга. Ўз навбатида ҳар бир оператор хусусий қийматлар спектрига эга. Ўлчаш жараёнида бу хусусий қийматларнинг у ёки бу қиймати ва ҳар ўлчашда эса турли қийматлари қайд қилинади. Шунинг учун заррача ҳолатини аниқловчи операторнинг ўртача қиймати тушунчаси киритилади. Эҳтимолликлар назариясидан маълумки, тасодифий катталикларнинг ўртача қиймати

$$\langle a \rangle = \frac{a_1 \nu_1 + a_2 \nu_2 + \ldots + a_k \nu_k}{N} \tag{12.1}$$

формула билан аниқланади. Бу ерда a_1 — a катталикнинг N марта ўлчашда ν_1 марта қайд этиладиган қиймати ва ҳоказо. Ўлчашлар сони кичик бўлганда (12.1) формула билан аниқланувчи ўртача қиймат турлича бўлиши мумкин. Агар ўлчашлар сони $N \to \infty$, у ҳолда $\langle a \rangle$ ўртача қиймат аниқ бир чегаравий қиймат a_0 га интилади, $\frac{\nu_1}{N}$, $\frac{\nu_2}{N}$, . . . лар эса мос ҳолда a_1, a_2 ва ҳоказо қийматларнинг қайд қилиниши эҳтимоллиги бўлади:

$$a_0 = \lim_{N\to\infty} \langle a \rangle = a_1 \lim_{N\to\infty} \frac{\nu_1}{N} + a_2 \lim_{N\to\infty} \frac{\nu_2}{N} + \ldots + a_n \lim_{N\to\infty} \frac{\nu_n}{N} =$$
$$= a_1 w_1 + a_2 w_2 + \ldots + a_n w_n = \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot w_i. \tag{12.2}$$

Демак, тасодифий катталикнинг ўртача қиймати тасодифий қийматлар билан уларнинг қайд қилиниш эҳтимолликлари кўпайтмасининг йиғиндисига тенг экан. Агарда тасодифий қийматлар узлуксиз ўзгарса, унинг ўртача қийматини интеграл орқали

$$<a> = \int_{-\infty}^{+\infty} af(x)\,dx \qquad (12.3)$$

ифодалаш мумкин. Бу ерда $f(x)$ тақсимот функциясидир. Бу аниқланган натижани операторлар учун умумлаштирсак, ихтиёрий G физик катталикнинг ўртача қиймати:

$$<G> = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^{x}\, G\Psi\, dV. \qquad (12.4)$$

Бу квант механикасида турли масалаларни ечишда кўп учрайдиган асосий формулалардан биридир. У Ψ функция маълум бўлса ҳар қандай физик катталик операторини ўртача қийматини аниқлашга имкон беради.

13-§. АЙРИМ ФИЗИК КАТТАЛИКЛАРНИНГ ОПЕРАТОРЛАРИ

Заррачани характерловчи барча физик катталикнинг операторлари албатта ўзига қўшма, чизиқли (эрмит) операторлари кўринишида бўлиши керак. Бундай операторларнинг айримлари билан танишайлик.

Физик (динамик) катталик операторини аниқлашнинг умумий қоидаси қуйидагича: ихтиёрий физик катталик G оператори G шундай кўринишга эга бўлиши керакки, у билан заррачанинг ҳолат функцияси Ψ га таъсир этганимизда G физик катталик G операторининг хусусий қиймати, Ψ функция эса унинг хусусий функцияси бўлсин, яъни

$$\hat{G}\Psi = G\Psi. \qquad (13.1)$$

Бу ерда Ψ функцияси сифатида заррачанинг муайян ҳолатини физик катталик билан бир қаторда аниқлайдиган ҳолат функцияси тушунилади.

1. Координаталар ва вақт операторлари. Ψ функцияси қуйидиги координаталар x, y, z, t иинг функциясидир. Бу ўзгарувчиларнинг операторлари ўзларининг сон қийматларига тенг бўладиган ҳолни кўрайлик. Шунинг учун бу операторлар билан бирор Ψ функцияга таъсир этиш, Ψ функциясини шу сон қийматига кўпайтиришга тенг кучлидир:

$$\hat{x}\Psi = x\Psi,\quad \hat{y}\Psi = y\Psi,\quad \hat{z}\Psi = z\Psi,\quad \hat{t}\Psi = t\Psi. \qquad (13.2)$$

2. Потенциал энергия оператори. Потенциал энергия U фақат координаталарнинг функцияси бўлганлиги сабабли потенциал энергия оператори ҳам унинг қийматига тенг бўлади:

$$\hat{U}\Psi = U\Psi \qquad (13.3)$$

3. Энергия оператори. Таъриф (13.3) га кўра энергия оператори

$$\hat{E}\Psi = E\Psi \qquad (13.4)$$

шартни қаноатлантириши керак. Яъни заррачанинг энергияси E энергия оператори $\hat{E}$ нинг хусусий функцияси бўлиши керак. Бу операторнинг кўринишини аниқлаш учун Ψ функцияси сифатида де Бройль тўлқин функциясини

$$\Psi(t) = \Psi^0 e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad (13.5)$$

оламиз. Бу ерда $\Psi^0 = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}P_x x}$ тўлқин функциянинг вақтга боғлиқ бўлмаган қисми. (13.4) ва (13.5) ларни солиштиришдан кўринадики,

$$\hat{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \qquad (13.6)$$

Демак, энергия оператори вақт бўйича биринчи тартибли ҳосила олиш операциясини билдиради.

4. Импульс оператори. Маълумки, заррача импульси операторини ташкил этувчилари орқали қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\hat{\vec{P}} = \vec{a}_1\hat{P}_x + \vec{a}_2\hat{P}_y + \vec{a}_3\hat{P}_z. \qquad (13.7)$$

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ — Декарт координаталар системасининг бирлик векторлари. $\hat{P}_x$ кўринишини аниқлайлик. Бунинг учун де Бройль тўлқини (4.4)

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - P_x x)} = \Psi_0^{*} e^{\frac{i}{\hbar}P_x x} \qquad (13.8)$$

дан фойдаланамиз. Бу ерда $\Psi_0^{*} = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ координатага боғлиқ бўлмаган катталик. (13.1) шартга кўра

$$\hat{P}_x\Psi = P_x\Psi \qquad (13.9)$$

бўлиши керак. (13.8) ва (13.9) ни солиштиришдан кўринадики, (13.9) шарт бажарилиши учун P_x операторининг кўриниши

$$\hat{P}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad (13.10)$$

бўлиши керак. Худди шу йўл билан импульс операторининг қолган ташкил этувчиларини ҳам аниқлаш мумкин:

$$\hat{P}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y},\quad \hat{P}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \qquad (13.11)$$

Буларни (13.7) га қўйсак,

$$\hat{\vec{P}} = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{a}_1\frac{\partial}{\partial x} + \vec{a}_2\frac{\partial}{\partial y} + \vec{a}_3\frac{\partial}{\partial z}\right) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \qquad (13.12)$$

келиб чиқади. Бу ерда

$$\vec{\nabla} = \vec{a}_1\frac{\partial}{\partial x} + \vec{a}_2\frac{\partial}{\partial y} + \vec{a}_3\frac{\partial}{\partial z} \qquad (13.13)$$

— градиент (набла) оператори.

Айрим функцияларнинг операторлари (кинетик энергия, гамильтон функцияси, импульс моменти ва ҳ. к.) уни ташкил этган катталиклар операторлари орқали ифодаланиши мумкин. Бунда натижавий оператор албатта эрмит оператори бўлишини талаб қилиш керак.

5. Кинетик энергия оператори. Заррачанинг кинетик энергияси T ни унинг импульси орқали ифодалаш мумкин:

$$T = \frac{\vec{P}^2}{2m_0}. \qquad (13.14)$$

Бу ерга (13.12) ни қўйсак, кинетик энергия оператори

$$\hat{T} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^2 \qquad (13.15)$$

кўринишда ёзилади. Демак, кинетик энергия оператори Лаплас оператори $(\vec{\nabla}^2 = \Delta)$ орқали ифодаланар экан.

6. Гамильтон оператори. Маълумки, стационар ҳолатлар учун Гамильтон функцияси кинетик T ва потенциал U энергиялар йиғиндисидан иборат.

$$\hat{\mathscr{H}} = \hat{T} + \hat{U}.$$

Бу ерга кинетик ва потенциал энергия операторларини қуйсак, Гамильтон оператори қуйидагича ифодаланади:

$$\hat{\mathscr{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^2 + U(x, y, z). \tag{13.16}$$

7. Импульс моменти оператори. Микрообъект кўп ҳолларда (масалан, атом молекулада) потенциал майдонни ҳосил қилувчи бирор маркгз атрофида ҳаракат қилади. Бундай ҳаракатни характерлаш учун қўшимча равишда импульс моменти катталиги киритилади. У ҳаракат интеграли бўлиши мумкин. Классик физикада импульс моменти $\vec{M}$ заррача импульси $\vec{p}$ билан радиус вектор $\vec{r}$ нинг векториал кўпайтмасидан иборат:

$$\vec{M} = [\vec{r} \times \vec{p}] \tag{13.17}$$

Унинг ташкил этувчилари

$$\begin{aligned} M_x &= yp_z - zp_y, \\ M_y &= zp_x - xp_z, \\ M_z &= xp_y - yp_x. \end{aligned} \tag{13.18}$$

Бу ифодани оператор кўринишида ёзсак:

$$\hat{\vec{M}} = [\vec{r} \times \hat{\vec{p}}] \tag{13.19}$$

бўлади. Бу ерда $\vec{r}$ радиус вектор (саноқ бошидан заррачагача бўлган масофа) оператори ўзига тенглигини ҳисобга олдик. Импульс моменти операторининг координата ўқларига проекцияси (13.19) дан (13.18) га ўхшаш қуйидагича бўлади:

$$\left.\begin{aligned} \hat{M}_x &= \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ \hat{M}_y &= \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ \hat{M}_z &= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \end{aligned}\right\} \tag{13.20}$$

Амалий масалаларни ҳал қилишда (M^2) импульс моменти квадратининг оператори ҳам кўп қўлланилади. Уни аниқлайлик. Классик физикадан маълумки,

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2. \qquad (13.21)$$

Бу ерга (13.20) ни қўйсак,

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \left\{ \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \right.$$
$$\left. + \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \right\} \qquad (13.22)$$

келиб чиқади. Юқоридагилардан фойдаланиб исботлаш мумкинки,

$$\left.\begin{aligned} \hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x &= i\hbar \hat{M}_z \\ \hat{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y &= i\hbar \hat{M}_x \\ \hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z &= i\hbar \hat{M}_y \end{aligned}\right| \qquad (13.23)$$

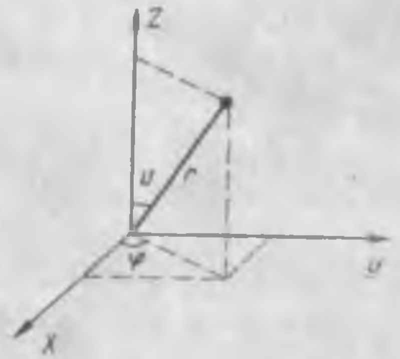
Гамильтон операторини (13.16) кўринишда ифодалаш заррачага таъсир этаётган куч вақт ўтиши билан ўзгармаганда тўғридир. Бундай ҳолда $U(x, y, z)$ заррачанинг потенциал энергияси бўлиб, гамильтониан заррачанинг тўла энергиясига тенг бўлади. Агарда заррача ҳаракатланаётган соҳада потенциал майдондан ташқари электромагнит майдон ҳам бўлса, унга таъсир этаётган куч координата ва вақтга боғлиқ бўлади. Бундай ҳолда U функция x, y, z ва t га боғлиқ бўлиб, $U(x, y, z, t)$ заррачанинг потенциал энергияси бўла олмайди. $U(x, y, z, t)$ ни бу ҳолда куч майдони дейилади. Шунинг учун бу ҳолда гамильтон оператори

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + U(x, y, z, t)$$

заррачанинг тўла энергиясига тенг бўлмайди. Юқоридаги мураккаб майдон учун гамильтон операторини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m_0}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}}\right) + e\Phi + U. \qquad (13.24)$$

Бу ерда $\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$, Φ — электромагнит майдоннинг скаляр потенциали, $\vec{A}$ — майдоннинг вектор потенциали, U — куч



13.1 - расм. Декарт ва сферик координаталар системаси.

майдон функцияси. Φ ва $\vec{A}$ катталиклар электромагнит майдон кучланганликлари билан қуйидагига боғлиқ:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t},$$

$$B = \operatorname{rot}\vec{A}$$

Бу ерда $\vec{\mathcal{E}}$ —электр майдон, $\vec{B}$— магнит майдон кучланганлик векторлари.

8. Сферик координат системасида импульс моменти оператори. Заррачанинг марказий симметрик потенциал майдондаги ҳаракати (42- §) одатда сферик координаталар системасида ечилади. Шунинг учун $\hat{M}$ операторини сферик координат системасида ифодалайлик. Бунинг учун декарт ва сферик координаталар системалари ўзгарувчилари ўртасидаги қуйидаги муносабатлардан фойдаланамиз (13.1- расм):

$$x = r\sin\theta\cos\varphi,\ \ y = r\sin\theta\sin\varphi,$$
$$z = r\cos\theta,\ \ r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \qquad (13.25)$$

Буларни (10.20) ва (10.22) ларга қўйсак, қуйидаги натижа келиб чиқади:

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

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

$$\hat{M}_z = -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}, \qquad (13.26)$$

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 = -\hbar^2\nabla^2_{\theta,\varphi}$$

Бу ерда

$$\nabla^2_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\upsilon\,\frac{\partial}{\partial\upsilon}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad (13.27)$$

сфера учун Лаплас операторидир

14-§. НОАНИҚЛИКЛАР МУНОСАБАТИ

Микрооламнинг обьектив хусусиятларидан бири уни характерловчи ўзаро коммутацияланмайдиган операторлар учун ноаниқлик муносабатларининг мавжудлигидир. Уни биринчи марта квант механикасининг асосчиларидан бири Гейзенберг аниқлаган (1927 й). Ҳозирги кунда бу муносабатлар микроолам хусусиятларини ўрганишда квант механикаси учун асосий қурол бўлиб хизмат қилади.

1. Гейзенберг тенгсизликлари. Ноаниқлик муносабатларини заррача координатаси ва импульсини аниқлаш мисолида келтириб чиқарайлик. Маълумки, заррача ҳолати физик катталиклар операторларининг ўртача қийматлари билан характерлангди. Операторларнинг ўртача қийматини аниқлаш формуласи (12.4) га биноан стационар ҳолатдаги заррачанинг x ўқи бўйича координата ва импульс операторларини ўрталаштирайлик:

$$<x> = \int \psi^* x \Psi \, dx, \qquad (14.1)$$

$$<p_x> = \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx. \qquad (14.2)$$

Ўлчашлар жараёнида координата учун x ва импульс учун p_x қийматлар топилган бўлсин. Бу ҳолда хатолик

$$\Delta x = x - <x> \text{ ва } \Delta p_x = p_x - <p_x>$$

бўлиб, уларнинг ўртача қиймати (14.1) ва (14.2) формулага биноан

$$<\Delta x> = \int \psi^* (x - <x>) \psi \, dx = \int \psi^* x \psi \, dx - <x> =$$

$$= <x> - <x> = 0$$

ва

$$<p_x> = \int \psi^* (p_x - <p_x>) \psi \, dx =$$

$$= \int \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} - <p_x> = <p_x> - <p_x> = 0$$

бўлади. Аммо бу натижалар система координатаси ва импульсини ўлчашда хатолик йўқлигини билдирмайди. Ҳар иккала катталик қийматини ўлчашда ҳам уларнинг ҳақиқий қийматидан ($<x>$, $<p_x>$) ортиқ ва кам томонга фарқ қилувчи натижалар олинади. Бундаги хатоликлар бир-бири билан ейишиб ўртача хатолик нолга тенг бўлади. Шунинг учун ўртача квадратик оғишни излаймиз. Координата ва импульс учун ўртача квадратик оғиш мос ҳолда қуйидагига тенг бўлади:

$$<(\Delta x)^2> = \int \psi^* (x - <x>)^2 \psi\, dx = <x^2> - <x>^2, \quad (14.3)$$

$$<(\Delta p_x)^2> = \int \psi^* (p_x - <p_x>)^2 \psi\, dx = <p_x^2> - <p_x>^2. \quad (14.4)$$

Ҳисоблашни осонлаштириш мақсадида координата бошини заррача марказига жойлаштирамиз. У ҳолда $<x>^2 = 0$, $<p_x>^2 = 0$ бўлиб, (14.3) ва (14.4) ни (14.1) ва (14.2) ни ҳисобга олиб тубандагича ёзамиз:

$$<(\Delta x)^2> = <x^2> = \int \psi^* x^2 \psi\, dx, \quad (14.5)$$

$$<(\Delta p_x)^2 = <p_x^2> = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi\, dx. \quad (14.6)$$

$<(\Delta x)^2>$ ва $<(\Delta px)^2>$ ўртасидаги боғланишни топиш мақсадида қуйидаги ёрдамчи интегрални кўрайлик:

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\alpha x \psi^* + \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)\left(\alpha x \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) dx. \quad (14.7)$$

Уни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$I(\alpha) = a\alpha^2 - b\alpha + c. \quad (14.8)$$

Бу ерда α — x га боғлиқ бўлмаган ихтиёрий ҳақиқий катталик.

$$a = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x^2 \psi dx,$$

$$b = -\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x\psi + x\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}\right) dx,$$

$$c = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\frac{\partial \psi}{\partial x} dx.$$

Интегралларни бўлаклаб ҳисобласак ва (14.5), (14.6) ни эътиборга олсак,

$$a = <x^2> > 0,\ b = 1,\ c = \frac{<p_x^2>}{\hbar^2} > 0 \quad (14.9)$$

келиб чиқади. a, b ва c коэффициентлар мусбат бўлганлиги туфайли $I(\alpha)$ нинг энг кичик қиймати α га боғлиқ ҳолда нолдан катта бўлса, I ҳамма вақт мусбат бўлади. Шунинг учун $I_{min}(\alpha)$ ни аниқлаймиз. Бунинг учун (14.8) ни α бўйича дифференциаллаб ва натижани нолга тенглаштириб

$$\alpha_{min} = \frac{b}{2a}$$

ни аниқлаймиз. Буни (14.8) га қўйиб, шартга кўра $I_{min} \geqslant 0$ бўлиши учун

$$4ac \geqslant b^2 \qquad (14.10)$$

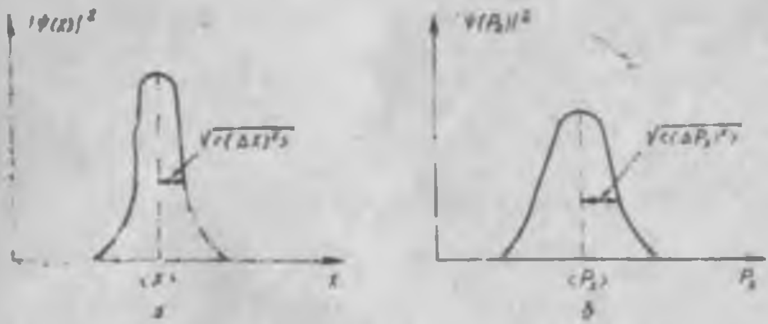
бўлиши кераклигини топамиз. Бу ерга a, b ва c ларнинг қийматларини қўйсак,

$$<(\Delta \hat{x})^2 > < (\Delta \hat{p}_x)^2 < > \frac{\hbar^2}{4} \qquad (14.11)$$

келиб чиқади. Демак, x ва p_x ларни ўлчашдаги ўртача квадратик оғишларининг кўпайтмаси доимий $\frac{\hbar^2}{4}$ дан кичик бўла олмайди. (14.11) га ўхшаш тенгсизликларни y ва z ўқлари бўйича ҳам аниқлаш мумкин:

$$\begin{gathered} (\Delta \hat{y})^2 > < (\Delta \hat{p}_y)^2 > \geqslant \frac{\hbar^2}{4}, \\ (\Delta \hat{z})^2 > < (\Delta \hat{p}_z) > \geqslant \frac{\hbar^2}{4}. \end{gathered} \qquad (14.12)$$

(14.11), (14.12) тенгсизликларга *Гейзенбергнинг ноаниқликлар муносабатлари* дейилади. 14.1-расмда координата (a) ва импульс фазосида эҳтимоллик зичлигининг графиги келтирилган. У ердан кўринадики, p_x ни ўлчашдаги хатоликни қанча кичрайтирмоқчи бўлсак, координатни ўлчашдаги хатолик шунча ортиқ бўлади ва аксинча.



14.1-расм. Заррачанинг координаталар (a) ва импульслар ($б$) фазасида топилиш эҳтимолликлари зичлигининг тақсимоти.

2. Умумий ноаниқлик принципи. $\hat{x}$ ва $\hat{p}_x$ операторларининг коммутаторини аниқлайлик. Бунинг учун дастлаб $\hat{x}\hat{p}_x = \hat{x}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ кўпайтма оператор билан ψ функцияга таъсир этамиз:

$$\hat{x}\,\hat{p}_x\,\psi = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}, \tag{14.13}$$

сўнгра уларнинг ўрнини алмаштириб ψ функцияга таъсир этамиз

$$\hat{p}_x\,\hat{x}\,\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \frac{\hbar}{i}\psi + \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\psi}{\partial x}. \tag{14.14}$$

(14.13) ва (14.14) ларнинг фарқини олсак, x, $\hat{p}_x$ операторларнинг коммутатори

$$\hat{x}\,\hat{p}_x - \hat{p}_x\,\hat{x} = i\hbar \tag{14.15}$$

келиб чиқади. Демак $\hat{x}$ ва $\hat{p}_x$ операторлари ўзаро коммутацияланмас экан. Буни эътиборга олиб (14.1) тенгсизликни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$<(\Delta\hat{x})^2><(\Delta\hat{p}_x)^2> \geqslant \frac{1}{4}<|\hat{x}\,\hat{p}_x - \hat{p}_x\,\hat{x}|^2> \tag{14.16}$$

Демак, координата ва импульсни ўлчашдаги хатоликлар учун аниқланган Гейзенберг тенгсизлиги шу операторлар коммутаторининг нолга тенг бўлмаслиги, яъни бу динамик катталиклар операторларининг ўзаро коммутацияланмаганлиги туфайлидир. Бу хулосани (14.16) га асосан ихтиёрий ўзаро коммутацияланмайдиган операторлар учун умумлаштирсак, Гейзенберг тенгсизлиги қуйидагича ёзилади:

$$<(\Delta\hat{Q})^2><(\Delta\hat{\sigma})^2> \geqslant \frac{2}{4}<|\hat{Q}\hat{\sigma} - \hat{\sigma}\hat{Q}|^2>. \tag{14.17}$$

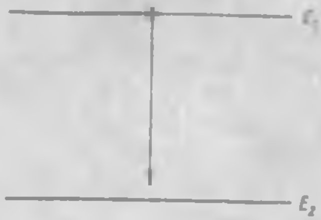
13-§ да келтирилган айрим физик катталикларнинг операторлари коммутаторларини аниқласак энергия $\hat{E}$ ва вақт $\hat{t}$ операторлари $\hat{M}_x$, $\hat{M}_y$, $\hat{M}_z$ ҳамда импульс моментининг z ўқига проекцияси $\hat{M}_z$ билан бурчакли координата φ операторлари ўзаро коммутацияланмайди. Шу сабабли бу операторлар учун Гейзенберг тенгсизликлари мавжуддир. Энергия ва вақт операторининг коммутатори

$$[\widehat{E}, \widehat{t}] = i\hbar. \qquad (14.18)$$

Бу операторлар учун ноаниқлик принципи

$$< \Delta E >< \Delta t > \geqslant \hbar/2 \qquad (14.19)$$

бўлади. Бу тенгсизликнинг маъноси қуйидагича. Вақт узлуксиз ўтиб тургани сабабли $\Delta t = 0$ бўла олмайди. Шунинг учун Δt вақт оралиғида энергияни ўлчаш албатта ΔE фарққа олиб келади. Агар Δt жуда катта бўлса $\Delta E = 0$ бўлиб, стационар ҳолатга мос келади. Яъни узоқ вақт давомида энергияни аниқ ўлчаш мумкин. (14.19) тенгсизликни атомда электроннинг E_1 ва E_2 энергияли ҳолатлари билан боғлаш мумкин (14.2-расм)



14.2-расм. Атом энергияси ва яшаш вақти ўртасидаги ноаниқлик муносабати (14.20) га доир.

$$\Delta (E_1 - E_2) \Delta t > \hbar \qquad (14.20)$$

(Энергиянинг фарқи E_1 ва E_2 лар учун ҳам бўлиши мумкин бўлганлиги сабабли (14.19) нинг ҳар икки томонини 2 га кўпайтирдик). У ҳолда (14.20) тенгсизликдаги Δt электроннинг E_1 энергияли ҳолатдан E_2 энергияли ҳолатга ўтиш ҳодисаси юз бериши учун кетган вақт оралиғини ифодалайди. $\Delta E = \Delta (E_1 - E_2)$ энергия эса электроннинг бундай ўтиши туфайли атом томонидан нурлатилган ёруғлик кванти энергиясидаги сочилиш. Бу фарқ атом нурланиш чизиғининг табиий кенглигидир.

$\widehat{M}_z$ ва φ операторнинг коммутатори

$$[\widehat{M}_z, \varphi] = \frac{\hbar}{i} \qquad (14.21)$$

бўлиб, булар учун ноаниқлик принципи

$$< \Delta\widehat{M}_z >< \Delta\varphi > \geqslant \frac{\hbar}{2} \qquad (14.22)$$

кўринишда ёзилади. Бу тенгсизликдан кўринадики, цилиндрик координаталар системасида заррачанинг азимутал бурчаги φ қанча аниқ бўлса, унинг импульс моментининг z ўқига проекцияси шунча ноаниқ бўлади ва аксинча.

3. Ноаниқлик муносабатларининг маъноси. Шундай қилиб, система ҳолатини аниқлайдиган физик катталиклар операторларининг айрим группаси биргаликда аниқ қийматга эга бўлса, бошқа бир группаси биргаликда аниқ қийматга эга бўлмайди. Назарий текширишларга қараганда импульс ва координата, энергия ва вақт, импульс моментининг проекцияси ва азимутал бурчак биргаликда аниқ ўлчанмайди. Улар ўлчаниши мумкин, аммо бундай жуфтларни ўлчашдаги ўртача хатоликлар кўпайтмасини $\frac{\hbar}{2}$ дан камайтириб бўлмайди. Бу ноаниқликлар субъектив сабабларга кўра пайдо бўлгани йўқ, яъни ноаниқликлар ўлчов асбобининг камчилиги ёки текширувчининг малакасизлигидан келиб чиқмайди. Бу ноаниқликлар микрооламнинг объектив хусусиятидир. Ҳақиқатан ҳам заррача импульсини, унинг тезлиги ва массаси орқали ифодалаб (14.11) га қўйсак, тенгсизлик қуйидагича бўлади: $<(\Delta x)>\geqslant\frac{\hbar}{2mv}$. Демак, заррачанинг массаси қанча катта бўлса, унинг координатини ўлчашда хатолик шунча оз бўлади. Заррача фазода локал бўла олади. Юқоридаги натижалардан кўринадики, ўзаро коммутацияланувчи операторларнинг хусусий қийматлари биргаликда аниқ қийматга эга бўлади. Ўзаро коммутацияланмайдиган операторларнинг хусусий қийматларини биргаликда аниқ ўлчаб бўлмайди.

Айрим физик катталиклар учун ноаниқликнинг мавжудлигидан микроолам хусусиятларини мукаммал ўрганиб бўлмас экан ёки уларни билиш чекланган деган хулоса чиқариш мутлақо нотўғридир. Аксинча, ноаниқликларни ҳисобга олиш микрооламдаги жараёнларни тўғри тушунишга, уни ташкил этган заррачалар хусусиятини ҳар томонлама тўла ўрганишга имкон беради.

Заррача импульси ва координатасини биргаликда аниқ ўлчаб бўлмаслиги унинг бир вақтда аниқ бу параметрларга эга бўлмаслигидандир. Бошқача айтганда микрооламда ҳеч бир заррача локал бўла олмайди, балки у динамик ҳолатда бўлади.

Иккинчи томондан ноаниқлик принципларининг пайдо бўлиши микроолам хусусиятини ўрганишга макроолам тушунчалари, физик терминлари кириб борганлигидандир. Бу ҳолда ноаниқлик принципи асосчиси Гейзенберг шундай деган эди: «Биз атом масштабидаги жараёнларни катта масштабдаги каби талқин қила олмаймиз. Агарда биз ўрганиб қолган тушунчалардан фойдаланмоқчи бўлсак, у ҳолда уларнинг қўлланилиши ноаниқлик принциплари муносабатлари билан чекланган бўлади». Ҳақиқатан ҳам, тарихан инсонияг уни ўраб олган макроолам хусусиятини ўрганган ва унга хос атамалар, қонуниятлар ўйлаб топган. Ана шу «бисот» билан микрооламни ҳам ўрганишга киришди. Табиийки, бу тушунчалар микрооламдаги ҳодисаларни тўғри акс эттира олмайди. Тушунча ва атамларни ўзгартириш учун эса микрооламни макрооламга боғланган ҳолда ўрганиш лозим эди ёки бўлмаса ўрганишни микрооламдан бошлаши лозим эди. Бу эса оламни билиш кетма-кетлигига зиддир. Шундай экан микрооламни макрооламга хос атама ва тушунчалар билан унинг ўзига хос хусусиятлари: дискретлиги, физик катталикларнинг квантланиши, тўлқин — корпускуляр дуализм ва ноаниқлик принципларини эътиборга олган ҳолда ўрганиш лозим.

Бошқача сўз билан айтганда, ноаниқлик муносабатлари заррачанинг тўлқин ва корпускуляр хусусиятга эга бўлишларининг математик ифодасидир. Демак, улар микроолам объектив хусусиятини ифодаловчи муносабатлардир. Бунга яна бир мисол келтирайлик. Маълумки, водород атоми назарияси дастлаб (умумий физика курсида) Бор постулатлари ва классик физика қонуниятлари ёрдамида ўрганилади. Шунинг учун ҳам атомда электроннинг энергияси квантлашувчи бўлиб чиққани билан, унинг ядро атрофидаги ҳаракати стационар орбиталар бўйлаб бўлади. Демак, классик физикадаги корпускулага ўхшаш электрон траекторияга эга.

Водород атоми назарияси (47-§) квант механикаси нуқтаи назаридан ечилганда ҳам электрон энергияси Бор назариясига биноан топилган натижа билан бир хил бўлади. Аммо бу ҳолда электроннинг аниқ траекторияси эмас, балки унинг ядро атрофида топилиш эҳтимоллигининг зичлигига эга бўламиз. Бу зичлик ядро яқинида ҳам, ундан узоқда ҳам нулдан фарқ қилади ва фазонинг эҳтимоллик зичлигининг энг катта қийматли нуқталарини бирлаштирсак, Бор назариясида аниқланган орбиталар келиб чиқади. Ядро атрофида электроннинг топилиш эҳтимолликларини бундай фазовий тақсимоти тажрибада ҳам аниқланган. Демак, ҳақиқат мезони бўлган тажриба атомдаги электрон учун квант механикасининг назариясини тўла тасдиқлайди. Шу билан бирга ядро атрофида ҳаракатланаётган электрон импульсини аниқ (энг катта қийматга тенг деб олсак, координати ҳақидаги ноаниқлик ёки хатолик) ўлчами атом ўлчами тартибида бўлади. Шундай қилиб, микроооламда траектория тушунчаси ўринсиздир. Лекин элементар заррачаларни қайд қилувчи айрим ўлчов асбобларида (масалан, Вильсон камерасида) улар из қолдиради. Аммо бу из заррачанинг траекторияси эмас. Бу заррача билан муҳит ўртасидаги ўзаро таъсир соҳаси бўлиб заррача шу соҳадан ноаниқлик принципига мос келувчи координат ва импульс интервалига эга бўлиб ҳаракатланади. Шундай қилиб, микрооламда операторлари ўзаро коммутацияланувчи динамик катталикларни биргаликда кузатиш мумкин холос.

15-§. БИРГАЛИКДА ЎЛЧАНУВЧИ КАТТАЛИКЛАР

Юқоридаги 10—11-§ лардан кўринадики, система ҳолатини ифодаловчи динамик катталиклар (X, E, U, $\vec{P}$) ўзларининг операторларига эга. Система ҳолатини аниқлаш ана шу динамик катталикларнинг хусусий қийматларини ўлчаш демакдир, аммо барча динамик катталикларнинг хусусий қийматларини бир вақтда ўлчаб бўлмайди. Система ҳолатини ифодаловчи Ψ функция бир вақтнинг ўзида қайси динамик катталиклар операторларининг хусусий функцияси бўла олса, ўша операторларнинг хусусий қийматларини бир вақтда ўлчаш мумкин. Равшанки, Ψ функцияси бир вақтнинг ўзида барча операторларнинг хусусий функцияси бўла олмайди. Бу система ҳолатини аниқловчи операторларнинг ўзаро коммутацияланиш ёки коммутацияланмаслигига боғлиқ (11-§). Фараз қилайлик $\hat{G}$ ва $\hat{Q}$ операторлари берилган бўлсин. Ψ функцияси бу операторларнинг хусусий функцияси бўлсин:

$$\hat{G}\Psi = g\Psi \quad \hat{Q}\Psi = q\Psi. \tag{15.1}$$

$\hat{G}$ ва $\hat{Q}$ операторларининг коммутаторини аниқлайлик. (12.1) га асосан $\hat{G}\hat{Q}\psi = \hat{G}q\psi = q\hat{G}\psi = qg\psi$ ва

$$\hat{Q}\hat{G}\psi = \hat{Q}g\psi = g\hat{Q}\psi = gq\psi, \tag{15.2}$$

у ҳолда

$$[\hat{G}\hat{Q}]\psi = \hat{G}\hat{Q}\psi - \hat{Q}\hat{G}\psi = (gq - qg)\psi \tag{15.3}$$

келиб чиқади. g ва q лар сон қийматлар, уларни кўпайтиришлар ўрни алмашгани билан қиймати ўзгармайди:

$$qg = gq. \tag{15.4}$$

Демак,

$$[\widehat{G}\,\widehat{Q}] = 0,$$

яъни $\widehat{G}$, $\widehat{Q}$ операторлари ўзаро коммутацияланади. Ёки аксинча $\widehat{G}$ ва $\widehat{Q}$ ўзаро коммутацияланувчи операторлар бўлсин. У ҳолда уларнинг хусусий функциялари бир хил бўладими ёки йўқми? Ўзаро коммутацияланиш шартига кўра

$$\widehat{G}\widehat{Q} = \widehat{Q}\widehat{G}. \tag{15.5}$$

$\widehat{G}$ операторининг хусусий функцияси ψ бўлсин:

$$\widehat{G}\psi = g\psi. \tag{15.6}$$

Бу функция $\widehat{Q}$ операторининг ҳам хусусий функцияси бўла олишини исботлайлик. (12.5) ва (12.6) га кўра

$$\widehat{Q}\widehat{G}\psi = \widehat{Q}g\psi = g\widehat{Q}\psi. \tag{15.7}$$

(15.6) ва (15.7) ни солиштиришдан кўринадики, $\widehat{Q}\psi$ ва ψ лар $\widehat{G}$ операторининг хусусий функциялари. Бирор доимий сонга фарқ қилувчи иккита бир хил функция битта ҳолатни ифодалайди. Шунинг учун $\widehat{Q}\psi$ ва ψ лар бирор доимий сон q аниқлигида бир хилдир. Шунинг учун

$$\widehat{Q}\psi = q\psi \tag{15.8}$$

деб ёза оламиз. Демак, ўзаро коммутацияланувчи $\widehat{G}$ ва $\widehat{Q}$ операторларининг бирортаси учун хусусий функция бўлган ψ иккинчиси учун ҳам хусусий функция бўла олади. Бундай операторларнинг хусусий қийматларини бир вақтда аниқ ўлчаш мумкин.

Классик физикада эса система ҳолатини аниқловчи барча физик катталикларни бир вақтда ўлчаш мумкин. Демак, микрооламда система ҳолатини аниқловчи параметрлар сони классик системани аниқловчи параметрларга қараганда камроқ бўлади. 11-§ да келтирилган динамик катталиклар ичида $\widehat{p}_x$ ва $\widehat{x}$, $\widehat{E}$ ва t операторлари ўзаро коммутацияланмайди. (Охиргини текшириб кўришни укувчининг ўзига топширамиз.) Демак, уларнинг хусусий қийматларини ўлчов асбоби бир вақтда аниқлай олмайди. Демак, микрооламда система ҳолатини импульс ва энергия (улар ўзаро коммутацияланади) ёки координата ва вақт (улар хам коммутацияланади) фазосида ифодалаш мумкин. Аммо бундан микроолам хусусиятларини ўрганишда ўлчов асбоблари турлича бўлиши керак, деган хулоса келиб чиқмайди. Микрооламда система ҳолатини турли ўлчов нуқтаи назаридан ўрганиш бир-бирини инкор этмайди, балки тўлдиради. Шунинг учун квант механикасида буни тўлдириш принципи деб юритилади. Айрим физик катталикларни бир вақтда аниқ ўлчана олмаслиги микрооламнинг ички хусусияти бўлиб «ноаниқлик принципида» ўз ифодасини топган.

II бобга доир масалалар

1. $\frac{d}{dx}+\frac{1}{x}$ операторнинг кубини топинг.

Жавоби: $\frac{d^3}{dx^3}+\frac{3}{x}\frac{d^2}{dx^2}$.

2. $\frac{d}{dx}$ ва x операторларининг коммутаторини топинг.

Жавоби: $\frac{d}{dx}x-x\frac{d}{dx}=1$

3. $\psi(\vec{r})$ функцияни $\psi(\vec{r}+\vec{a})$ га ўтказувчи операторини топинг.

Жавоби: $\hat{T}_{\vec{a}}=e^{\vec{a}\cdot\vec{\nabla}}$.

4. $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$ операторга эрмит—қўшма бўлган операторни топинг.

Жавоби: $\left(\frac{\partial^n}{\partial x^n}\right)^+=(-1)^n\frac{\partial^n}{\partial x^n}$.

5. $\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — Лаплас операторининг эрмит (ўз-ўзига қўшма) операторлигини исботланг.

6. $\vec{\hat{M}}=\vec{r}\times\vec{\hat{p}}$ импульс моменти операторининг эрмит операторлигини кўрсатинг.

7. $i\frac{\partial}{\partial x}$ операторнинг хусусий функцияларини ва хусусий қийматларини аниқланг.

Жавоби: $\Psi_\lambda(x)=Ce^{-i\lambda x}$, λ ихтиёрий ҳақиқий сон.

8. $x+\frac{d}{dx}$ операторнинг хусусий функцияларини ва хусусий қийматларини аниқланг.

$$Жавоби:\ \Psi_\lambda(x) = Ce^{\lambda x - \frac{x^2}{2}},\ \lambda \text{ ихтиёрий сон.}$$

9. Заррача ҳолати

$$\Psi(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{(x-x_0)^2}{2a}}$$

тўлқин функция билан ифодаланади. Агар a, p_0, x_0—ҳақиқий катталиклар бўлса, заррача координатаси бўйича тақсимот функциясини, координата x ва импульс p_x ларнинг ўртача қийматлари топилсин.

$$Жавоби:\ f(x) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}},\ <x> = x_0,\ <p_x> = p_0.$$

10. Эрмит операторнинг ўртача қиймати ҳақиқий, квадратининг ўртача қиймати эса мусбат катталик бўлишини кўрсатинг.

11. Тебраниш частотаси ω бўлган чизиқли гармоник осциллаторнинг $\Psi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{x^2}{2 \cdot x_0^2}\right)$ асосий ҳолатда кинетик ва потенциал энергияларининг ўртача қийматини ҳисобланг ($x_0 = \frac{\hbar}{m_0\omega}$, m_0 — заррача массаси).

$$Жавоби:\ <T> = <U> = \frac{1}{4}\hbar\omega.$$

12. $\Psi(\varphi) = A \sin\varphi$ ҳолатдаги система учун $<(\Delta\varphi)^2>$ ва $<(\Delta \widehat{L}_z)^2>$ ўртача қийматларни ҳисобланг.

$$Жавоби:\ <(\Delta\varphi)^2> = \frac{\pi^2}{3} - \frac{1}{2},\ <(\Delta \widehat{L}_z)^2> = \hbar^2.$$

13. Импульс моменти квадратининг операторини $Y(\upsilon, \varphi) = A \sin\upsilon \cos\varphi$ тўлқин функцияси ҳолатдаги ўртача қийматини аниқланг.

$$Жавоби:\ <\widehat{\vec{M}^2}> = 2\hbar^2.$$

14. Жуфт ёки тоқ тўлқин функцияли ҳолатдаги зарядли заррачалар системасининг ўртача диполь моменти нолга тенглигини исботланг.

15. Ҳолати

$$\Psi(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} \cdot \varphi(x)$$

тўлқин функция билан ифодаланадиган заррача импульсининг ўртача қиймати p_0 га тенг бўлишини кўрсатинг ($\varphi(x)$ ҳақиқий функция).

16. Орбитал импульс моментининг квантлашган қийматлари $M_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, унинг M_z проекциясининг максимал қиймати $l\hbar$ га тенг эканлигини билган ҳолда M_x ва L_y проекциялар ноаниқликларининг ўртача қийматини топинг.

$$Жавоби:\ <(\Delta M_x)^2> = <(\Delta M_y)^2> = \frac{l}{2}\hbar^2.$$

III БОБ
ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАЛАРИ

Бир вақтнинг ўзида тўлқин ва корпускуляр хусусиятга эга бўлган заррачаларнинг (объектларнинг) ҳаракатини ифодаловчи тенгламалар, уларнинг ечимлари ва хусусиятлари билан танишайлик.

Квант механикасининг асосий тенгламалари В. Гейзенбергнинг (1925) матрица механикасида, Э. Шредингернинг (1926) тўлқин механикасида, П. Диракнинг (1927) ҳолатлар «вектор»и алгебрасида ва ниҳоят, Р. Фейнманнинг (1965) «траекториялар бўйича интеграллар» ҳисобида турли тасаввурларда баён қилинган. Э. Шредингер тўлқин ва матрица механикаларининг эквивалентлигини исботлади ва улар квант механикаси деган умумий номга бирлашди. Квант механикасининг юқоридаги формалари ўзига хос методларда баён қилинган ва математик аппаратлари турлича бўлса-да, аммо битта микрообъектни ўрганишга қаратилган, якуний натижалари бир хил ва бирндан иккинчига ўтиши мумкин. Математик аппарати нуқтаи назаридан тўлқин механикаси соддароқ ва яққолроқ бўлганлиги сабабли квант механикасининг асосий тушунчалари ва қонунларини Шредингер тенгламалари асосида баён қиламиз.

16-§. ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАЛАРИ

Шредингер тенгламалари тўлқин ва корпускуляр хусусиятга эга бўлган заррача (ёки заррачалар) ҳаракатини турли потенциал майдонларда ифодалаш учун тажриба натижалари асосида кашф қилинган. Шунинг учун уларни квант механикасигача ҳукм сурган классик физика қонунларидан фойдаланиб келтириб чиқариш мумкин эмас. Аммо уларнинг бошқа тенгламалар билан боғлиқлигини кўрсатиш мумкин. Маълумки, заррачанинг тўла энергияси (E) унинг импульси ($\vec{P}$) ва потенциал энергияси (U) орқали қуйидагича ифодаланади:

$$E = \frac{\vec{P}^2}{2m_0} + U. \tag{16.1}$$

Бундай заррачанинг ҳаракатини де Бройль ясси тўлқин

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{P}\vec{r})} \tag{16.2}$$

нинг тарқалиши билан ифодалашни таклиф этди. Агар заррача фақат x ўқи йўналишида тарқалаётган бўлса ва вақт ўтиши билан унинг ҳаракат характери ўзгармаса (стационар ҳолат) (16.2) формулани $\Psi(x) = \psi = Ae^{ip_x x}$ кўринишда ёзиш мумкин. Бу ифодани x бўйича икки маротаба дифференциаллаб p_x^2 ни аниқлаймиз.

$$p_x^2 = -\frac{\hbar^2}{\psi}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}.$$

Худди шу йўл билан p_y^2 ва p_z^2 ларни аниқлаб $\vec{P}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ муносабатга қўйсак,

$$\vec{P}^2 = -\frac{\hbar^2}{\psi}\nabla^2\psi \tag{16.3}$$

келиб чиқади. Бу ерда $i^2 = -1$ ни ҳисобга олдик, $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — Лаплас операториднр. $\vec{P}^2$ нинг (16.3) қийматини (16.1) тенгламага қўйсак

$$E - U = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi$$

ёки

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \tag{16.4}$$

ҳосил бўлади. Бу — Шредингернинг стационар тенгламаси. Бу ерда U ва Ψ, x, y, z нинг функцияси ҳисобланади. (16.2) тўлқин функциясини вақт бўйича бир марта дифференциаллаcак

$$\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi(t). \tag{16.5}$$

Бу ердан топилган E ни ва (16.3) ни (16.1) тенгламага қўйсак

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\Psi(t) + U\Psi(t) \tag{16.6}$$

ҳосил бўлади. Бу — Шредингернинг тўла тенгламаси. У заррача ҳаракатини стационар бўлмаган, яъни вақтга боғлиқ бўлган майдонларда ўрганишга имкон беради. (16.6) да Ψ ўзгарувчи функция x, y, z ва t нинг функцияси, аммо қисқа ёзиш мақсадида $\Psi(t)$ кўринишда ёзамиз. Шунинг учун бундан буён, махсус қайд этилмаса, Ψ ни x, y, z нинг функцияси, $\Psi(t)$ ни эса x, y, z ва t нинг функцияси деб тушуниш лозим. (16.6) тенгламани Гамильтон оператори (13.16) ёрдамида содда кўринишда ифодалаш мумкин:

$$\hat{\mathcal{H}}\,\Psi(t) = \hat{E}\,\Psi(t). \qquad (16.7)$$

Шредингер тенгламалари иккинчи тартибли, чизиқли Штурм — Лиувилл типидаги хусусий дифференциал тенгламалардир. Шу сабабдан (16.4) ва (16.6) тенгламаларнинг ечимлари бўлган ψ ва $\Psi(t)$ функциялари қуйидаги шартларни қаноатлантиришлари керак:

1. Ўзи ва 1-тартибли ҳосиласи узлуксиз,
2. Бир қийматли,
3. Фазонинг ҳамма соҳасида қиймати чекли,
4. Конкрет масала талабларидан келиб чиқадиган чегаравий шартларнинг бажарилиши.

Шредингер тенгламасининг юқоридаги шартларни қаноатлантирувчи ечимлари E параметрнинг ҳар қандай қийматларида ҳам мавжуд бўлмайди. E энергиянинг айрим қийматларидагина (16.4) ва (16.6) ларнинг ечимлари (1) — (4) шартларни қаноатлантиради. Ана шу қийматлар E_1, E_2, . . . , E_n, . . . бўлсин. Буларни E параметрнинг хусусий қийматлари дейилади ва уларнинг тўплами энергетик спектрни ташкил этади. Энергиянинг ҳар бир хусусий қийматига мос келган ψ_n ечимларни хусусий функциялар дейилади. (16.4) ва (16.6) дан кўринадики, Шредингер тенгламаларининг ечими потенциал майдон кўринишига узвий боғлиқ. Биз буларга (16.4) ва (16.6) тенгламаларнинг қўлланишига конкрет масалалар ечганимизда (VI, VII боблар) ишонч ҳосил қиламиз. ψ функцияси қайси соҳада нолга тенг бўлса, ўша соҳада заррача йўқ. Агар вақтнинг бирор t_0 моментида заррачанинг ҳолати $\Psi_0(t_0)$ маълум бўлса, (16.6) тенгламани ечиб унинг t вақт моменти (лаҳзаси) даги фазовий ҳолатини ($\Psi(t)$) ҳам топиш мумкин. Бу квант механикасидаги сабабиятлик принципи бўлиб, унинг маъноси шуки, t вақтдаги заррача ҳолатини унинг t_0 вақтдаги ҳолати ёрдамида фақат статистик аниқлаш мумкин холос (индетерминизм).

Шредингер тенгламалари битта заррача учун ҳам, заррачалар тўплами учун ҳам тўғридир. Фақат бунда Гамильтон операторини тўғри танлай билиш лозим.

Юқорида қайд этганимиздек (7-§), Шредингер тенгламаларининг ечими бўлган ψ ва $\Psi(t)$ функциялар ёрдамида заррачанинг шу функциялар аниқланган соҳада бўлиш эҳтимоллиги dW топилади.

17-§. ЭҲТИМОЛЛИК ОҚИМИ ВЕКТОРИНИНГ ЗИЧЛИГИ

Классик физика нуқтаи назаридан бирор муҳитда зарядли заррачаларнинг ҳаракатини ўрганиш учун қуйидаги узлуксизлик тенгламаси ечилади:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \qquad (17.1)$$

Бу ерда ρ — зарядли заррачалар умумий электр зарядининг зичлиги. $\vec{j}$ — зарядли заррачалар ҳаракати туфайли ҳосил бўлган электр токининг зичлик вектори. (17.1) тенгламанинг квант механикасидаги кўринишини аниқлайлик. Бунинг учун Шредингернинг тўла тенгламаси (16.6) ни қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$\frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m_0}\nabla^2 \Psi(t) + \frac{i}{\hbar} U\Psi(t) = 0. \qquad (17.2)$$

Бу тенгламанинг комплекс ўзига қўшмаси

$$\frac{\partial \Psi^*(t)}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m_0}\nabla^2 \Psi^*(t) - \frac{i}{\hbar} U\Psi^*(t) = 0 \qquad (17.3)$$

бўлади. (17.2) тенгламани $\Psi^2(t)$ га ва (17.3) тенгламани эса $\Psi(t)$ га ҳадма-ҳад кўпайтириб, чиққан натижани ўзаро қўшамиз:

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

$$- \Psi^*(t)\nabla^2\Psi(t)\} = 0. \qquad (17.4)$$

Векторлар алгебрасидан маълумки,

$$\nabla[\Psi\nabla\Psi^*] = \nabla\Psi\nabla\Psi^* + \Psi\nabla^2\Psi^*,\ \operatorname{div}\vec{j} = \nabla\vec{j},\quad \operatorname{grad}\Psi = \nabla\Psi.$$

Буларни эътиборга олиб (17.4) тенгламанинг ҳар бир ҳадини электрон зарядига кўпайтириб қуйидагича ёзамиз:

$$\frac{\partial[\Psi^*(t)\Psi(t)e]}{\partial t} + \nabla\frac{i\hbar e}{2m_0}\{\Psi(t)\operatorname{grad}\Psi^*(t) -$$

$$- \Psi^*(t)\operatorname{grad}\Psi(t)\} = 0. \qquad (17.5)$$

Бу тенглама квант механикасида узлуксизлик тенгламасининг кўринишидир. (17.1) билан (17.5) ни солиштиришдан кўринадики, квант механикасида электр заряди зичлиги

$$\rho = e\Psi^*(t)\Psi(t) = e|\Psi(t)|^2 \qquad (17.6)$$

формула билан аниқланади. Демак, квант механикасида заряд зичлиги заррачаларни фазонинг берилган соҳасида бўлиш эҳтимоллигининг зичлигига тўғри пропорционал экан. Ток зичлиги эса

$$\vec{j} = \frac{ei\hbar}{2m_0}(\Psi(t)\ \mathrm{grad}\ \Psi^*(t) - \Psi^*(t)\ \mathrm{grad}\ \Psi(t)) \qquad (17.7)$$

формула билан аниқланиб, $\Psi(t)$ функциясининг градиентига пропорционал экан. Агарда заррача ҳолатини аниқловчи функция градиенти бўлмаса, электр токи ҳам ҳосил бўлмайди. Маълумки, заррача ҳолатини аниқловчи ҳолат функцияси монохроматик бўлса, уни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\Psi(t) = \varphi e^{-i\omega t}. \qquad (17.8)$$

Буни (17.7) формулага қўйсак,

$$\vec{j} = \frac{ei\hbar}{2m_0}(\Psi\ \mathrm{grad}\ \Psi^* - \Psi^*\ \mathrm{grad}\ \Psi) \qquad (17.9)$$

ток зичлиги вақтга боғлиқ бўлмайди. Бу стационар токдир. Демак, монохроматик функция билан ҳолати аниқланувчи зарядли заррачалар оқими стационар электр токини ҳосил қилади. Муҳитнинг параметрлари ток зичлигига Ψ функцияси орқали киради.

Агар Ψ ва Ψ^* функциялари ҳақиқий бўлса, улар ўзаро тенг бўлиб ($\Psi = \Psi^*$) ток зичлиги нулга тенг бўлади. Бундай ҳол электронлар бирор потенциал чуқурлик ичида бўлганда (VI боб), яъни унинг энергияси E потенциал тўсиқдан (U_0) кичик бўлганда кузатилади. Демак, металл ичидаги эркин электронлар ихтиёрий йўналишда (ташқи кучланиш бўлмаганда) ҳаракатлангани билан улар натижавий электр токи ҳосил қилмайди. Аммо бу электронлар фазода тартибли эркин ҳаракат қилсалар $\vec{j} = \rho \cdot \vec{N}$ электр токи ҳосил қилади.

18-§. ДИНАМИК КАТТАЛИКЛАРНИНГ ВАҚТ ЎТИШИ БИЛАН ЎЗГАРИШИ

Квант механикасининг математик аппаратидан маълумки, ҳар бир динамик катталик ўз операторига эга (13-§) ва ўлчашда бу операторнинг хусусий қийматининг ўртачаси аниқланади (12-§). Ихтиёрий оператор хусусий қийматининг ўртача қиймати унинг оператори ёрдамида қуйидаги формула билан аниқланади:

$$<\hat{A}> = \int \Psi^*(t)\,\hat{A}\,\Psi(t)\,dV. \qquad (18.1)$$

Динамик катталиклар вақт ўтиши билан ўзгариши мумкин.

Ўзгариш қонуниятини аниқлаш мақсадида (18.1) ифодани вақт бўйича дифференциаллаймиз:

$$d<\hat{A}> = \int \Psi^*(t)\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi(t)\,dV + $$
$$+ \int \frac{\partial \Psi^*(t)}{\partial t}\hat{A}\,\Psi(t)\,dV + \int \Psi^*(t)\,\hat{A}\,\frac{\partial \Psi(t)}{\partial t}\,dV. \qquad (18.2)$$

Шредингернинг тўла тенгламасини операторлар орқали ифодаланишидан маълумки (16-§.)

$$\frac{\partial \Psi^*(t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\hat{\mathscr{H}}\,\Psi^*(t), \qquad \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{\mathscr{H}}\,\Psi(t) \qquad (18.3)$$

Буларни (18.2) га қўйсак,

$$\frac{d<\hat{A}>}{dt} = <\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}> + \frac{1}{i\hbar}\int [\Psi^*(t)\,\hat{A}\hat{\mathscr{H}}\,\Psi(t) -$$
$$- \hat{\mathscr{H}}\,\Psi^*(t)\,\hat{A}\,\Psi(t)]\,dV. \qquad (18.4)$$

Гамильтониан $\hat{\mathscr{H}}$ эрмит оператор бўлганлигидан,

$$\int (\hat{\mathscr{H}}\,\Psi^*(t))\,(\hat{A}\,\Psi(t))\,dV = \int \Psi^*(t)\,\hat{\mathscr{H}}\hat{A}\,\Psi(t)\,dV.$$

Буни эътиборга олсак, (18.4) тенгламани қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин:

$$\frac{d<\hat{A}>}{dt} = <\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}> + \frac{1}{i\hbar}\int [\Psi^*(t)\,\hat{A}\hat{\mathscr{H}}\,\Psi(t) -$$
$$- \Psi^*(t)\,\hat{\mathscr{H}}\hat{A}\,\Psi(t)]\,dV$$

ёки

$$\frac{d<\hat{A}>}{dt} = <\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}> + \frac{1}{i\hbar}\int \Psi^*(t)\,[\hat{A}\hat{\mathscr{H}} -$$
$$- \hat{\mathscr{H}}\hat{A}]\,\Psi(t)\,dV. \qquad (18.5)$$

Равшанки, (18.5) тенгламанинг ўнг томонидаги интеграл (18.1) формулага биноан $\hat{A}$ ва $\hat{\mathscr{H}}$ операторлари коммутаторининг ўртача қийматидир. Шунинг учун (18.5) натижани қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\frac{d<\hat{A}>}{dt} = <\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}> + <\{\hat{\mathscr{H}}, \hat{A}\}>. \qquad (18.6)$$

Бу ерда

$$\{\widehat{\mathscr{H}}, \widehat{A}\} = -\frac{1}{i\hbar}[\widehat{\mathscr{H}}, \widehat{A}] = -\frac{1}{i\hbar}(\widehat{\mathscr{H}}\widehat{A} - \widehat{A}\widehat{\mathscr{H}}) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}(\widehat{\mathscr{H}A} - \widehat{A\mathscr{H}}).$$

Пуассоннинг квант қавси дейилади. Пуассоннинг классик қавси эса қуйидаги

$$[\mathscr{H}, f] = \sum_i \left(\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial x_i}\frac{\partial f}{\partial p_i}\right)$$

кўринишда бўлиб, унинг ёрдамида Гамильтоннинг каноник тенгламалари ва ҳаракат интегралларини келтириб чиқариш мумкин.

Агар $\widehat{A}$ оператори вақтга ошкора (бевосита) боғлиқ бўлмаса, у ҳолда $< \frac{\partial \widehat{A}}{\partial t} > = 0$ ва (18.6) тенгламани қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\frac{d<\widehat{A}>}{dt} = < \{\widehat{\mathscr{H}}, \widehat{A}\} >. \tag{18.7}$$

Бу тенгламанинг қўлланишлари билан танишайлик.

19-§. ЭРЕНФЕСТ ТЕОРЕМАСИ

Пуассон қавси ёрдамида заррача ҳаракатини ифодаловчи айрим тенгламаларни келтириб чиқарайлик. Бунинг учун

$$\frac{d<\widehat{A}>}{dt} = < \{\widehat{\mathscr{H}}, \widehat{A}\} > = -\frac{1}{i\hbar} < (\widehat{\mathscr{H}A} - \widehat{A\mathscr{H}}) > \tag{19.1}$$

тенгламадаги $\widehat{A}$ операторни заррача ҳолатини характерловчи конкрет физик катталик оператори билан алмаштириш зарур. У ҳолда (19.1) тенглама ўша физик катталик ўртача қийматининг вақт ўтиши билан ўзгаришини ифодалайди. Шундай физик катталиклар операторлари сифатида вақтга ошкора боғлиқ бўлмаган координата ва импульснинг шу координата бўйича ташкил этувчиси p_x операторларини олайлик.

1. Координата оператори, $\widehat{A} = X$ бўлсин. У ҳолда (19.1) нинг кўриниши

$$\frac{d<X>}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} < (\widehat{\mathscr{H}X} - \widehat{X\mathscr{H}}) > \tag{19.2}$$

бўлади. Бу ерда $\widehat{X}=x$, $\widehat{\mathscr{H}}=\frac{\widehat{p}_x^2}{2m_0}+\widehat{U}(x)$, $U(x)=U(x)$. Аввал қайд этганимиздек (13-§) координата ва унинг функцияси бўлган потенциал энергия операторлари ўзларининг хусусий қийматларига тенг. Бундай операторлар билан бирор функцияга таъсир этиш у функцияни ўша хусусий қийматларга кўпайтиришга тенг кучли. Шу сабабли $\widehat{X}$ ва $\widehat{U}$ операторлари ўзаро коммутацияланади ($\widehat{X}\widehat{U}=\widehat{U}\widehat{X}$).

Буларни ҳисобга олсак, гамильтон ва координата операторларидан

$$\left.\begin{aligned}\widehat{X}\widehat{\mathscr{H}}&=x\frac{\widehat{p_x^2}}{2m_0}+xU(x)\\ \widehat{\mathscr{H}}\widehat{X}&=\frac{\widehat{p_x^2}}{2m_0}x+U(x)x\end{aligned}\right| \tag{19.3}$$

келиб чиқади. (19.3) ни (19.2) га қўйсак,

$$\frac{d<X>}{dt}=\frac{1}{i\hbar\, 2m_0}<(x\widehat{p_x^2}-\widehat{p_x^2}x)> \tag{19.4}$$

ҳосил бўлади. Охирги тенгликнинг ўнг томонига $\widehat{p}_x\, x\, \widehat{p}_x$ ни қўшиб ва айирамиз:

$$d<x>=\frac{1}{2m_0 i\hbar}<(x\widehat{p_x^2}-\widehat{p}_x\, x\,\widehat{p}_x+\widehat{p}_x\, x\,\widehat{p}_x-\widehat{p_x^2}x)=$$

$$=\frac{1}{2m_0 i\hbar}<[(x\widehat{p}_x-\widehat{p}_x x)\widehat{p}_x+\widehat{p}_x(x\widehat{p}_x-\widehat{p}_x x)]>. \tag{19.5}$$

Маълумки,

$$x\widehat{p}_x-\widehat{p}_x x=i\hbar.$$

Буни (19.5) га қўйсак,

$$\frac{d<x>}{dt}=\frac{<\widehat{p}_x>}{m_0} \tag{19.6}$$

келиб чиқади.

2. Импульс оператори, $\widehat{A}=\widehat{p}_x$ бўлсин. У ҳолда (19.1) нинг кўриниши

$$\frac{d<p_x>}{dt}=\frac{1}{i\hbar}<(\widehat{p}_x\widehat{\mathscr{H}}-\widehat{\mathscr{H}}\widehat{p}_x)> \tag{19.7}$$

бўлади.

Бу ҳолда

$$\widehat{p}_x \widehat{\mathcal{H}} = \frac{\widehat{p}_x \widehat{p}_x^2}{2m_0} + \widehat{p}_x U$$

ва

$$\widehat{\mathcal{H}} \widehat{p}_x = \frac{\widehat{p}_x^2 \widehat{p}_x}{2m_0} + U p_x$$

бўлиб, $\widehat{p}_x$ ва $\widehat{p}_x^2$ операторлари ўзаро коммутацияланади ($\widehat{p}_x \widehat{p}_x^2 = \widehat{p}_x^2 \widehat{p}_x$). $\widehat{p}_x U$ операторларининг коммутатори эса қуйидагига тенг:

$$\widehat{p}_x U - U \widehat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial U}{\partial x}.$$

Буларни эътиборга олиб (19.7) тенгламани

$$\frac{d<p_x>}{dt} = \frac{1}{i\hbar} < (\widehat{p}_x U - U \widehat{p}_x) > = -< \frac{\partial U}{\partial x} > \quad (19.8)$$

кўринишга келтириш мумкин. Аниқланган (19.6) ва (19.8) тенгламалар классик физикадаги

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m_0} \quad \text{ва} \quad \frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x} \quad (19.9)$$

тенгламаларнинг квант механикасидаги (ўхшаши) кўринишидир. Уларни *Эренфест теоремалари* деб юритилади. Уларни яна қуйидагича ҳам ёзиш мумкин:

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^* x \Psi \, dx = \frac{1}{m_0} \int \Psi^* \widehat{p}_x \Psi \, dx, \quad (19.10)$$

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^* \widehat{p}_x \Psi \, dx = - \int \Psi^* \frac{\partial U}{\partial x} \Psi \, dx. \quad (19.11)$$

(19.6) тенгламадаги $<p_x>$ ни аниқлаб (19.8) га қўйсак, Ньютон тенгламасининг квант механикасидаги кўриниши келиб чиқади:

$$m_0 \frac{d^2<x>}{dt^2} = -< \frac{\partial U}{\partial x} > = <F(x)>. \quad (19.12)$$

20- §. КВАНТ МЕХАНИКАСИ ТЕНГЛАМАЛАРИДАН КЛАССИК МЕХАНИКА ТЕНГЛАМАЛАРИГА ЎТИШ

Аввалги параграфда Пуассон қавси ёрдамида Ньютон қонунининг квант физикасидаги кўринишини

$$m_0 \frac{d^2<x>}{dt^2} = <F(x)> \quad (20.1)$$

аниқладик. Бу тенглама билан классик физикадаги Ньютон қонуни

$$m_0 \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x) \qquad (20.2)$$

ўртасидаги боғланишни аниқлайлик. Юқорида қайд қилганимиздек квант физикасида заррача ҳолатини аниқлашда динамик катталиклар операторларининг ўртача қийматлари иштирок этади. Шунинг учун (20.2) тенгламанинг квант физикадаги кўринишини аниқлаш учун у ердаги ўзгарувчи x ни $<\hat{x}> = <x>$ билан алмаштириш кифоя бўлиши керак эди. У ҳолда биз қуйидаги натижага эга бўлардик:

$$m_0 \frac{d^2 <x>}{dt^2} = F(<x>), \qquad (20.3)$$

аммо Эренфест теоремаларига биноан Ньютон қонунининг квант механикасидаги кўриниши (20.1) тенглама билан аниқланади. Агар (20.1) ва (20.3) тенгламалардаги $<F(x)>$ ва $f(<x>)$ лар тенг бўлса, у ҳолда (20.1) ни аниқлаш учун Эренфест теоремаларидан фойдаланишнинг ҳожати йўқ, балки классик физикадаги тенгламаларда ўзгарувчиларни операторларининг ўртача қиймати билан алмаштириш кифоя бўлади. Бу фикрларнинг тўғрилигини аниқлаш мақсадида $<F(x)>$ ва $F(<x>)$ ўртасидаги муносабатни топайлик. Шу мақсадда куч операторини қуйидагича ёзамиз:

$$F(x) = F(<x> + x - <x>) = F(<x> - \Delta x). \quad (20.4)$$

Бу ифодани $x = <x>$ нуқтаси атрофида Тейлор қаторига ёйилик:

$$F(x) = F(<x>) + (\Delta x) F'(<x>) + \left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 F''(<x>) + \ldots (20.5)$$

Охирги ифодани умумий қоидага (12-§) мувофиқ ўртача қийматини аниқлайлик. У ҳолда $<\Delta x> = 0$ (14-§) эканлигини эътиборга олиб қаторнинг биринчи икки ҳади билан чегаралансак,

$$<F(x)> = F(<x>) = \frac{<(\Delta x)^2>}{2} F''(<x>) \qquad (20.6)$$

натижа келиб чиқади. Буни (20.1) га қўйсак, ҳаракатнинг квант тенгламаси

$$m_0 \frac{d^2 <x>}{dt^2} = F(<x>) + \frac{<(\Delta x)^2>}{2} F''(<x>) \quad (20.7)$$

ҳосил бўлади. Бу тенгламанинг ўнг томонидаги иккинчи ҳад бўлмаганда (20.7) ва (20.3) тенгламалар бир хил бўлар эди. Демак, ана шу ҳад (20.3) классик тенгламага квант механикаси томонидан киритилган тузатмадир. Шунинг учун ҳам квант механикасидаги ҳаракат тенгламаси қуйидаги шарт

$$2\,\frac{F'(\langle x\rangle)}{F''(\langle x\rangle)} \gg \langle(\Delta x)^2\rangle \tag{20.8}$$

бажарилганда классик физика ҳаракат тенгламасига ўтади. Бу ердан кўринадики, заррача координатасини ўлчашдаги оғиш (хатолик) ўртача қийматининг квадрати қанча кичик бўлса, заррача ҳаракати учун квант механикаси тенгламаси ўрнига классик механика тенгламасидан ($x \to \langle x\rangle$ алмаштириб) шунчалик аниқлик билан фойдаланса бўлади. Аммо (20.8) муносабат умумий эмас. Юқоридаги (20.8) ва ўхшаш тенгсизликни заррача импульси учун ҳам аниқлаш мумкин. Импульс билан бевосита заррача кинетик энергияси T боғлиқ.

Бир қарашда классик механикадаги

$$T(p_x) = \frac{p_x^2}{2m_0} \tag{20.9}$$

ифодада p_x ни $\langle p_x\rangle$ билан алмаштириб

$$T(\langle p_x\rangle) = \frac{\langle p_x\rangle^2}{2m_0} \tag{20.10}$$

квант механикаси ифодасига ўтиш мумкин, деган янглиш фикр туғилади. Бироқ квант механикаси нуқтаи назаридан кинетик энергиянинг ўртача қиймати эса қатъий олганда

$$\langle T(p_x)\rangle = \frac{\langle p_x^2\rangle}{2m_0} \tag{20.11}$$

бўлади. (20.10) ва (20.11) ифодалар ўртасидаги боғланишни аниқлайлик. Бунинг учун $p_x = \langle p_x\rangle + \Delta p_x$ ни (20.9) га қўямиз:

$$T(p_x) = \frac{1}{2m_0}(\langle p_x\rangle + \Delta p_x)^2 = \frac{1}{2m_0}(\langle p_x\rangle^2 + 2\langle p_x\rangle\Delta p_x + \Delta p_x^2). \tag{20.12}$$

Охирги ифодани ўртачалаймиз ва $\langle\Delta p_x\rangle = 0$ эканлигини эътиборга оламиз:

$$\langle T(p_x)\rangle = \frac{\langle p_x\rangle^2}{2m_0} + \frac{\langle(\Delta p_x)^2\rangle}{2m_0}. \tag{20.13}$$

(20.13) билан (20.10) ни солиштиришдан кўринадики,

$$<p_x>^2 \gg <(\Delta p_x)^2> \qquad (20.14)$$

шарт бажарилса, (20.10) ва (20.11) ифодалар бир хил бўлади, яъни кинетик энергиянинг квант механикасида топилган қиймати классик механикадаги билан бир хил бўлади. Демак, (20.12) тенгламанинг ўнг томонидаги иккинчи ҳад квант механикаси томонидан кинетик энергияга киритилган қўшимча ҳаддир. (20.8) ва (20.14) тенгсизликларни ўзаро кўпайтирсак,

$$4m_0 T(<p_x>)\left|\frac{F(<x>)}{F''(<x>)}\right| \gg <(\Delta x)^2><(\Delta p_x)^2> \qquad (20.15)$$

бўлиб, бу (20.8) ва (20.14) шартларга қараганда қаттиқроқдир. Иккинчи томондан Гейзенбергнинг ноаниқлик муносабатларидан маълумки,

$$<(\Delta x)^2><(\Delta p_x)^2> \geqslant \frac{\hbar^2}{4}. \qquad (20.16)$$

(20.15) ва (20.16) тенгсизликларни умумлаштирсак,

$$m_0 T(<p_x>)\left|\frac{F(<x>)}{F''(<x>)}\right| \gg \frac{\hbar^2}{16} \qquad (20.17)$$

келиб чиқади. Бу тенгсизлик классик физикадаги динамик катталикларни уларнинг ўртача қийматлари билан алмаштириш туфайли келиб чиққан ҳаракат тенгламаларининг микроолламда қўлланиш чегарасини билдиради. Демак, заррачанинг импульси ($m_0T(<p_x>)$) қанча катта бўлса ёки заррача ҳаракат қилаётган майдон потенциалининг ўзгариш тезлиги ($F''(<p_x>)$) қанча кичик бўлса, (20.17) тенгсизлик шунча яхши бажарилади. Бундай ҳолда заррача ҳаракатини ўрганиш учун классик физика тенгламаларидан фойдаланиш мумкин. (20.17) тенгсизлик ўринли бўлмаган ҳолларда заррачанинг ҳаракатини ўрганиш учун квант механикаси тенгламаларидан фойдаланиш лозим. (20.17) тенгсизликни ҳаракатнинг квант тенгламаларидан классик тенгламаларига ўтиш шарти деб ҳам қабул қилиш мумкин.

21- §. КВАНТ МЕХАНИКАСИ ВА ОПТИКА

Физика тарихига оид кўпгина асарларга назар ташласак, кўп ҳолларда Э. Шредингер «Квант механикаси» нинг асосий тенгламаларини «Тўлқинли оптика» тенгламаларига қараб яратган деган фикр берилади.

Ҳақиқатан ҳам, Гамильтон яратган механика ва геометрик оптика ўртасидаги ўхшашликка эътибор берган Луи де Бройль «Квант механикаси»нинг дастлабки тушунчаларини (заррачаларнинг тўлқин хусусиятли бўлишини) киритган эди.

Математика нуқтаи назаридан «Тўлқинли оптика»нинг тенгламалари вақтга нисбатан иккинчи тартибли дифференциал тенглама кўринишда бўлса, Шредингер тенгламаси эса — биринчи тартиблидир. Шундай бўлсада квант механикаси ва тўлқинли оптика тенгламаларини солиштириб кўриш кўпгина масалаларни осон ҳал этишга кўмаклашади.

Маълумки, бир жинсли муҳитда v тезликли тўлқиннинг тарқалишида содир бўладиган силжиш (f) учун ёзилган тенглама

$$\nabla^2 f - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0 \tag{21.1}$$

кўринишда бўлади. Агар тўлқиннинг тебраниш частотасини ω десак, у ҳолда силжишни

$$f = U\, e^{-i\omega t} \tag{21.2}$$

кўринишда излаб, (21.1) ифодадан

$$\nabla^2 U + k^2 U = 0 \tag{21.3}$$

тенгламага эга бўламиз. Бунда $k = \omega/v = \frac{2\pi}{\lambda}$ — тўлқин сони, λ — тўлқин узунлиги. Агар $v = \text{const}$ $(\lambda = \lambda_0)$ бўлса, (21.3) тенглама бир жинсли, агар $v = v(x, y, z)$ $(k = k(x, y, z))$ бўлса, бир жинсли бўлмаган муҳит учун тўлқин тенгламаси бўла олади.

Бу ерда ҳам, геометрик оптикадаги каби, синдириш кўрсаткичи

$$n = \frac{k}{k_0} = \frac{\lambda_0}{\lambda} \tag{21.4}$$

тушунчасини киритайлик (λ_0 — бўшлиқдаги тўлқин узунлиги). У ҳолда $k = k_0 n$ бўлиб, (21.3) ни қайта

$$\nabla^2 U + n^2 k_0^2 U = 0 \tag{21.5}$$

кўринишда ёзиш мумкин. (21.5) тенгламанинг ечимини

$$U = a\, e^{i k_0 \theta} \tag{21.6}$$

кўринишда излаймиз ($k_0\theta$ — тўлқин фазаси, a — унинг амплитудаси). k_0 нинг катта (λ_0 нинг кичик) қийматлари соҳаси учун тўлқин тенгламасини ечиш мақсадида a ва θ ларни k_0 нинг тескари қийматларига нисбатан қаторга ёямиз, яъни

$$a = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \overline{k}_0^n, \quad \theta = \sum_{n=0}^{\infty} \theta_n \overline{k}_0^n. \tag{21.7}$$

У ҳолда (21.7) ни эътиборга олсак, (21.6), (21.7) муносабатлардан

$$-k_0^2 a_0 (\nabla\theta_0)^2 + k_0^2 n^2 a_0 + R(k_0) = 0 \tag{21.8}$$

тенгламага эга бўламиз. Бунда $R(k_0)$ — k_0 нинг биринчи, нолинчи ва манфий даражали ҳадларнинг йиғиндисидир. Агар $R(k_0) = 0$ деб ҳисобласак, у ҳолда охирги тенгламадан

$$(\nabla \theta_0)^2 = n^2 \tag{21.9}$$

геометрик оптиканинг асосий тенгламасини ҳосил қиламиз. Бу тенглама

$$\theta_0(x, y, z) = \text{const} \tag{21.10}$$

шартни қаноатлантирувчи сирт—доимий фазалар сирти тенгламасидир. Бундай ҳолда нур (21.10) шартни қаноатлантирувчи сиртга доимо ортогонал бўлиб ўтади. Одатда $\theta_0(x, y, z)$ функциясини *эйконал* деб юритилади.

Шредингернинг тўла тенгламаси

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\vec{r}) \cdot \Psi \tag{21.11}$$

нинг ечимини

$$\Psi = \Psi(\vec{r}, t) = U(\vec{r})e^{-iEt/\hbar} \tag{21.12}$$

кўринишда изласак, (21.11) тенгламадан

$$\nabla^2 U + k^2 U = 0 \tag{21.13}$$

тенгламага—геометрик оптиканинг асосий тенгламаси (21.3) га жуда ўхшаш тенгламани ҳосил қиламиз. (21.13) да тўлқин сони ўрнида

$$k = \sqrt{2m\hbar^{-2}(E-V)} \tag{21.14}$$

катталик келяпти. (21.14) дан $k_0 = k(V = 0) = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ эканини эътиборга олсак, синдириш кўрсаткичи

$$n = \frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{E-V}{E}} \tag{21.15}$$

кўринишда аниқланади.

Юқорида қайд этилган квант механикаси ва оптика ўхшашлигининг қўлланиш шарти (бир ўлчамли ҳолатлар учун)

$$\left| \frac{\partial\lambda}{\partial x} \right| \ll 2\pi \qquad (21.16)$$

муносабат билан аниқланади.

Шуни қайд этиш мумкинки, агар $V(x, y, z)$ нинг таъсир соҳаси кенглиги a бўлса, у ҳолда (21.16) шартни

$$\lambda \ll a \qquad (21.17)$$

кўринишда ёзиш мумкин. Агар заррача энергиясининг ортиши (тўлқин узунлигининг камайиши) билан ноэластик (энергия ютилиш билан кечадиган) сочилишнинг улуши ҳам орта боришини эътиборга олсак, у ҳолда $\lambda \ll a$ шарт катта энергияли ихтиёрий заррача учун ўринли бўлавермаслиги келиб чиқади.

22- §. КВАЗИКЛАССИК ЯҚИНЛАШИШ. ВЕНТЦЕЛЬ — КРАМЕРС — БРИЛЛЮЭН МЕТОДИ

Маълумки, $\hbar \to 0$ чегаравий шарт бажарилганда квант механикасининг қонунлари классик механика қонунларига ўтиши талаб этилади.

Шу маънода квант механикасининг айрим масалаларини классик механика тенгламаларига ўхшаш тенгламаларни ҳосил қилиб ечиш мумкин. Бундай ҳолларда, табиийки, ҳар хил яқинлашишлардан фойдаланишга тўғри келади. Мана шундай яқинлашишларни *квазиклассик яқинлашишлар* деб юритилади.

Мураккаб ҳисоблашларсиз шуни қайд қилиш мумкинки, квазиклассик яқинлашиш, одатда, бош квант сони катта қийматлар қабул қилиши талаб этилган ҳоллардагина ишлатилади. Масалан, водород атомида энергетик сатҳларнинг тақсимоти (жойлашиши)

$$E_n = -\frac{1}{2}\left(\frac{e_0^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{m_e c^2}{n^2}$$

муносабат ёрдамида аниқланиб, $n+1$ ва n- сатҳлар оралиғида энергетик кенглик

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = -\frac{2n+1}{(n+1)^2} E_n$$

бўлиб, $E = E_n$ сатҳ ва унга яқин энергетик сатҳ оралиғи

$\hbar \to 0$ шартда $n^2 \hbar^2 = \text{const}$ муносабат бажарилганда $\frac{2n+1}{(n+1)^2} E_n$ га тенг бўлади; бундан $n \to \infty \left(n \sim \frac{1}{\hbar}\right)$ келиб чиқади. Бу эса юқоридаги фикримиз далилидир.

Умуман олганда квазиклассик яқинлашиш заррача (де-Бройль) тўлқин узунлиги фазода сезиларсиз ўзгарган ҳолдагина ишлатилади.

Келгусида, соддалик учун, бир ўлчамли ҳолатларни кўриб ўтайлик. Табиийки, бир ўлчамли ҳолат натижаларини икки ёки кўп ўлчамли ҳолларга қўллаш кўп қийинчилик туғдирмайди. Шунинг учун Шредингернинг стационар тенгламасини

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0 \tag{22.1}$$

кўринишда ёзиб, унинг ечимини қуйидаги кўринишда излаймиз:

$$\psi = e^{iW/\hbar}, \quad W = S - i\hbar \ln A \tag{22.2}$$

(S ва $\ln A$ $\hbar$ нинг жуфт функцияларидир). У ҳолда охирги муносабатлардан

$$\frac{\partial S}{\partial x} - 2m_0(E - V) = \hbar^2\left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}\right)\frac{1}{A}, \tag{22.3а}$$

$$2\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial S}{\partial x} + A\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = 0 \tag{22.3б}$$

тенгламалар системасига эга бўламиз. Бунда (22.3б) узлуксизлик тенгламаси бўлиб, ундан

$$A = \text{const} \Big/ \sqrt{\frac{\partial S}{\partial x}} \tag{22.4}$$

муносабатни оламиз. (22.4) ни (22.3а) га қўйиб

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 = 2m_0(E - V) + \hbar^2\left[\frac{3}{4}\left(\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right)\Big/\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2}\,\frac{\frac{\partial^3 S}{\partial x^3}}{\frac{\partial S}{\partial x}}\right]\right. \tag{22.5}$$

учинчи тартибли, чизиқли бўлмаган дифференциал тенгламага эга бўламиз. Унинг ечимини

$$S = S_0 = \hbar^2 S_1 + (\hbar^2)^2 S_2 + \ldots \tag{22.6}$$

$\hbar^2$ га нисбатан қатор кўринишда изласак, нолинчи тартибли ҳадларга нисбатан ёзилган қуйидаги

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2=\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2=2m_0(E-V)$$

тенгламадан

$$S_0=\int\sqrt{2m_0(E-V)}\,dx=\int p(x)\,dx$$

муносабат келиб чиқади. Бу ерда микрозаррачанинг импульси

$$p(x)=\hbar k(x)=\sqrt{2m_0(E-V)} \qquad (22.7)$$

эътиборга олинди. Бундай яқинлашиш Вентцель—Крамерс—Бриллюэн (ВКБ) яқинлашиши деб номланади.

(22.7) дан кўринаяптики, ВКБ яқинлашишда тўлқин функциясининг кўриниши микрозаррача энергиясининг қийматига боғлиқ:

1. $E>V$ (классик механика соҳаси) ҳолда $p=\sqrt{2m_0(E-V)}>0$. Бунда

$$\frac{\partial S}{\partial x}=\pm p(x)=\pm\hbar k(x)=\pm\sqrt{2m_0(E-V)} \qquad (22.8)$$

бўлиб, тўлқин функция

$$\psi_1(x)=\frac{C}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\int_b^x k(x)\,dx+\alpha\right) \qquad (22.9)$$

кўринишдаги осцилляцияланувчи функцияларнинг чизиқли комбинациясидан иборат эканлиги келиб чиқади (C, b ва α- чегаравий шартлар ёрдамида аниқланувчи доимий катталиклар).

2. $E<V$ (ноклассик соҳа) ҳолда

$$k=il^{-1},\ \hbar l^{-1}\sqrt{2m_0(V-E)} \qquad (22.10)$$

муносабат ўринли бўлиб,

$$\frac{\partial S}{\partial x}=\pm i\hbar l^{-1} \qquad (22.11)$$

тенгламага эга бўламиз. ВКБ яқинлашишда тўлқин функциясининг кўриниши

$$\psi_2(x)=\sqrt{e}\left(C_1e^{\int_a^x l^{-1}dx}+C_2e^{-\int_a^x l^{-1}dx}\right) \qquad (22.12)$$

ҳақиқий аргументли экспоненциал функцияларнинг чизиқли комбинациясидан иборат экани келиб чиқади. Бунда C_1, C_2, a- чегаравий шартлар ёрдамида аниқланувчи доимий сонлар.

Юқорида қайд этилган икки ($E>V$, $E<V$) ҳолдан ташқари яна бир—махсус ҳол: заррача тўла энергияси (E) потенциал энергия (V) га тенг бўлган ҳол ҳам мавжуд. Бунда заррачанинг кинетик энергияси (T) ва импульси ($p(x)$) нолга тенг бўлади, яъни ўз ҳаракатини тўла тўхтатади. Бундай ҳол бўлиши мумкин бўлган нуқта *махсус* ёки *қайтиш нуқтаси* дейилади.

Классик механикада $p=0$ шартни қаноатлантирувчи нуқтада заррача ҳаракатдан тўхтаб, сўнгра аввалги ҳаракатига тескари ҳаракатда иштирок этади. Бундай ҳолат $E>V$ (классик) соҳада кузатилиши мумкин. $E<V$ (ноклассик) соҳада кузатилиши учун $\psi(x)$ нинг $x\to\infty$ шартда ўсувчи ҳади олдидаги коэффициентнинг нолга тенг бўлиши талаб этилади, яъни

$$\psi_2(x) = C_2\sqrt{l}\, e^{-\int\limits_a^x l^{-1}dx}. \qquad (22.12a)$$

Умуман олганда $x>a$ соҳада $E<V$, $x<a$ соҳада $E>V$ муносабатлар ўринли бўлса, $\psi_1(x)$ ва $\psi_2(x)$ функциялар

$$\psi_1(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}}\sin\left(\int\limits_a^x k(x)dx + \frac{\pi}{4}\right),\ x<a, \qquad (22.13)$$

$$\psi_2(x) = \frac{C_1}{2\sqrt{|k(x)|}}\, e^{-\int\limits_a^x |k(x)|dx},\ x>a \qquad (22.14)$$

кўринишда қайд этилади.

Агар заррачанинг ҳаракати $b<x<a$ соҳада $V(x)$ (потенциал ўра) билан чегараланган бўлса,

$$\psi_1'(x) = \frac{C}{\sqrt{k(x)}}\sin\left[\int\limits_a^x k(x)\,dx + \frac{\pi}{4}\right] \qquad (22.15)$$

ва (22.14) ифодаларнинг $b<x<a$ соҳада мос келиш шартидан

$$\int\limits_a^b k(x)\,dx + \frac{\pi}{2} = (n+1)\pi \qquad (22.16)$$

фойдали муносабатга эга бўламиз (n — бутун сонлар). Агар интеграллашни $baab$ берк контур бўйича олиб борсак

$$\oint k(x)\,dx = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \qquad (22.17)$$

муносабатни оламиз. ВКБ яқинлашишда n га нисбатан $(1/2)$ га эътибор бермаса ҳам бўлади.

(22.17) дан кўринаяптики, ВКБ яқинлашишда заррачанинг энергетик спектри (ҳолатлари) узлукли (дискрет) энергетик сатҳлардан иборатдир.

23- §. СТАЦИОНАР ҲОЛАТЛАР. ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИНИНГ ДИСКРЕТ СПЕКТРИ

Энергияси аниқ қиймат қабул қилувчи системанинг ҳолатлари стационар ҳолатлар дейилади. Чунки квант механикасида энергиянинг сақланиш қонунига системанинг энергияси аниқ қиймат қабул қилгандагина энергия вақтга нисбатан ўзгармас қолади.

Шу бойсдан гамильтониан вақтга боғлиқ бўлмаган

$$\frac{\partial \hat{\mathscr{H}}}{\partial t} = 0 \tag{23.1}$$

система учун Шредингер тенгламаси

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}} \psi_n \tag{23.2}$$

ни ўзгарувчиларга ажратиш усулидан фойдаланиб ечамиз, яъни

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) \cdot A_n(t) \tag{23.3}$$

кўринишда танлаймиз (n — система ҳолатининг тартиби). У ҳолда (23.3) ва (23.2) лардан

$$\frac{i\hbar \dfrac{\partial A_n}{\partial t}}{A_n} = \frac{\hat{\mathscr{H}} \psi_n(\vec{r})}{\psi_n(\vec{r})} \tag{23.4}$$

га эга бўламиз. Тенгликнинг ҳар иккала томони бир хил доимий катталикка тенг бўлгандагина тенглик ўринли бўлади, яъни:

$$i\hbar \frac{1}{A_n} \frac{\partial A_n}{\partial t} = E_n, \frac{\hat{\mathscr{H}} \psi_n(\vec{r})}{\psi_n(\vec{r})} = E_n \tag{23.5}$$

ёки

$$i\hbar \frac{\partial A_n}{\partial t} = E_n A_n, \tag{23.5 a}$$

$$\hat{\mathscr{H}} \psi_n(\vec{r}) = E_n \psi_n(\vec{r}) \quad (E_n = \text{const}). \tag{23.5 б}$$

(23.5a) тенгламадан

$$A_n = C_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

ифодани топамиз. Агар $\Psi(\vec{r}, t)$ нинг ортонормаланганлик шартини эътиборга олсак,

$$A_n = e^{-iE_n t/\hbar}$$

муносабатга эга бўламиз. Демак, умумий тўлқин функцияси

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r})\, e^{-iE_n t/\hbar} \qquad (23.6)$$

кўринишга келади.

Шундай қилиб, системанинг n- тартибли ҳолати гамильтониан $(\hat{\mathscr{H}})$ нинг хусусий қиймати (E_n) билан аниқланади. E_n нинг энг кичик қийматига мос келувчи стационар ҳолат *нормал* ёки *асосий ҳолат* деб юритилади. Қолган ҳолатлар эса *уйғонган ҳолатлар* деб номланади.

Энди стационар ҳолатларнинг қуйидаги хусусиятларини санаб ўтамиз:

1. Стационар ҳолатдаги система тўлқин функциясининг вақтга боғлиқ эволюцияси (ўзгариши) бу ҳолатга мос келувчи энергия билан тўла аниқланади. Бу ерда шуни таъкидлаш лозимки, ҳар хил стационар ҳолатлар ичида шундайлари бўлиши мумкинки, уларга мос келувчи энергиянинг хусусий қийматлари бир хил бўлиб қолиши мумкин (бошқа физик катталиклари фарқли бўлса-да). Бундай ҳолатлар *турланган* ёки *айниган* стационар ҳолатлар дейилади.

2. Стационар ҳолатларда заррача топилиш эҳтимоллигининг зичлиги

$$\rho_n = \Psi_n^*(\vec{r}, t)\, \Psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n^*(\vec{r})\, \psi_n(\vec{r}) = |\psi_n(\vec{r})|^2 \qquad (23.7)$$

ва эҳтимоллик оқимининг зичлиги

$$\vec{j}_n = \frac{\hbar}{2i\, m_0}\left[\Psi_n^*(\vec{r}, t)\, \nabla\Psi_n(\vec{r}, t) - \Psi_n(\vec{r}, t)\, \nabla\Psi_n^*(\vec{r}, t)\right] =$$
$$= \frac{\hbar}{2i\, m_0}\left[\psi_n^*(\vec{r})\, \nabla\psi_n(\vec{r}) - \psi_n(\vec{r})\nabla\psi_n^*(\vec{r})\right] \qquad (23.8)$$

вақтга нисбатан доимий катталиклардир.

3. Вақтга боғлиқ бўлмаган ихтиёрий физик катталик A нинг стационар ҳолатларга нисбатан ўртача қиймати

$$\langle\hat{A}\rangle = \int \Psi_n^*(\vec{r}, t)\hat{A}\, \Psi_n(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \int \psi_n^*(\vec{r})\, \hat{A}\, \psi_n(\vec{r}) d^3\vec{r} \qquad (23.9)$$

вақтга нисбатан ўзгармасдир.

Шредингернинг тўла тенгламаси (23.2) вақтга нисбатан биринчи тартибли, чизиқли бўлганлиги сабабидан система гамильтониани $\widehat{\mathscr{H}}$ нинг хусусий қиймати дискрет ($E_1, E_2, \ldots, E_n$) ёки узлуксиз бўлиши мумкин. Бундан кўринаяптики, Шредингер тенгламасининг ечимини ҳар иккала ҳол учун айрим-айрим қараб ўтиш мақсадга мувофиқдир.

Дастлаб Шредингер тенгламасининг дискрет спектрини кўрайлик.

Квант механикасида ихтиёрий физик катталик унга мос келувчи оператор ва унинг хусусий қиймати билан характерланади. Хусусий қийматларнинг тўплами эса унинг *спектри* дейилади. Демак, спектр дискрет ёки узлуксиз бўлиши мумкин.

E_n дискрет спектрли система учун ёзилган Шредингер тенгламаси (23.5 *б*) нинг тўла ечимини дискрет ҳолатларнинг тўлқин функцияларидан ташкил этган қатор

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \qquad (23.10)$$

кўринишида ёзиш мумкин. Бунда қаторга ёйиш коэффициентларининг квадрати $|a_n|^2$ одатда, система энергияси ҳар хил қийматларининг эҳтимоллигини аниқлайди.

$\psi_n(\vec{r})$ аргументининг ўзгариш соҳасида $\int |\psi_n(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}$ интеграл чекли қийматли бўлганлиги сабабидан ҳамма системалар дискрет энергетик спектрли заррача чегараланган соҳада мавжуд бўлиб, бу соҳанинг ташқарисида тўлқин функцияси тезда нолга интилади. Агар

$$\sum_n |a_n|^2 = 1 \qquad (23.11)$$

ни эътиборга олсак (23.11), (23.10) лардан

$$\sum_n a_n a_n^* = \int \Psi^* \Psi \, d^3\vec{r}. \qquad (23.12)$$

Агар $\Psi^* = \sum_n a_n^* \psi_n^*(\vec{r}) e^{iE_n t/\hbar}$ эканини эътиборга олсак (23.12) дан a_n учун

$$a_n = \int \Psi \psi_n^*(\vec{r}) e^{iE_n t/\hbar} d^3\vec{r} \qquad (23.13)$$

ифодага эга бўламиз.

Келгусида кўп ишлатиладиган қуйидаги теорема мавжуд. Бирор $\widehat{L}$ эрмит операторининг турли L_n ва L_m дискрет хусусий қийматларига тўғри келган хусусий функциялари ψ_n ва ψ_m ортогоналдир, яъни

$$\int \psi_m^*(\vec{r}) \psi_n(\vec{r}) \, d^3\vec{r} = 0 \quad (m \neq n). \qquad (23.14)$$

Бу муносабат 11- § да исбот қилинган.

24- §. УЗЛУКСИЗ СПЕКТР УЧУН ТЎЛҚИН ФУНКЦИЯЛАРНИ НОРМАЛАШ. ДИРАКНИНГ δ-ФУНКЦИЯСИ ВА УНИНГ ХУСУСИЯТЛАРИ

23- § да дискрет спектрли ҳолатлар тўлқин функцияларини нормалаш, ихтиёрий тўлқин функциясини бу тўлқин функцияларга нисбатан қаторга ёйиш ва қаторга ёйиш коэффициентларини топиш кабиларни кўриб ўтдик. Буларни узлуксиз спектрли ҳолатлар учун қайтариш мумкин.

Хусусий қиймати узлуксиз спектрни ташкил қилувчи (ихтиёрий физик катталик) оператор ($\hat{f}$) нинг хусусий функцияси

$$\hat{f}\,\Psi_f(\eta) = f\Psi_f(\eta) \qquad (24.1)$$

тенгламани қаноатлантиради. Бунда f — $\hat{f}$ нинг хусусий қиймати, η — квантлашган система координаталарининг тўплами.

Ихтиёрий тўлқин функциясини дискрет спектрли ҳолат функцияларининг қатори сифатида (23- § да) қаралганидек, ушбу ҳолда ҳам ихтиёрий тўлқин функцияси (Ψ) ни узлуксиз спектрли оператор хусусий тўлқин функция ($\Psi_f(\eta)$) ларининг интеграли, яъни

$$\Psi(\eta) = \int a_f \Psi_f(\eta) \, df \qquad (24.2)$$

кўринишда қайд қилиш мумкин. (24.2) да f нинг қиймат қабул қилиш соҳаси бўйича интегралланади.

Узлуксиз спектрли тўлқин функцияларни нормалаш шарти, дискрет спектрли ҳолатлардагидек, осон эмас албатта. Чунки $|\Psi_f(\eta)|^2 df$ катталик $\eta \to \infty$ шартда тезда нолга айланмайди. Шу сабабдан $\int |\Psi_f(\eta)|^2 d\eta$ интеграл (чекли қийматли эмас) узоқлашувчидир.

Демак, тўлқин функцияси модули квадратидан координаталар бўйича интегралининг бирга тенг бўлишини талаб этиш мантиқсиздир. Шу боисдан Ψ_f тўлқин функциясини нормалаш учун $|a_f|^2 df$ қаралаётган катталикнинг Ψ_f функция билан характерланувчи ҳолатда $(f, f+df)$ оралигида топилиш эҳтимолини характерласин. У ҳолда f нинг ҳар бир қийматларининг қабул қилиш эҳтимолликларининг йиғиндиси бирга тенг бўлиши керак, яъни

$$\int |a_f|^2 df = 1 \qquad (24.3)$$

эканини эътиборга олсак

$$\int \Psi\Psi^* d\eta = \int |a_f|^2 df. \qquad (24.4)$$

(24.3) ва (24.2) ифодалардан эса

$$\int \Psi\ \Psi^* d\eta = \int\int a_f^* \Psi_f^* \Psi\, df\ d\eta. \qquad (24.5)$$

Бундан қаторга ёйиш коэффициентлари учун қуйидаги ифодани топамиз:

$$a_f = \int \Psi(\eta)\, \Psi_f^*(\eta)\, d\eta \qquad (24.6)$$

Шундай қилиб узлуксиз спектрли тўлқин функциялари бўйича қаторга ёйиш коэффициентларини аниқлаш қоидаси, дискрет спектрли ҳолат учун аниқланган қоидага ўхшаш экан.

Узлуксиз спектрли ҳолат тўлқин функцияларининг нормалаш шартини топиш мақсадида (24.2) ни (24.5) га қўйиб

$$a_f = \int df' a_{f'} \int \Psi_{f'} \Psi_f^* d\,\eta \qquad (24.7)$$

муносабатга эга бўламиз. Бу муносабатнинг a_f нинг ихтиёрий қиймати учун ўринли бўлиши учун

$$\int \Psi_{f'}(\eta)\, \Psi_f^*(\eta)\, d\eta = \delta(f - f') \qquad (24.8)$$

муносабатнинг бажарилиши талаб этилади. Бунда $\delta(x)$ — Диракнинг дельта (δ) функцияси дейилади. δ — функция $x=f-f'=0$ $(f=f')$ учун $\int \delta(f-f')F(f')df' = F(f)$ муносабатни қаноатлантирувчи ҳолда чексиз қийматли, $x \neq 0$ $(f \neq f')$ учун нолга тенг бўлувчи сакраб ўзгарувчи функциядир.

Шундай қилиб, (24.8) дан кўринаяптики, узлуксиз спектрли операторларнинг хусусий функциялари δ функцияга нормалашган.

Узлуксиз спектрли тўлқин функциялар (24.8) шартдан ташқари

$$\int \Psi_f(\eta)\, \Psi_f^*(\eta') df = \delta(\eta - \eta') \qquad (24.9)$$

муносабатни ҳам қаноатлантиради.

(24.8) ва (24.9) ифодалардан кўринаяптики, $f=f'$ $(\eta = \eta'$ ҳол учун) ёки $\eta = \eta'$ $(f = f'$ бўлганда) узлуксиз спектрли тўлқин функциялар ортогонал бўлиб, $f \neq f'$ $(\eta = \eta')$ ёки $\eta \neq \eta'$ $(f = f')$ ҳолларда эса (24.3) ва (24.9) интеграллар узоқлашувчидир.

Агар қаралаётган оператор бир вақтнинг ўзида ҳам дискрет, ҳам узлукли спектрли бўлса, у ҳолда ихтиёрий ψ функцияни

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n + \int a_f \Psi_f\, df \qquad (24.10)$$

кўринишда аниқлаш мумкин. $\Psi(\eta)$ нинг бирга нормалаш шартидан эса

$$\sum_n |a_n|^2 + \int |a_f|^2\, df = 1 \qquad (24.11)$$

фойдали муносабат келиб чиқади.

Бундай ҳолда хусусий тўлқин функцияларнинг нормалаш шарти

$$\sum_n \Psi_n^*(\eta')\, \Psi_n(\eta) + \int \Psi_f^*(\eta')\, \Psi_f(\eta)\, df = \delta(\eta - \eta') \qquad (24.12)$$

кўринишда қайд этилади.

Энди Дирак δ-функциясининг хусусиятларини кўрайлик. Диракнинг дельта-функцияси импульсли (зинали) ўзгарувчи функция бўлиб, қуйидаги хусусиятларга эга:

$$\int_a^b f(y)\, \delta(y - y_0)\, dy = \begin{cases} 0, \text{ агар } y_0 < a^{*} \\ \frac{1}{2} f(y_0 + 0), \text{ агар } y_0 = a \\ \frac{1}{2} f(y_0 - 0), \text{ агар } y_0 = b \\ \frac{1}{2} f(y_0 + 0) + \frac{1}{2} f(y_0 - 0), \\ \text{агар } a < y_0 < b. \end{cases} \qquad (24.13)$$

$(a < b)$

δ-функциянинг бу аниқланишидан унинг нолга тенг бўлмаган қиймати учун $\delta(y) = 0$ ёки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y)\, dy = 1. \qquad (24.14)$$

---

*) $(y_0 + 0)$ y_0 га ўнг томонидан, $(y_0 - 0)$ эса чап томондан яқинлашишини билдиради.

Шундай қилиб, δ-функцияни $f(y)$ функцияни $f(y_0)$ билан алмаштириш имконини берувчи интеграл шакл алмаштирувчи оператор сифатида қараш мумкин. δ-функция қуйидаги муносабатларни қаноатлантиради:

$$\delta(ay) = \delta(y)/a,$$

$$\delta(-y) = \delta(y), \quad y\,\delta(y) = 0,$$

$$f(y)\,\delta(y-a) = \frac{1}{2}\,[f(a-0) + f(a+0)]\,\,\delta(y-a),$$

$$\delta(y^2 - a^2) = \frac{1}{2a}\,[\delta(y-a) + \delta(y+a)], \qquad (24.15)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y-a)\,\,\delta(y-b)\,dy = \delta(a-b).$$

Бу ерда a ва b мусбат сонлар.

δ-функциянинг n-тартибли ҳосиласи қуйидаги муносабатдан топилади:

$$\delta^{(n)}(y) = (-1)^n\,\frac{\delta(y)}{y^n}. \qquad (24.16)$$

У ҳолда қуйидаги шакл алмаштириш ўринлидир:

$$\int_a^b f(y)\,\delta^{(n)}(y-y_0)\,dy = \begin{cases} 0, & \text{агар } y_0 < a \\ \frac{1}{2}(-1)^n\,f^{(n)}(y_0+0), & \text{агар } y_0 = a \\ \frac{1}{2}(-1)^n\,f^{(n)}(y_0-0), & \text{агар } y_0 = b \\ \frac{1}{2}(-1)^n\,[f^{(n)}(y_0+0) + f^{(n)}(y_0-0)], & \\ \text{агар } a < y_0 < b & \end{cases}$$

$$(24.17)$$

Масаланинг тўлиқлигини таъминлаш мақсадида қуйидаги муносабатларни — Фурье алмаштиришларни ҳам келтириб ўтамиз:

$$2\pi\,\delta(t-t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t_0}\,e^{i\omega t}\,\,d\omega,$$

$$2\pi\,\delta^{(n)}(t-t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} (i\omega)^n\,e^{-i\omega t_0}\,e^{i\omega t}\,\,d\omega, \qquad (24.18)$$

$$\frac{\pi}{2}\,[\delta(t-t_0) + \delta(t+t_0)] = \int_0^{\infty} \cos\omega t\cdot\cos\omega t_0\,d\omega.$$

III бобга доир масалалар

1. X ўқининг мусбат йўналишида эркин ҳаракатланаётган заррача учун вақтга боғлиқ Шредингер тенгламасининг умумий ечимини топинг.

$$\text{Жавоби: } \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(k_x) e^{i(k_x x - \omega t)} dk_x, \ \omega = \frac{\hbar k_x^2}{2m}.$$

2. Агар эркин заррача вақтнинг $t = 0$ бошланғич пайтида

$$\Psi(x, 0) = Ae^{-\frac{x^2}{a^2} + ik_0 x}$$

тўлқин функцияли холатда бўлса, ихтиёрий t пайтдаги эҳтимоллик зичлиги ва эҳтимоллик оқимининг зичлиги топилсин.

$$\text{Жавоби: } \rho(x, t) = \frac{|A|^2}{\varkappa^{1/2}} e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{\varkappa a^2}}$$

$$j(x, t) = \rho(x, t) \cdot \frac{\hbar k_0}{m\varkappa}\left(1 + \frac{\hbar t \cdot x}{ma^4 k_0}\right), \ \varkappa = 1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}.$$

3. m массали заррача бир ўлчовли симметрик

$$V(x) = \begin{cases} V_0, \text{ агар } x < -l \text{ ёки } x > l \\ 0, \text{ агар } -l < x < l \end{cases}$$

потенциал чуқурда ҳаракатланади. $E < V_0$ ҳол учун энергиянинг хусусий қийматларини аниқловчи тенгламани топинг.

$$\text{Жавоби: } kl = n\pi - 2 \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}, \ k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

4. Даври $l = a + b$ га тенг бўлган

$$V(x) = \begin{cases} V_0, \text{ агар } nl - b \leqslant x \leqslant nl \\ 0, \text{ агар } nl \leqslant x \leqslant nl + a \end{cases}$$

бир ўлчовли даврий потенциал майдонда ҳаракатланаётган заррача энергетик спектрини аниқловчи тенгламани топинг.

$$\text{Жавоби: } \cos \varkappa_0 a \operatorname{ch} \varkappa b + \frac{\varkappa^2 - \varkappa_0^2}{2\varkappa\varkappa_0} \sin \varkappa_0 a \cdot \operatorname{sh} \varkappa b = \cos kl, \ \varkappa_0^2 = 2mE\hbar^{-2},$$
$$\varkappa^2 = 2m(V_0 - E)\hbar^{-2}.$$

5. Қуйидаги операторларнинг вақт бўйича ўзгаришини ифодаловчи тенгликларни исбот қилинг:

а) $\frac{d\,(\widehat{x^2})}{dt} = \frac{1}{m}(x\hat{p}_x + \hat{p}_x x);$

б) $\frac{d\,(\widehat{xp_x})}{dt} = \frac{\hat{p}_x^2}{m} - x\frac{\partial V}{\partial x};$

в) $\frac{d(\hat{p}_x^2)}{dt} = -\hat{p}_x \frac{\partial V}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x}\hat{p}_x;$

г) $\frac{d\hat{L}_z}{dt} = -x\frac{\partial V}{\partial y} + y\frac{\partial V}{\partial x}.$

6. Шредингер тенгламасидан фойдаланиб энергия учун

$$(\partial W/\partial t) + \operatorname{div}\vec{S} = 0$$

узлуксизлик (сақланиш қонуни) тенгламасини ҳосил қилинг ва энергия зичлиги W, Умов-Пойнтинг вектори $\vec{S}$ лар учун квант ифодаларни топинг.

Жавоби: $W = \frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\Psi^* \cdot \Psi + \Psi^*\nabla\Psi).$

$$\vec{S} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\nabla\Psi + \frac{\partial\Psi}{\partial t}\cdot\nabla\Psi^*\right).$$

7. Импульс моменти $\vec{M} = \vec{r}\times\vec{p}$ ва куч моменти $\vec{\mathcal{M}} = \vec{r}\times\vec{F}$ орасидаги классик боғланиш

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \vec{\mathcal{M}}$$

бу катталикларнинг квантомеханик ўртача қийматлари учун ҳам ўринли бўлишини исботланг.

8. Шредингер тенгламасидан $\hbar\to 0$ чегаравий ҳолда Гамильтон — Якоби

$$\frac{\partial S}{\partial t} = (\nabla S)^2 + V$$

тенгламаси келиб чиқишини кўрсатинг. ($S(\vec{r}, t)$) — таъсир функцияси.

IV БОБ. СИММЕТРИЯ ВА САҚЛАНИШ ҚОНУНЛАРИ

Кўпгина ҳолларда физик системанинг симметрияси — ҳар хил фазовий алмаштиришларга нисбатан инвариант (ўзгармас) лиги масалани соддалаштиришга олиб келади ва унинг ечимларини ойдинлаштиради.

Квант механикасида симметрия назарияси квант ҳолатларини ўхшаш гуруҳларга ажратиш ва тўлқин функцияларининг трансформацион хусусиятларига қараб масалани соддалаштириш имконини беради.

Система симметриясини эътиборга олиш ҳар хил ҳолатлар ўртасидаги оптик ўтишларнинг «рухсат этилган» ёки «тақиқланган»лик шартларини олдиндан кўра билишга, кўпгина ҳолларда квант ўтишлар матрица элементларининг нолга тенг ёки нолдан фарқли эканлигини ажратиш имконини беради.

Шуниси қизиқарлики, сақланиш қонунлари фазовий ёки вақтга нисбатан олинган симметрия мулоҳазаларидан аниқланиши мумкин. Масалан, импульснинг сақланиш қонуни фазонинг бир жинслилигидан келиб чиқса, энергиянинг сақланиш қонуни вақтнинг бир жинслиги билан, боғлиқдир.

25- §. СИММЕТРИЯ ВА ГРУППАЛАР НАЗАРИЯСИНИНГ ЭЛЕМЕНТЛАРИ

Симметрия сўзи юнонча сўз бўлиб луғавий мазмуни «ўлчовдош» маъносини англатади. Бироқ система (атом ёки молекула) нинг симметрияси дейилганда системани уз-ўзига айлантирувчи ортогонал алмаштиришлар мавжуд деб тушунамиз.

Системани ўз-ўзига устма-уст туширувчи жамики фазовий алмаштиришлар тўплами унинг тўла симметриясини ташкил этади. Бундай алмаштиришларни

$$\vec{r}' = g\vec{r} \tag{25.1}$$

каби белгилайлик. Бунда (25.1) ифода «симметрия элементи таъсирида $\vec{r}$ координата $\vec{r}'$ ҳолатига ўтади» деб ўқилади.

Келгусида биз фақат ортогонал — ихтиёрий икки нуқта орасидаги масофани ўзгартирмовчи алмаштиришларни эътиборга оламиз, холос:

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = |\vec{r}\,'_1 - \vec{r}\,'_2| \quad (\vec{r}\,'_1 = g\vec{r}_1, \quad \vec{r}\,'_2 = g\,\vec{r}_2). \tag{25.2}$$

Бундай (ортогонал) алмаштиришларда тўғри чизиқ — тўғри чизиққа, текислик — текисликка, тўғри бурчак — тўғри бурчакка алмашади, яъни шаклан ўзгаришсиз қолади. Ортогонал алмаштиришлар қуйидагича ифодаланади.

$$r'_i = \sum_j R_{ij}(g)\, r_j. \tag{25.3}$$

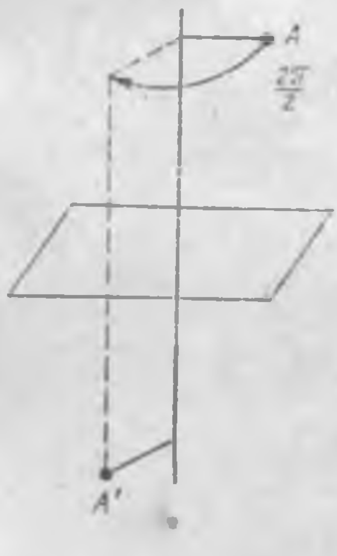
Бунда $i, j = x, y, z$; R_{ij} — $\hat{R}$ (унитар) ҳақиқий матрица элементлари: $(\hat{R}\hat{R}^{-1})_{ij} = \sum_k R_{ik} R^{-1}_{kj} = \sum_k R_{ik} R_{jk} = \delta_{ij}$ шартни қаноатлантиради, δ_{ij} — Кронекер белгиси.

Қуйидаги элементар фазовий алмаштиришларни келтириб ўтамиз.

1. Маълум ўққа нисбатан системанинг φ бурчакка бурилиши. Системани $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ ($n = 1, 2, 3, \ldots$) бурчакка бураш операцияси C_n билан белгиланади ва бурилиш ўқи n-тартибли симметрия ўқи дейилади. Масалан, C_2 симметрия элементининг системага таъсири уни $2\pi/2 = 180°$ га ўз-ўзига устма-уст туширган ҳолда иккинчи тартибли симметрия ўқи атрофида буришдан иборат. Бунда системанинг C_2 ўқида ётувчи нуқталарининг ҳолати ўзгаришсиз қолади.

2. Текисликда кўзгули акслантириш. Бу элемент таъсири остида система маълум текисликка нисбатан инвариант кўзгули аксланади. Масалан, системани горизонтал текисликка нисбатан кўзгули акслантириш δ_h, вертикал текисликка нисбатан эса — σ_v каби белгиланади.

Система кўзгули акслантирилганда қайси текисликка нисбатан ўз-ўзига мос келса, ўша текислик симметрия текислиги дейилади ва системанинг бу текисликда ётган нуқталари ҳолати ҳам ўзгаришсиз қолади. Битта текисликка нисбатан системанинг икки каррали кўзгули акси уни аввалги ҳолатига қайтаради. Бу айний ўзгартиришдир, яъни $\sigma_h \sigma_h = \sigma_h^2 = e$ ёки $\sigma_v \sigma_v = \sigma_v^2 = e$. Одатда айний — бирлик ўзгартириш e каби белгиланади.



25.1-расм. n-тартибли кўзгули бурилиш симметрия элементининг A нуқтага таъсири.

3. Кўзгули бурилиш. Агар система бир вақтнинг ўзида n-тартибли симметрик ўққа нисбатан $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ бурчакка бурилиб, сўнгра текисликка нисбатан кўзгули акслантирилса ва бунда у ўз-ўзига устма-уст тушса, бу икки ўзгартириш биргаликда кўзгули бурилиш деб аталади. 25.1-расмдан кўринадики, бундай алмаштириш n жуфт сон бўлганидагина янги симметрия элементи бўла олади. Агар n бирга тенг бўлса, $n = 1$ каррали бундай ўзгартириш оддий акснинг ўзи бўлиб қолади, чунки бунда бурилиш бурчаги $2\pi = 360^\circ$ га тенг бўлади ва бир текисликка нисбатан тоқ сонли акс оддий аксдан иборат бўлиб қолади.

Агар симметрия текислиги горизонтал бўлса, n-тартибли кўзгули бурилиш алмаштириши $S_n = \sigma_h C_n = C_n \sigma_h$ каби белгиланади. Масалан, кўзгули бурилиш ўзгартиришининг хусусий ҳоли $S_2 = C_2 \sigma_h = \sigma_h C_2$. Системани бирор ўқ атрофида 180° га буриш ва унга тик бўлган текисликка нисбатан кўзгули акслантириш операцияларидан иборат бўлган мураккаб ўзгартиришни инверсия дейилади.* Бунда системанинг ихтиёрий танланган нуқтаси, унинг кўзгули бурилиш ўзгартиришида ҳосил бўлган ўрни, симметрия ўқи ва симметрия текислиги кесишган нуқта бир тўғри чизиқда ётади.

Система симметрияси элементларининг тўплами ўзига хос хусусиятларга эга бўлиб, симметрия элементларининг бирортаси ҳам иштирок этмаслиги системанинг бирор симметрияси йўқлигидан далолат беради.

Системага ҳар бир симметрия элементини қўллаганда унинг структураси инвариантлигича қолгани каби, икки ёки ундан ортиқ симметриявий алмаштиришлар кетма-кет таъсир этганда ҳам система структураси фазовий инвариантлигича қолади. Охирги айний фазовий ўзгартиришни кўп босқичда эмас, балки бир алмаштириш билан ҳам амалга ошириш мумкин. Демак, кетма-кет қўлланган ёки ундан ортиқ симметрия элементлари шу тўпламнинг бошқа битта элементини ташкил этади.

Симметрия элементларининг тўпламида айний (бирлик) элементи ҳам бор. Бу элемент таъсирида система ўз ҳолатини ўзгартирмайди (ихтиёрий сонни бирга кўпайтирганда қиймат ўзгармаганидек).

Системага бирорта ортогонал алмаштириш таъсир эттирилганда система ўз-ўзига алмашса, бунга тескари алмаштириш таъсирида ҳам система ўз-ўзига алмашади. Демак, симметрия элементлари тўпламида ҳар бир элементга тескариси ҳам мавжуд бўлиб, у ҳам шу тўпламга киради **.

Агар системага унинг симметрияси тўпламидан ихтиёрий элементи таъсир эттирилса, у ўзи эгаллаган фа-

---

* Элементар ячейкаси симметрия марказига эга бўлган кристаллар инверсия марказли, акс ҳолда инверсия маркази бўлмаган кристаллар дейилади. Биринчи типдаги кристалларга Ge, Si кабилар, иккинчисига GaAs, InSb ярим ўтказгичлар мисол бўла олади.

** Геометрияда агар g элемент G тўпламнинг элементи ҳисобланса, $g \in G$ каби белгиланади. $g \notin G$ белгилаш элемент тўпламга кирмаслигини англатади.

зонинг турли нуқта ёки йўналишларида аввалги физик хусусиятларини сақлайди.

Юқорида қайд этилган хусусиятларни ўзида мужассамлаштирган симметриявий ўзгартиришларнинг тўплами симметрия группасини ташкил этади. Биз юқорида симметриявий ўзгартиришларни геометрик (фазовий) алмаштиришлар сифатида қарадик. Аслида, масалан, квант механикасида, симметриявий ўзгартиришларни қаралаётган система гамильтонианининг инвариантлигини таъминловчи симметриявий координатлар ўзгариши сифатида қараш мумкин. Бунда ихтиёрий система симметрия группасининг элементи таъсирида ўз-ўзига алмашганлиги учун координаталар системасининг бундай ўзгариши қаралаётган система учун Шредингер тенгламасини ўзгаришсиз қолдиради. Келгусида Шредингер тенгламасининг инвариантлигини таъминловчи симметриявий ўзгартиришлар тўғрисида фикр юритамиз. Шундай қилиб, симметриявий ўзгартиришлар — группалар асоси билан танишиб ўтамиз.

Математикада группа дейилганда қуйидаги талабларни қаноатлантирувчи a_1, a_2, a_3, . . . элементларнинг чекли (чекли группа) ёки чексиз (чексиз группа) тўплами тушунилади:

1. Ихтиёрий икки a_1 ва a_2 элементларининг маълум тартибдаги кўпайтмаси $a_1 \cdot a_2$ шу группанинг учинчи элементига мос келади, яъни $a_1 \cdot a_2 = a_3$, агар $a_1 \in G$, $a_2 \in G$ бўлса, у ҳолда $a_3 \in G$. Симметриявий алмаштиришларга нисбатан дастлаб кўпайтмадаги ўнгдан биринчи элементига мос келувчи операция бажарилади. Умуман олганда $a_1 \cdot a_2 \neq a_2 \cdot a_1$. Агар ихтиёрий танлачган икки a_1 ва a_2 элементлари учун $a_1 \cdot a_2 = a_2 \cdot a_1$ бажарилса, бундай группа коммутацияланувчи ёки абель группаси дейилади.

2. G группада шундай битта, фақат битта элемент борки, у бирлик ёки айний (e) элемент дейилиб, ихтиёрий элемент ($a \in G$) учун $ea = ae = a$ тенгликни қаноатлантиради.

3. G тўпламнинг ихтиёрий элементи $a \in G$ учун унга тескари бўлгач $a^{-1} \in G$ элементи бўлиб, $a \cdot a^{-1} = e$ тенглик доимо ўринлидир. Бундан $(a \cdot b \cdot c \cdot d)^{-1} = d^{-1}c^{-1}b^{-1}a^{-1}$ эканини исботлаш қийин эмас, албатта.

4. Битта группага қарашли бир нечта элементларнинг кўпайтмаси учун ассоциатив қонуният ўринлидир. Масалан, $(a_1 \cdot a_2) \cdot a_3 = a_1 \cdot (a_2 \cdot a_3)$.

Чекли группалардаги элементлар сони группанинг тартиби (h) дейилади.

Одатда группа туташ элементлар бўйича синфларга булиб ўрганилади. Агар $a_1, a_2 \in G$ элементлар ўзаро $a_1 = a_3 a_2 a_3^{-1}$ $(a_3 \in G)$ боғланган бўлса, у ҳолда a_1 ва a_2 туташ элементлардир. Масалан, тенг томонли учбурчакнинг симметрия группаси уч хил туташ элементлар синфидан иборат: айний элемент; медианалардан ўтувчи ва учбурчак текислигига тик ҳолда медианалар кесишган нуқта орқали ўтувчи ўқлар атрофида (биринчи ҳолда $\pi = 180°$ га, иккинчи ҳолда $2\pi/3 = 120°$; $240°$ га) буриш; учбурчак текислигига тик бўлиб, уни медианалари орқали кесиб ўтувчи текисликларга нисбатан акслантириш.

Айтайлик, n элементли $(a_1, a_2, \ldots)$ A ва m элементли $(b_1, b_2, \ldots)$ B группалари берилган бўлиб, уларнинг элементлари бир-биридан фарқли ва ўзаро коммутациялашган бўлсин. У ҳолда A группанинг ҳар бир элементи a_i ни B группанинг ҳар бир элементи b_j га кўпайтирсак, $n \cdot m$ элементли бошқа группа ҳосил бўлади ва у A ва B группаларнинг тўғри кўпайтмаси ($A \times B$ каби белгиланади) сифатида топилади.

Агар чекли ўлчамли системаларга симметрия группасининг ихтиёрий элементини таъсир этсак, ҳеч бўлмаса, унинг бирор нуқтаси ҳаракатсиз қолса, бундай симметрия группаси *нуқтавий группа* дейилади. Табиатига қараб нуқтавий группалар чекли ёки чексиз бўлиши мумкин. Масалан, сферанинг ўз марказидан ўтувчи ўқи атрофида ихтиёрий бурчакка буришга нисбатан симметрия группаси C_∞ каби белгиланади ва у аксиал ёки сферик симметрия группаси деб номланади.

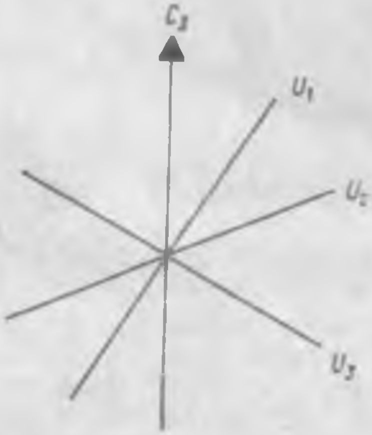
Сфера марказидан ўтувчи хоҳлаган ўқ атрофида ихтиёрий бурчакка буришлар ва марказдан ўтувчи ихтиёрий текисликда акслантириш тўла сферик симметрия группасини ташкил этади.

Мисол тариқасида нуқтали группаларнинг айримларини кўриб ўтайлик.

1. C_n *группаси* n-тартибли ўқ атрофида буришлар группаси. Унинг айрим олинган ҳар бир n элементлари айрим бир синфни ташкил этади. C_1 группаси фақат биргина айний (e) элементдангина иборат.

2. S_{2n} *группаси* $2n$-тартибли кўзгули бурилиш ўқи атрофида буришлар группаси. Хусусан, S_2 икки: $S_2^2 = e$ ва $S_2 = \sigma_n C_2 = i$ элементлардан ташкил топган.

3. D_n *группаси* — симметрия элементлари сифатида n-тартибли симметрия ўқига ва унга тик ҳолда бир нуқтада ўзаро $2\pi/n$ бурчак остида кесиб ўтувчи n та иккинчи тартибли ўқларга эга (25.2-расм).



25.2-расм. 3- тартибли симметрия ўқини унга перпендикуляр ҳолда бир нуқтада (ўзаро $\varphi_3 = \frac{\pi}{3} = 60°$ бурчак остида) кесиб ўтувчи учта 2- тартибли симметрия ўқлари (D_3 группаси)

26-§. ҲАРАКАТ ИНТЕГРАЛЛАРИ ВА СИММЕТРИЯ БЎЙИЧА ҚЎЙИЛАДИГАН ШАРТЛАР

Юқорида қайд этилган мулоҳазалар фақат вақтнинг маълум моментига нисбатан юритилди. Бу эса қаралаётган динамик системанинг динамик катталиклари ва ҳолатлари ўртасидаги муносабатлар маълум бир вақт моментига нисбатан топилди демакдир. Худди шундай муносабатларнинг хоҳлаган вақт моментлари ўртасидаги боғланишини аниқлаш алоҳида аҳамият касб этади. Бу ҳол системанинг ҳаракат интегралларнни топиш масаласига олиб келади. Бунинг учун ихтиёрий $\hat{L}$ операторнинг ўртача қиймати

$$<\hat{L}> = \int d^3\vec{r}\,\Psi^*\hat{L}\Psi \tag{26.1}$$

нинг вақт ўтиши билан ўзгаришини кўрайлик. (26.1) дан

$$\frac{d}{dt}<\hat{L}> = \int\left\{\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\hat{L}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}\Psi + \Psi^*\hat{L}\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\}d^3\vec{r}. \tag{26.2}$$

(26.2) ифодада $\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}^*\Psi^*$, $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = +\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}\Psi$ ва $\hat{\mathcal{H}}^* = \hat{\mathcal{H}}$ муносабатларни эътиборга олсак, уни қайта қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$\frac{d}{dt}<\hat{L}> = \int d^3\vec{r}\,\Psi^*\left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial t} + \left[\hat{L}, \hat{\mathcal{H}}\right]\right)\Psi. \tag{26.3}$$

Бунда $[\hat{L}, \hat{\mathcal{H}}] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{L}\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{L})$ — $\hat{L}$ ва $\hat{\mathcal{H}}$ операторларининг коммутатори. Ушбу коммутаторни кўпинча, Пуассоннинг квант қавси деб ҳам юритилади. Агар

$$\frac{d<\widehat{L}>}{dt} = \int d^3\vec{r}\, \Psi^* \frac{d\widehat{L}}{dt}\Psi \tag{26.4}$$

муносабат ўринли деб ҳисобласак, у ҳолда (26.3) дан

$$\frac{d\widehat{L}}{dt} = \frac{\partial\widehat{L}}{\partial t} + [\widehat{L}, \widehat{\mathscr{H}}] \tag{26.5}$$

муносабатни оламиз. Бундан агар $\widehat{L}$ оператор вақтга ошкора боғлиқ бўлмаса $\left(\frac{\partial\widehat{L}}{\partial t} = 0\right)$ ва $\widehat{\mathscr{H}}$ билан коммутацияланса $(\widehat{L\mathscr{H}} - \widehat{\mathscr{H}L} = 0)$, у ҳолда $\widehat{L}$ операторнинг ўртача қиймати вақт ўтиши билан ўз қийматини ўзгартирмайди. Бундай катталиклар ҳолат ҳаракати тенгламасининг интеграли ёки, оддийгина, ҳаракат интеграли деб юритилади. Агар $\widehat{L}$ операторини координата $(\vec{r})$ ва импульс $\widehat{\vec{p}}$ операторлари билан ўрин алмаштирсак,

$$\frac{\partial\vec{r}}{\partial t} = [\vec{r}, \widehat{\mathscr{H}}],\ \frac{\partial\widehat{\vec{p}}}{\partial t} = [\vec{p}\,\widehat{\mathscr{H}}] \tag{26.6}$$

Гамильтоннинг квант тенгламасига эга бўламиз. (26.6) кўринишдаги операторли тенгламалар классик механикадаги Гамильтон тенгламасига ўхшаш. Классик механикадаги каби Гамильтоннинг квант тенгламаларидан бири (чапдаги) координата ва импульс операторлари ўртасидаги муносабатни аниқлаш имконини берса, иккинчиси импульс операторининг вақтга боғлиқ ўзгаришини ифодалайди.

Келгуси матнларда ҳаракат интеграли ёрдамида айрим катталикларнинг сақланиш қонунлари ёритилган. Бироқ шуни қайд этиш мумкинки, ҳаракат интеграли ва унинг ёрдамида аниқланган сақланиш қонунларининг мавжудлиги қаралаётган системанинг симметрияси билан ҳам боғлиқ. Фазо ва вақтнинг бир жинслигига нисбатан ҳаракат интегралларига айрим матнлар ажратилганлиги сабабидан бу ерда ҳаракат интегралини фазовий жуфтликка нисбатан кўриб ўтамиз. Айтайлик, $\widehat{\vec{r}} \to -\vec{r}$ (фазовий инверсия) алмаштиришда $\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$ тенглик ўринли бўлсин. Агар потенциал энергия оператори $U(\vec{r}) = U(-\vec{r})$ каби танланса (масалан, сферик майдонларда), у ҳолда $\mathcal{H}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}, \vec{r}\right) = \mathcal{H}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}, -\vec{r}\right)$.

Шундай қилиб, $\vec{r} \to -\vec{r}$ шакл алмаштиришда

$$\widehat{\mathcal{H}}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}, \vec{r}\right)\psi(\vec{r}) = \widehat{\mathcal{H}}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}, -\vec{r}\right)\psi(-\vec{r}) \quad (26.7)$$

муносабатни оламиз*. Бу эса дастлабки вақт моментида системанинг тўлқин функциясининг жуфтлиги (симметрик $\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$ ёки антисимметрик $\psi(\vec{r}) = -\psi(-\vec{r})$) қандай танланган бўлса, вақтнинг ўтиши билан у шундайлигича қолади демакдир. Шундай қилиб, масаланинг табиатига боғлиқ ҳолда унинг жуфтлиги (системанинг симметрия хусусияти) ҳам ҳаракат интеграли бўла олади.

27-§. КУЧЛАР МАЙДОНИНИНГ ФАЗОВИЙ СИММЕТРИЯСИ. ИМПУЛЬС ВА ИМПУЛЬС МОМЕНТИНИНГ САҚЛАНИШ ҚОНУНИ

Классик физикадаги импульс ва импульс моментининг сақланиш қонунлари қаралаётган фазонинг симметрияси билан аниқланади: импульснинг сақланиш қонуни фазонинг ёки уни акслантирувчиси координаталар системасининг силжиш (трансляция)га нисбатан симметриявийлиги билан боғланган, импульс моментининг сақланиш қонуни эса координаталар системасининг маълум ўқига нисбатан буришга нисбатан симметриявийлиги билан боғлиқ. Бу ҳолдан сезилиб турибдики, юқорида қайд этилган сақланиш қонунларининг аниқ координаталар системасига нисбатан мавжудлиги қаралаётган системанинг симметриявий хусусиятлари ҳақида фикр юритишга имкон беради.

Келгусида симметриявий алмаштириш дейилганда координаталар системасининг силжиши (трансляцияси), олдиндан танланган ўққа нисбатан (аксиал) ёки ихтиёрий ўқларга нисбатан маълум бурчакка буриш ва симметрия текисликларига нисбатан акслантириш каби алмаштиришлар тушунилиши

---

* (26.7) ни фазовий инверсия ($\vec{r} \to -\vec{r}$) га нисбатан жуфтликнинг сақланиш қонуни деб аташ мумкин. Бироқ бу қонун табиатнинг умумий қонуни бўла олмайди. Махсус масалаларда, масалан, атом ядросининг K^-, π^-, μ^--мезонли емирилишларида, янги фотогальваник ҳодисаларда бу қонундан четга чиқиш кузатилган,

мумкин. Бундай симметриявий алмаштиришлар гуруҳини бирор, масалан, $\hat{G}$ оператор билан белгилайлик. $\hat{G}$ xOy текислигига нисбатан акслантириш, яъни z ни $(-z)$ га алмаштиришга айнан бўлган симметриявий алмаштиришни билдирса, $f(x, y, z)$ функция бундай алмаштиришдан сўнг $f(x, y, -z)$ функциясига алмашади. Бунга

$$\hat{G} f(x, y, z) = f(x, y, -z) \tag{27.1}$$

каби математик кўриниш берайлик.

(27.1) ифодадан кўриниб турибдики, $\hat{G}$ операторга нисбатан тескари бўлган $\hat{G}^{-1}$ оператор билан $f(x, y, -z)$ функцияга таъсир этсак, $f(x, y, z)$ га, яъни олдинги кўринишга қайтади. Демак,

$$\hat{G}^{-1}\hat{G} = 1. \tag{27.2}$$

$\hat{G}$ операторга нисбатан эрмит қўшма $\hat{G}^{+}$ оператори системанинг гамильтониани $\hat{\mathscr{H}}$ билан коммутацияланганлиги шартидан, яъни

$$[\hat{\mathscr{H}}\hat{G}^{+}] = 0 \tag{27.3}$$

тенгликдан $\hat{G}^{+} = \hat{G}^{-1}$ эканлиги келиб чиқади. Шунингдек, $\hat{G}$ оператор таъсирида тўлқин функциялар учун нормаланганлик шарти ҳам ўзгармайди. Шу сабабдан симметриявий алмаштириш оператори $\hat{G}$ ни унитар оператор (V бобга қаранг) деб номланади.

Фикримизнинг тўлалигини таъминлаш мақсадида қайд этамизки, $\hat{G}$, $\hat{G}^{+}$, $\hat{G}+\hat{G}^{+}$ ва $\hat{G}-\hat{G}^{+}$ симметрия операторлари ҳам системанинг гамильтониани $\hat{\mathscr{H}}$ билан коммутацияланишини эътиборга олсак, бу операторлар вақтга боғлиқмаслиги келиб чиқади. Шунингдек, $\hat{G}+\hat{G}^{+}$ ва $\hat{G}-\hat{G}^{+}$ операторлар эрмит қўшма ва ўзаро коммутациялашуви операторлардир. Шу сабабдан уларнинг хусусий функциялари ортогонал ва умумий бўлиб, $\hat{G}$ операторнинг ҳам хусусий функцияси бўла олади. Демак, юқорида қайд этилган тўрт операторларнинг тўлқин функцияларини гамильтониан (энергия операторининг) хусусий функцияси билан мос келадиган қилиб танлаш мумкин.

Энди импульс ва импульс моментининг сақланиш қонунларини кўриш мақсадида ташқи кучлар таъсирида бўлмаган заррачаларнинг ёпиқ системасини кўриб ўтайлик. Бу системани ихтиёрий, жуда кичик масофа ($\delta \vec{r}$) га параллел кўчиришда фазо бир жинслигича қолади деб тасаввур этамиз. Шу сабабли системанинг гамильтониани бу ҳолда ўзгаришсиз қолади.

Айтайлик, $\psi(\vec{r})$ тўлқин функциясига $\delta \vec{r}$ масофага силжитувчи $\widehat{G}_1$ оператор таъсир этсин, яъни

$$\widehat{G}_1 \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) \tag{27.4}$$

ёки

$$\psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) \approx \psi(\vec{r}) + \delta \vec{r}\, \vec{\nabla} \psi = (1 + \delta \vec{r}\, \vec{\nabla})\, \psi(\vec{r}). \tag{27.5}$$

(27.5) ифодада иккинчи ва ундан катта тартибли кичик ҳадлар эътиборга олинмади. (27.4) ва (27.5) ифодалардан

$$\widehat{G}_1 = 1 + \delta \vec{r}\, \vec{\nabla}. \tag{27.6}$$

Юқорида қайд этганимиздек, $\widehat{G}_1$ оператор таъсирида система гамильтонианининг ўзгармаслиги $\widehat{G}_1$ оператор билан $\widehat{\mathscr{H}} \psi(\vec{r})$ га таъсир этиш $\widehat{G}_1 \psi(\vec{r})$ га тўла энергия оператори $\widehat{\mathscr{H}}$ билан таъсир этиш билан эквивалентдир, яъни

$$\widehat{G}_1 \widehat{\mathscr{H}} \psi(\vec{r}) = \widehat{\mathscr{H}} \widehat{G}_1 \psi(\vec{r}), \tag{27.7}$$

ёки

$$\widehat{G}_1 \widehat{\mathscr{H}} - \widehat{\mathscr{H}} \widehat{G} = [\widehat{G}_1, \widehat{\mathscr{H}}] = 0. \tag{27.8}$$

Бундан

$$[\widehat{\vec{p}}\, \widehat{\mathscr{H}}] = 0, \tag{27.9}$$

яъни (26.1) га мувофиқ импульснинг сақланиш қонуни келиб чиқади. (27.9) да импульс оператори $\widehat{\vec{p}}$ нинг

$$\widehat{\vec{p}} = i\hbar \vec{\Delta} \tag{27.10}$$

ифодасини эътиборга олдик. У ҳолда

$$\widehat{G}_1 = 1 + \delta \vec{r}\, \vec{\nabla} = 1 + \frac{i}{\hbar}\, \delta \vec{r}\, \widehat{\vec{p}} \approx e^{\frac{i}{\hbar} \widehat{\vec{p}}\, \delta \vec{r}}. \tag{27.11}$$

Энди ички кучлар ёки марказий симметрияли, яъни ихтиёрий йўналишлари эквивалент бўлган фазодаги ташқи кучлар таъсирида бўлган системани кўрайлик.

Система ташқи куч манбаи билан устма-уст тушувчи марказга нисбатан ротация (буриш) оператори $\widehat{G}_2$ таъсирида бўлсин. Бунда тўлқин функцияси $\psi(\vec{r})$ $\widehat{G}_2$ таъсирида $\psi(\vec{r}+\delta\vec{r})$ кўринишга келади:

$$\widehat{G}_2\,\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r}+\delta\vec{r}), \tag{27.12}$$

$\delta\vec{r}=[\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{r}]$ — бу жуда кичик бурчакка буришда заррача радиус вектори $\vec{r}$ нинг ўзгариши, $\delta\vec{\varphi}=\vec{n}\,\delta\varphi$, $\vec{n}$—буриш амалга оширилаётган ўқ бўйлаб йўналган бирлик вектор. $\varphi(\vec{r}+\delta\vec{r})$ ни қаторга ёйиб, нолинчи ва биринчи тартибли кичик ҳадлар билан чегаралансак, (22.12) ни қайта қуйидагича ёзамиз:

$$\widehat{G}_2\,\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r}+\delta\vec{r})\approx[1+[\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{r}]\,\vec{\nabla}]\,\psi(\vec{r}). \tag{27.13}$$

Бундан кичик бурчакка буриш оператори $\widehat{G}_2$ нинг кўриниши

$$\widehat{G}_2=1+[\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{r}]\,\vec{\nabla}=1+\frac{i}{\hbar}\,[\vec{r},\,\widehat{\vec{p}}]\,\delta\vec{\varphi}=1+\frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\,\widehat{\vec{M}} \tag{27.14}$$

эканини топамиз. $\widehat{\vec{M}}=[\vec{r},\,\widehat{\vec{p}}]$ импульс моменти операторидир.

Агар система кичик бурчакка бурилса, унинг гамильтонияни ўзгармай қолишини эътиборга олсак, $\widehat{\mathscr{H}}$ ва $\widehat{G}_2$ операторлар ўзаро коммутатив операторлар экани келиб чиқади. Масала шартига кўра $\Delta\vec{\varphi}$ доимий вектордир, шу сабабдан

$$\widehat{\vec{M}}\widehat{\mathscr{H}}-\widehat{\mathscr{H}}\,\widehat{\vec{M}}=[\widehat{\vec{M}},\,\widehat{\mathscr{H}}]=0. \tag{27.15}$$

Бу эса (26.1) га асосан импульс моментининг сақланиш қонунига олиб келади.

28-§. ВАҚТ ИНВЕРСИЯСИ. ЭНЕРГИЯНИНГ САҚЛАНИШ ҚОНУНИ

Маълумки, классик физиканинг тенгламалари вақтга нисбатан (жуфт) иккинчи тартибли бўлганлигидан улар t ни $(-t)$ алмаштиришга нисбатан инвариантдир.

Квант механикасида эса ўзгача ҳол: ностационар Шредингер тенгламаси вақтга нисбатан биринчи тартибли, лекин атом ва унга нисбатан катта ўлчамли системаларнинг гамильтонианлари* эса вақт инверсиясига нисбатан инвариантдир.

Классик физикада координаталар системаси t ни $(-t)$ га алмаштиришда ўзгаришсиз қолади, аммо импульс (шунингдек, ҳаракат миқдори моменти) бу ҳолда ўз ишорасини ўзгартиради. Бундай ўзгартиришга олиб келувчи операторни квант механикасида вақт инверсияси оператори $(\widehat{K})$ дейилади. Айтайлик, $\Psi(\vec{r}, t)$ функцияси Шредингернинг ностационар тенгламаси

$$\widehat{\mathscr{H}}\,\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\,\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \qquad (28.1)$$

нинг ечими бўлсин. У ҳолда агар $\widehat{\mathscr{H}}$ вақтга боғлиқ бўлмаса ва ҳақиқий қийматли бўлса, (28.1) ифоданинг ҳар иккала томонини комплекс боғласак ($\Psi \to \Psi^*$, $i \to -i$)

$$\widehat{\mathscr{H}}\,\Psi^*(\vec{r}, -t) = -i\hbar\,\frac{\partial\Psi^*(\vec{r}, -t)}{\partial t} = i\hbar\,\frac{\partial\Psi^*(\vec{r}, -t)}{\partial(-t)}. \qquad (28.2)$$

Охирги ифодадан кўринаяптики, $\Psi(\vec{r}, -t)$ функцияси ҳам $\widehat{\mathscr{H}}$ нинг хусусий функцияси бўла олади ва «вақтнинг орқага қайтиши» да зарраचанинг ҳаракатини ифодалайди. Демак, $\Psi(\vec{r}, t)$ тўлқин пакетининг маълум бир йўналишидаги ҳаракатига мос келса $\Psi^*(\vec{r}, -t)$ эса бу йўналишга тескари бўлган тўлқин пакетининг ҳаракатини характерлайди. Демак, $\widehat{K}\Psi = \Psi^*(-t)$. Бундан $K^2 = 1$ ёки $K = \pm 1$; «+» ишора ҳақиқий, «—» ишораси эса мавҳум тўлқин функцияларга мос келади. Масалан,

$$\widehat{K}\,\widehat{\vec{p}}\,\widehat{K} = \widehat{K}(-i\hbar\vec{\nabla})\widehat{K} = -\widehat{\vec{p}}, \quad \widehat{K}\,\vec{r}\,\widehat{K} = +\vec{r}.$$

Келгусида вақт инверсияси операторига нисбатан инвариант қолувчи системалардаги сақланиш қонуни сифатида энергиянинг сақланиш қонунини кўрайлик. Бунинг учун ихтиёрий $\widehat{A}$ операторининг вақтга нисбатан тўла ҳосиласи Пуассоннинг квант қавси орқали ифодаланганлигини эътиборга оламиз:

---

* Ташқи магнит майдони бўлмаганда.

$$\frac{d\widehat{A}}{dt}=\frac{d\widehat{A}}{\partial t}+[\widehat{\mathcal{H}}\,\widehat{A}]. \qquad (28.3).$$

Бунда Пуассоннинг квант қавси

$$[\widehat{\mathcal{H}}\,\widehat{A}]=\frac{i}{\hbar}\,(\widehat{\mathcal{H}}\,\widehat{A}-\widehat{A}\,\widehat{\mathcal{H}}), \qquad (28.4)$$

$\widehat{\mathcal{H}}$ — системанинг гамильтониани. $\widehat{A}$ оператори вақтга ошкора боғланмаган бўлса, (28.3) қуйидаги кўринишга келади

$$\frac{d\widehat{A}}{dt}=[\widehat{\mathcal{H}}\,\widehat{A}]. \qquad (28.5)$$

Бу ифодадан кўриняптики, ихтиёрий $\widehat{A}$ динамик оператор вақтга ошкора боғлиқ бўлмаса ва системанинг тўла энергия оператори — гамильтониани билан коммутациялашган бўлса, у вақтга нисбатан доимий қолади. Бу хулоса эса $\widehat{A}$ оператори характерлайдиган катталикнинг сақланиш қонунидан далолат беради.

Заррачаларига ички кучларгина таъсир этаётган берк системани кўрайлик. Агар вақтни бир жинсли деб қарасак системанинг ҳаракат ҳолати вақтнинг ҳисоб бошини танлашга нисбатан инвариант (ўзгармас) қолади. У ҳолда (28.3) да $\widehat{A}=\widehat{\mathcal{H}}$ деб қарасак ва гамильтониаңнинг ўзи билан ўзи коммутацияланишига эътибор қилсак,

$$\frac{d\widehat{\mathcal{H}}}{dt}=[\widehat{\mathcal{H}}\,\widehat{\mathcal{H}}]=0. \qquad (28.6)$$

Бундан $\widehat{\mathcal{H}}=\mathrm{const}$, яъни система тўла энергиясининг сақланиш қонунини оламиз.

Система энергияси ўртача қийматининг ўзгариши

$$\frac{d<E>}{dt}=\frac{i}{\hbar}\int\Psi^*\,[\widehat{\mathcal{H}}\,\widehat{\mathcal{H}}]\,\Psi\,d^3\vec{r}=0 \qquad (28.7)$$

ёки

$$<E>=\mathrm{const}. \qquad (28.8)$$

Бундан берк система ўртача энергиясининг сақланиши келиб чиқади.

IV бобга доир масалалар

1. Кристалл панжара 5-тартибли айланиш симметрия ўқига эга бўлолмаслигини исботланг.

2. Куб ўқларининг симметрия группасидаги элементларни кўрсатинг.

Жавоби: e, 8 (C_3, C_3^2), 3 ($C_2 = C_4^2$), 6C_2, 6 (C_4, C_4^3) — жами 24 та.

3. N та заррачадан ташкил топган квант системада $\vec{r}_n \to \vec{r}_n = -\vec{r}_n$ координата алмаштиришга нисбатан ҳаракат интегралини текширинг.

4. Чексиз бир жинсли цилиндрик майдонда жойлашган N та спинсиз заррачалар системаси учун механик ҳаракат интегралларини кўрсатинг.

Жавоби: E — энергия, p_z — ва M_z импульс ва импульс моментининг проекцияси, I — тўлқин функциянинг жуфтлиги.

5. Агар $\hat{f}_1$ ва $\hat{f}_2$ эрмит операторлар бирор системасининг ҳаракат интеграллари бўлса, у ҳолда $\hat{g} = \hat{f}_1 \cdot \hat{f}_2 + \hat{f}_2 \cdot \hat{f}_1$ ва $\hat{g}' = [\hat{f}_1, \hat{f}_2] = \hat{f}_1 \cdot \hat{f}_2 - \hat{f}_2 \cdot \hat{f}_1$ операторлар хам ҳаракат интеграллари бўлишини исботланг.

6. Агар $\hat{p}_x$ ва $\hat{M}_z$ бирор система учун ҳаракат интеграли бўлса, у ҳолда p_y хам ҳаракат интеграли эканлигини исботланг.

7. Бир жинсли кучлар майдонидаги заррача учун

$$\hat{\vec{G}} = \hat{\vec{p}} - \vec{F}_0 t$$

ҳаракат интеграли бўлишини кўрсатинг ($\vec{F}_0$ — заррачага таъсир этувчи куч).

V БОБ

ТАСАВВУРЛАР НАЗАРИЯСИ

Квант механикаси кенг физик жараёнларни ўз бағрига олганлиги сабабидан танланган бир усул маълум гуруҳ масалалар учун анчайин қулай бўлса, бошқаси учун ноқулай ҳисобланиши мумкин.

Масалан, шундай ҳол бўлиши мумкинки, Гильберт фазосидаги абстракт вектор ҳолатлар («бра», «кет»— Дирак белгилашлари) ва динамик катталикларга мос келувчи операторлар ўрнига ҳолатларни маълум қонуниятлар билан тўлдирувчи сонлар киритишга тўғри келади.

Шу сабабдан квант механикасида конкрет масалага қараб аниқ тасаввур киритилиб, унга нисбатан ҳисоб-китоб юритилади. Буни эътиборга олган ҳолда келгусида квант механикасида қўлланиладиган бир неча тасаввурларни келтирамиз.

29- §. КВАНТ СИСТЕМАЛАРИНИ ТУРЛИЧА ТАСАВВУРЛАРДА ИФОДАЛАШ

Юқорида қайд қилинганидек, квант механикасида бир вақтнинг ўзида бир неча классик катталикларнинг (масалан, $\vec{r}$ ва $\vec{p}$, E ва t — вақт) бир ансамбль (физик система) учун мавжудлиги мантиққа тўғри келмайди.

Шу сабабдан бир вақтнинг ўзида бир неча классик (механик) катталикларни ўлчайдиган асбоб квант механикаси доирасида учрамайди. Демак, квант механикасида ўлчов асбоблари аниқ синфларга бўлинган бўлади. Масалан, «координата» ($\vec{r}$) ни ўлчайдиган асбоблар бир вақтнинг ўзида қаралаётган системанинг «импульси» ($\vec{p}$) ни ўлчай олмайди, яъни квант механикасида ўлчов асбоблари ёки «$\vec{p}$» тасаввурда, ёки «$\vec{r}$» тасаввурда «ишлай олади» холос.

Бироқ квант механикасида, асосан, физик системанинг ҳолати унинг тўлқин функцияси $\Psi(\vec{r})$ билан характерланади, яъни $\Psi(\vec{r})$ координаталар функцияси холос. Бу ҳолда система ҳолатини импульснинггина функциясидан иборат бўлган тўлқин функцияси $\Psi(\vec{p})$ билан ёритиш мумкин эмасмикан, деган савол туғилади. Бу саволни бошқача (математикалаштириб) «$\vec{r}$» тасаввурда берилган $\Psi(\vec{r})$ функцияни: «$\vec{p}$» тасаввурда ($\Psi(\vec{p})$) ёзиш мумкинми? — деб ифодалаш мумкин.

Бунинг учун «$\vec{r}$» — тасаввурда берилган $\Psi(\vec{r})$ функцияни импульс операторининг хусусий функцияси $\Psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ бўйича қаторга ёямиз:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int C(\vec{p}, t) \cdot \psi_{\vec{p}}(\vec{r})\, d^3 \vec{p}, \tag{29.1}$$

$$C(\vec{p}, t) = \int \Psi(\vec{r}, t) \cdot \psi^*_{\vec{p}}(\vec{r})\, d^3 \vec{r}. \tag{29.2}$$

Бундан кўринаяптики, агар $C(\vec{p}, t)$ амплитуданинг кўринишини билсак $\Psi(\vec{r}, t)$ нинг кўринишини ҳам топиш мумкин, яъни $C(\vec{p}, t)$ нинг берилиши $\Psi(\vec{r}, t)$ аналитик кўринишини тўла-тўкис топиш имконини беради. Шу боисдан $\vec{p}$ аргументли $C(\vec{p}, t)$ функцияни «$\vec{p}$»—тасаввурдаги тўлқин функциясн дейиш мумкин. Шу маънода (29.1) «$\vec{p}$» тасаввурдан «$\vec{r}$» тасаввурга ўтиш, (29.2) эса «$\vec{r}$» тасаввурдан «$\vec{p}$» — тасаввурига ўтиш ифодасидир. Демак, $\Psi(\vec{r}, t)$ ва $C(\vec{p}, t)$ функциялари (квант физикаси нуқтаи назаридан) битта ҳолатгагина қарашлидир.

Юқоридагиларга ўхшаш мустақил параметр сифатида зарранинг энергияси (E) ни ҳам олиш мумкин. Айтайлик E энергия E_1, E_2, E_3, . . . , E_n дискрет спектрдан ташкил топган бўлсин. У ҳолда $\Psi(\vec{r}, t)$ тўлқин функциясини ҳар бир дискрет энергетик сатҳ тўлқин функциялари $\Psi_1(\vec{r})$, $\Psi_2(\vec{r})$, . . . , $\Psi_n(\vec{r})$ бўйича қуйидагича ёйиш мумкин:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t)\,\psi_n(\vec{r}), \tag{29.3}$$

$$C_n(t) = \int \Psi(\vec{r}, t)\,\psi_n^*(\vec{r})\,d^3\vec{r}. \tag{29.3'}$$

Бу ҳолда ҳам $C_n(t)$ нинг берилиши тўлиғича $\Psi(\vec{r}, t)$ тўлқин функциясини аниқлай олади, яъни $C_n(t)$ функциялар E_1, E_2, . . . , E_n дискрет спектрли ҳолатни «E» («энергия) тасаввурида тўлиғича ёрита олади. Бундай маънода (29.3) «E» тасаввурдаги тўлқин функциясини «$\vec{r}$» тасаввурига ўтиш ифодасидир. (29.3) эса бунга тескари шакл алмаштириш ифодасидир. Масалан, $\hat{L}$ операторини $\hat{L}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}, \vec{r}\right)$ кўринишда олиб, ихтиёрий $\psi(\vec{r})$ га таъсир этсак, уни $\varphi(\vec{r})$ га алмаштиради, яъни

$$\varphi(\vec{r}) = \hat{L}\,\psi(\vec{r}) \tag{29.4}$$

деб тасаввур этганмиз. Бу $\hat{L}$ операторини «$\vec{r}$» тасаввурда ифодалашдир.

Қиймати (E_n) дискрет спектрли бўлган «E» тасаввурда $\hat{L}$ операторни ифодалаш учун φ ва ψ функцияларни

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_n C_n\,\psi_n(\vec{r}), \tag{29.5}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n d_n\psi_n(\vec{r}) \tag{29.6}$$

кўринишда қаторга ёямиз. (29.5) ва (29.6) ифодалардаги C_n ва d_n мос ҳолда $\psi(\vec{r})$ ва $\psi(\vec{r})$ функцияларнинг «E» тасаввурда ифодалашидир. (29.5), (29.6) ларни эътиборга олиб (29.4) ни қайта

$$\sum_n d_n \psi_n(\vec{r}) = \sum_n C_n \widehat{L} \psi_n(\vec{r}) \qquad (29.7)$$

кўринишда ёзамиз ва ҳар иккала тарафини $\Psi^*_m(\vec{r})$ га кўпайтириб дискрет спектрли ҳолат тўлқин функцияларнинг ортонормаланганлик шартини эсда сақлаб

$$d_m = \sum_n L_{mn} C_n \qquad (29.8)$$

ифодага эга бўламиз. Бунда

$$L_{mn} = \int \psi^*_m(\vec{r}) \cdot \widehat{L}\, \psi_n(\vec{r})\, d\vec{r}. \qquad (29.9)$$

Агар L_{mn} катталиклар тузилган бўлса, (29.8) га асосланиб d_m амплитудани топиш мумкин. Шунинг учун L_{mn} ни «E» тасаввурда ёзилган $\widehat{L}$ оператор сифатида қараш мумкин.

30-§. ОПЕРАТОРЛАРНИ ТУРЛИЧА ТАСАВВУРЛАШ

Операторларни ҳар хил тасаввурларда ифодалаш оддий квант назариясидан қаттиқ жисмлар физикаси назариясигача қўлланилади. Кўпгина амалий масалалар ҳал этилишида Гамильтон операторини иккига бўлиш қулайдир:

а) эркин заррачалар ҳаракатини ифодаловчи $(\widehat{\mathscr{H}}_0)$ ҳади. Гамильтоннинг бу ҳадига нисбатан тузилган Шредингер тенгламасининг ечими аниқ деб ҳисобланади;

б) бир хил ёки ҳар хил заррачаларнинг ўзаро таъсирини ўз ичига олувчи ҳади $(\widehat{\mathscr{H}}_1)$.

Бу иккала ҳолга нисбатан Шредингер тенгламасининг кўриниши қуйидагича бўлади:

$$(\widehat{\mathscr{H}}_0 + \widehat{\mathscr{H}}_1)\, \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \dot{\Psi}(r, t), \qquad (30.1)$$

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

Шредингер тасаввури деб номланувчи бу тасаввурда операторлар вақтга боғлиқ бўлмай, ҳолат (тўлқин) функциялари t вақтга боғлиқ бўлади. Қуйидаги Шредингер тенгламаси

$$\mathscr{H}_0 \Psi_0 (\vec{r}, t) = i\hbar \dot{\Psi}_0(\vec{r}, t) \qquad (30.2)$$

нинг ечими, шартга кўра, маълум деб ҳисоблаймиз ва уни

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = \hat{U}(t) \cdot \Psi_0 (\vec{r}, 0) \qquad (30.3)$$

кўринишда қайта ёзамиз. Бунда $\hat{U}(t)$ эркин заррачаларнинг дастлабки ҳолати функцияси $\Psi(\vec{r}, 0)$ га таъсир этиб, изланаётган $\Psi_0(\vec{r}, t)$ функцияни ҳосил қилувчи оператор. Уни экспоненциал функция кўринишда қуйидагича тасвирлаш мумкин:

$$\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathscr{H}}_0 t} \qquad (30.4)$$

Бундай муносабатнинг мавжудлигини (30.4) ни (30.3) га қўйиб ва уни вақт бўйича дифференциаллаб, ҳосил бўлган ифодани (30.2) га қўйиб исботлаш осон. $\hat{\mathscr{H}}$ оператор ўзи билан ўзи коммутациялашгани учун, шу сабабдан $\hat{\mathscr{H}}$ (30.4) билан ҳам коммутациялашгандир. Шунинг учун $\hat{\mathscr{H}}$ оператор бўлишидан қатъи назар бу усул ўринлидир.

(30.1) тенгламанинг ечими $\Psi(\vec{r}, t)$ ни (30.3) га ўхшаш

$$\Psi = \hat{U}\,\overline{\Psi} \qquad (30.5)$$

кўринишда излаймиз. Кўриниб турибдики, бу усул оддий дифференциал тенгламаларни ечишда қўлланиладиган «доимийлар вариацияси» га ўхшашдир.

(30.5) ни (30.1) га қўйиб, вақт бўйича дифференциаллашни ҳам амалга ошириб, қуйидаги тенгликка эга бўламиз:

$$\hat{\mathscr{H}}_0 \hat{U}\,\overline{\Psi} + \hat{\mathscr{H}}_1 \hat{U}\,\overline{\Psi} = \hat{\mathscr{H}}_0 \hat{U}\,\overline{\Psi} + i\hbar \hat{U}\,\dot{\overline{\Psi}}$$

ёки

$$\hat{\mathscr{H}}_1 \hat{U}\,\overline{\Psi} = i\hbar \hat{U}\,\dot{\overline{\Psi}}. \qquad (30.6)$$

Бу тенгликнинг ҳар иккала томонига $\hat{U}^{-1}$ ни кўпайтириб,

$$\hat{U}^{-1}\hat{\mathscr{H}}_1 \hat{U}\,\overline{\Psi} = i\hbar\,\dot{\overline{\Psi}}$$

ёки

$$\hat{\overline{\mathscr{H}}}_1\,\overline{\Psi} = i\hbar\,\dot{\overline{\Psi}} \qquad (30.7)$$

га эга бўламиз. Бунда

$$\widehat{\widehat{\mathscr{H}}}_1 = \widehat{U}_1^{-1}\widehat{\mathscr{H}}_1\widehat{U} = e^{\frac{i\mathscr{H}_0 t}{\hbar}}\,\widehat{\mathscr{H}}_1 e^{-\frac{i\mathscr{H}_0 t}{\hbar}} \qquad (30.8)$$

Бундан кўринаяптики, $\widehat{\mathscr{H}}_1$ операторида $\widehat{\mathscr{H}}_0$ экспонентанинг даражасида учрайди. Лекин бу ҳол масалани мураккаблаштирмайди, айниқса турли хил зррачаларнинг, масалан электрон ва фотоннинг ўзаро таъсирини ўрганаётганда анчайин қўл келади.

Шредингер тасаввуридан ўзгача усулда ҳам Шредингер тенгламаси

$$\widehat{\mathscr{H}}\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\dot{\Psi}(\vec{r}, t) \qquad (30.9)$$

ни ечиш учун тўлқин функциясини

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\,\Psi(\vec{r}, 0) \qquad (30.10)$$

кўринишда излаймиз $(\widehat{\mathscr{H}} = \widehat{\mathscr{H}}_0 + \widehat{\mathscr{H}}_1)$. Бу Гейзенберг тасаввури деб юритилади. Кўриниб турибдики, экспоненциал функция кўринишдаги операторни аниқ кўринишини излаш масалани мураккаблаштиради. Аммо Гейзенберг усули ностационар Шредингер тенгламасини ечишнинг янги усулини яратади. Квант назариясида кўпинча берилган оператор $(\vec{A})$ нинг ўртача қиймати

$$<\Psi|\vec{A}|\Psi> \qquad (30.11)$$

ни топиш талаб этилади. Бундай ҳолларда Гейзенберг тасаввурини қўллаш кўпгина қулайликлар туғдиради. У ҳолда (30.10) ни эътиборга олиб (30.11) ни қайта

$$< \Psi(\vec{r}, 0)e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\Big|\widehat{A}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\,\Psi(r, 0)> = <\Psi(\vec{r}, 0)\times$$
$$\times\Big|e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\widehat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\Big|\Psi(\vec{r}, 0)> = <\Psi(\vec{r}, 0)|\widehat{\widehat{A}}|\Psi(\vec{r}, 0)> \qquad (30.12)$$

кўринишда ёзиб оламиз. Шундай қилиб, $\widehat{A}$ операторнинг $\Psi(\vec{r}, t)$ функцияларга нисбатан ҳисобланадиган ўртача қиймати $\Psi(\vec{r}, 0)$ функцияларга нисбатан

$$\widehat{\widehat{A}} = e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\,\widehat{A}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathscr{H}t} \qquad (30.13)$$

операторнинг ўртача қийматини ҳисоблашга олиб келади. Демак, Гейзенберг тасаввурида, Шредингер тасаввуридан фарқли ўлароқ, операторлар вақтга боғлангач бўлиб, ҳолат функциялари, аксинча, вақтнинг кечишини ҳис қилмайди.

Квант назариясида, одатда, қаралаётган физик масаланинг дастлабки ҳолат функцияси Ψ_0 олдиндан берилган бўлади. Шу сабабдан масала $\widehat{\widehat{A}}$ операторнинг вақтга қандай боғлиқлигини топишга ўтади. (30.13) ни вақтга нисбатан дифференциаллаб $\widehat{\widehat{A}}$ операторни қаноатлантирувчи қуйидаги тенгламага эга бўламиз:

$$\frac{d\widehat{\widehat{A}}(\vec{r}\,,\,t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left(\widehat{\mathscr{H}}\widehat{\widehat{A}} - \widehat{\widehat{A}}\widehat{\mathscr{H}}\right) = \frac{i}{\hbar}\left[\widehat{\mathscr{H}}, \widehat{\widehat{A}}\right]. \qquad (30.14)$$

Шундай қилиб, бу тенглама Гейзенберг тасаввурида ёзилган операторларнинг ҳаракат (вақтга нисбатан эволюцион) тенгламасига эга бўламиз. Бунда $\widehat{A}$ оператор вақтга ошкор кўринишда боғлиқмас деб ҳисобладик. $[\widehat{\mathscr{H}}, \widehat{\widehat{A}}]$ коммутаторни ҳисоблаш учун ўрин алмашиниш муносабатлари керак. Бундай муносабатларни Шредингер тасаввуридан Гейзенберг тасаввурига ўтиш учун топамиз. Бунинг учун $[\widehat{A}, \widehat{B}] = \widehat{C}$ ($\widehat{A}$, $\widehat{B}$, $\widehat{C}$—операторлар) коммутаторининг чап тарафини $e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}$ га, ўнг тарафини $e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}$ га кўпайтириб ва оператор кўпайтмаси ўртасида $1 = e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}$ эканини эътиборга олиб, қуйидагича қайта ёзамиз:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}[\widehat{A}, \widehat{B}]e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t} = e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}(\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\,\widehat{A})e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t} =$$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\widehat{A}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\widehat{B}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t} - e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\widehat{B}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t}\,\times$$

$$\times e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t} A e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathscr{H}}t} = \widehat{\widehat{A}}\widehat{\widehat{B}} - \widehat{\widehat{B}}\,\widehat{\widehat{A}} = [\widehat{\widehat{A}}, \widehat{\widehat{B}}] = \widehat{\widehat{C}}. \tag{30.15}$$

(30.15) дан $[\widehat{\widehat{A}}, \widehat{\widehat{B}}] = \widehat{\widehat{C}}$ эканини топамиз.

Худди шунингдек, Шредингер тасаввурндаги $[\widehat{A}, \widehat{B}]_+ = (\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A}) = C$ муносабат Гейзенберг тасаввурида $[\widehat{\widehat{A}}, \widehat{\widehat{B}}]_+ = \widehat{\widehat{C}}$ кўринишга келади.

31-§. МАТРИЦАЛАР ВА УЛАР УСТИДА АМАЛЛАР

Қуйидагича жадвал кўринишида ёзилган ҳақиқий ёки мавҳум сонлар тўплами

$$\widehat{A} = \begin{bmatrix} a_{11}a_{12}a_{13} & \ldots & a_{1m} \\ a_{21}a_{22}a_{23} & \ldots & a_{2m} \\ \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot\ \cdot & \cdot \\ \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot\ \cdot & \cdot \\ a_{n1}a_{n2}a_{n3} & \ldots & a_{nm} \end{bmatrix} = \| a_{ij} \| \tag{31.1}$$

$n \times m$ ўлчамли матрица дейилади. Бунда $a_{11}, a_{21}, \ldots, a_{n1}$ — устун, $a_{11}, a_{12}, \ldots a_{1m}$ — сатр элементлари дейилади, a_{nm} — матрицанинг n-устун, m-сатрда жойлашган элементидир. Масалан, бир устунли $n \times 1$ ўлчамли «вектор» матрица

$$\widehat{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \tag{31.2}$$

кўринишда бўлади. Қуйида матрицалар устида амалларни қисқача исботсиз келтириб ўтамиз.

1. Матрицаларни қўшиш:

$$(\widehat{A} + \widehat{B} + \widehat{C})_{mn} = a_{mn} + b_{mn} + c_{mn}. \tag{31.3}$$

b_{mn}, c_{mn} — мос ҳолда $\widehat{B}$ ва $\widehat{C}$ матрицаларининг элементлари.

2. Матрицаларни кўпайтириш:

$$\widehat{A} \times \widehat{B} = \widehat{C}. \tag{31.4}$$

Бунда $C_{mn} = \sum_l a_{ml}\, b_{ln}$, яъни $\widehat{A}$ матрицанинг (31.4) устунлар сони, $\hat{B}$ матрицанинг сатрлар сонига тенг бўлиши зарурий шартдир:

$$\underset{m}{n\,\boxed{\hat{A}}} \times \underset{p}{\boxed{\quad\hat{B}\quad}}\,m = \underset{p}{\boxed{\quad\hat{C}\quad}}\,n$$

Бу ерда шуни эслатмоқчимизки, икки квадрат ($n = m$) матрицалар кўпайтмасининг детерминанти ҳар бир матрицалар айрим ҳисобланган детерминантларининг кўпайтмасига тенг:

$$\det(\hat{A} \times \hat{B}) = \det \hat{A} \cdot \det \hat{B}.$$

Диагонал элементлари ($a_{nn} = 1,\ n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$) фақатгина 1 га тенг, нодиагоналлари эса ноль бўлган матрица бирлик матрица дейилади:

$$\hat{1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \|\delta_{mn}\| \tag{31.5}$$

(δ_{mn} — Кронекер символи)

3. $\hat{A} \times \hat{A}^{-1} = \hat{1}$ тенгликни қаноатлантурувчи $\hat{A}^{-1}$ матрицани $\hat{A}$ нинг тескари матрицаси дейилади ва у $\det \hat{A} \neq 0$ ҳолдагина мавжуд. Кейинги ҳисоблашларда $\det \hat{A}^{-1} = 1/\det \hat{A}$, муносабатлар қўл келиб қолиши мумкин:

4. Шпур (изи): $\mathrm{Sp}\,\hat{A} = \sum\limits_{m} a_{mm}$. (31.6)

Масалан: $\mathrm{Sp}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Sp}(\hat{B}\hat{C}\hat{A}) = \mathrm{Sp}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) \neq \mathrm{Sp}(\hat{B}\hat{A}\hat{C})$.

5. Комплекс туташ матрица учун:

$$(\hat{A}^{*})_{mn} = a^{*}_{mn}, \tag{31.7а}$$

транспонирланган матрица учун эса

$$(\hat{\tilde{A}})_{mn} = a_{nm}, \tag{31.7б}$$

эрмит қўшма матрица учун

$$(\hat{A}^{+})_{mn} = (\hat{\tilde{A}}^{*})_{mn} = a^{*}_{nm} \tag{31.7в}$$

муносабатлар ўринлидир.

6. Махсус матрицалар қаноатлантирувчи муносабатлар 31.1-жадвалда келтирилган.

31.1-жадвал

№	Матрицанинг номи	Асосий характерловчи муносабат
1	Ҳақиқий	$\hat{A} = \hat{A}^*$
2	Унитар	$\hat{A} = (\hat{A}^{-1})^+$; хусусий қиймати-нинг модули бирга тенг
3	Эрмит	$\hat{A} = \hat{A}^+$; хусусий қиймати ҳақи-қий
4	Ортогонал	$\hat{A} = (\hat{\tilde{A}})^{-1}$
5	Симметрик	$\hat{A} = \hat{\tilde{A}}$
6	Диагонал	$a_{mn} = a_{nn}\delta_{mn}$
7	Скаляр	$a_{mn} = a_0\delta_{mn}$
8	Ўзига хос (сингуляр)	$\det\hat{A} = 0$

Энди матрицаларни оддий кўпайтиришдан фарқ қилувчи тўғри кўпайтиришни кўриб ўтайлик ва уни «⊗» каби белгилайлик. У қуйидагича аниқланади:

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})_{mn,\,kl} = a_{mk} \cdot b_{nl}, \qquad (31.8\,a)$$

$$\mathrm{Sp}(\hat{A} \otimes \hat{B}) = \mathrm{Sp}\,\hat{A} \cdot \mathrm{Sp}\hat{B}. \qquad (31.8\,б)$$

Агар $\hat{A}$ матрица $(m \times n)$ $\hat{B}$ — $(k \times l)$ ўлчамли бўлса, $\hat{A} \otimes \otimes \hat{B}$ матрица $(mk \times kl)$ ўлчамли бўлади. Устун ва сатрлари тартиблашган икки хонали сонлар билан номерланади.

Матрицаларнинг тўғри қўшилишини $\oplus$ каби белгиласак,

$$\hat{A} \oplus \hat{B} = \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{0} \\ \hat{B} & \hat{B} \end{pmatrix}. \qquad (31.9)$$

Бунда $\hat{0}$ — ҳамма элементлари нолдан иборат бўлган ноль матрицадир. Бунда

$$\mathrm{Sp}(\hat{A} + \hat{B}) = \mathrm{Sp}\,\hat{A} + \mathrm{Sp}\,\hat{B}.$$

Мисол тариқасида Паули матрицалари

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (31.10)$$

ёрдамида аниқланган қуйидаги матрицалар

$$\hat{C}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_x + i\,\hat{\sigma}_y\right), \hat{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x - i\,\hat{\sigma}_y) \quad (31.11)$$

алгебрасини кўриб ўтайлик:

$$\hat{C}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x + i\,\hat{\sigma}_y).$$

$$\hat{C}\hat{C} + \hat{C}\hat{C} = 2\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{C}^+\hat{C} + \hat{C}^+\hat{C} = 2\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (31.12)$$

$$\hat{C}^+\hat{C} + \hat{C}^+\hat{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1}.$$

Икки қаторли матрицалар $\hat{C}$ ва $\hat{C}^+$ нинг қуйидаги

$$|1> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |0> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (31.13)$$

матрицаларга таъсирини кўриб ўтайлик.

$$\hat{C}^+|0> = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1>,$$

$$\hat{C}|1> = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |0>. \quad (31.14)$$

Агар шартли равишда $|1>$ заррачанинг «бор», $|0>$ эса унинг «йўқ» ҳолатини характерлайдиган матрицалар сифатида қарасак, у ҳолда $\hat{C}^+$ — заррачанинг «туғилиш», $\hat{C}$ — эса уни «йўқотиш» матрицаларидир. У ҳолда

$$\hat{C}^+|1> = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (31.15)$$

ифодадан $\hat{C}^+$ ва $\hat{C}$ матрицалар бир ҳолатда биттадан ортиқ заррача бўлмайдиган системалар (фермионлар) учун хос эканлиги келиб чиқади.

32-§. МАТРИЦА КЎРИНИШИДАГИ ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИ

Тўлқин функцияси $\Psi(\vec{r}, t)$ ни қуйидаги қатор

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n \Psi_n(\vec{r}, t) \tag{32.1}$$

кўринишда ёзиш мумкин бўлса,

$$\Psi(\vec{r}, t) = [C_1, C_2, \ldots, C_n] \cdot \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \Psi_n \end{bmatrix} = \hat{C}\hat{\Psi} \tag{32.2}$$

икки матрица кўпайтмаси, аниқроғи бир устунли $\hat{\Psi}$ ва бир қаторли $\hat{C}$ матрицалар кўпайтмаси сифатида ёзиш мумкин. Бунда Ψ_n — $\hat{\Psi}$ матрицанинг n-элементи, яъни $\Psi_n = \Psi_n(\vec{r}, t)$ функцияси система гамильтонианининг n-хусусий қийматига мос келувчи ҳолат функциясидир. Соддалик учун турлаииш (айниш) йўқ ва стационар ҳолатларнинг хусусий тўлқин функциялари ортонормалангаи деб ҳисоблаймиз.

Ихтиёрий $\hat{L}$ операторининг ўртача қиймати

$$<\hat{L}> = \int d^3\vec{r}\; \psi^*(\vec{r})\, \hat{L}\, \psi(\vec{r}) \tag{32.3}$$

ни (32.1) ни эътиборга олиб

$$<\hat{L}> = \sum_m \sum_n C_m^* C_n \int d^3\vec{r}\; \psi_m^*\, \hat{L}\, \psi_n = \sum_m \sum_n C_m^* C_n L_{mn} \tag{32.4}$$

кўринишда ёзиш мумкин. Агар $\hat{L}$ оператори матрица кўринишида берилган бўлса ва ҳолат функциясини (32.2) кўринишида танласак, у ҳолда (32.4) $\hat{L}$ оператор ўртача қийматининг матрица кўринишидаги ифодаси бўлади. Айтайлик, $\hat{L} = \hat{L}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{r}}, \vec{r}\right)$ бўлсин. У ҳолда $\hat{L}\psi = L\psi$ эканини ва бу тенгликни (32.1) ни эътиборга олиб қайта ёзсак ва чап томондан ψ_m^* га кўпайтириб $\vec{r}$ бўйича интеграллаcак

$$\sum_n C_n \int d^3\vec{r}\; \psi_m^*\, \hat{L}\, \psi_n = L \sum_n C_n \int d^3\vec{r}\; \psi_m^* \psi_n = LC_m$$

ёки

$$\sum_n C_n L_{mn} = LC_m. \qquad (32.5)$$

$\widehat{L}$ операторининг хусусий қийматлари L_{mn} қатнашган ва C_n номаълум ҳолат функциясига нисбатан ёзилган чексиз, чизиқли ва бир жинсли тенгламалар системасига эга бўламиз. Агар $\widehat{L} = \widehat{\mathscr{H}}$ бўлса, (32.5) Шредингернинг матрица кўринишдаги стационар тенгламасини ифодалайди.

Олий алгебра курсидан маълумки, бир жинсли чизиқли тенгламалар системасининг ечими номаълумлар коэффициентлари (L_{11}, L_{12}, . . .) дан тузилган детерминант нолга тенг бўлгандагина аниқ қийматга эга, яъни (32.5) га нисбатан

$$\begin{Vmatrix} L_{11}-L & L_{12} & L_{13} & \dots & L_{1n} \\ L_{21} & L_{22}-L & L_{23} & \dots & L_{2n} \\ L_{31} & L_{32} & L_{33}-L & \dots & L_{3n} \\ L_{n1} & L_{n2} & L_{n3} & \dots & L_{nn}-L \end{Vmatrix} = 0 \qquad (32.6)$$

Табиийки, бу детерминант чексиз қатор ва устунга эга бўлганлиги учун трансцендентдир. Шу боисдан L нинг аниқланиши мумкин бўлган қиймати (32.6) тенгламанинг тартиби билан чегараланган. Масалан, (32.6) икки ўлчамли бўлса, L иккита, уч ўлчамли бўлса, L учта қийматга эга бўлиши мумкин ва ҳ. к. Шуни ҳам ёдда тутмоқ кераккки, (32.6) тенгламанинг ҳақиқий қийматлари (илдизлари) гина физик маънога эга. Агар L нинг қийматлари L_ν аниқ бўлса, $\widehat{C}$ матрица элементлари

$$C_1 = C_1(L_\nu),\ C_2 = C_2(L_\nu),\ \dots,\ C_n = C_n(L_\nu) \qquad (32.7)$$

ни ҳам аниқлаш унчалик мураккаб эмас. Топилган C_1, C_2, . . . C_n лар $\widehat{L} = \widehat{L}\left(-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\vec{r}}, \vec{r}\right)$ операторининг хусусий функциялари бўла олади. Шу тариқа топилган ва (32.1) кўринишда изланган тўлқин функцияси «r-тасаввурда»

$$\psi_\nu(\vec{r}) = \sum_n C_n(L_\nu)\psi_n(\vec{r}) \qquad (32.8)$$

каби ёзилади. Шундай қилиб,

$$L_{mn} = \int d^3\vec{r}\,\psi_m^*\,\widehat{L}\,\psi_n = \int d^3\vec{r}\,\psi_m^* L_n \psi_n = L_n\int d^3\vec{r}\,\psi_m^*\psi_n = \\ = L_n\sigma_{mn} \qquad (32.9)$$

га эга бўламиз. $\|\sigma_{mn}\|$ бирлик диагонал матрица эканини эътиборга олсак, (32.9) ифодадан қуйидаги хулосага келамиз: ихтиёрий катталик ўзининг хусусий тўлқин функциялари тасаввурнда диагонал матрица кўринишида ифодаланади.

33-§. УНИТАР АЛМАШТИРИШЛАР

Биз юқорида тўлқин функциясининг бир неча тасаввурларда ифодаланишини кўриб ўтдик. Тўлқин функцияси ёки чизиқли операторларни ихтиёрий танланган икки тасаввурдаги кўринишларидан бирини иккинчиси орқали ифодаламоқ учун унитар алмаштиришлар (унитар матрицалар, унитар операторлар) дан фойдаланилади.

Бунинг учун дискрет $(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ ва $(b_1, b_2, \ldots, b_n)$ хусусий қийматли иккита эрмит $\hat{A}$ ва $\hat{B}$ операторларни олайлик. $\hat{A}$ ва $\hat{B}$ ларнинг хусусий тўлқин функциялари мос ҳолда $U^{(1)}, U^{(2)}, \ldots, U^{(n)}$ ва $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \ldots, \psi^{(n)}$ бўлсин. $U^{(n)}$ ҳолат функциясини $\psi^{(m)}$ ҳолат функцияси бўйича қаторга ёйсак,

$$U^{(l)} = \sum_n \psi^{(n)} S_{nl}, \quad U^{(\nu)*} = \sum_m \psi^{(m)*} S^*_{m\nu} \tag{33.1}$$

бўлиб, бунда

$$S_{nl} = \int \psi^{(n)*} U^{(l)} d^3\vec{r}, \quad S^*_{m\nu} = \int \psi^{(m)} U^{(\nu)*} d^3\vec{r}. \tag{33.2}$$

Энди ихтиёрий $\hat{R}$ операторнинг бир $(\hat{A})$ тасаввурдан иккинчи $(\hat{B})$ тасаввурга ўтишда шакл ўзгаришини кўрайлик. Агар $\hat{R}$ нинг «$\hat{A}$ тасаввур» даги матрица элементи

$$R_{mn} = \int U^{(m)*} \hat{R}\, U^{(n)} d^3\vec{r}, \tag{33.3}$$

«$\hat{B}$- тасаввур» дагиси эса

$$R_{\nu l} = \int \psi^{(\nu)*} \hat{R}\, \psi^{(l)} d^3\vec{r} \tag{33.4}$$

бўлади. У ҳолда (33.1) ни эътиборга олиб, (33.3) ни қуйидагича қайта ёзиш мумкин:

$$R_{\nu l} = \sum_{m,n} S^*_{m\nu} R_{mn} S_{nl}. \tag{33.5}$$

S_{nl} ни $\widehat{S}$ нинг матрица элементи деб ҳисобласак, $\widehat{S}$ ва унга қўшма $\widehat{S}^+$ ($\widehat{S}^+ = \widehat{S}^*$) нинг матрица элементлари ўртасидаги $(\widehat{S}^+)_{mn} = \widehat{S}^*_{nm}$ боғланишни эътиборга олсак, (33.5) ифодадан

$$R_{\nu l} = \sum_{m,\ n} (S^+)_{\nu m} R_{mn} S_{nl} \qquad (33.6)$$

ёки матрица кўринишда

$$\widehat{R}' = \widehat{S}^+ \widehat{R}\, \widehat{S} \qquad (33.6\,a)$$

муносабатга эга бўламиз.

Охирги ифодадан $\widehat{S}$ ва $\widehat{S}^+$ матрицаларни $\widehat{R}$ операторнинг бир ($\widehat{A}$) тасаввурдан иккинчиси ($\widehat{B}$) га ўтишда шакл алмаштиришни қайд этувчи матрица сифатида қараш мумкинлиги келиб чиқади. (33.1) да биринчи тенгликнинг ҳар иккала тарафини $U^{(\nu)*}$ га, иккинчисини эса $U^{(l)}$ га кўпайтириб, натижани координаталар бўйича интеграллаб, интеграллашда тўлқин функцияларнинг ортонормалланганлик шартини эътиборга олсак,

$$\sum_{m,\ n} S^*_{m\nu} S_{nl} \delta_{mn} = \delta_{l\nu} \qquad (33.7)$$

келиб чиқади. Бундан

$$\sum_m S^+_{\nu m} S_{ml} = \delta_{l\nu} \qquad (33.8)$$

ёки матрица кўринишда

$$\widehat{S}^+ \widehat{S} = 1. \qquad (33.9)$$

$\psi^{(m)}$ ва $\psi^{(n)*}$ ларни мос ҳолда $U^{(l)}$ ва $U^{(\nu)*}$ лар бўйича қаторга ёйиб ва юқорида қайд этилган амалларни бажариб

$$\sum_m S_{lm} S^+_{mn} = \delta_{ln} \qquad (33.8\,a)$$

ёки

$$\widehat{S}\, \widehat{S}^+ = 1 \qquad (33.9\,a)$$

муносабатларни топиш қийин эмас. Одатда (33.9) ва (33.9*a*) муносабатларни қаноатлантирувчи $\widehat{S}$ матрицани *унитар матрица* деб юритилади. $\widehat{S}$ матрица ифодаловчи шакл алмаштиришни *унитар шакл алмаштириш* дейилади.

(33.9 *a*) дан $S^+ = \widehat{S}^{-1}$ экани келиб чиқади. Бундан унитар ва эрмит ($\widehat{S}^+ = \widehat{S}$) матрицалар ўзаро фарқли экани келиб чиқади.

Шундай қилиб, ихтиёрий битта физик катталикни бир эмас, балки бир-биридан унитар алмаштиришлар билан фарқланувчи операторлар тўплами кўринишда ифодалаш мумкин. Бундай (унитар алмаштиришларда инвариант қолувчи) операторларга: а) ўзаро қўшма ва чизиқли боғланган; б) коммутация муносабатини қаноатлантирувчи операторлар мисол бўла олади.

34-§. ДИРАК БЕЛГИЛАШЛАРИДА КВАНТ МЕХАНИКАСИ ТЕНГЛАМАЛАРИ

Квант механикасининг яратилиш тарихидан маълумки, дастлаб Гейзенберг, сўнгра Борн, Гейзенберг, Иордан (1925 й) «матрицавий механика» деб номланган, Шредингер (1925 й) эса «тўлқин механика» деб номланган квант механикасини яратди. Бу икки хил ном расмийлигини, ўзаро эквивалентлигини ва биридан-иккинчисига ҳеч қандай карама-қаршиликсиз ўтиш имконини Шредингер (1926 й) кўрсатиб ўтганди.

П. А. Дирак юқоридан фарқли ўлароқ квант механикасида ўта қисқа ва нафис белгилашлар киритди. У шундай «тасаввур» киритдики, унинг ёрдамида матрицавий ва тўлқин квант механикасининг умумийлиги келиб чиқади.

«Матрицавий механика» да физик системанинг ҳолатини матрица характерласа, «тўлқин» квант механикасида ҳолат тўлқин функция билан ифодаланади.

Дирак бу борада бошқача яқинлашди: ҳолат векторларининг абстракт фазосини киритиб квант механикасига «геометрик» тус берди. Бу маънода квант механикасидаги кўпгина ҳисоблашларда векторлар алгебрасининг усулларидан фойдаланиш имкони туғилади.

Дирак белгилашларида тўлқин функцияси $\Psi = |\Psi>$ каби белгиланиб, унга эрмит қўшма тўлқин функция эса $\Psi^+ = <\Psi|$ каби белгиланади. Шундай қилиб

$$<\Psi| = |\Psi>^+, \quad |\Psi> = <\Psi|^+ \qquad (34.1)$$

эканини топиш унчалик қийин эмас. (34.1) да шартли равишда $<\Psi|$ «бра» — вектор, $|\Psi>$ «кет» — вектор деб белгиланган. Масалан, $|\Psi> = |\Psi_1> + |\Psi_2>$, $<U| = <U_1| + <U_2|$ бўлса, у ҳолда $<U|\Psi> = (<U_1| + <U_2|)(|\Psi_1> + |\Psi_2>) = <U_1|\Psi_1> + <U_1|\Psi_2> + <U_2|\Psi_1> + <U_2|\Psi_2>$ бўлади.

Кўпинча Дирак тасаввурида белгилашларни янада соддалаштириш мақсадида бра ва кет векторларига тўлқин функциясининг индекси ёзилади: $|\Psi_1> = |1>$, $<\Psi_2| = <2|$. Тўлқин функцияларининг ортонормаланганлик шарти

$$\int d^3\vec{r}\,\Psi_i^*\,\Psi_j = <i|j> = \delta_{ij} \tag{34.2}$$

кўринишда ёзилади.

Дирак тасаввурини ойдинлаштириш учун ихтиёрий $\Psi_n = |n>$ тўлқин функциясини $\Psi_m = |m>$ тўлқин функциясига нисбатан қаторга ёйиш

$$\Psi_n = \sum_m C_{nm}\,\Psi_m \tag{34.3}$$

ни Дирак белгилашларида қайта ёзамиз

$$|n> = \sum_m |m><n|m>. \tag{34.4}$$

Дирак белгилашларида ностационар Шредингер тенгламаси

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}\,\Psi(\vec{r},t) \tag{34.5}$$

нинг кўриниши қуйидагича бўлади.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t> = \hat{\mathscr{H}}|t>. \tag{34.6}$$

Бунда $|t> = \Psi(\vec{r},t)$, $\hat{\mathscr{H}}$ — қаралаётган физик системанинг гамильтоннани.

V бобга доир масалалар

1. $\Psi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$ ва $\Psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\,e^{i\vec{p}_0\vec{r}}$ функцияларни импульслар тасаввурида ифодаланг.

Жавоби: $\varphi_{\vec{r}_0}(\vec{p}) = \frac{e^{i\vec{p}\vec{r}}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}$, $\varphi_{\vec{p}_0}(\vec{p}) = \delta(\vec{p}_0-\vec{p})$.

2. Фазовий инверсия $\hat{I}$ ва $\vec{a}$ векторга параллел кўчириш (трансляция) $\hat{T}_{\vec{a}}$ операторларининг импульслар тасаввуридаги кўринишини аниқланг.

Жавоби: $\hat{I}\,\varphi(\vec{p}) = \varphi(-\vec{p})$, $\hat{T}_{\vec{a}} = e^{i\vec{a}\vec{p}/\hbar}$

3. Икки унитар операторлар кўпайтмаси хам унитар оператор бўлишини исботланг.

4. Агар $\hat{F}$ эрмит оператор бўлса, у холда $\hat{G} = e^{i\hat{F}}$ унитар оператор эканлигини кўрсатинг.

5. $\hat{a}$ ва $\hat{a}'$ квадрат матрицалар унитар алмаштириш орқали боғланган $\hat{a}' = \hat{F}\hat{a}\hat{F}^{+}$. Бу матрицаларнинг излари ($Sp\,\hat{a}$, $Sp\,\hat{a}'$) ва детерминантлари бир хил эканлигини исбот қилинг.

6. $\hat{G} = e^{i\hat{F}}$ унитар матрицанинг детерминантини топинг.

Жавоби: $\det \hat{G} = e^{iSp\,\hat{F}}$.

7. Координаталар тасаввуридан импульслар тасаввурига ўтиш натижасида тўлқин функциясининг жуфтлиги ўзгармаслигини исботланг.

VI БОБ

БИР ЎЛЧОВЛИ ФАЗОДАГИ ҲАРАКАТ

Юқорида қайд этилганидек, квант механикасининг вазифаси тўлқин ва корпускуляр хусусиятга эга бўлган заррачаларнинг ҳаракатини ўрганиш, унинг берилган вақт моментида фазонинг dV хажм элементида бўлиш эҳтимоллигини аниқлашдан иборат. Бунинг учун масаланинг моҳиятига қараб, Шредингер стационар

$$\hat{\mathscr{H}}\psi = E\psi \qquad \text{(VI.1)}$$

ёки тўла

$$\hat{\mathscr{H}}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad \text{(VI.2)}$$

тенгламасини ечиш зарур. Натижада энергиянинг турли хусусий қийматлари (E_1, E_2, . . . , E_n, . . .) ва уларга мос келган хусусий функциялар (Ψ_1, Ψ_2, . . . , Ψ_n, . . .) аниқланади. (VI. 1) ва (VI. 2) тенгламаларнинг ечими чегаравий шартлардан ташқари заррача харакат қилаётган соха потенциал майдонининг табиатига (электр, магнит, электромагнит) ва ўзгариш формасига боғлиқ. Майдон параметрлари Гамильтон оператори

$$\hat{\mathscr{H}} = (\hat{\vec{p}}^2/2m_0) + U(x,\ y,\ z) \qquad \text{(VI.3)}$$

орқали берилади.

Ташқи магнит майдон бўлмаганда (VI.3) формуладаги заррача импульсини унинг оператори билан бевосита алмаштириш мумкин:

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}.$$

У ҳолда Гамильтон операторининг кўриниши қуйидагича бўлади:

$$\hat{\mathscr{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{\nabla}^2 + U(x, y, z) \quad \text{(VI.4)}$$

Майдон характерига қараб ҳал этиладиган масалалар ҳам турлича бўлади. Бу бобда заррачанинг бир ўлчовли фазодаги ҳаракати ўзига хос характерли айрим масалаларига тўхталамиз. Зарурат бўлганда бир ўлчовли фазодаги ҳаракат натижаларини уч ўлчовли фазодаги ҳаракат учун умумлаштириш мумкин.

35-§. МИКРОЗАРРАЧАНИНГ ЭРКИН ҲАРАКАТИ

Потенциал майдон вақт ўтиши ва координаталар ўзгариши билан у заррача ҳаракатига таъсир этмайди. Шунинг учун бундай майдонда заррача эркин ҳаракат қилади. Майдон параметрлари вақт ўтиши билан ўзгармас бўлганлиги сабабли заррача ҳаракатини ўрганиш учун Шредингернинг стационар тенгламаси (VI.1) ни ечамиз. Майдон потенциалининг координата бўйича ўзгармаганлиги $-\infty < x < +\infty$ оралиғида $U(x) = 0$ деб қабул қилиш ҳуқуқини беради. Буни эътиборга олиб (VI.4) ни (VI.1) га қўйсак, бир ўлчовли фазода эркин ҳаракат қилаётган заррача учун Шредингер тенгламаси

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (35.1)$$

кўринишга эга бўлади. Бу ерда

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}E. \quad (35.2)$$

(35.1) тенгламанинг ечими қуйидаги кўринишда бўлади:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (35.3)$$

Бу ечимнинг физик маъносини аниқлаш учун уни тўла тўлқин функцияси кўринишида ёзиб оламиз:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t} = Ae^{-i(\omega t - kx)} + Be^{-i(\omega t + kx)} \quad (35.4)$$

Бу ердан кўринадики, тенгликнинг ўнг томонидаги биринчи $A^{-i(\omega t - kx)}$ ҳад X ўқининг мусбат йўналишида тарқалувчи ясси тўлқинни, иккинчи ҳад эса X ўқининг манфий йўналишида тарқалувчи ясси тўлқинни ифодалайди. Демак, эркин ҳаракат қилаётган заррачанинг ҳолатини аниқловчи тўлқин функцияси бир-бирига нисбатан қарама-қарши йўналишда тарқалувчи ясси тўлқинлар суперпозициясидан иборат экан.

Эркин ҳаракатланаётган заррачанинг энергияси (35.2) формулага биноан

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2m_0} = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m_0\lambda^2} = \frac{\hbar^2 m_0^2 v^2}{2m_0\hbar^2} = \frac{m_0v^2}{2}, \qquad (35.5)$$

бўлиб узлуксиздир. Демак, заррача эркин ҳаракат қилганда, яъни унинг ҳаракат қилиш соҳаси чекланмаганда, энергияси дискрет бўлмай, тезликка боғлиқ ҳолда узлуксиз қиймат олади. Демак, тўлқин ва корпускуляр хусусиятга эга бўлган заррача эркин ҳаракатланганда классик физика қонунига бўйсунувчи корпускулага ўхшаш бўлади.

36-§. ЗАРРАЧАНИНГ ПОТЕНЦИАЛ ТЎСИҚДАН ҚАЙТИШИ

Координата ўқи X нинг мусбат йўналиши бўйича эркин ҳаракат қилаётган заррача ўз йўлида $x = 0$ нуқтада «баландлиги» U_0 га тенг бўлган потенциал тўсиққа дуч келсин (36.1-расм). Тўсиқнинг эни чексиз дейлик $U(x) = \begin{cases} 0, & -\infty \leqslant x \leqslant 0, \\ U_0, & 0 \leqslant x \leqslant +\infty. \end{cases}$ Заррача ҳаракат қилаётган соҳани иккига ажратамиз: I соҳа $-\infty \leqslant x \leqslant 0$; II $0 \leqslant x \leqslant +\infty$. Бу ерда икки ҳол бўлиши мумкин:

а классик механикада   б. Квант механикасида

36.1- расм. Заррачанинг потенциал тўсиқдан қайтиши: а) классик механикада; б) Квант механикасида.

а) $E > U_0$, яъни заррача энергияси потенциал тўсиқ баландлигидан катта. Равшанки, I соҳада E энергия билан ҳаракат қилаётган заррача II соҳага бемалол ўтади ва у ерда $E - U_0$ энергия билан ўз ҳаракатини давом эттиради;

б) $E < U_0$ — заррача энергияси потенциал тўсиқ баландлигидан кичик бўлсин. Классик физика нуқтаи назаридан бундай заррача икки соҳа чегараси $x = 0$ га жойлашган потенциал тўсиқдан қайтади, аммо I соҳадан II соҳага ўта олмайди. Чунки бу ҳолда унинг импульси $p = \sqrt{2m_0(E - U_0)}$ мавҳум бўлади. Квант механикаси нуқтаи назаридан қандай бўлади? Бу саволга жавоб бериш учун зарраланинг $0 \leqslant x \leqslant \leqslant \infty$ соҳада топилиши эҳтимоллигини $(|\Psi|)^2$ ҳисоблаш керак. Агар $|\Psi|^2$ потенциал тўсиқнинг иккинчи томонида ҳам нолга тенг бўлмаса, демак, заррача потенциал тўсиқ соҳасига ҳам ўтади. $x = 0$ нуқтага жойлашган потенциал тўсиққа келаётган заррача учун

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x} \qquad (36.1)$$

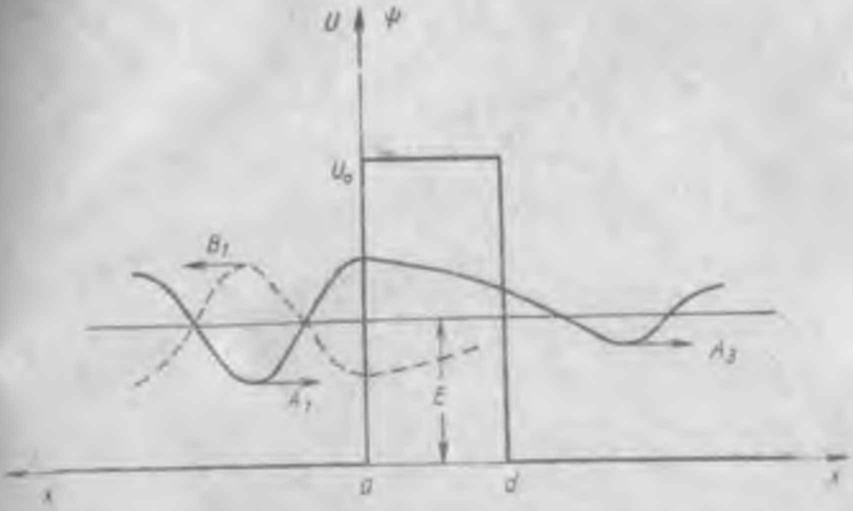
ни ёзиш мумкин. Иккинчи $0 \leqslant x < +\infty$ соҳада чексизликдан қайтган тўлқинни эътиборга олмаймиз ($B = 0$). У ҳолда иккинчи соҳа учун тўлқин функцияси

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2x} \qquad (36.2)$$

кўринишда танланади. Шу сабабли $|\psi_2(x)|^2$ ҳар иккала соҳада нолдан фарқли экани аниқ. Бу эса зарраланинг (потенциал тўсиқ бўлишидан қатъи назар) II соҳада ҳам топилиш эҳтимоллиги ноль эмаслигини билдиради. Бу ҳол ўз навбатида потенциал тўсиқ мавжуд соҳаларда ҳам зарраланинг бўлиш (ўтиш) мумкинлигини кўрсатади.

37-§. ЗАРРАЧАНИНГ ЭНИ ЧЕКЛАНГАН ПОТЕНЦИАЛ ТЎСИҚДАН ЎТИШИ

Аввалги масалада (36-§) заррача ўз йўлида учраган потенциал тўсиқдан $E < U_0$ бўлганда қайтишини кўрдик. Квант физикаси қонунларига бўйсунувчи заррача классик заррачадан фарқли равишда иккинчи (тўсиқ) соҳасига қисман ўтиб, сўнгра яна биринчи соҳага қайтади. У ердан кўринадики, агарда потенциал тўсиқ эни чекли бўлса, маълум миқдордаги заррачалар ундан ўтиб кетиши мумкин. Бундай ҳодисага *туннель эффекти* дейилади. Бу масала билан батафсил танишайлик. Масалани осонлаштириш мақсадида потенциал тўсиқни идеаллаштириб тўғри тўртбурчак шаклда деб оламиз (37.1-расм). Аниқланган натижани ихтиёрий формадаги по-



37.1-расм. Заррачанинг эни чекланган потенциал тўсиқдан ўтиши ва қайтиши.

тенциал тўсиқ учун ҳам умумлаштириш мумкин. X ўқининг мусбат йўналишида ҳаракат қилаётган E энергияли заррача эни d, баландлиги U_0 бўлган потенциал тўсиққа дуч келсин. $E > U_0$ бўлганда заррача потенциал тўсиқдан ўта олади. $E < U_0$ бўлганда заррачанинг потенциал тўсиқдан ўтиш эҳтимоллигини аниқлайлик. Бунинг учун заррача ҳаракат қиладиган сохани майдон потенциалининг ўзгаришига караб учга бўламиз:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\infty \leqslant x \leqslant 0 \quad \text{(I соҳа)} \\ U_0, & 0 \leqslant x \leqslant d \quad \text{(II соҳа)} \\ 0, & d \leqslant x \leqslant +\infty \quad \text{(III соҳа)} \end{cases}$$

а) Биринчи (I) соҳада $-\infty \leqslant x \leqslant 0$ майдон потенциали ($U = 0$) нолга тенг. Шунинг учун Шредингернинг стационар тенгламаси (VI. 1) ни қуйидагича ёзамиз:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0. \qquad (37.1)$$

Бу ерда

$$k_1^2 = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}. \qquad (37.2)$$

(37.1) тенгламанинг ечими

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x} \qquad (37.3)$$

кўринишда бўлади.

б) Иккинчи (II) соҳада $0 \leqslant x \leqslant d$ майдон потенциали $U = U_0 = \text{const}$. Шунинг учун Шредингер тенгламасини

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2\psi_2 = 0 \qquad (37.4)$$

кўринишда ёзиш мумкин. Бу ерда

$$k_2^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U_0)] \qquad (37.5)$$

(37.4) тенгламанинг ечимини

$$\psi_2 = A_2 e^{-\varkappa x} + B_2 e^{\varkappa x} \qquad (37.6)$$

кўринишда танлаймиз ($\varkappa = +ik_2$);

г) учинчи (III) соҳада $0 \leqslant x \leqslant +\infty$ майдон потенциали биринчи соҳадаги каби нолга тенг. Шунинг учун $k_1 = k_3$, у ҳолда учинчи соҳа учун Шредингер тенгламаси

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k_1\psi_1 = 0 \qquad (37.7)$$

кўринишда бўлиб, унинг ечими

$$\psi_3 = A_3 e^{ik_1(x-d)} + B_3 e^{-ik_1(x-d)} \qquad (37.8)$$

бўлади. A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3 коэффициентларни топиш учун соҳа чегараларида ψ функциясининг ўзи ва унинг биринчи тартибли ҳосилалари узлуксиз деб ҳисоблаймиз:

$$\psi_1\big|_{x=0} = \psi_2\big|_{x=0}, \quad \frac{d\psi_1}{dx}\bigg|_{x=0} = \frac{d\psi_2}{dx}\bigg|_{x=0} \qquad (37.9)$$

$$\psi_2\big|_{x=d} = \psi_3\big|_{x=d}, \quad \frac{d\psi_2}{dx}\bigg|_{x=d} = \frac{d\psi_3}{dx}\bigg|_{x=d}. \qquad (37.10)$$

Заррачанинг эркин ҳаракатидан маълумки, $A_1 e^{ik_1x}$ тўлқин X ўқининг мусбат йўналишида тарқалувчи тўлқинни, яъни потенциал тўсиққа тушаётган тўлқинни ифодаласа, $B_1 e^{-ik_1x}$ потенциал тўсиқдан I соҳага қайтган тўлқинни ифодалайди. Худди шунингдек, $A_2 e^{-\varkappa x}$ ҳад потенциал тўсиқ ичида X нинг мусбат йўналишида тарқалаётган тўлқинни ифодаласа, $B_2 e^{\varkappa x}$ ҳад иккинчи ва учинчи соҳалар чегарасидан қайтган тўлқинни ифодалайди. Учинчи соҳанинг ечимидаги $A_3 e^{ik_1(x-d)}$ ҳад потенциал тўсиқдан нат[illegible]авий ўтган тўлқинни ифодалайди. $B_3 e^{-ik(x-d)}$ ҳад эса чексизликдан қайтган тўлқинни ифодалайди. Охиргини ҳисобга олмаслик мумкин. Шунинг учун $B_3 = 0$ деймиз. У ҳолда тўсиққа тушаётган тўлқин интенсивлигини бирлик сифатида қабул қилиб ($A_1 = 1$), тўртта (B_1, A_2, A_3, B_2) коэффициентни аниқлаш учун (37.9) ва (37.10) ларга асосан тўртта алгебраик тенгламага эга бўламиз. Потенциал тўсиқнинг тиниқлиги

$$D = |j_{ўт} / j_{туш}| \tag{37.11}$$

тушунчасини киритамиз. Демак, потенциал тўсиқдан ўтган заррачалар оқими зичлиги ($j_{ўт}$) нинг тўсиққа тушаётган заррачалар оқими зичлиги ($j_{туш}$) га нисбатининг абсолют қиймати потенциал тўсиқнинг заррачалар учун тиниқлиги бўлади. Заррачаларнинг тўлқин функцияси маълум бўлса, уларнинг оқими зичлиги қуйидаги формула билан ((17.9) га қаранг) аниқланар эди:

$$j = \frac{i\hbar}{2m_0}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^* - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right). \tag{37.12}$$

Бу формулага потенциал тўсиққа тушаётган тўлқин ($A_1 e^{-ik_1x}$) ни ва ундан ўтган тўлқин ($A_3 e^{ik_1(x-d)}$) функцияларини қўйиб, мос холда $j_{туш} = \frac{e\hbar}{m_0} k_1 |A_1|^2$ ва $j_{ўт} = \frac{e\hbar}{m_0} k_1 |A_3|^2$ оқимлар зичликларини ҳисоблаймиз. Натижада потенциал тўсиқнинг тиниқлиги (шаффофлиги)

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = |A_3|^2 \tag{37.13}$$

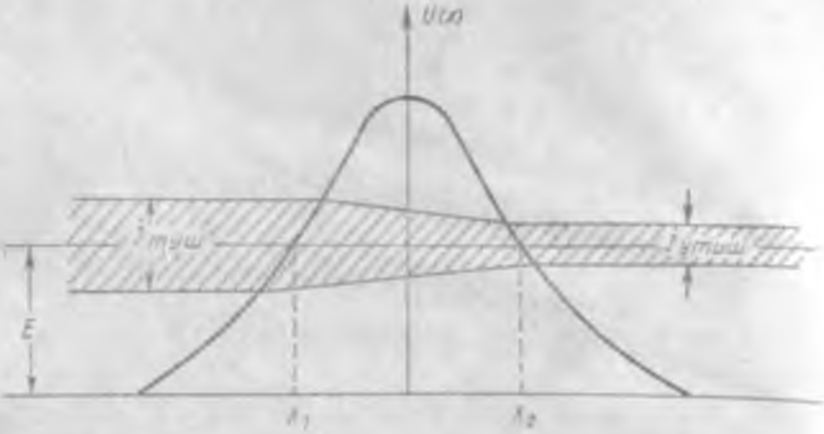
бўлади. (37.9) ва (37.10) тенгламалар системасини ечиб

$$A_3 = 2/\left[2\operatorname{ch}\varkappa d + i\left(\frac{\varkappa}{k} - \frac{k}{\varkappa}\right)\operatorname{sh}\varkappa d\right] \tag{37.14}$$

натижани топамиз. $\varkappa d \gg 1$ шартда (37.13) ва (37.14) дан тўғри бурчакли потенциал тўсиқнинг тиниқлиги

$$D = D_0 e^{-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0-E)}} \tag{37.15}$$

бўлишини аниқлаш қийин эмас. Бу ерда $D_0 = \frac{16n^2}{(1+n^2)^2} \approx 1$, $n = \frac{k_1}{\varkappa} = \sqrt{\frac{E}{U_0-E}}$. Демак, потенциал тўсиқнинг заррача учун тиниқлиги унинг эни d га, потенциал тўсиқнинг баландлиги U_0 га ва тўсиққа тушаётган заррачанинг энергияси E га боғлиқ бўлар экан. Тўсиқ эни ортса унинг тиниқлиги экспоненциал равишда камаяди ва $d \to \infty$ бўлганда $D \to 0$. Потенциал тўсиқнинг баландлиги ортса ҳам D камаяди, аммо E ортса D ҳам ортади, яъни энергияси катта заррачалар учун тўсиқнинг тиниқлиги ортиқдир. Потенциал тўсиқ-



37.2-расм. Ихтиёрий шаклдаги потенциал тўсиқдан ўтиш.

дан туннель эффекти (энергиясини ўзгартирмасдан) ўтиш туфайли ўтган заррача III соҳада потенциал тўсиққа тушаётгандаги (I соҳадаги) энергиясига тенг энергия E билан тарқалади. (37.15) формулада қуйидаги

$$\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m_0(U_0-E)} \rightarrow \frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m_0\,[U(x)-E]}\,dx \tag{37.16}$$

алмаштириш қилсак,

$$D = D_0\, e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m_0[U(x)-E]}\,dx} \tag{37.17}$$

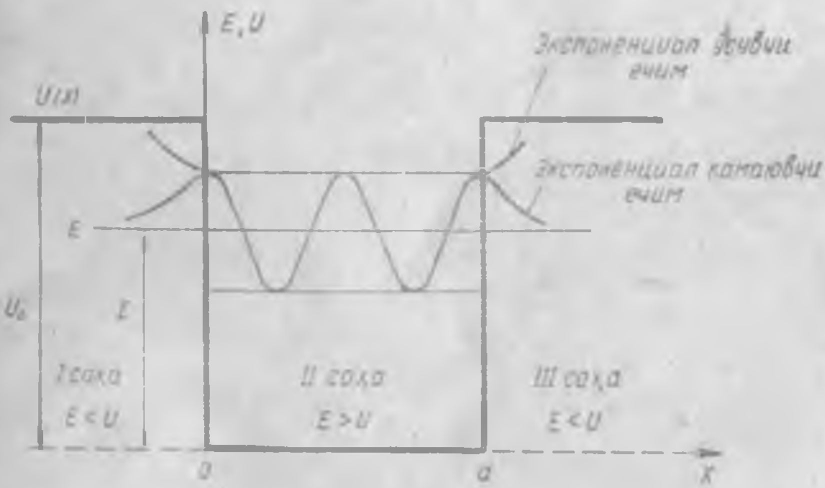
келиб чиқади. Бу ихтиёрий шаклдаги потенциал тўсиқнинг тиниқлигидир (37.2-расм). x_1 ва x_2 потенциал тўсиқ чегараларидир.

Шундай қилиб, заррачалар тўлқин хусусиятга эга бўлганликлари сабабли уларнинг энергияси потенциал тўсиқ баландлигидан кичик бўлса ҳам тўсиқдан ўта олиши мумкин. Агарда заррача тўлқин хусусиятига эга бўлмаса, яъни унинг ҳаракати классик физика қонунларига биноан аниқланса, бундай заррачалар $E < U_0$ бўлганда потенциал тўсиқдан мутлақо ўта олмайди. Чунки $E - U_0 = \frac{p^2}{2m_0}$ формулага биноан заррача импульси $E < U_0$ бўлгачда мавҳум бўлади. Бу эса маънога эга эмас.

Ҳақиқатда, тажрибада туннель эффектлари кўп кузатилади: радиоактив ҳодисалардаги ядронинг α-емирилиши, туннель диодларининг ишлаши, электронларнинг металлдаги совуқ эмиссияси ва бошқа ҳодисаларни туннель механизмига асосан тушунтира олиш мумкин. Бу эффектлар яна бир бор микрозаррачаларнинг тўлқин ва корпускуляр хусусиятини биргаликда эътиборга олувчи квант механикаси принципларининг тўғрилигини исботлайди.

38-§. ЗАРРАЧАНИНГ ПОТЕНЦИАЛ ЧУҚУРЛИК ИЧИДАГИ ҲАРАКАТИ

Эркин ҳаракатланаётган микрозаррача потенциал тўсиқдан қандай қайтиши билан танишдик (36-§). Потенциал тўсиқ ($E < U_0$) бир ўлчовли фазода ҳаракат қилаётган заррача учун ҳар икки томондан бўлса (38.1-расм), унинг ҳаракати ва энергиясида қандай ўзгаришлар бўлиши билан танишайлик. Бундай ҳолда заррача потенциал чуқурлик ичида ҳаракатланади деб тушунилади. Амалда ҳар қандай ўтказгич ичидаги эркин электронни биринчи яқинлашишда потенциал чуқурлик ичида деб қабул қилиш мумкин. Чунки металл билан вакуум ўртасида потенциал сакраш бўлиб, у металл ичидаги эркин электрон учун потенциал тўсиқ вазифасини ўтайди. Потенциал тўсиқнинг баландлиги U_0, заррача энергияси E бўлиб, $0 \leqslant E < U_0$ ($E > U_0$ бўлганда заррача эркин



38.1-расм. Потенциал чуқур ичида ҳаракатланаётган заррачанинг маълум энергиясига мос келган тўлқин функцияси.

ҳаракат қилиб, энергияси узлуксиз бўлиб қоладиган ҳол учун Шредингер тенгламасинин ечгйлик. Ҳар галгидек заррача ҳаракат қилаётган соҳани учтага бўламиз ва уларнинг ҳар бирида майдон потенциали ўзгармас деб оламиз:

$$\begin{aligned} &1 \text{ соҳа}, \; -\infty \leqslant x \leqslant 0 && U(x) = U_0 = \text{const}, \\ &2 \text{ соҳа}, \; 0 \leqslant x \leqslant d && U(x) = 0, \\ &3 \text{ соҳа}, \; d \leqslant x \leqslant +\infty && U(x) = U_0 = \text{const}. \end{aligned} \tag{38.1}$$

Соҳалар чегарасида (0, d) потенциал энергияни сақлаб ўзгаради деб қабул қилдик. Бу масалани идеаллаштириш ҳисобланади. Амалда соҳалар чегарасида потенциал энергия жуда кичик Δx интервалда 0 дан U_0 гача ўзгаради. Бу соҳада заррача ҳаракатини ҳисобга олиш учун Δx интервалда $U = f(x)$ боғланишни билиш зарур. Бу боғланиш айрим хусусий ҳоллар учунгина маълум. Қўйилган масалани ечиш асосан методик жиҳатдан аҳамиятли бўлганлиги сабабли $\Delta x \to 0$ деб оламиз. Шунинг учун U потенциал майдон энергияси соҳалар чегарасида 0 дан U_0 га сакраб ўзгаради.

Ҳар учала соҳа учун Шредингер тенгламасининг ечимларини ёзамиз:

1 соҳада $\dfrac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \; \psi_1 = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}, \; k_1 =$

$$= \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E-U_0)}. \tag{38.2}$$

2 соҳада $\dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0, \; \psi_2 = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x}, \; k_2 =$

$$= \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar} E}, \tag{38.3}$$

3 соҳада $\dfrac{d^2\psi_3}{dx^2} + k_3^2\psi_3 = 0, \; \psi_3 = A_3 e^{ik_3(x-d)} + B_3 e^{-ik_3(x-d)},$

$$k_3 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E-U_0)}. \tag{38.4}$$

Бу ердан кўринадики, биринчи ва учинчи соҳада

$$k_1 = k_3 = i\varkappa, \; \varkappa = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0-E)}. \tag{38.5}$$

Буни эътиборга олсак, биринчи ва учинчи соҳа учун ечимлар мос ҳолда қуйидагича ёзилади:

$$\psi_1 = A_1 e^{-\varkappa x} + B_1 e^{+\varkappa x}, \qquad (38.6)$$

$$\psi_3 = A_3 e^{-\varkappa (x-d)} + B_3 e^{\varkappa (x-d)}. \qquad (38.7)$$

(38.6) ва (38.7) дан кўринадики *1*- ва *3*- соҳаларда ечим X га боғлиқ ҳолда экспоненциал равишда ортиб борувчи ва экспоненциал равишда камайиб борувчи ҳадлардан иборат. Шредингер тенгламасининг ечимига қўйилган шартга биноан ечим чекли бўлиши керак. Бу шартни каноатлантириш учун ψ_1 ечимда $(x < 0)\, B_1 = 0$, ψ_3 ечимда эса $B_3 = 0$ деб оламиз, яъни ечимларнинг ортиб борувчи ҳадларини ташлаб юборамиз. У ҳолда (38.6) ва (38.7) ечимларни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\psi_1 = A_1 e^{-\varkappa |x|}, \qquad (38.8)$$

$$\psi_3 = A_3 e^{-\varkappa (x-d)}. \qquad (38.9)$$

Шунингдек, $e^{\pm ikx} = \cos kx \pm i \sin kx$ ни ҳисобга олсак, *2*-соҳадаги ечим тебранма характерли

$$\psi_2 = A_2 \sin k_2 x + B_2 \cos k_2 x \qquad (38.10)$$

кўринишга эга бўлади. Соҳалар чегарасида ψ функциянинг ўзи ва унинг биринчи тартибли дифференциали узлуксиз деймиз:

$$\psi_1 |_{x=0} = \psi_2 |_{x=0}, \quad \left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0}; \qquad (38.11)$$

$$\psi_2 |_{x=d} = \psi_3 |_{x=d}, \quad \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=d} = \left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{x=d}. \qquad (38.12)$$

Масалани соддалаштириш мақсадида $U_0 \to \infty$ деб фараз қилайлик, бу шартнинг физик маъноси шундан иборатки, заррача потенциал чуқурлик ичида бўлиб, ундан ташқарига чиқа олмайди. Демак, потенциал чуқурлик ташқарисида, яъни *1*,*3*- соҳаларда заррача йўқ. Бунинг учун потенциал чуқурлик ташқарисида тўлқин функция нолга тенг бўлиши керак ($\varphi = 0$). У ҳолда (38.11) ва (38.12) чегаравий шартлар ўрнига

$$\psi |_{x=0} = \psi(0) = 0, \qquad (38.13)$$

$$\psi |_{x=d} = \psi(d) = 0 \qquad (38.14)$$

ларга эга бўламиз. (38.10) ечимни (38.13) га қўйсак, номаълум коэффициент $B_2 = 0$ келиб чиқади. Демак, потенциал чуқур ичида (38.10) ечимни

$$\psi_2 = A_2 \sin k_2 x \qquad (38.15)$$

кўринишда ёзиш мумкин. У ҳолда (38.14) ифодадан қуйидаги тенгликни оламиз:

$$\psi_2(d) = A_2 \sin k_2 d = 0, \qquad (38.16)$$

яъни

$$k_2 d = n\pi \qquad (38.17)$$

ўринли бўлади. Бу ерда $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ қийматлар олиши мумкин. (38.17) дан k_2 ни аниқлаб, (38.15) га қўйсак, потенциал чуқурлик ичидаги зарраchанинг тўлқин функцияси

$$\psi_2 = A_2 \sin n\pi \frac{x}{d} \qquad (38.18)$$

бўлади. A_2 коэффициент ψ_2 функциясининг нормаланганлик шарти

$$\int_0^d \psi_2 \psi_2^* \, dx = 1 \qquad (38.19)$$

дан топилади. (38.18) ни (38.19) га қўйиб интегрални ҳисоблаб, $A_2 = \sqrt{\frac{2}{d}}$ эканлигига ишонч ҳосил қилиш мумкин. У ҳолда чексиз потенциал чуқурлик ичида ҳаракат қилаётган зарраchанинг тўлқин функциясининг тугал кўриниши

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin n\pi \frac{x}{d} \qquad (38.20)$$

дек бўлади. Унга мос келган энергиянинг қийматини (38.17) ни (38.3) га қўйиб аниқлаймиз:

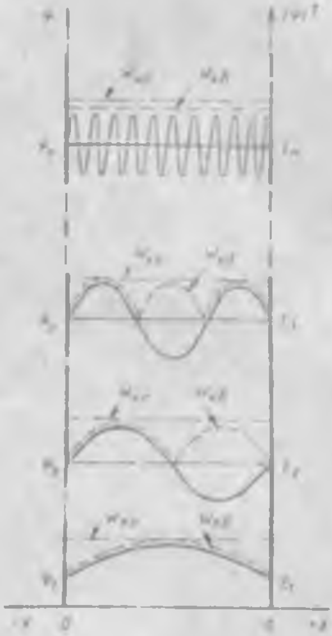
$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_0 d^2}. \qquad (38.21)$$

Демак, микрозарра потенциал чуқурлик ичида ҳаракат қилганда унинг энергияси дискрет қийматлар (n га боғлиқ ҳолда) олар экан. Шуниси муҳимки, микрозарраchанинг энергияси потенциал чуқурлик эни кичрайиши билан ортиб боради. Аниқланган натижани тасаввур қилиш учун энергия ва тўлқин функциясининг n нинг $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$ қийматларига мос келган хусусий қийматларини ёзайлик

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 d^2}, \; E_2 = 4E_1, \; E_3 = 9E, \; E_n = 16E_1, \ldots$$

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{\pi x}{d}, \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{2\pi x}{d}, \quad \psi_3 =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{3\pi}{d} x, \ \psi_4 = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{4\pi}{d} x, \ \ldots$$



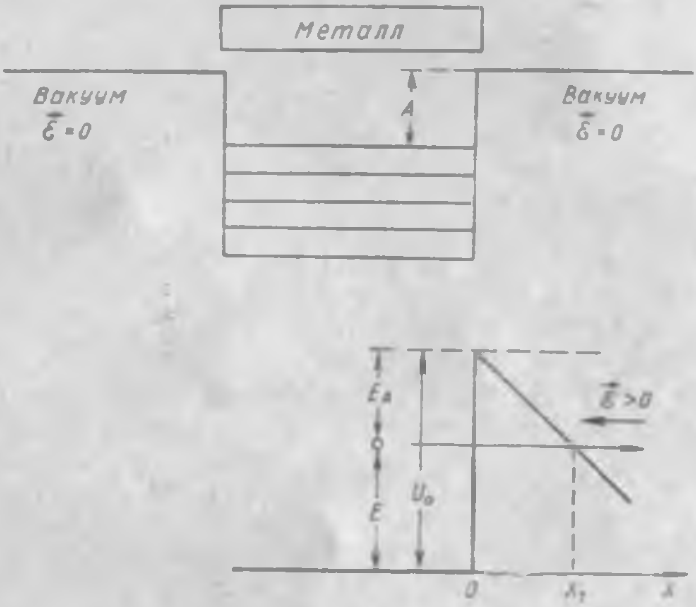
38.2- расм. Тўғри тўртбурчак шаклдаги потенциал чуқурда ҳаракатланаётган заррача энергетик спектри ва тўлқин функциялари.

38.2-расмда бу қийматлар график равишда тасвирланган. $|\psi|^2$ микрозаррачанинг потенциал чуқурлик ичида бўлиш эҳтимоллигини билдиради. Графиклардан кўринадики, $n = 1$ бўлганда заррачанинг потенциал чуқурлик ичида топилиш эҳтимоллиги унинг марказида энг катта бўлади. Агар бу заррача классик физика қонунларига бўйсунувчи бўлса, унинг потенциали чуқурлик ичида топилиш эхтимоллиги энергиясига боғлиқ бўлмай, ҳар доим чуқурлик тубининг ҳамма соҳасида бир хил бўлар эди (горизонтал чизиқ). Квант сони n ортиши билан заррача энергияси ортиб боради. Унинг потенциал чуқурлик ичида топилиш эҳтимоллиги қисмларга бўлиниб, чуқурликнинг горизонтал текислик бўйича ҳамма соҳасида бир хил бўлишга интилади.

n нинг жуда катта қийматларида квант заррачанинг потенциал чуқурлик ичида топилиш эҳтимоллиги классик заррачанинг топилиш эҳтимоллигига яқинлашиб боради. Бошқача айтганда квант заррачасининг энергияси ортиши билан унинг хусусияти классик заррача хусусиятига яқинлашиб боради.

39- §. ЭЛЕКТРОННИНГ МЕТАЛЛДАН СОВУҚ ЭМИССИЯСИ

Ҳозирги замон электроникаси электроннинг турли хил потенциал майдонда ҳаракатини ўрганишга ва уни бошқаришга асосланган, электрон бир соҳадан иккинчи соҳага, каттиқ жисмдан вакуумга ёки аксинча ўтганда ҳам у ҳаракат қилаётган майдон потенциали ўзгаради. Бундан турли мақсадларда фойдаланилади. Энергияси E бўлган электрон металл ичидан вакуумга чиқиши учун унга қўшимча E_A энергия бериш керак. Бу энергия камида электроннинг металлдан чиқиш иши A га сон жиҳатдан тенг бўлиши зарур. Бу энергияни электронга металлни қиздириш йўли билан (термоэмиссия) ёки ёруғлик таъсирида (фотоэффект) бериш мумкин. Ҳар иккала ҳолда ҳам металл қизийди. Аммо электронни металлдан вакуумга уни қиздирмасдан ҳам, яъни электронга қўшимча энергия бермасдан ҳам чиқариш мумкин. Бундай ҳол электроннинг металлдан совуқ эмиссияси дейилади. Бунинг учун металл билан вакуум ўртасига кучланганлигининг йўналиши металл томонга бўлган электр майдони қўйиш керак. Бу майдон таъсирида металл билан вакуум ўртасидаги потенциал тўсиқнинг эни кичраяди. Демак, потенциал тўсиқнинг тиниқлиги D ортади. Бу ўз навбатида металл ичидаги элек-



39.1 - расм. Электронларнинг металлдан совуқ эмиссиясини тушунтиришга доир.

тронларнинг вакуумга потенциал тўсиқни айланиб ўтмасдан туннель механизмга биноан вакуумга чиқишига имкон беради, электр токи ҳосил бўлади. Равшанки, совуқ эмиссия туфайли ҳосил бўлган ток потенциал тўсиқ тиниқлигига тўғри пропорционалдир:

$$j = j_0 D = j_0 D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m_0}\int\limits_0^x \sqrt{U(x)-E}\,dx} \qquad (39.1)$$

Бу ерда

$$U(x) = U_0 - e_0 \mathscr{E} x \qquad (39.2)$$

бўлиб, ташқи электр майдон кучланганлиги $\mathscr{E}$ бўлганда потенциал энергиянинг координатага қараб ўзгаришини ифодалайди. (39.2) формулани (39.1) га қўйиб, потенциал тўсиқнинг эни $x_1 = \frac{V_0 - E}{e_0 \mathscr{E}}$ ни ҳисобга олсак (39.1-расм)

$$j = j_s e^{-\frac{\mathscr{E}_0}{\mathscr{E}}} \qquad (39.3)$$

келиб чиқади. Бу ерда $j_s = j_0 D_0$,

$$\mathscr{E}_0 = \frac{4\sqrt{2m_0(V_0 - E)}}{3e_0\hbar}. \qquad (39.4)$$

Демак, (39.3) га биноан совуқ эмиссия токи ташқи электр майдон кучланганлиги ($\mathscr{E}$) ортиши билан экспоненциал равишда катталашиб боради. $\mathscr{E} \to 0$, демак, эмиссион ток j ҳам нолга интилади. Бундан ташқари, эмиссион ток металл билан вакуум ўртасидаги потенциал тўсиқ баландлиги U_0 билан электрон энергияси E га ҳам боғлиқ. Шундай қилиб, электроннинг металлдан совуқ эмиссиясини фақат туннель механизмига асосан тушунтириш мумкин.

40-§. ЧИЗИҚЛИ ГАРМОНИК ОСЦИЛЛЯТОР

Мувозанат ҳолати атрофида квазиэластик куч таъсирида тебранма ҳаракат қилувчи системага *гармоник осциллятор* дейилади.

Гармоник осциллятор масаласи физика фанининг ҳамма қисмида фундаментал масалалардан бири ҳисобланади. Чунки илгари қайд этганимиздек, муҳит хусусияти (электр, иссиқлик ўтказувчанлик, иссиқлик сиғими, нурланиш ва ҳоказо) уни ташкил этган заррачалар ҳаракат турларига узвий боғлиқ. Гармоник тебранма ҳаракат эса оддий (илгариланма, айланма, тебранма) ҳаракатлар ичида энг кўп учрайди. Бундай ҳаракат микроолам заррачаларининг барчасига хос.

Бундан ташқари, кўп ҳолларда мураккаб ҳаракатларни бир-бирига тик гармоник тебранма ҳаракатларга ажратиб ўрганиш қулайдир. Шунинг учун ҳам гармоник осциллятор масаласи назарий физика учун бош масаладир. У билан батафсилроқ танишайлик. Дастлаб осциллятор масаласининг классик ва Бор назариясидаги натижаларни эслайлик.

1. Классик физикада чизиқли гармоник осциллятор масаласи қуйидаги тенгламани

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0 \tag{40.1}$$

ечиб ўрганилади. Бунда ω_0 — гармоник осцилляторнинг хусусий частотаси. (40.1) тенгламани ечиб, силжиш $x(t)$ ни аниқлаймиз:

$$x = x_0 \sin \omega_0 t, \tag{40.2}$$

x_0 — тебраниш амплитудаси, ω_0 — тебраниш частотаси. Классик осцилляторнинг тезлиги ($\dot{x}$) ва тезланиши ($\ddot{x}$) (40.2) ечимни дифференциаллаб топилади. Осцилляторнинг тўла энергияси E эса қуйидагига тенг

$$E = \frac{m_0 \dot{x}^2}{2} + \int_0^{x_0} \omega_0^2 m_0 x \, dx = \frac{m_0 \omega_0^2 x_0^2}{2} \cdot \tag{40.3}$$

Демак, классик осцилляторнинг тўла энергияси частота ω_0 ва амплитуда x_0 квадратига тўғри пропорционал бўлиб, ихтиёрий узлуксиз қиймат олиши мумкин. Шунинг учун ҳам бу назария жисмларнинг иссиқликдан нурланишини тўғри тушунтира олмайди.

2. **Осциллятор масаласи Бор назариясига асосланиб ҳам ечилган.** Бундан осциллятор энергияси дискрет бўлиши кўрсатилган. Энергиянинг квантлашиш шарти қуйидагича:

$$\oint m_0 \dot{x} \, dx = 2\pi \hbar n. \tag{40.4}$$

Бу ерда $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$ квант сони. (40.4) тенгламани берк контур бўйича ечиш учун x дан t ўзгарувчига ўтамиз. У ҳолда интегралнинг чегараси 0 дан T гача бўлади.

$$\dot{x} dx = \frac{dx}{dt} \frac{dx}{dt} dt = \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 dt = x_0^2 \omega_0^2 \sin^2 \omega_0 t dt. \tag{40.5}$$

Буни (40.4) га қўйиб интегрални ҳисобласак ва (40.3) ни эътиборга олсак,

$$E = n \hbar \omega_0 \tag{40.6}$$

келиб чиқади. Демак, Бор назарияси нуқтаи назаридан осциллятор энергияси квантлашган бўлади. Дискрет қийматлар олади. Осциллятор томонидан электромагнит тўлқинлари нурлатилиши квантлашган бўлиши кераклигини М. Планк таклиф этиб, нурланиш назариясини яратган эди. Бор эса Планк формуласининг тўғрилигини асослаб берди. Аммо бу билан осциллятор масаласи узил-кесил ҳал бўлди деган гап эмас. Чунки (40.6) натижа (40.4) шарт қабул қилингандагина келиб чиқади. Ўз навбатида (40.4) формула эса бирор назариядан келтириб чиқарилган эмас, балки қабул қилинган шарт. Шунинг учун, ҳақиқатда осциллятор энергияси ва унинг ҳолатини аниқловчи ψ функцияси қандай кўринишда бўлишини аниқлаш учун масалани квант механикаси нуқтаи назаридан ечиш керак. Иккинчи томондан, нурланиш назариясига ёки иссиқлик сиғимга асос бўладиган осцилляторларнинг ўлчамлари атом масштабида бўлиб, классик осциллятордан хусусиятлари билан тубдан фарқ қилади. Шу боисдан (40.6) каби формулани аниқлашда классик осциллятор учун топилган (40.4) формуладан фойдаланиш нотўғри. Шунинг учун осциллятор масаласини квант механикасидаги ечиш усули билан танишамиз.

3. Квант механикаси нуқтаи назаридан чизиқли гармоник осциллятор

$$U = \frac{m_0 \omega_0^2 x^2}{2} \tag{40.7}$$

формула билан аниқланувчи потенциал чуқурлик ичида ҳаракат қилади. Потенциал чуқурлик ичида

$$E > U.$$

Потенциал чуқурлик ташқарисида эса $E < U$. (40.7) ни ҳисобга олиб квант осциллятори учун Шредингер тенгламасини қуйидагича ёзамиз:

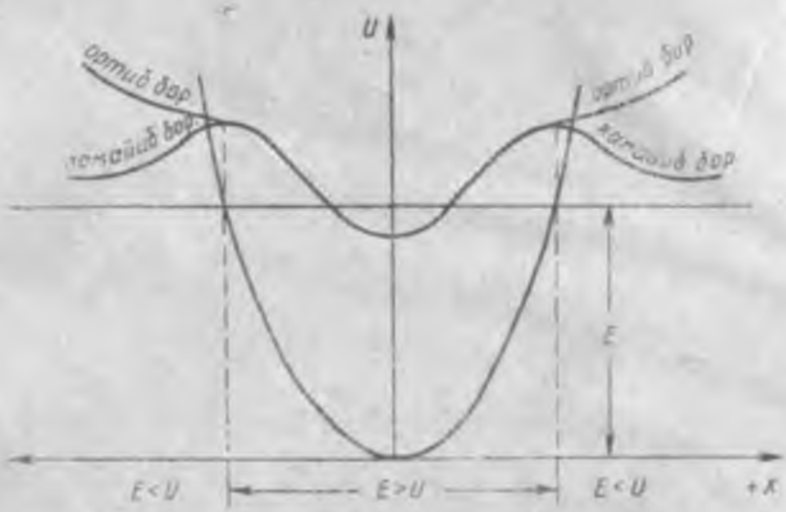
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{m_0 \omega_0^2 x^2}{2}\right)\psi = 0. \tag{40.8}$$

Бу тенгламани ечиш учун

$$\eta = x\sqrt{\frac{m_0 \omega_0}{\hbar}} \tag{40.9}$$

янги ўзгарувчига ўтамиз. У ҳолда (40.8) тенгламанинг кўриниши қуйидагича бўлади:

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} + (\varkappa - \eta^2)\psi = 0. \tag{40.10}$$



40.1- расм. Чизиқли гармоник осциллятор учун Шредингер тенгламасининг экспоненциал ортиб ва камайиб борувчи ечимлари.

Бу ерда

$$\varkappa = \frac{2E}{\hbar\omega_0}.$$

Охирги тенгламадан кўринадики, заррача потенциал чуқурлик ичида деб қабул қилиш $(E > U)\varkappa > \eta^2$ тенгсизликка тенг кучли. Бу ҳолда (40.10) нинг ечими тебранма характерда бўлади.

Заррача потенциал чуқурлик ташқарисида деган тушунча $(E < U)\ \varkappa < \eta^2$ шартга тенг кучли бўлиб (40.10) тенгламанинг бу соҳадаги ечими экспоненциал ортиб ва камайиб борувчи ташкил этувчилардан иборат бўлади (40.1- расм). (40.10) тенгламанинг ечими Шредингер тенгламасининг ечимига қўйилган умумий шартларни қаноатлантириши учун ортиб борувчи ечимларни ташлаб юборишимиз керак. Яъни x ортганда (демак, $\eta \to \infty$)ψ функция нолга интилиши керак Шунда аниқланган ечим физик маънога эга бўлади. Бу талабни қондириш учун (40.10) тенгламанинг ечимини қуйидаги кўринишда излаймиз

$$\psi = e^{-\frac{1}{2}\eta}\,\varphi(\eta). \tag{40.11}$$

Бу ердан кўринадики $\eta \to \infty$ бўлганда $\psi \to 0$ бўлади. (40.11) формулада φ ўзгарувчи η га боғлиқ бўлган янги функция. (40.11) ни (40.10) га қўйсак φ га нисбатан янги тенглама

$$\frac{d^2\varphi}{d\eta^2} - 2\eta\frac{d\varphi}{d\eta} + (\varkappa - 1)\varphi = 0 \qquad (40.12)$$

ҳосил бўлади. Охирги тенгламанинг ечимини қуйидаги

$$\varphi = \sum_{\nu=0} b_\nu \eta^\nu \qquad (40.13)$$

кўринишда ёзамиз. (40.13) кўп ҳадли (40.12) тенгламанинг ечими бўлиши учун уни қаноатлантириши керак. Шунинг учун (40.13) ни (40.12) та қўйсак қуйидаги алгебраик тенглама ҳосил бўлади:

$$\sum_{\nu=0} b_\nu [\nu(\nu-1)\eta^{\nu-2} - (2\nu+1-\varkappa)\eta^\nu] = 0. \qquad (40.14)$$

Охирги тенгламада бир хил даражали номаълумлр олдидаги коэффициентларнинг алгебраик йиғиндиси нулга тенг бўлса (40.13) кўп хадли (40.12) тенгламани қаноатлантирган бўлади. У холда (40.11) ифода чизиқли гармоник осциллятор учун ёзилган (40.10) ёки (40.8) тенгламанинг ечими бўла олади. Шунинг учун (40.14) тенгламани η^ν учун ёзамиз. Бунинг учун ν га қиймат бериб йиғиндини ёйиб ёзиб, бир хил даражали номаълумларни группалаштирсак,

$$\sum_{\nu=0} \{b_{\nu+2}(\nu+1)(\nu+2) - b_\nu(2\nu+1-\varkappa)\}\eta^\nu = 0 \qquad (40.15)$$

ҳосил бўлади. Демак, юқоридаги шартимизга биноан (40.15) тенгламада η^ν номаълум олдидаги коэффициентлар йиғиндиси нулга тенг бўлса (40.13) ечим (40.12) ни қаноатлантирган бўлади:

$$b_{\nu+2}(\nu+1)(\nu+2) - b_\nu(2\nu+1-\varkappa) = 0.$$

Бу реккуррент формула бўлиб, унинг ёрдамида ν- ҳад коэффициенти b_ν маълум бўлса, $(\nu+2)$ ҳад коэффициенти $b_{\nu+2}$ ни аниқлаш мумкин:

$$b_{\nu+2} = b_\nu \frac{2\nu+1-\varkappa}{(\nu+1)(\nu+2)}. \qquad (40.16)$$

Аммо Шредингер тенгламаси ечими чекли бўлиши керак. (40.13) қатор эса чексиз ортиб бораверади. Шунинг учун (40.13) қаторни қандайдир ҳаддан бошлаб узиш лозим. Ана шу узилаётган ҳаднинг номери $\nu = n$ бўлсин. У ҳолда (40.16) ни қуйидагича ёзиш мумкин

$$b_{n+2} = b_n \frac{2n+1-\varkappa}{(n+1)(n+2)}. \qquad (40.17)$$

Қатор n-ҳаддан бошлаб узилиши учун $b_n \neq 0$ ва $b_{n+2} = 0$ бўлиши керак. У ҳолда b_{n+4} ва ундан кейинги барча ҳадлар коэффициенти нулга тенг бўлади. Бунинг учун (40.17) формуладан

$$2n+1-\varkappa = 0 \qquad (40.18)$$

бўлиши керак. Бу ерга $\varkappa$ нинг қийматини $\left(\frac{2E}{\hbar\omega_0}\right)$ қўйсак,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 \qquad (40.19)$$

келиб чиқади. Бу ерда $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ квант сони. (40.19) формула чизиқли гармоник осцилляторнинг энергиясидир. $n = 0$ бўлганда квант осцилляторнинг энергияси

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

бўлиб, бунга нулинчи энергия дейилади. (40.19) натижани келиб чиқишидан кўринадики, классик осциллятор билан квант осциллятори тубдан фарқ қилади. Узилишга эга бўлган қаторни полином орқали ифодалаш қабул қилинган. (40.18) шарт бажарилганда (40.13) қаторни қуйидаги Чебишев — Эрмит полиноми кўринишнда ёзамиз

$$\varphi = (-1)^n e^{\eta^2} \frac{d^n e^{-\eta^2}}{d\eta^n} = H_n(\eta) \qquad (40.20)$$

У ҳолда (40.11) ечимни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\psi_n = C_n e^{-\frac{\eta^2}{2}} H_n(\eta). \qquad (40.21)$$

Бу ечимдаги коэффициент C_n ψ функциясининг нормаланганлик шартидан

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n \, dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0\omega}}\, C_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\eta^2} H_n(\eta) H_n(\eta) d\eta = 1 \qquad (40.22)$$

интегрални ҳисобласак,

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n! \sqrt{\pi}}} \left(\frac{m_0\omega_0}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}. \qquad (40.23)$$

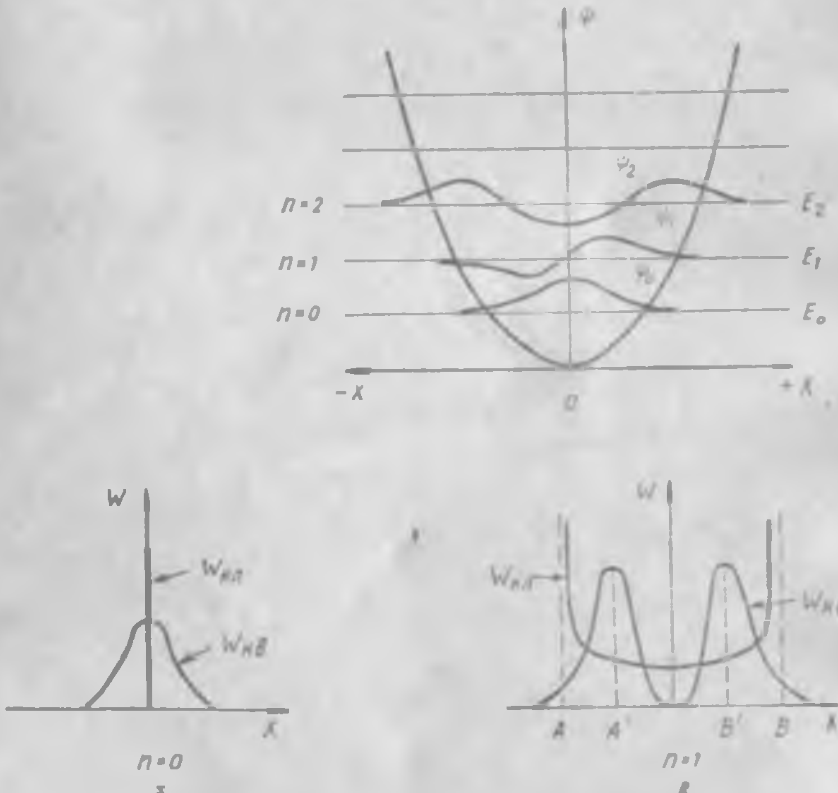
У ҳолда (40.21) ни умумий ҳолда қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right),$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0}}. \qquad (40.24)$$

Аниқланган натижани тасаввур қилиш учун n нинг бир қанча қийматларига мос келган хусусий энергиялар ва хусусий функциялар қийматларининг ифодаларини келтирайлик:

$$n = 0, \; E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}, \; \psi_0 = C_0 e^{-\frac{1}{2}\eta^2},$$



40.2- расм. Чизиқли гармоник осцилляторнинг энергетик спектри, хусусий функциялари (a) ва ($n=0$, 1 учун фазода топилиш эхтимоллиги зичлигининг тақсимланиши ($б$, $в$)

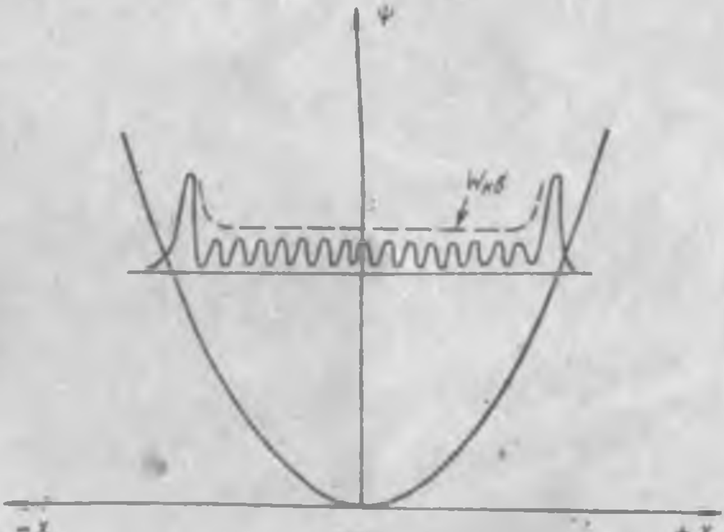
$$n = 1,\ E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0. \quad \psi_1 = C_1 2\psi e^{-\frac{1}{2}\eta^2},$$

$$n = 2,\ E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega_0,\ \psi_2 = C_2(4\eta^2 - 2)e^{-\frac{1}{2}\eta^2}.$$

40.2- расмда бу ифодалар график равишда тасвирланган. Классик ($W_{кл}$) ва квант ($W_{кв}$) осцилляторларининг топилиш эҳтимолликларининг зичлиги $n = 0$, 1 қийматлар учун 40.2- *б*, *в* расмларда алоҳида курсатилди. (40.19) дан n — нинг ортиши билан осцилляторнинг энергияси ҳам ортади. n нинг жуда катта қийматларида квант осцилляторининг топилиш эҳтимоллиги классик осцилляторнинг топилиш эҳтимоллигига яқинлашади (40.3- расм). Демак, юқори энергияларда квант ва классик осцилляторлар орасидаги фарқ камайиб боради.

4. Осцилляторнинг нолинчи энергияси. Квант механикаси нуқтаи назаридан осциллятор масаласини ечганимизда унинг энг кичик энергияси

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{} \tag{40.25}$$



40.3- расм. Чизиқли гармоник осцилляторнинг $n \to \infty$ да фазода топилиш эҳтимоллиги зичлигининг тақсимоти.

га тенг бўлиши аниқланди. Осцилляторнинг энергияси бундан кичик бўла олмайди. Микроолам заррачалари температура $T \to 0$ да ҳам ҳаракатдан тўхтамайдилар. Бу ҳол микроламнинг қандай хусусияти билан боғлиқлигини аниқлайлик. Осцилляторнинг тўла энергиясини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$E = \frac{<p_x^2>}{2m_0} + \frac{m_0 \omega_0^2 <x^2>}{2}. \qquad (40.26)$$

Ноаниқлик принципидан фойдаланиб $<p_x^2>$ ни $<x^2>$ орқали ифодалайлик. Маълумки,

$$<(\Delta x)^2> <(\Delta p_x)^2> \frac{\hbar^2}{2} \qquad (40.27)$$

да қилинган муҳокамага (14- §) асосан $(\Delta x)^2$ ни $<x^2>$ билан, $<(\Delta p_x)^2>$ ни $<p_x^2>$ билан алмаштириш мумкин. У ҳолда (40.27) муносабатдан

$$<p_x^2> = \frac{\hbar^2}{4<x^2>}$$

ни (40.26) га қўйсак,

$$E = \frac{\hbar}{8m_0<x^2>} + \frac{m_0 \omega_0^2 <x^2>}{2} \qquad 40.28)$$

келиб чиқади. Аниқланган (40.28) натижа $<x^2>$ нинг ҳеч қандай қийматида нолга айланмайди: $<x^2> \to 0$ бўлса, (40.28) да биринчи ҳад ∞ га интилади, $<x^2> \to \infty$ бўлса, иккинчи ҳад ∞ га интилади. Энди (40.28) нинг энг кичик қийматини аниқлайлик. Бунинг учун (40.28) ни $<x^2>$ бўйича бир марта дифференциаллаб, чиққан натижани нулга тенглаштириб $<x^2>$ нинг қайси қийматида E минимум бўлишини аниқлаймиз. Шу йўл билан топилган $<x^2>$ нинг қийматини (40.28) га қўйсак,

$$E_{\min} \geq \frac{\hbar\omega_0}{2} \qquad (40.29)$$

келиб чиқади.

Демак, квант осцилляторининг энергияси ҳеч қачон нолга тенг бўлмай, унинг энг кичик қиймати (40.25) формула билан аниқланар экан. Квант осцилляторининг энергияси нолга тенг бўлмаслиги (14- §) ноаниқлик принципи ёрдамида исботланди. Демак, квант осцилляторининг нолинчи энергияга эга бўлиши ноаниқлик принципи туфайли келиб чиқиб, микроламнинг объектив хусусиятидир. Тажриба ҳам бу хулосанинг тўғрилигини исботлайди. Маълумки, рентген нури кристалл панжарасининг тебраниши туфайли сочилади. Кристалл температурасини камайтирсак, унга мос ҳолда сочилишининг кўндаланг кесим юзаси ҳам камая бошлайди. Аммо кристалл температураси нулга яқинлашган сари сочилишнинг кўндаланг кесим юзаси нолгача камаймай, аниқ ўзгармас катталикка интилади. Демак, температура камайиши билан кристаллни ҳосил қилган осцилляторларнинг тебраниши нолгача камая олмайди, яъни паст температураларда ҳам энг кичик тебранишлар сақланиб қолади. Бу тажриба микроолам хусусияти ўзига хослигини, ундаги заррачалар доим ҳаракатда бўлишини, шу туфайли унинг координатаси ва импульсини бир вақтда ўлчаб бўлмаслигини, яна бир бор исботлайди.

Шунинг учун хам (6- §) микрооламда тўлқин ва корпускуляр хусусиятлар битта объектда мужассамлашган деганда «тўлқин» ва «корпускула» тушунчасини классик маънода тушуниш керак эмас. Классик корпускулагина фазонинг бирор нуктасида (ёки соҳасида) локал бўла олади, тўлқин ва корпускуляр хусусиятга эга булган микроолам заррачаси локал бўла олмайди. Бу микрооламнинг объектив хусусиятидир.

41- §. ОСЦИЛЛЯТОРНИ ЭНЕРГЕТИК ТАСАВВУРЛАШ

Заррача ҳолатини аниқловчи параметрларни хусусиятига қараб турлича тасаввурлаш қулай бўлади. Осцилляторни энергетик тасаввурлаш ҳам унинг ҳолатини тушунишни осонлаштиради.

Бу ҳолда тўла энергия оператори $\widehat{\mathscr{H}}$ диагонал матрицадан иборат бўлиб, унинг элементлари қуйидагича формула:

$$\mathscr{H}_{mn} = E_n \delta_{mn} \tag{41.1}$$

ёрдамида аниқланади. Бунда

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{41.2}$$

ёки матрица кўринишида қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\widehat{\mathscr{H}} = \begin{vmatrix} \frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar\omega_0 & 0 & 0 & 0 & \ldots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar\omega_0 & 0 & 0 & \ldots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix} \tag{41.3}$$

Маълумки, осцилляторни ҳар қандай $\Psi(x, t)$ ҳолатини стационар ҳолатлар суперпозициясидан иборат қилиб, ёзиш мумкин:

$$\Psi(x, t)=\sum_n C_n(0)\,\psi_n(x)\,e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}=\sum_n C_n(t)\,\psi_n(x). \qquad (41.4)$$

Бу ерда

$$\psi_n(x)=\frac{e^{-\frac{\eta^2}{2}}}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}\,x_0}}\,H_n(\eta).$$

C_n нинг қийматлар тўплами тўлқин функциясининг «E» тасаввуридаги кўриниши бўлади.

$\Psi_n(x, t)$ ҳолатда бўлгач заррача энергияси E_n ни топиш эҳтимоллиги

$$w(C_n)=|C_n(t)|^2=|C_n(0)|^2 \qquad (41.5)$$

бўлади.

Аниқланган натижадан кўринадики, бу эҳтимоллик вақтга боғлиқ эмас. Демак, энергия ҳаракат интеграли бўла олади. Энди координата операторини «E» тасаввурда ифодалайлик. Умумий назарияга кўра бу оператор матрица элементи

$$x_{mn}=\int\psi_m^*\,x\,\psi_n\,dx \qquad (41.6)$$

дан иборат бўлиши керак. Бу ерга ψ_m ва ψ_n ларни қўйсак

$$x_{mn}=x_0\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\eta^2}H_m(\eta)\,\eta\,H_n(\eta)\,d\eta,\quad x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m_0\,\omega_0}}. \qquad (41.7)$$

Бу интегралнинг қиймати қуйидагича:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\eta^2}H_m(\eta)\,\eta\,H_n(\eta)\,d\eta=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{n}{2}}, & m=n-1,\\[2mm] \sqrt{\dfrac{n+1}{2}}, & m=n+1.\end{cases} \qquad (41.8)$$

Буларни эътиборга олиб (41.6) интегрални δ_{mn} символи ёрдамида қуйидагича ёзиш мумкин:

$$x_{mn}=x_0\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{n-1,m}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\delta_{n+1,m}\right) \qquad (41.9)$$

Бу ердан кўринадики, координата $\widehat{x}$ матрицаси нулдан фарқли элементлари бош диагоналга қўшни бўлган матрица бўлади:

$$\hat{x} = x_0 \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1/2} & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ \sqrt{1/2} & 0 & \sqrt{2/2} & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot & \cdot \; \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \sqrt{2/2} & 0 & \sqrt{3/2} & \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix}$$

VI бобга доир масалалар

1. Нейтрон эни $a = 10^{-14}$ м бўлган бир ўлчовли чексиз чуқур потенциал ўра ичида турибди. Унинг минимал энергиясининг қийматини аниқланг.

Жавоби: $E_1 = 2,1$ МэВ.

2. Заррачанинг a кенгликдаги чексиз чуқур потенциал ўрада n-энергетик сатҳдаги ҳолати учун $< (\Delta x)^2 >$ ва $< (\Delta p_x)^2 >$ ларни ҳисобланг.

$$\text{Жавоби: } < (\Delta x)^2 > = \frac{a^2}{12}\left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2}\right), \quad < (\Delta p_x)^2 > = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{a^2}.$$

3. Массаси m_0 бўлган заррачанинг

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & \text{агар } x < 0, \\ 0 & \text{агар } 0 < x < a, \\ U_2 & \text{агар } x > a \end{cases}$$

потенциал майдондаги дискрет энергетик спектрини аниқловчи тенгламани келтириб чиқаринг ($E < U_1 < U_2$).

$$\text{Жавоби: } ka = n\pi - \arcsin\sqrt{\frac{E}{U_1}} - \arcsin\sqrt{\frac{E}{U_2}},$$

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_0 E}.$$

4. Асоси $2a$ ва баландлиги U_0 бўлган тенг ёнли учбурчак шаклдаги потенциал тўсиқнинг m_0 массали заррача учун $E < U_0$ энергиялардаги тиниқлигини ҳисобланг.

$$\text{Жавоби: } D = D_0 l^{-\frac{8\sqrt{2m_0}}{3\hbar U_0} a \sqrt{(U_0 - E)^3}}.$$

5. Массаси m_0 ва энергияси $E < U_0$ заррача учун

$$U(x) = U_0\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)$$

потенциал тўсиқнинг тиниқлигини топинг.

$$\text{Жавоби: } D = D_0 e^{-\frac{\pi a}{\hbar}\sqrt{\frac{2m_0}{U_0}}(U_0 - E)}.$$

6. Ихтиёрий шаклдаги потенциал тўсиқнинг тиниқлик ва қайтариш коэффициентларининг йиғиндиси бирга тенг бўлишини кўрсатинг.

7. Чизиқли гармоник осциллятор n-энергетик сатҳда бўлганда $<x^2>$ ва $<U(x)>$ ларни аниқланг.

Жавоби: $<x^2>_n = \frac{\hbar}{m_0 \omega_0}\left(n+\frac{1}{2}\right), <U(x)>_n =$

$$= \frac{\hbar \omega_0}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

8. Чизиқли гармоник осцилляторнинг турли импульс қийматлари эҳтимолликларининг тақсимланишини топинг.

Жавоби: $|\varphi_n(p_x)|^2 = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi m_0 \hbar \omega_0}} e^{-p_x^2/m_0 \hbar \omega_0} H_n^2\left(\frac{p_x}{\sqrt{m_0 \hbar \omega_0}}\right).$

9. Доимий $\vec{\mathcal{E}}_0$ электр майдонига жойлаштирилган m_0 массали ва e_0 зарядли чизиқли гармоник осцилляторнинг стационар энергетик сатҳларини ва тўлқин функцияларини аниқланг.

Жавоби: $E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \omega_0 + \frac{e_0^2 \mathcal{E}_0^2}{2m_0^2 \omega_0^2}, \ \psi_n(\eta) = C_n e^{-\frac{\eta^2}{2}} H_n(\eta),$

$$\eta = \left(\frac{m_0 \omega_0}{\hbar}\right)^{1/2}\left(x - \frac{e_0 \mathcal{E}_0}{m_0 \omega_0^2}\right), \ n = 0, 1, 2, \ldots .$$

10. m_0 массали зарраранинг

$$U(x) = \begin{cases} \infty, \text{ агар } x < 0, \\ \frac{1}{2} k x^2, \text{ агар } x > 0 \end{cases}$$

кўринишдаги майдонда ҳаракати учун энергиянинг хусусий қийматларини ҳисобланг.

Жавоби: $E_n = \left(2n+\frac{3}{2}\right)\hbar \omega_0, \ n = 1, 2, 3, \ldots$

VII БОБ

ЗАРРАЧАНИНГ МАРКАЗИЙ СИММЕТРИК ПОТЕНЦИАЛ МАЙДОНДАГИ ҲАРАКАТИ

Юқорида қайд этилгандек заррачанинг ҳаракати, ҳолат функцияси ва энергияси унинг қандай майдонда ҳаракат қилаётганига боғлиқ. Ҳозиргача бир ўлчовли потенциал майдондаги ҳаракатлар билан танишдик. Амалда шундай потенциал майдонлар ҳам учрайдики, уни бирор марказ ҳосил қилиб, у ана шу марказга нисбатан симметрик бўлади. Мисол тариқасида атом ядросининг кулон майдонини олиш мумкин. Шунинг учун ҳам заррачанинг марказий симметрик потенциал майдондаги ҳаракати масаласининг натижаси биринчи ўринда атом структурасини ўрганиш, ундаги электронларнинг ҳолат функциясини ва энергиясини аниқлаш учун хизмат қилади. Бундай масалани сферик координаталар системасида ечиш қулайдир. Шунинг учун энг аввало Шредингер тенгламасини сферик координаталар системасида ифодалаш лозим.

42- §. ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИНИ СФЕРИК КООРДИНАТАЛАР СИСТЕМАСИДА ИФОДАЛАШ. ЎЗГАРУВЧИЛАРНИ АЖРАТИШ

Бунинг учун Шредингер тенгламаси

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}[E - U]\psi = 0 \tag{42.1}$$

даги оператор ∇^2 ни сферик координаталар системасида ифодалаш лозим. Маълумки, Декарт координаталар системаси ўзгарувчилари x, y, z билан, сферик координаталар системаси ўзгарувчилари r, ν, φ ўртасида қуйидагича боғланишлар мавжуд (13.1- расм)

$$x = \rho\cos\varphi, \quad y = \rho\sin\varphi, \quad z = r\cos\nu, \quad \rho = r\sin\nu. \tag{42.2}$$

Буларни ҳисобга олсак ∇^2 операторининг сферик координаталар системасидаги кўриниши қуйидагича бўлади:

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\nu,\varphi}^2. \tag{42.3}$$

Бу ерда

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right), \tag{42.4}$$

$$\nabla_{\nu,\varphi}^2 = \nabla_\nu^2 + \frac{1}{\sin^2\nu}\nabla_\varphi^2, \tag{42.5}$$

$$\nabla_\nu^2 = \frac{1}{\sin\nu}\frac{\partial}{\partial\nu}\left(\sin\nu\frac{\partial}{\partial\nu}\right), \quad \nabla_\varphi^2 = \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{42.6}$$

Буларни эътиборга олиб (42.1) тенгламани сферик координаталар системасида қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\left[\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\nu,\varphi}^2\right]\psi(r,\nu,\varphi) + k^2(r)\psi(r,\nu,\varphi) = 0. \tag{42.7}$$

Бу ерда

$$k^2(r) = \frac{2m_0}{\hbar^2}[E - U(r)] \tag{42.8}$$

Демак, марказий симметрик майдонда потенциал энергия фақат радиус векторнинг функцияси бўлиб марказга нисбатан симметрикдир. Бундай майдонда ҳаракатланаётган заррачанинг ҳолат функцияси ва энергиясини аниқлаш учун (42.7) тенгламани ўзгарувчиларнинг қуйидаги ўзгариш соҳасида

$$0 \leqslant r \leqslant \infty, \quad 0 \leqslant \upsilon \leqslant \pi, \quad 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi \tag{42.9}$$

ечиш лозим. (42.7) тенглама уч ўлчовли, иккинчи тартибли, хусусий ҳосилали дифференциал тенглама бўлиб, уни ўзгарувчиларни ажратиш методига биноан ечиш мумкин. Бунинг учун (42.7) тенгламанинг ечимини қуйидаги иккита мустақил функцияларнинг кўпайтмасидан иборат қилиб оламиз:

$$\psi(r,\nu,\varphi) = R(r)\cdot Y(\nu,\varphi). \tag{42.10}$$

Бу ерда R фақат r ўзгарувчининг функцияси бўлиб, Шредингер тенгламаси ечимининг радиал ташкил этувчиси (**радиал функция**) дейилади. Y функция ν ва φ ўзгарувчиларга боғлиқ бўлиб, уни **Шар функцияси** дейилади. (42.10) ни (42.7) тенгламага қўйиб, операторларга боғлиқ бўлмаган функцияларни ундан чиқарамиз. Ҳосил бўлган натижанинг ҳар бир ҳадини $R(r)Y(\nu,\varphi)$ га бўлиб ва r^2 га кўпайтириб, бир хил ўзгарувчига боғлиқ бўлган ҳадларни тенгламанинг бир томонига ўтказсак, қуйидаги тенглик келиб чиқади:

$$\frac{\nabla_{\nu,\varphi}^2 Y(\nu,\varphi)}{Y(\nu,\varphi)} = -\frac{r^2\nabla_r^2 R(r)}{R(r)} - r^2 R(r). \tag{42.11}$$

Бу тенглама ўринли бўлиши учун унинг чап ва ўнг томони бир хил доимийликка тенг бўлиши керак. Ана шу доимийликни λ дейлик. У ҳолда (42.11) ни иккита мустақил тенгламаларга ажратиш мумкин

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[k^2(r) - \frac{\lambda}{r^2}\right]R(r) = 0, \tag{42.12}$$

$$\nabla_{\nu,\varphi}^2 Y(\nu,\varphi) + \lambda Y(\upsilon,\varphi) = 0. \tag{42.13}$$

Бу ерда (42.12) дифференциал тенглама фақат битта r ўзгарувчига боғлиқ бўлиб уни мустақил ечиш мумкин.

Юқоридаги усул билан (42.13) тенгламани ҳам иккига ажратамиз. Бунинг учун (42.13) дифференциал тенгламанинг ечимини

$$Y(\nu,\varphi) = \theta(\nu)\Phi(\varphi) \tag{42.14}$$

кўринишда ёзамиз. (42.14) ечимни (42.13) га қўйилик ва (42.5) ни хисобга олайлик:

$$\nabla_\nu^2[\theta(\nu)\Phi(\varphi)]+\frac{1}{\sin^2\nu}\nabla_\varphi^2[\theta(\nu)\Phi(\varphi)]+\lambda\,\theta(\nu)\Phi(\varphi)=0.$$

Операторларга боғлиқ бўлмаган функцияларни улардан чиқарайлик

$$\Phi(\varphi)\nabla_\nu^2\theta(\nu)+\frac{\theta(\nu)}{\sin^2\nu}\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi)+\lambda\,\theta(\nu)\Phi(\varphi)=0.$$

Бу ерда ҳар бир ҳадни $\sin^2\nu$ га кўпайтириб, $\theta(\nu)\Phi(\varphi)$ га бўлсак ва бир хил номаълумларни тенгламанинг бир томонига ўтказсак

$$\sin^2\nu\,\frac{\nabla_\nu^2\theta(\nu)}{\theta(\nu)}+\lambda\sin^2\nu=-\frac{\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} \tag{42.15}$$

ҳосил бўлади. Бу ердан кўринадики, тенгламанинг чап томони фақат ν ўзгарувчига, ўнг томони эса фақат φ ўзгарувчига боғлиқ. (42.15) тенглама ўринли бўлиши учун унинг чап ва ўнг томонлари бир хил доимийликка тенг бўлиши керак. Ана шу доимийлик m^2 бўлсин. У ҳолда (42.15) ни иккига ажратиб ёзиш мумкин:

$$\nabla_\nu^2\theta(\nu)+\left[\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\nu}\right]\theta(\nu)=0, \tag{42.16}$$

$$\nabla_\varphi^2\Phi(\varphi)+m^2\Phi(\varphi)=0. \tag{42.17}$$

Шундай қилиб, учта ўзгарувчи r, ν, φ ларга боғлиқ бўлган (42.7) тенглама учта мустақил (42.12), (42.16) ва (42.17) тенгламаларга ажради. λ, m ларга ўзгарувчиларни ажратиш доимийси дейилади. Уларнинг оладиган қийматлари ва маъноси билан тенгламаларни ечиш жараёнида танишамиз. Юқоридаги (42.12), (42.16) ва (42.17) тенгламаларни ечиб, аниқланган натижаларни (42.10) га қўйсак марказий симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган заррача учун ёзилган (42.7) тенгламанинг ечимини топган бўламиз.

43- §. АЗИМУТАЛ ФУНКЦИЯНИ АНИҚЛАШ

Бу функция (42.17) тенгламани ечиш туфайли топилади. Уни қуйидагича ёзамиз:

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m^2\Phi(\varphi)=0. \tag{43.1}$$

Бу тенгламанинг ечими қуйидагича бўлади:

$$\Phi(\varphi) = C e^{im\varphi}. \tag{43.2}$$

Ўзгарувчиларни ажратиш туфайли ҳосил бўлган (43.1) тенгламанинг ечими ҳам Шредингер тенгламасининг ечими ψ га қўйилган умумий шартларни қаноатлантириши керак. Жумладан, ечим бир қийматли бўлиши керак. $\Phi(\varphi)$ функциянинг бир қийматли бўлиш шарти қуйидагича бўлади:

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi).$$

Бу ерга (43.2) ечимни қўйсак, $\Phi(\varphi)$ функция бир қийматли бўлиши учун

$$e^{im\,2\pi} = 1 \tag{43.3}$$

бажарилиши кераклиги келиб чиқади. Эйлер формуласи $e^{ix} = \cos x + i\sin x$ ни эътиборга олсак, (43.3) шартни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\cos m\,2\pi + i\sin m\,2\pi = 1. \tag{43.4}$$

Равшанки, охирги шарт m нинг қуйидаги қийматларида бажарилади:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \tag{43.5}$$

Демак, $\Phi(\varphi)$ функция m нинг (43.5) қийматларидагина бир қийматли бўлади. (43.5) дан кўринадики, бу қийматлар узлуксиз эмас, дискретдир. Шунинг учун ўзгарувчиларни ажратиш доимийси бўлган m ни квант сони дейилади. Унинг маъносини (магнит квант сони эканлигини) ва юқори чегарасини келгуси параграфларда (45- , 46- §) аниқлаймиз.

(43.2) ечимдаги доимий катталик C ни $\Phi(\varphi)$ функциясининг нормаланганлик шарти

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi)\,\Phi(\varphi)\,d\varphi = 1$$

дан фойдаланиб аниқлаймиз. Бу ерга (43.2) ни қўйсак,

$$\int_0^{2\pi} C^2 e^{-im\varphi}\, e^{im\varphi}\, d\varphi = \int_0^{2\pi} C^2\, d\varphi = 1$$

келиб чиқади. Бу ердан кўринадики, $C = \sqrt{1/2\pi}$ дир. У ҳолда (44.2) ечимни қуйидагича ёзамиз:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\varphi}. \tag{43.6}$$

Шундай қилиб, квант сони m га қиймат бериб $\Phi(\varphi)$ функциянинг турли хусусий қийматлари топилади. Шунинг учун $\Phi(\varphi)$ функцияга m индекс қўйилади.

44- §. ҚУТБ ФУНКЦИЯНИ АНИҚЛАШ

Бунинг учун (42.16) тенгламани ечиш лозим. Уни (42.6) ни ҳисобга олиб қуйидагича ёзамиз:

$$\frac{d}{d\nu}\left[\sin\nu\,\frac{d\theta(\nu)}{d\nu}\right]+\left[\lambda-\frac{m^2}{\sin^2\nu}\right]\theta(\nu)\sin\nu=0. \qquad (44.1)$$

Охирги тенгламада $\eta=\cos\nu$ янги ўзгарувчига ўтамиз. У ҳолда (44.1) тенгламанинг кўриниши ўзгаради:

$$\frac{d}{d\nu}\left[(1-\eta^2)\frac{d\theta}{d\eta}\right]+\left(\theta-\frac{m^2}{1-\eta^2}\right)\theta=0. \qquad (44.2)$$

Бу тенгламанинг ечимини

$$\theta(\nu)=(1-\eta^2)^{\frac{m}{2}}U \qquad (44.3)$$

кўринишида излаймиз. Бу ерда U ўзгарувчи η га боғлиқ бўлган янги функция, $m>0$ ҳолда $\eta=\pm1$ бўлгандаги махсус нуқталардан ҳоли бўлиш мумкин. (44.3) ни (44.2) га қўйсак, U га нисбатан янги тенглама келиб чиқади:

$$(1-\eta^2)\frac{d^2U}{d\eta^2}-2\eta(m+1)\frac{dU}{d\eta}+[\lambda-m(m+1)]U=0. \qquad (44.4)$$

Охирги тенгламанинг ечимини қуйидаги кўп ҳадли кўринишда излаймиз:

$$U=\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\eta^\nu. \qquad (44.5)$$

(44.5) кўп ҳадли (44.4) тенгламанинг ечими бўлиши учун уни қаноатлантириши керак. Шунинг учун (44.5) ни (44.4) га қўямиз:

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}\{\nu(\gamma-1)a_\nu\eta^{\nu-2}+[\lambda-(\nu+m)(\nu+m+1)]a_\nu\eta^\nu\}=0 \qquad (44.6)$$

Математика курсидан маълумки, (44.4) дифференциал тенгламанинг ечими (44.5) кўринишдаги кўп ҳадли бўлиши учун (44.6) алгебраик тенгламада бир хил даражали η номаълумлар олдидаги коэффициентларнинг алгебраик йиғиндиси нолга тенг бўлиши керак. Биз бу шартни ν- даражали η^ν нинг олдидаги коэффициентлар учун ёзайлик:

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \{(\nu+2)(\nu+1)\,a_{\nu+2} - [(\nu+m)(\nu+m-1) -$$

$$- \lambda]\,a_\nu\}\,\eta^\nu = 0. \qquad (44.7)$$

Демак, шартга кўра (44.7) даги коэффициентларнинг йиғиндиси нолга тенг бўлиши керак

$$(\nu+2)(\nu+1)\,a_{\nu+2} - [(\nu+m)(\nu+m-1) - \lambda]\,a_\nu = 0.$$

Бу ердан қуйидаги рекуррент формула

$$a_{\nu+2} = a_\nu \frac{(\nu+m)(\nu+m+1)-\lambda}{(\nu+2)(\nu+1)} \qquad (44.8)$$

келиб чиқади. Бу муносабат ёрдамида ν- ҳад коэффициенти a_ν маълум бўлса, $\nu+2$- ҳад коэффициенти $a_{\nu+2}$ ни аниқлаш мумкин, ўз навбатида, $a_{\nu+2}$ ёрдамида $a_{\nu+4}$ ни топиш мумкин ва ҳоказо. (44.8) каби формулани (44.5) қаторнинг тоқ номерли ҳадлари учун ҳам ёзиш мумкин.

Қатор (44.5) кўринишидаги ечим ν ортиши билан чексиз ортиб бораверади. Аммо Шредингер тенгламасининг ечими ψ чекли бўлиши керак. Демак (44.5) қатор ҳам чекли бўлиши керак. (44.5) қаторни чекли қилиш учун қандайдир ҳаддан бошлаб узиш лозим. Ана шу узилаётган ҳаднинг номери $\nu = q$ бўлсин. У ҳолда узиш шарти қуйидагича: $a_q \neq 0$, аммо $a_{q+2}=0$. Натижада a_{q+2} ёрдамида аниқланувчи a_{q+4} ҳад ҳам ноль бўлади ва ҳоказо. (44.8) дан кўринадики, қатор $\nu = q$- ҳаддан бошлаб узилиши учун

$$\lambda = l(l+1) \qquad (44.9)$$

бўлиши керак. Бу ерда $l = m + q$ — орбитал квант сони деб юритилади. Узилаётган ҳад номери q қуйидаги қийматларни олиши мумкин:

$$q = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ \ldots$$

$m \geqslant 0$ эканлигини эътиборга олсак, (44.9) формуладаги квант сони қуйидаги қийматларни олади:

$$l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ \ldots$$

Демак, l ҳам дискрет қийматлар олади. $l = m + q$ муносабатдан $m \leqslant l - q$ бўлиб, q нинг энг кичик қиймати $\nu = 0$ эканлигини эътиборга олсак, m нинг энг катта қиймати $m = l$ бўлади. Демак, магнит квант сони m нинг қиймати юқоридан орбитал квант сони l билан чегаралангандир:

$$m \leqslant l. \qquad (44.10)$$

Қатори қандайдир ҳаддан бошлаб узиладиган кўп ҳадлини полином дейилади. (44.5) қаторни (45.8) шартни ҳисобга олиб полином кўринишидэ қуйидагича ёзиш мумкин:

$$U = \frac{1}{2^l\, l!}\, \frac{d^{\,l+m}}{d\eta^{l+m}} (\eta^2 - 1)^l. \qquad (44.11)$$

Бу натижа $m = 0$ бўлганда Лежандр полиноми

$$P_l(\eta) = \frac{1}{2^l\, l!}\, \frac{d^l (\eta^2 - 1)^l}{d\eta^l} \qquad (44.12)$$

га ўтади (шу мақсадда (44.11) формулада $\frac{1}{2^l\, l!}$ коэффициент олинди). (44.11) ни (44.3) га қўйсак,

$$\theta_l^m(\theta) = C_l^m P_l^m(\eta), \quad P_l^m(\eta) = (1 - \eta^2)^{\frac{m}{2}} U \qquad (44.13)$$

келиб чиқади. Бу ердаги C_l^m коэффициент $\theta_l^m(\upsilon)$ функциясининг нормаланганлик шарти

$$\int_0^{2\pi} \theta_l^m \theta_l^m \sin\theta\, d\theta = 1 \qquad (44.14)$$

ёрдамида аниқланади:

$$C_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}. \qquad (44.15)$$

У ҳолда (44.13) ечимни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\theta(\eta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}\, \frac{(1-\eta^2)^{m/2}}{2^l\, l!}\, \frac{d^{\,l+m}(\eta^2 - 1)^l}{d\eta^{l+m}} \qquad (44.16)$$

Демак, l ва m ларга қиймат бериш билан марказий симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган заррача учун ёзилган Шредингер тенгламасининг $\theta(\theta)$ ташкил этувчисининг турли хусусий кўринишлари топилади. (44.16) натижа m нинг мусбат қиймати учун топилди. m нинг манфий қийматлари учун эса уни қуйидаги муносабат ёрдамида

$$P_l^m(\eta) = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} P_l^{-m}(\eta) \qquad (44.17)$$

ўзгартириб ёзиш мумкин.

Шундай қилиб, (44.16) натижа (44.17) ни эътиборга олган ҳолда m нинг қуйидаги қийматлари учун тўғридир: $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm l$.

45- §. ШАР ФУНКЦИЯСИ

Аниқланган $\Phi(\varphi)$ ва $\theta(\theta)$ функцияларни $Y(\theta, \varphi) = \theta(\theta)\Phi(\varphi)$ ечимга қўйиб Шар функцияси

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(1-\eta^2)^{m/2}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \times$$

$$\times \frac{d^{l+m}}{d\eta^{l+m}} (\eta^2 - 1)^l e^{im\varphi} \qquad (45.1)$$

ни аниқлаш мумкин. Бу ердан кўринадики m ва l квант сонларига қиймат бериб, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ нинг турли хусусий кўринишлари топилади. m нинг манфий қийматларига мос келган Y_l^m ни аниқлаш учун (44.17) га мувофиқ (45.1) ни $(-1)^m$ га кўпайтириш лозим.

m ва l квант сонларининг физик маъносини аниқлаш учун шар функциясига шундай оператор билан таъсир этишимиз керакки, Y_l^m бу операторнинг хусусий функцияси бўлсин. Ўзгарувчиларни ажратиш темасидан (42- §) маълумки, (42.13 формулага қаранг)

$$\nabla^2_{\theta,\varphi} Y(\theta, \varphi) = -\lambda Y(\theta, \varphi) \qquad (45.2)$$

Демак, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ функция $\nabla^2_{\theta,\varphi}$ операторининг хусусий функцияси. Квант механикасини математик аппаратидан маълумки (13- §), $\nabla^2_{\theta,\varphi}$ сфера учун Лаплас оператори бўлиб, марказий симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган заррачанинг тўла ҳаракат миқдор моменти $(\widehat{M})$ квадрати операторини аниқлайди

$$\widehat{M^2} = \widehat{M}_x^2 + \widehat{M}_y^2 + \widehat{M}_z^2 = -\hbar^2 \nabla^2_{\theta,\varphi} \qquad (45.3)$$

Буни ва $\lambda = l(l+1)$ эканлигини эътиборга олсак, (45.2) муносабатни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\widehat{M^2} Y_l^m(\theta, \varphi) = -\hbar^2 \nabla^2_{\theta,\varphi} Y_l^m(\theta, \varphi) =$$
$$= -\hbar^2 l(l+1) \times Y_l^m(\theta, \varphi). \qquad (45.4)$$

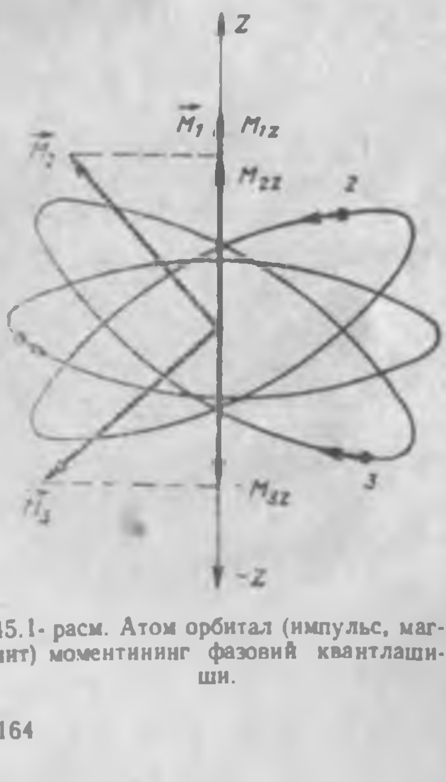
Демак,

$$M = \hbar\sqrt{l(l+1)}.$$

Орбитал квант сони l га қиймат бериш билан марказий симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган заррачанинг тўла ҳаракат миқдор моменти аниқланади. Хусусий функция таърифига (15-§) кўра бу биргаликда ўлчанувчи операторларнинг хусусий функцияси бўлади. Ўзаро коммутацияланувчи операторлар биргаликда ўлчана олади. Шунинг учун $\hat{\vec{M}}^2$ билан коммутацияланувчи операторларни топишимиз керак. Исботлаш мумкинки,

$$[\hat{\vec{M}}^2, \hat{M}_x] = [\hat{\vec{M}}^2, \hat{M}_y] = [\hat{\vec{M}}^2, \hat{M}_z] = 0. \qquad (45.5)$$

Аммо $\hat{M}_x$, $\hat{M}_y$ ва $\hat{M}_z$ операторлари ўзаро коммутациялашмайди. Шунинг учун $\hat{\vec{M}}^2$ нинг хусусий функцияси бўлган Y_l^m яна $\hat{M}_x$, $\hat{M}_y$ ва $\hat{M}_z$ ларнинг бирортасини хусусий функцияси бўлиши мумкин. (45.1) формуладан кўринадики, Y_l^m функция $\hat{M}_z$ нинг хусусий функцияси бўла олади:



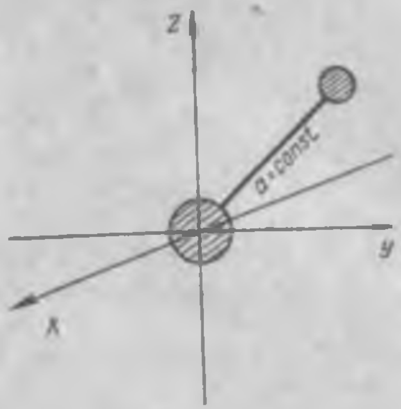
45.1- расм. Атом орбитал (импульс, магнит) моментининг фазовий квантлашиши.

$$\hat{M}_z Y_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi). \qquad (45.6)$$

У ҳолда $Y_l^m(\theta, \varphi)$ функция $\hat{M}_x$ нинг ҳам, $\hat{M}_y$ нинг ҳам хусусий функцияси бўлолмайди. Аммо Y_l^m ни шундай танлаш мумкинки, $\hat{M}_x$ нинг ёки $\hat{M}_y$ нинг хусусий функцияси бўлсин. У ҳолда Y_l^m қолган иккита операторнинг ($\hat{M}_y$, $\hat{M}_z$ ёки $\hat{M}_x$, $\hat{M}_z$) хусусий функцияси бўлолмайди. (45.6) формуладан

$$M_z = m\hbar \qquad (45.7)$$

келиб чиқади. Демак, m квант сони марказий симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган заррача тўла (орбитал) ҳаракат миқдор моментининг бирор танланган (z) йўналишига проекциясини аниқлайди (45.1-расм).



46.1-расм. Ротатор масаласини тушунтиришга доир.

46-§. РОТАТОР

Ротатор деб ўзаро боғланган ва бири иккинчиси атрофида айланма ҳаракат қилувчи иккита заррачалар системасига айтилади (46.1-расм). Бунга икки атомли молекулаларни (масалан, H_2, O_2 ва ҳоказо) мисол қилиш мумкин. Бундай системанинг ҳолат функцияси ва энергиясини топиш учун марказий симметрик майдонда заррачанинг ҳаракати масаласининг натижаларидан фойдаланиш мумкин. Системани ташкил этган заррачалар орасидаги масофа ўзгармас бўлса

$$r = a = \text{const}, \tag{46.1}$$

ротаторнинг ҳолат функцияси шар функцияси

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; \times$$

$$\times\, \frac{\sin^m\theta\, d^{\,l+m}}{d(\cos\theta)^{\,l+m}}(-\sin^2\theta)^l\, e^{im\varphi} \tag{46.2}$$

ёрдамида тўла аниқланади. Ротаторнинг энергиясини аниқлаш учун эса Шредингер тенгламаси (42.12)

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[k^2(r) - \frac{\lambda}{r^2}\right] R(r) = 0 \tag{46.3}$$

ни ечиш керак. $r = \text{const}$ бўлганлиги сабабли (46.3) нинг биринчи ҳади нулга тенг, $R(r) \neq 0$. Шунинг учун (46.3) дан

$$k^2(r) = \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U(r)) = \frac{\lambda}{r^2} \equiv \frac{l(l+1)}{r^2} \tag{46.4}$$

ҳосил бўлади. $U(r) = 0$ деб ҳисоблаш мумкин. У ҳолда (46.4) формуладан

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J} \qquad (46.5)$$

келиб чиқади. Бу ерда $J = m_0 r^2 = m_0 a^2$ — ротаторнинг инерция моменти. Демак, ротаторнинг энергияси орбитал квант сони l га қиймат бериш билан аниқланиб, унинг инерция моменти J га тескари пропорционал бўлади. Аммо энергиянинг E_l хусусий қийматига мос келган хусусий функция $Y_l^m(\theta, \varphi)$ орбитал квант сонидан ташқари m магнит квант сонига ҳам боғлиқ. Орбитал квант сони l нинг ҳар бир қийматига $-l, -(l-1), -(l-2), \ldots, 0, \ldots, l-2, l-1, +l$ жами $2l+1$ та магнит квант сони m тўғри келади. Демак, E_l нинг ҳар бир хусусий қийматига бир-биридан магнит квант сони m билан фарқ қилувчи $2l+1$ та ўзаро ортогонал бўлган шар функцияси мос келади. Бошқача айтганда бу ҳолат функцияларининг ҳар бири ротатор орбитал моменти $\vec{M}$ нинг ихтиёрий Z ўқига проекциясининг қиймати билан бир-биридан фарқ қилади. Энергиянинг битта қийматига ҳар хил ҳолат функцияларининг мос келишига *ҳолатнинг турланиши* дейилади. Бу тушунча квант механикаси учун муҳим аҳамиятга эгадир. $N = 2l+1$ қийматга *турланиш даражаси* дейилади. Бу ердан кўринадики турланмаган ҳоллар ҳам бўлиши мумкин. $l = 0$ бўлганда $N = 1$ бўлиб, энергиянинг битта қийматига битта ҳолат функцияси Y_0^0 мос келади. Шунинг учун квант сонининг бу қийматларига мос келган ҳолатни *турланмаган ҳолат* дейилади.

Орбитал квант сонининг турли қийматларига мос келган ҳолатларни алоҳида қуйидагича номлаш қабул қилинган

$l = 0$	s — ҳолат;	$l = 4$	g — ҳолат;
$l = 1$	p — ҳолат;	$l = 5$	h — ҳолат;
$l = 2$	d — ҳолат;	$l = 6$	i — ҳолат;
$l = 3$	f — ҳолат;	$l = 7$	j — ҳолат.

Турланиш таърифига кўра s ҳолат бир каррали турланган (турланмаган), p ҳолат — 3 каррали, d ҳолат — 5 каррали, f ҳолат — 7 каррали, g ҳолат — 9 каррали, h ҳолат — 11 каррали, i ҳолат — 13 каррали ва ҳ. к. турлангандир. Мисол сифатида ротаторнинг s ва p ҳолатлари билан танишайлик. Уларнинг энергиялари ва ҳолат функциялари қуйидаги жадвалда келтирилган:

орбитал квант сони	ҳолат	энергия	магнит квант сони	ҳолат функцияси	$\lvert Y_l^m \rvert^2$
0	s	$E_0 = 0$	0	$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$1/4\pi$
			-1	$Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin\theta$	$\frac{3}{8}\pi \sin^2\theta$
1	p	$E_1 = \frac{\hbar^2}{J}$	0	$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$	$\frac{3}{4}\pi \cos^2\theta$
			$+1$	$Y_1^{+1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin\theta$	$\frac{3}{8}\pi \sin^2\theta$

Ҳолат функцияси маълум бўлса, қуйидаги формула

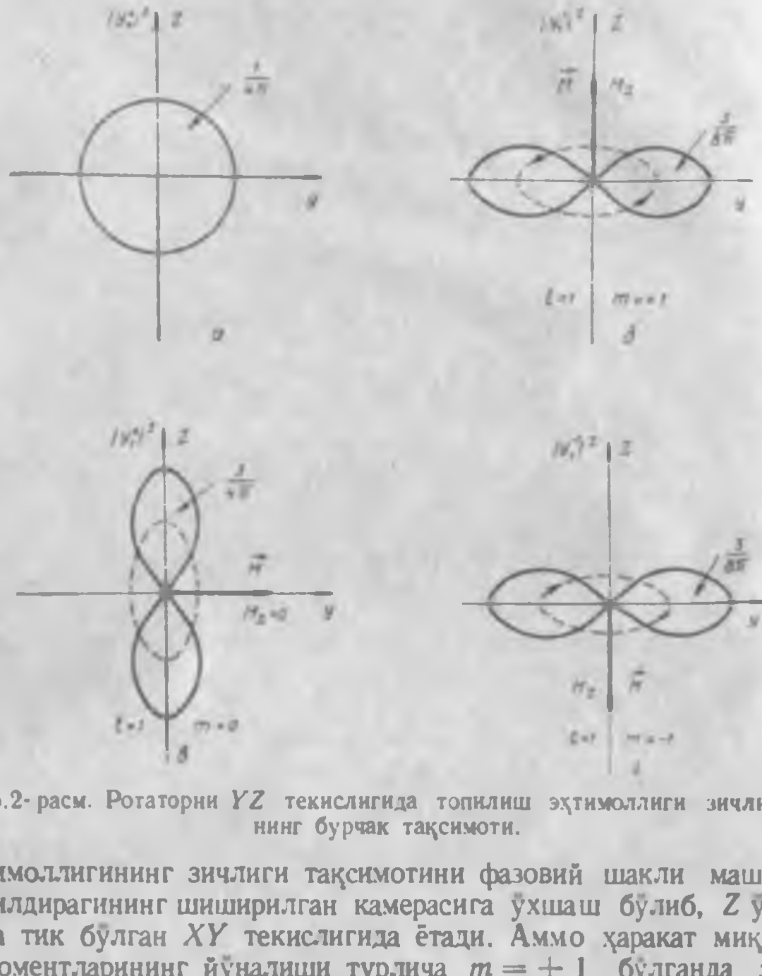
$$dw(\theta, \varphi) = |Y_l^m|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \qquad (46.6)$$

ёрдамида ротатор заррачаси сферанинг сиртида θ ва $\theta + d\theta$, φ ва $\varphi + d\varphi$ бурчаклар интервалида топилиши эҳтимоллигини аниқлаш мумкин.

$|Y_l^m|^2$ катталик φ га боғлиқ бўлмаганлиги сабабли (46.6) ифодани φ бўйича интеграллаб

$$dw(\theta) = |Y_l^m|^2 \, 2\pi \sin\theta \, d\theta \qquad (46.7)$$

ни аниқлаймиз. Бу ифода ротаторни θ ва $\theta + d\theta$ бурчак интервалида топилиши эҳтимоллигини билдиради. $dw(\theta)$ нинг YZ текислигидаги графиги s ҳолатдаги ва p ҳолатдаги ротатор учун 46.2-расм *а*, *б*, *в*, *г* ларда келтирилган. Тақсимотни тўла тасаввур қилиш учун шаклларни OZ ўқи атрофида тўла бир марта айлантириш керак. У ҳолда s холат учун сфера келиб чиқади. Демак, s ҳолатдаги заррачанинг $M = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ формулага мувофиқ орбитал моменти нолга тенг бўлиб, унинг марказ атрофидаги топилиш эҳтимоллиги сферик симметрикдир. p ҳолат уч каррали турланган. Улар бир-биридан ҳаракат миқдор моментларининг йўналиши билан фарқ қилади. $l = 1$, $m = 0$ бўлганда заррача топилиш эҳтимоллигининг зичлиги Z ўқи бўйича чўзилган бўлиб фазовий шакли (OZ — ўқи атрофида айлантириш туфайли) пиллага ўхшаган бўлади. Бу ҳолда заррача ҳаракат миқдор моментининг йўналиши эса Z ўққа тик бўлади. $l = 1$, $m = \pm 1$ квант сонларига мос келган ҳолатда заррача топилиши эҳ-



46.2-расм. Ротаторни YZ текислигида топилиш эҳтимоллиги зичлиги-нинг бурчак тақсимоти.

тимоллигининг зичлиги тақсимотини фазовий шакли машина ғилдирагининг шиширилган камерасига ўхшаш бўлиб, Z ўқига тик бўлган XY текислигида ётади. Аммо ҳаракат миқдор моментларининг йўналиши турлича $m = +1$ бўлганда заррача ҳаракат миқдор моменти $\vec{M}$ Z ўқи бўйлаб йўналган бўлса, $m = -1$ бўлганда Z ўқига тескари йўналган бўлади. Шар функциясининг юқоридаги хусусиятлари барча марказий симметрик потенциал майдонларга ҳам хосдир.

Ҳолатнинг турланиши майдон потенциалининг сферик симметриклигида, турли йўналишларнинг эквивалентлигидандир. Агарда атом ёки ротатор бирор магнит майдонига жойлаштирилган бўлса, йўналишларнинг симметриклиги бузилади, демак, турланиш ҳам қисман ёки тўла йўқолади.

47-§. РАДИАЛ ФУНКЦИЯНИ АНИҚЛАШ

Бу функцияни аниқлаш учун қуйидаги тенгламани ечишимиз керак:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \left[r^2 k^2 (r) - \lambda\right] R = 0. \qquad (47.1)$$

Бу ерда

$$k^2 (r) = \frac{2 m_0}{\hbar^2} [E - U (r)].$$

Демак, радиал функцияни топишимиз учун потенциал энергиянинг r ўзгарувчига қандай боғлиқлигини билиш зарур. Фараз қилайлик, марказий симметрик потенциал майдонни заряди $+Ze$ бўлган атом ядроси ҳосил қилган бўлсин. (Z — протонлар сони.) Унинг майдонида битта электрон ҳаракат қилсин. Бундай атомлар (H, He^+, Li^{++} ва ҳ. к.) водородсимон атомлар дейилади.

У ҳолда потенциал энергия қуйидаги формула билан аниқланади:

$$U (r) = \int_r^{\infty} f (r) dr = - \int_r^{\infty} \frac{Ze \cdot e}{r^2} dr = - \frac{Ze^2}{r}. \qquad (47.2)$$

Буни, $k (r)$ ва λ ни эътиборга олиб (47.1) ни қуйидагича ёзамиз:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left\{E - \left[- \frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l (l+1)}{2 m_0 r^2}\right]\right\} R = 0. \qquad (47.3)$$

Охирги тенгламани яна қуйидагича ҳам ифодалаш мумкин:

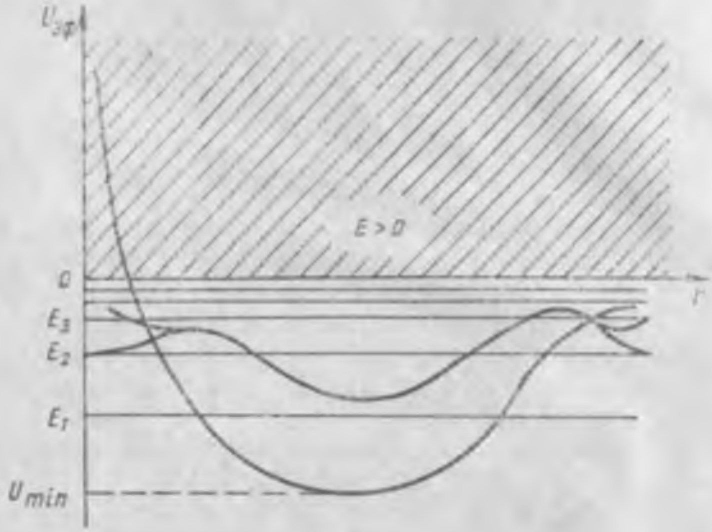
$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U_{эф} (r)) R = 0. \qquad (47.4)$$

Бу ерда

$$U_{эф} = - \frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l (l+1)}{2 m_0 r^2} \qquad (47.5)$$

эффектив потенциалдир. Водородсимон атомда электроннинг ҳаракати (47.5) формула билан аниқланувчи эффектив потенциал майдонда заррачанинг ҳаракатига эквивалентдир. (47.5) формуланинг ўнг томонидаги биринчи ҳад электрон билан ядронинг Кулон қонунига биноан ўзаро таъсир потенциал энергияси, иккинчи ҳад эса электроннинг ядро атрофида айланма ҳаракати туфайли ҳосил бўлган марказдан қочирма куч билан боғлиқдир.

47.1-расмда эффектив потенциал энергиянинг r га боғлиқлик графиги келтирилган. У ердан кўринадики, потенциал энергия



47.1-расм. Водород атомида «эффектив потенциал» нинг масофага қараб ўзгариши ва радиал функция учун Шредингер тенгламаси ечимларини схематик кўрсатиш.

$$r = r_0 = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m_0 z e^2}$$

нуқтада $U_{\min} = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{2\hbar^2 l(l+1)}$ га тенг минимал энергияга эга. Демак потенциал энергия чуқурликка эга: $r_0 > r \to 0$ бўлганда $U_{эф} \to \infty$ бўлади, $r_0 < r \to \infty$ бўлганда эса потенциал энергия $U_{эф} \to 0$, яъни потенциал чуқурлик «девор»лари симметрик эмас. Агарда $E > 0$ бўлса электрон потенциал чуқурлик ичида бўлмайди, демак эркин ҳаракат қилади. У ҳолда унинг энергияси (35-§) узлуксиз бўлади.

Агарда $E < 0$ бўлса, электрон потенциал чуқурлик ичида бўлади. Бундай ҳолда электрон энергияси дискрет (38-§) қийматлар олади. Атомда электрон энергияси дискрет қийматлар олиши тажрибада (5-§) исботланган. Шунинг учун (47.3) тенгламани $E < 0$ бўлган ҳол учун ечамиз. Бунинг учун (47.3) ни қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \left(A - \frac{2B}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R = 0. \quad (47.6)$$

Бу ерда

$$A = -\frac{2m_0 E}{\hbar^2} > 0, \quad B = \frac{m_0 Ze^2}{\hbar^2} > 0.$$

Қуйидагича $\rho = 2\sqrt{Ar}$ алмаштириш қилиб r ўзгарувчини ρ билан алмаштирсак, (47.6) дан

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} - \left(\frac{1}{4} - \frac{B}{\sqrt{A}\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R = 0. \quad (47.7)$$

Дастлаб бу тенгламанинг асимптотик ечимларини, яъни ρ нинг (r нинг) энг катта ва энг кичик қийматларига мос келган ечимларини аниқлаймиз. Потенциал чуқурлик ичида (47.6) тенгламанинг ечими гармоник (тебранма) функция орқали ифодаланса, унинг ташқарисида экспоненциал кўринишда бўлади. $\rho \to \infty$ ($r \to \infty$) да (47.7) тенгламадаги иккинчи, тўртинчи ва бешинчи ҳадлар бошқа ҳадларга қараганда жуда кичик бўлиб, уларни ташлаб юбориш мумкин. У ҳолда (48.7) нинг кўриниши

$$\frac{d^2R_\infty}{d\rho^2} - \frac{1}{4}R_\infty = 0 \quad (47.8)$$

бўлади. Бунинг ечимини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$R_\infty = C_1 e^{-\frac{1}{2}\rho} + C_2 e^{\frac{1}{2}\rho}. \quad (47.9)$$

Экспоненциал ечим ортиб борувчи ва камайиб борувчи ташкил этувчилардан иборат бўлиб, ечим чекли бўлиши учун (47.9) да ρ га боғлиқ ҳолда ортиб борувчи (яъни C_2 коэффициентли) ҳадни ташлаб юборамиз. У ҳолда (47.9) ечим

$$R_\infty = C_1 e^{-\frac{1}{2}\rho} \quad (47.10)$$

кўринишида бўлади.

$\rho \to 0$ ҳол учун (47.7) тенгламани қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\frac{d^2R_0}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR_0}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}R_0 = 0. \quad (47.11)$$

Бу тенгламанинг ечимини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$R_0 = C_1'\rho^l + C_2'\rho^{-l-1} \quad (47.12)$$

Бу ерда C_2' коэффициентга боғлиқ бўлган ҳад ρ камайиши билан ортиб боради ва уни юқоридаги (47.9) сабабларга кўра ташлаб юборамиз. У ҳолда $\rho \to 0$ даги ечим қуйидагича бўлади:

$$R_0 = C_1'\rho^l \quad (47.13)$$

Шундан сўнг (47.7) тенгламанинг ечимини

$$R = R_\infty R_0 U = C\rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho} U \qquad (47.14)$$

кўринишда ёзиш мумкин ($C = C_1 C_1'$). (47.14) ни (47.7) га қўйсак,

$$\rho \frac{d^2 U}{d\rho^2} + \left[2(l+1) - \rho\right] \frac{dU}{d\rho} + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1\right) U = 0 \quad (47.15)$$

ҳосил бўлади. Бу тенгламанинг ечимини одатдагидек кўп ҳадли

$$U = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu \qquad (47.16)$$

кўринишда излаймиз. (47.16) ни (47.15) га қўйиб, аниқланган натижани ρ нинг даражасига қараб группалаштирсак, қуйидаги тенглама келиб чиқади:

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \rho^\nu \Big\{ a_\nu \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - \nu\right) + a^{\nu+1} (\nu + 1) [\nu + 2(l+1)] \Big\} = 0. \qquad (47.17)$$

Маълумки, (47.16) кўп ҳадли кўринишдаги ечим ўринли бўлиши учун (47.17) да бир хил даражали номаълумлар олдидаги коэффициентларнинг йиғиндиси нолга тенг бўлиши керак. Шу шартга биноан (47.17) дан

$$a_{\nu+1} = a_\nu \frac{\nu + l + 1 - \frac{B}{\sqrt{A}}}{(\nu + 1)[\nu + 2(l+1)]} \qquad (47.18)$$

келиб чиқади. Бу формула ёрдамида коэффициент a_ν маълум бўлса, $a_{\nu+1}$ коэффициентни аниқлаш мумкин. Кўп ҳадли (47.16) чекли бўлиши учун уни ҳам қандайдир ҳаддан бошлаб узиш керак. Ана шу ҳаднинг номери $\nu = k_r$ бўлсин. У ҳолда қатор узилиши учун (47.18) дан

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = k_r + l + 1 = n \qquad (47.19)$$

бўлиши кифоя. Бу ердаги k_r га *радиал квант сони* дейилади ва $k_r = 0, 1, 2, 3, 4 \ldots$ қийматларни олади. n га *бош* *квант сони* дейилади. k_r, l нолдан бошлаб мусбат қийматлар олганлиги сабабли бош квант сони $n = 1$ дан бошлаб чексизгача мусбат қийматларни олади:

$$n = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ \ldots,\ \infty.$$

(47.19) дан $l = n - k_r - 1$ бўлиб, орбитал квант сони l юқоридан бош квант сони билан чекланганлигини ва $l \leqslant n - 1$ бўлиши кўриниб турибди. (47.19) га B ва A ларнинг қийматларини қўйсак

$$E_n = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{2n^2\hbar^2}. \qquad (47.20)$$

келиб чиқади. Демак, бош квант сони n га қиймат бериш билан марказий симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган заррачанинг тўла энергиясининг хусусий қийматлари E_1, E_2, E_3, . . . аниқланади. Қатори узиладиган (47.16) кўп ҳадлини Лагерр полиноми орқали ифодалаш мумкин:

$$U = \theta_{k_r}^{2l+1}(\rho) = e^{\rho}\rho^{-2l-1}\frac{d^{k_r}}{d\rho^{k_r}}\left(e^{-\rho}\rho^{k_r+2l+1}\right). \qquad (47.21)$$

Буни (47.14) га қўйсак,

$$R_{nl}(\rho) = C_{nl}\, e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^{l}\,\theta_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \qquad (47.22)$$

келиб чиқади. Бу ердаги коэффициент C_{nl} радиал функциянинг нормаланганлик шарти

$$\int_0^{\infty} R^* R r^2 dr = 1 \qquad (47.23)$$

дан топилади:

$$C_{nl} = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!\,(n+l)!}} \qquad (47.24)$$

Шундай қилиб, марказий симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган заррача учун ёзилган Шредингер тенгламасининг радиал ташкил этувчиси

$$R_{nl} = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!(n+l)!}}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{l} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \times$$

$$\times e^{\rho}\rho^{-2l-1}\frac{d^{k_r}}{d\rho^{k_r}}\left(e^{-\rho}\rho^{k_r+2l+1}\right)$$

бўлади. Бу ерда $a_0=\frac{\hbar^2}{m_0e^2}$ — водородсимон атом учун биринчи Бор радиусидир.

48-§. ВОДОРОДСИМОН АТОМ ЭЛЕКТРОНИНИНГ ҲОЛАТ ФУНКЦИЯСИ

Водородсимон атом электронининг ҳолат функцияси марказий симметрик майдон учун ёзилган Шредингер тенгламаси (47.7) нинг ечими

$$\psi_{nlm}(r,\ \upsilon,\ \varphi)=R_{nl}(r)\,Y_l^m(\theta,\ \varphi) \qquad (48.1)$$

бўлади. Аввалги ифодаларда (45-§ ва 47-§) радиал $R_{nl}(r)$ ва шар $Y_l^m(\upsilon,\ \varphi)$ функцияларининг кўринишлари аниқланди:

$$R_{nl}(r)=\left(\frac{z}{na_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{4}{n\,(n-l-1)!(n+l)!}}\,e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l\theta_{n-l-1}^{2l+1}(\rho), \qquad (48.2)$$

$$Y_l^m(\upsilon,\ \varphi)=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi\,(l+m)!}}\,P_l^m(\eta)\,e^{im\varphi} \qquad (48.3)$$

Бу ерда

$$\rho=\frac{2zr}{na_0},\quad a_0=\frac{\hbar^2}{m_0e^2},$$

$$\theta_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)=e_{\rho}^{\rho}{}^{-2l-1}\frac{d^{n-l-1}}{d\rho^{n-l-1}}\left(e_{\rho}^{-\rho}{}^{n+l}\right), \qquad (48.4)$$

$$P_l^{(m)}(\eta)=(-1)^m\frac{(l+m)!}{(l-m)!}P_l^{-m}(\eta), \qquad (48.5)$$

$$P_l^m(\eta)=(1-\eta^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{\,l+m}}{d\eta^{\,l+m}}\left[\frac{(\eta^2-1)^l}{2^l l!}\right].$$

Демак, m ва l га қиймат бериш билан шар функцияси Y_l^m аниқланади. Орбитал квант сони l нинг битта қийматига $2l+1$ та магнит квант сони тўғри келганлиги сабабли (44-§) шар функцияси $2l+1$ каррали турланган бўлади.

Бош квант сони n ва орбитал квант сони l га қиймат бериб, радиал функциянинг хусусий қийматлари R_{nl} аниқланади. Бош квант сонининг битта қийматига n та радиал функцияси тўғри келади. Демак, радиал функция n каррали турлангандир. Булардан кўринадики, квант сонлари n, l, m га қиймат бериб марказий симметрик майдонда ҳаракатланувчи заррача ҳолат функциясини турли хусусий кўринишлари топилади. Шунинг учун ҳолат функцияси φ_{nlm} (r, θ, φ) индексли кўринишида ёзилади.

Бош квант сони n нинг ҳар бир қийматига алоҳида энергия E_n тўғри келади. Аммо берилган n нинг ҳар бир қийматига m ва l билан фарқ қилувчи $N_n = \sum\limits_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$ та тўлқин функцияси тўғри келади. Демак, E_n энергияли ҳолат n^2 марта турлангандир. Бош квант сони n қуйидаги қийматларни олади:

$$n = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ \ldots,\ \infty$$

ва водородсимон атомда электроннинг энергиясини аниқлайди:

$$E_n = -\frac{Z^2e^4m_0}{2\hbar^2n^2}. \qquad (48.6)$$

Орбитал квант сони l қуйидаги қийматларни олади:

$$l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots,\ n-1$$

ва водородсимон атомда электроннинг тўла ҳаракат миқдор моментини аниқлайди:

$$M_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}. \qquad (48.7)$$

Магнит квант сони m қуйидаги қийматларни олади:

$$m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \pm 3,\ \ldots,\ \pm l$$

ва электрон тўла ҳаракат миқдор моментининг Z ўқига проекциясини аниқлайди:

$$M_z = m\hbar. \qquad (48.8)$$

Шундай қилиб, учта E_n, M_l, M_z катталиклар тўплами тўлқин функцияси $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ ни тўла аниқлайди. Квант сонлари n, l, m нинг аниқ қийматларига мос келган тўлқин функцияси $\psi_{n,\,l,\,m}(r, \theta, \varphi)$ абсолют қийматининг квадрати фазонинг r, θ, φ нуқтаси атрофида электроннинг топилиш эҳтимоллигини аниқлайди:

$$dW_{n,l,m,}(r,\ \theta,\ \varphi)=|\psi_{n,l,m,}(r,\ \theta,\ \varphi)|^2\, r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi. \tag{48.9}$$

Маълумки, $d\,\Omega=\sin\theta d\theta\, d\varphi$ учи координаталар марказида жойлашган мужассам бурчакдир.

Буни эътиборга олиб (49.9) ифодани θ, φ бўйича интегралласак электронни радиуси r ва $r+dr$ бўлган сфералар орасида топилиш эҳтимоллигини аниқлаймиз.

$$dw_{nl}(r)=R^2_{nl}(r)\, r^2\, dr. \tag{48.10}$$

Демак, электронни сферанинг dr қатлами орасида топилиш эҳтимоллиги радиал функцияга боғлиқ.

n ва l квант сонларининг берилган қиймати учун (48.2) формула ёрдамида R_{nl} ни аниқлаб, (48.10) га қўйиб, электрон топилиш эҳтимоллигини r нинг қандай қийматида максимум эканлигини ҳисоблаш мумкин. Эҳтимоллик радиал зичлигининг бош квант сони n нинг иккита қиймати учун аниқланган қиймати қуйидаги жадвалда келтирилган:

n	l	k_r	R_{nl}	R^2_{nl}
1	0	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{2Zr}{a_0}}$	$U\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{2Zr}{a_0}}$
	0	1	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \left(2e^{\frac{Zr}{a_0}}-\frac{Zr}{a_0}\right)$	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \left\{2e^{\frac{Zr}{a_0}}-\frac{Z^2}{a_0}\right\}^2$
2	1	0	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{3}} e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \frac{Zr}{a_0}$	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 \frac{1}{3} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2$

49-§. ВОДОРОДСИМОН АТОМЛАРНИНГ НУРЛАНИШ СПЕКТРЛАРИ

Водород атомининг нурланиш спектрлари унинг структураси, назарияси маълум бўлмасдан туриб тажрибада (1885—1908 йй.) аниқланган (5-§). Улар шу спектр қонуниятини аниқлаган олимлар номлари билан юритилади:

Лаймен серияси:

$$\omega_Л = R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 2,\ 3,\ 4,\ 5,\ 6,\ 7,\ \ldots \tag{49.1}$$

Бальмер серияси:

$$\omega_Б = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 3,\ 4,\ 5,\ 6,\ 7,\ 8,\ 9, \tag{49.2}$$

Пашен серияси

$$\omega_П = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 4,\ 5,\ 6,\ 7,\ 8,\ 9, \tag{49.3}$$

Брэкет серияси

$$\omega_{Бр} = R\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 5,\ 6,\ 7,\ 8,\ 9,\ \ldots, \tag{49.4}$$

Пфунд серияси

$$\omega_{Пф} = R\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad n = 6,\ 7,\ 8,\ 9,\ \ldots \tag{49.5}$$

Бу формулаларда R доимий катталик бўлиб ($R = 109677{,}6\ см^{-1}$) уни Ридберг тажриба йўли билан аниқлаган.

Ярим классик ва ярим квант Бор назарияси ёрдамида (49.1) — (49.5) формулалар исботланди ва Ридберг доимийси

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^2} \tag{49.6}$$

эканлиги аниқланди. Аммо ажратиш қобилияти юқори бўлган оптик асбоблар билан спектрал сериялар текширилганда улар бир-бирига яқин жойлашган нозик чизиқлардан иборатлиги сезилди. Қандай сабабларга кўра бундай бўлиниш мавжудлигини Бор назарияси тушунтира олмайди.

Умуман олганда, водородсимон атомларнинг тузилиши, ундаги электрониинг ҳолатини квант механикаси асослаб берди. Демак, атомнинг нурланиш спектрал серияларини ҳам квант механикаси нуқтаи назаридан қайта кўриш мақсадга мувофиқдир. Маълумки, водородсимон атомларда электроннинг ҳолати учта фазовий квант сонлари n, l, m ларнинг қиймати билан аниқланади. Атом нур ютиши ёки нур чиқариши учун электрон бир энергетик ҳолатдан иккинчи энергетик ҳолатга ўтиши керак. Бу ҳолат ўзгариши албатта n, l, m квант сонларининг ўзгариши билан бўлади. Аммо квант механикаси нуқтаи назаридан n, l, m квант сонларининг ўзгариши ихтиёрий бўлиши мумкин эмас (56.1- §). Квант сонларининг қандай ўзгаришида электроннинг ҳолат ўзгариши рухсат этилганлигини билиш учун қуйидаги матрица элементи

$$(\vec{r})_{nlm}^{n'l'm'} = \int \psi_{n'l'm'}^{*} \vec{r} \psi_{nlm} dV \tag{49.7}$$

ни ҳисоблаш керак. n, l ва m квант сонларининг қандай ўзгаришида (49.7) матрица элемент нолга тенг бўлмаса, ана шу ўзгаришлар туфайли электроннинг бир ҳолатдан иккинчи ҳолатга ўтиши рухсат этилган бўлади. Ҳисоблашларга қараганда (56.1- §) квант сонларининг қуйидаги ўзгаришларида

$$\left.\begin{aligned} \Delta n &= n_1 - n_2 = \text{ихтиёрий} \\ \Delta l &= l_1 - l_2 = \pm 1 \\ \Delta m &= m_1 - m_2 = 0, \pm 1 \end{aligned}\right\} \tag{49.8}$$

(49.7) матрица элементи нолга тенг бўлмайди. Демак, (49.8) формула билан ифодаланувчи квант сонларининг ўзгариши рухсат этилган бўлади. Квант. сонларининг (49.8) формулалар билан аниқланувчи қийматларига *саралаш (танлаш) қоидаси* дейилади. Саралаш қоидасига мувофиқ электрон агар вакант жой бўлса, ихтиёрий қаватга ўтиши мумкин, аммо бу вакант ҳолат албатта электроннинг эгаллаб турган ҳолатига қўшни бўлиши керак, яъни

$$s \rightleftarrows p \rightleftarrows d \rightleftarrows f \rightleftarrows g \rightleftarrows h \rightleftarrows i \rightleftarrows j.$$

Қўшни ҳолатни чеклаб ўтиш мумкин эмас. Демак, нурланиш частотаси бош квант сонидан ташқари орбитал квант сонига ҳам боғлиқ бўлиб, $(nl) = \left(-\frac{E_{nl}}{n}\right)$ нинг фарқи $(nl - n'l')$ кўринишида ёзилади. Унга спектрал терм дейилади. Бу нуқтаи назардан, яъни (49.8) га асосан (49.1) — (49.5) спектрал серияларни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\omega_{Л} = 1s - np,$$

$$\omega_{Б_1} = 2s - np,$$

$$\omega_{Б_2} = 2p - nd,$$

$$\omega_{Б_3} = 2p - ns,$$

$$\omega_{П_1} = 3s - np,$$

$$\omega_{П_2} = 3p - ns,$$

$$\omega_{\Pi_3} = 3p - nd,$$
$$\omega_{\Pi_4} = 3d - np,$$
$$\omega_{\Pi_5} = 3d - nf \text{ ва ҳ.к.}$$

Бу формулаларнинг барчасида $n=1, 2, 3, 4, 5, 6, \ldots$ қиймат- лар олади. Брэкет ва Пфуид серияларни спектрал термлар орқали ёзишни ўқувчиларнинг ўзига қўямиз.

Юқоридаги ўтишларда магнит квант сони ўзгармаслиги ҳам мумкин ёки орбитал квант сонига мос бир бирликка ортиши ёки камайиши мумкин.

50-§. ЯДРО ҲАРАКАТИНИ ҲИСОБГА ОЛИШ

Заррачанинг марказий симметрик потенциал майдондаги ҳаракатини ўрганишда майдонни ҳосил қилган марказнинг, яъни ядронинг ҳаракатини ҳисобга олмадик. Бу ядро массаси $M_я$ га нисбатан заррачанинг массаси m_0 ни ташлаб юборишга нисбатан тенг кучли эди. ($M_я \gg m_0$). Бундай тақрибий ҳисоблаш физиканинг жуда кўп кисмида катта хатоликка олиб келмаса ҳам микроoламда у қўпол хато ҳисобланади. Бу хатоликни баҳолаб, ядро ҳаракатини эътиборга олиш қандай натижаларга олиб келиши билан танишайлик. Ядро тинч ҳолатда эмас, ядро ва электрон умумий масса марказига нисбатан ҳаракат қилишади. Классик механика нуктаи назаридан бу масса марказининг радиус вектори қуйидагича ёзилади:

$$\vec{r}_0 = \frac{m_0 \vec{r}_1 + M_я \vec{r}_2}{m_0 + M_я}. \tag{50.1}$$

Бу ерда $\vec{r}_1$ ва $\vec{r}_2$ мос ҳолда электрон ва ядронинг ҳисоблаш бошланишига нисбатан радиус векторларидир. Улар ўзаро ядродан электронга томон йўналган радиус вектор $\vec{r}$ билан қуйидагича боғлиқ:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2. \tag{50.2}$$

Бу ҳолда тўла энергиянинг классик кўриниши қуйидагича ёзилади:

$$E = U(\vec{r}) + \frac{1}{2m_0} p^2 + \frac{1}{2M_я} p^2_{M_я}. \tag{50.3}$$

Бу ерда p — электрон импульси, $p_{M_я}$ — ядро импульси. Агар инерция маркази ҳисоблаш бошланишига жойлаштирилган бўлса, (50.1) формуладан

$$m_0 \dot{\vec{r}}_1 = -M_я \dot{\vec{r}}_2 \quad (50.4)$$

келиб чиқади. Охирги тенгликнинг ҳар икки томонини вақт бўйича дифференциалласак,

$$m_0 \dot{\vec{r}}_1 = -M_я \dot{\vec{r}}_2 \text{ ёки } \vec{p} = -\vec{p}_{M_я}. \quad (50.5)$$

Буни эътиборга олиб (50.3) ни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$E - U(r) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_0} + \frac{1}{M_я}\right) p^2. \quad (50.6)$$

Бу ерда $\frac{1}{m_0} + \frac{1}{M} = \frac{1}{m_к}$ ва

$$m_к = \frac{m_0 M_я}{m_0 + M_я} = \frac{m}{1 + \frac{m}{M_я}} \simeq m_0\left(1 - \frac{m_0}{M_я}\right) \quad (50.7)$$

га *келтирилган масса* дейилади. У ҳолда (50.6) муносабатни қуйидагича ёзиш мумкин.

$$E - U(r) = \frac{1}{2m_к} p^2. \quad (50.8)$$

Бу ердаги p импульсини 16-§ дагига ўхшаш

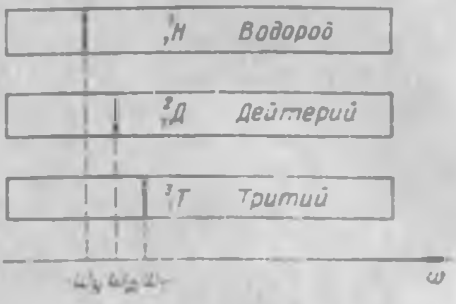
$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{\psi} \nabla^2 \psi \quad (50.9)$$

билан алмаштирсак,

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_к}{\hbar^2} [E - U] \psi = 0 \quad (50.10)$$

тенглама келиб чиқади. Бу ядро ҳаракатини ҳисобга олингандаги Шредингер тенгламасидир. Демак, марказий симметрик майдонда зарраchaнинг ҳаракати учун ёзилган (42.1) Шредингер тенгламасини ечиб аниқланган натижаларда электрон массаси m_0 ни (50.7) формула билан аниқланувчи келтирилган масса $m_к$ билан алмаштирсак, улар ядро ҳаракати ҳисобга олинган ҳол учун ҳам муваффақиятли қўлланилиши мумкин. (50.7) формуладан кўринадики, $M_я \gg m_0$ десак, $m_к = m_0$ бўлади, яъни келтирилган масса электрон массасига тенг бўлади. Масалан, водород атоми учун бу тенгсизлик $1836 \gg 1$ эканлигини билдиради. Аммо атом физикасида бундай тақрибий ҳисоблаш ҳам сезиларли хатоликларга олиб келишини қуйидаги мисолларда кўриш мумкин.

Водородсимон атомларнинг нурланиш спектрлари



50.1-расм. Водород, дейтерий ва тритий изотопларининг Бальмер сериясидаги энг кичик нурланиш частоталарининг нисбий жойлашиши.

$$\omega = R\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (50.11)$$

қонунларга бўйсуниши тажриба йўли билан ҳам, назарий ҳам исботланган. У ерда R Ридберг доимийси бўлиб қуйидагига тенг:

$$R = Z^2 R_\infty = \frac{m_0 Z^2 e^4}{2\hbar^3}. \quad (50.12)$$

R нинг индекси ядро массаси электрон массасидан чексиз катта бўлганлиги учун электрон массасини ташлаб юборганлигимизни билдиради. Биз (50.11) формулани водород атоми учун ($R = R_\infty$) ёзайлик:

$$\omega_H = R_\infty\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right). \quad (50.13)$$

Бу ерда $k = 2$ бўлса $n = 3, 4, 5, 6, \ldots,$ қийматлар олиб, охирги формула Бальмер сериясини ифодалайди:

$$\omega_H^{\text{Бальм}} = R_\infty\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right). \quad (50.14)$$

Назарияда Бальмер серияси битта, аммо тажриба (50.1-расм) кўрсатилгандек бир-бирига нисбатан силжиган уч хил спектрал чизиқлардан иборат. Бу ҳодисани (50.13) тушунтиролмайди. Агар ядрони тинч ҳолатда эмас, ҳаракатда десак, (50.12) формулада m_0 ўрнига $m_к$ иштирок этиб, (50.13) формуланинг кўриниши қуйидагича бўлади:

$$\omega_H^{\text{Бальм}} = R_\infty\left(1 - \frac{m_0}{M_я}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right). \quad (50.15)$$

Бу формулада $M_я \approx 1840\ m_0$ десак,

$$\omega_H^{\text{Бальм}} = R_\infty\left(1 - \frac{1}{1840}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (50.16)$$

бўлиб, биринчи чизиққа мос келади. Агар $M_я \approx 3680\ m_0$ десак, (50.14) кўриниш қуйидагича бўлиб,

$$\omega_D^{\text{Бальм}} = R_\infty\left(1 - \frac{1}{3680}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (50.17)$$

иккинчи чизиққа мос келади. Демак, иккинчи чизиққа мос келган частотани ҳосил қилиш учун ядро массасини протон массасидан икки маротаба катта, аммо заряди $Z=1$ деб ҳисоблашимиз керак. Ўз-ўзидан равшанки, бу водород изотопидир. Унинг хусусиятлари водород атомининг хусусиятларидан сезиларли фарқ қилгани учун уни алоҳида дейтерий (^2_1D) деб номлаш қабул қилинган.

Учинчи спектрал чизиқни ҳосил қилиш учун ядро массаси протон массасидан тахминан уч марта катта деб ҳисоблаш зарур. У ҳолда (50.14) формуланинг кўриниши

$$\omega_T^{\text{Бальм}} = R_\infty \left(1 - \frac{1}{5520}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \tag{50.18}$$

бўлади. Бу ҳам водород изотопининг спектрал сериясидир. Бу изотопни тритий (^3_1T) деб аталади.

Бу ҳар иккала изотоп ҳам водород атоми каби кислород билан бирикиб сувни (D_2O, T_2O) ҳосил қилади. Уларни оғир сув дейилади. Бундай молекулалар табиий тўғри сув таркибида бўлади. Табиий сувда 6800 та ^1_1H атомига битта ^2_1D атом тўғри келса, 10^{18} ^1_1H атомига битта ^3_1T атом тўғри келади.

Оғир сув ташқи кўринишдан оддий сувга ўхшагани билан химиявий ва физик хусусиятлари билан катта фарқ қилади. Масалан, оғир сув нормал атмосфера босимида 3,81°С да музлайди, 101,4°С да қайнайди, оддий сувга қараганда ёпишқоқлиги юқори ва тузни камроқ эритади. Оғир сув кўп техник қўлланишларга эга.

Ядро ҳаракатини ҳисобга олишнинг яна бир катта ютуғи ионлашган гелий атомининг спектрал сериясини аниқлашдан иборат бўлди. Дастлаб бу спектрал серия Қуёш спектрида аниқланиб қуйидаги қонуниятга эга

$$\omega = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right). \tag{50.19}$$

Бу ерда $n_1 = 2{,}5;\ 3;\ 3{,}5;\ 4;\ 4{,}5;\ \ldots$ Бу серияни *Пикеринг серияси* дейилади ва уни Қуёшда махсус шароитда бўлган водород атоми ҳосил қилади деб ҳисобланган. Аммо бундай тахмин билан қилинган назарий ҳисоблар тажрибага мос келмади. Шундан сўнг (50.19) формулани бир каррали ионлашган He^+ атоми учун ядро ҳаракатини ҳам эътиборга олиб ёзилди. У ҳолда (50.19) нинг кўриниши қуйидагича бўлади ($Z=2$):

$$\omega_{He} = R_{He}\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n_1^2}\right) = 2^2 R_\infty\left(1 - \frac{1}{7360}\right)\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n_1^2}\right) =$$

$$= R_\infty \left(1 - \frac{1}{7360}\right)\left(\frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)^2} - \frac{1}{\left(\frac{n}{2}\right)^2}\right). \qquad (50.20)$$

Фараз қилайлик, $k = 4$ бўлса, у ҳолда $\left(\frac{k}{2}\right)^2 = 2^2$ $n_1 = 5, 6, 7, 8, 9, \ldots$ қийматлар олиши керак. n_1 нинг бу қийматларида (50.20) формуладаги $\left(\frac{n}{2}\right)$ қуйидагиларга тенг бўлади:

$$n = 2{,}5;\ 3,\ 3{,}5;\ 4;\ 4{,}5;\ \ldots$$

Бу Пикеринг сериясидир.

Шундай қилиб, ядро ҳаракатини ҳисобга олиш водород атомининг изотопларини, бир каррали ионлашган гелий атомининг спектрал серияларини аниқлашга имкон беради. Демак, микрооламда 7360 га нисбатан ҳатто 1 ни ҳам кичик деб ташлаб юбориш мумкин эмас.

51-§. ИШҚОРИЙ МЕТАЛЛ АТОМЛАРИНИНГ ОПТИК ЭЛЕКТРОН МОДЕЛИ

Элементлар даврий системасида водород атомидан кейинда жойлашган атомларнинг нурланиш спектрларини ҳам Шредингер тенгламасини ечиб электроннинг энергиясини аниқлаб ўрганилади. Аммо бундай масалалар учун гамильтон операторини аниқлаш ва уни ҳисобга олиб Шредингер тенгламасини ечиш катта математик қийинчиликлар туғдиради. Чунки бундай масалаларни ҳал қилишда электронларнинг ўзаро таъсирини эътиборга олиш керак. Аммо мураккаб атомлар ичида шундай атомлар ҳам борки, улар учун биргина ўзгартириш туфайли водородсимон атомлар назариясидан фойдаланиш мумкин. Булар элементлар даврий системасининг биринчи группасига жойлашган (Li, Na, K, Rb, Cs, . . .) ишқорий металл атомларидир. Уларнинг барчаси P, S ҳолатли электронлар билан тўла бўлган инерт газлардан кейинда жойлашган. Шунинг учун ишқорий металл атомларининг ички электрон қаватларн (K, L, M, . . .). Электронлар билан тўла бўлиб, ташқи қаватида фақат битта электрони бўлади. Бу битта — *оптик электрон* ядронинг ва ички қаватлардаги (Z — 1) та электронларнинг умумлашган майдонида ҳаракат қилади. Ана шу умумлашган майдон потенциалини гамильтон операторида тўғри акс эттириб, Шредингер тенгламасини ечиш масалани ҳал қилишнинг бирдан-бир йўлидир. Бу масалани ҳал қилишнинг энг содда йўли эса ишқорий металл оптик электрони ҳаракат қилаётган майдон потенциалини қатор кўринишида ифодалаш бўлади.

$$U = -e^2\left(\frac{1}{r} + \frac{C}{r^2} + \frac{C_1}{r^3} + \dots\right). \tag{51.1}$$

$C, C_1, C_2, \dots$ коэффициентли ҳадлар ёрдамида ички қаватдаги электронларнинг оптик электрон потенциал энергиясига таъсирини эътиборга олган бўламиз. (51.1) формулада биринчи ва иккинчи ҳадлар билан чегараланамиз:

$$U = -\frac{e^2}{r}\left(1 + \frac{C}{r}\right). \tag{51.2}$$

Буни марказий симметрик потенциал майдон учун ёзилган Шредингер тенгламасини радиал ташкил этувчиси (47.1) га қўйилик:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left\{E - \left[-\frac{e^2}{r} - C\frac{e^2}{r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2}\right]\right\}R = 0, \tag{51.3}$$

ёки

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{ds}{dr} + \left\{\frac{2m_0E}{\hbar^2} + \frac{2m_0e^2}{\hbar^2 r} - \frac{2m_0Ce^2/\hbar^2 - l(l+1)}{r^2}\right\}R = 0.$$

Бу тенгламага қуйидагича белгилаш киритамиз:

$$\frac{2m_0e^2C}{\hbar^2} - l(l+1) = -l'(l'+1). \tag{51.4}$$

Натижада

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left\{\frac{2m_0E}{\hbar^2} + \frac{2m_0e^2}{\hbar^2 r} - \frac{l'(l'+1)}{r^2}\right\}R = 0 \tag{51.5}$$

тенглама ҳосил бўлади. Бу тенглама ечими маълум бўлган (47.6) тенглама билан ($Z = 1$ бўлган ҳол учун) бир хил. Шунинг учун (51.5) ни ечмасдан (47.6) тенгламанинг ечимида l ни l' билан алмаштириб (51.5) тенгламасини ечими сифатида фойдаланиш мумкин. Бизнинг асосий мақсадимиз ишқорий металл атомларининг нурланиш спектрини аниқлаш. Бунинг учун эса электроннинг энергиясини билиш зарур. (48.6) тенгламани ечиш туфайли электроннинг энергияси учун қуйидаги натижа аниқланган эди:

$$E_n = -\frac{m_0e^4}{2\hbar^2n^2}. \tag{51.6}$$

Бу ерда

$$n = k_r + l + 1 \tag{51.7}$$

бош квант сони. (51.5) тенгламани ечганимизда эса оптик электрон энергияси учун

$$E_n = -\frac{e^2 m_0}{2\hbar^2 n'^2} \tag{51.8}$$

келиб чиқади. Бу ерда

$$n' = k_r + l' + 1. \tag{51.9}$$

l' ни l орқали ифодалаш учун (51.4) алгебраик тенгламани ечишимиз керак. l' ҳамма вақт мусбат бўлишини эътиборга олиб (51.4) тенгламадан қуйидагини аниқлаш мумкин

$$l' = -\frac{1}{2} + \frac{2l+1}{2}\sqrt{1 - \frac{C\,8\,m_0 e^2}{(2l+1)^2\,\hbar^2}}. \tag{51.10}$$

Илдиз остидаги иккинчи ҳад ядрога яқин жойлашган қаватлардаги электронларнинг оптик электрон ҳолатига таъсирини ҳисобга олувчи ҳад бўлиб, ҳамма вақт бирдан кичикдир. Шунинг учун илдизни қаторга ёямиз. У ҳолда:

$$l' = l + \sigma(l). \tag{51.11}$$

Бу ерда

$$\sigma(l) = -\frac{2\,C\,m_0 e^2}{(2l+1)\,\hbar^2}. \tag{51.12}$$

Агар $C = 0$ десак, $l' = l$ келиб чиқади. Буни (51.9) га қуйиб, $n' = k_r + l + 1 + \sigma(l) = n + \sigma(l)$ ни аниқлаш мумкин. У ҳолда оптик эликтроннинг энергияси

$$E_n = -\frac{e^4 m_0}{2\hbar^2\,[n + \sigma(l)]^2} \tag{51.13}$$

бўлади. Демак, ишқорий метилл атомида оптик электроннинг энергияси бош квант сонидан ташқари орбитал квант сонига ҳам боғлиқ бўлар экан. Бу принципиал аҳамиятга эга. Оптик электроннинг турли ҳолатларнга мос келган тузатма $\sigma(l)$ нинг қиймати қуйидаги жадвалда келтирилган:

Элемент	z	σ (s)	σ (p)	σ (d)	σ (f)
Li	3	0,412	0,041	0,002	0,000
Na	11	1,373	0,883	0,01	0,001
K	19	2,23	1,776	0,146	0,007
Rb	37	3,195	2,711	1,233	0,012
Cs	55	4,131	3,649	2,448	0,022

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{T}_r + \frac{\widehat{\vec{L}^2}}{2m_0r^2} + U(r)$$

кўринишга келтиринг. $\widehat{T}_r$, $\vec{L}^2$ операторларини аниқланг.

5. Водород атомидаги $2p$ — ва $3d$ — электронларни ядродан энг катта эҳтимолликда топилиш масофаларини топинг.

Жавоби: $r_{2p} = 4a_0$, $r_{3d} = 9a_0$, a_0 — 1 — Бор радиуси.

6. Водород атомининг асосий ҳолатдаги электрони ва ядроси ҳосил қилаётган майдонининг ўртача электростатик потенциалини аниқланг.

$$\text{Жавоби: } \varphi(r) = \frac{e_0}{a_0}\left(1 + \frac{a_0}{r}\right)e^{-2r/a_0}.$$

7. Водород атомидаги $2s$ — электронининг импульслар тасаввуридаги тўлқин функциясини ва импульс қийматлари эҳтимолликларининг тақсимланишини топинг.

$$\text{Жавоби: } \varphi_{2s}(\vec{p}) = -\frac{16\sqrt{a_0^3\hbar^5}}{\pi} \cdot \frac{4a_0p^2 - \hbar^2}{(4a_0p^2 + \hbar^2)^3},$$

$$dW_s(\vec{p}) = |\varphi_{2s}(\vec{p})|^2 4\pi p^2\, dp = \frac{1024\, a_0^3\, \hbar^5\, p^2}{\pi} \cdot \frac{(4a_0p^2 - \hbar^2)^2}{(4a_0p^2 + \hbar^2)^6}\, dp.$$

8. s — ҳолатдаги m_0 массали заррачанинг

$$U(r) = \alpha\delta(r - a)$$

кўринишдаги потенциал майдонда радиал тўлқин функциясини ва дискрет энергетик сатҳларини аниқловчи тенгламани топинг.

Жавоби:

$$R_{n00}(r) = \begin{cases} C_1 \sin kr, & \text{агар } r < 0, \\ C_2 e^{ikr}, & \text{агар } r > a \end{cases}$$

$$-i\,ka - ka\,\mathrm{ctg}\,ka = \frac{2m_0\alpha a}{\hbar^2}, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_0E}.$$

VIII БОБ

ҚУЗҒАЛИШЛАР НАЗАРИЯСИ

Кўпгина ҳолларда Шредингер тенгламаси аниқ ечимга эга эмас, яъни энергия оператори — гамильтониан ($\hat{\mathcal{H}}$) нинг хусусий қиймати ва хусусий тўлқин функцияси ҳамма ҳолларда ҳам аниқ топилавермайди. Хусусан, атом физикасига боғлиқ бўлган кўпгина ҳолларда масалалар аниқ ечимларга эга эмас. Шу сабабдан бундай ҳолларда тақрибий ҳисоблашлар усулидан фойдаланилади. Бундай усуллардан бири қўзғалишлар назриясидир.

Қўзғалишлар назарияси дастлаб физиканинг космик жисмларнинг ҳаракатини ўрганувчи бўлимида қўлланилган. Айни пайтда бу ҳисоблаш усули квант механикасида ҳам кенг қўлланилади. Стационар ва ностационар квант ҳолатлар учун қўзғалишлар назарияси ишлаб чиқилган.

52-§. ТУРЛАНМАГАН ҲОЛАТЛАР УЧУН СТАЦИОНАР ҚЎЗҒАЛИШЛАР НАЗАРИЯСИ

Қўзғалишлар назариясининг дастлабки одими ўрганилаётган системанинг гамильтонианини тузиш ва хусусий қийматининг узлукли (дискрет) ёки узлуксиз эканлигини топишдан иборат. Масалани соддалаштириш мақсадида, фараз қилайлик, система гамильтонианини икки ҳад йиғиндисидан иборат бўлсин.

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_0 + \widehat{\mathcal{H}}' \qquad (52.1)$$

бўлиб, хусусий қиймати дискрет бўлсин. Бунда $\mathcal{H}'$ — қўзғалмаган (системанинг) гамильтон оператори $\widehat{\mathcal{H}}_0$ га вақтга боғлиқ бўлмаган (стационар) кичик қўшимча ҳад. Кейинчалик $\widehat{\mathcal{H}}'$ ни қўзғатувчи (оператор) деб юритамиз. Қўзғалмаган оператор $\widehat{\mathcal{H}}_0$ нинг хусусий қиймати ва хусусий функцияси

$$\widehat{\mathcal{H}}_0 \psi_0^{(n)} = E_0^{(n)} \cdot \psi_0^{(n)} \qquad (52.2)$$

тенгламадан аниқланган деб ҳисоблаймиз.

Келгуси ҳисоблашнинг қулай бўлиши учун (52.1) ни қайта

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \widehat{W} \qquad (52.3)$$

кўринишда ёзиб оламиз. Бунда λ — биринчи тартибли бирликсиз кичик сон, $\widehat{W}$ эса $\widehat{\mathcal{H}}_0$ тартибидаги оператор. Бу борада шуни қайд қиламизки, λ га пропорционал бўлган ҳад биринчи тартибли, λ^2 га пропорционал ҳадни иккинчи тартибли кичик ҳадлар сифатида қараймиз. Бу усул анча қулай, чунки охирги натижада $\lambda = 1$ деб қабул қилиб, λ ва $\widehat{W}$ ларнинг физик маъносини ойдинлаштирамиз (бунда $\widehat{W}$ $\widehat{\mathcal{H}}$ операторига айнан ўтади).

$\widehat{\mathcal{H}}'$ операторининг хусусий функцияси $\psi^{(n)}$ ва хусусий қиймати $E^{(n)}$ ларни λ нинг даражаси бўйича

$$\psi^{(n)} = \psi_0^{(n)} + \lambda\psi_1^{(n)} + \lambda^2\psi_2^{(n)} + \ldots = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \psi_m^{(n)},$$

$$E^{(n)} = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \cdot E_m^{(n)} \tag{52.4}$$

қаторга ёямиз. У ҳолда $(\widehat{\mathscr{H}}_0 + \lambda \widehat{W})\, \psi^{(n)} = E^{(n)}\, \psi^{(n)}$ тенгламани

$$(\widehat{\mathscr{H}}_0 + \lambda \widehat{W}) \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \psi_m^{(n)} = \sum_{m=0}^{\infty} E_m^{(n)} \lambda^m \sum_{m=0}^{\infty} \lambda^m \psi_m^{(n)} \tag{52.5}$$

кўринишда ёзамиз. (52.5) ни янада қуйидагича соддалаштирайлик:

$$(\widehat{\mathscr{H}}_0 + \lambda\widehat{W})(\psi_0^{(n)} + \lambda\psi_1^{(n)} + \lambda^2\psi_2^{(n)} + \ldots) =$$

$$= (E_0^{(n)} + \lambda E_1^{(n)} + \lambda^2 E_2^{(n)} + \ldots)(\psi_0^{(n)} + \lambda\psi_1^{(n)} + \lambda^2\psi_2^{(n)} + \ldots)$$

ёки

$$\widehat{\mathscr{H}}_0 \psi_0^{(n)} + \lambda(\widehat{\mathscr{H}}_0 \psi_1^{(n)} + \widehat{W} \psi_0^{(n)}) + \lambda^2(\widehat{\mathscr{H}}_0 \psi_2^{(n)} + W\psi_1^{(n)}) +$$

$$+ \ldots = E_0^{n} \psi_0^{(n)} + \lambda(E_0^{(n)} \psi_1^{(n)} + E_1^{(n)} \psi_0^{(n)}) +$$

$$+ \lambda^2(E_0^{(n)} \psi_2^{(n)} + E_1^{(n)} \psi_1^{(n)} + E_2^{(n)} \psi_0^{(n)} + \ldots). \tag{52.6}$$

(52.6) да λ нинг даражасига қараб ўнг ва чап тарафларидаги мос коэффициентларини тенглаштириб, қуйидаги тенгламалар системасига эга бўламиз:

$$\widehat{\mathscr{H}}_0 \psi_0^{(n)} = E_0^{(n)} \psi_0^{(n)}, \tag{52.7}$$

$$\widehat{\mathscr{H}}_0 \psi_1^{(n)} + \widehat{W} \psi_0^{(n)} = E_0^{(n)} \psi_1^{(n)} + E_1^{(n)} \psi_0^{(n)}, \tag{52.8}$$

$$\widehat{\mathscr{H}}_0 \psi_2^{(n)} + \widehat{W} \psi_1^{(n)} = E_0^{(n)} \psi_2^{(n)} + E_1^{(n)} \psi_1^{(n)} + E_2^{(n)} \psi_0^{(n)}, \tag{52.9}$$

. . . .

Энди $\psi_m^{(n)}$ тўлқин функциясини $\widehat{\mathscr{H}}_0$ гамильтониан хусусий функциялари бўйича қаторга ёямиз

$$\psi_1^{(n)} = \sum_{m \neq n} C_{nm}^{(1)} \psi_0^{(m)},$$

$$\psi_2^{(n)} = \sum_{m \neq n} C_{nm}^{(2)} \cdot \psi_0^{(m)}, \tag{52.10}$$

. . . .

(52.10) ифодани (52.8) ва (52.9) га қўйсак ва (52.7) ни эътиборга олсак,

$$\sum_{m \neq n} C_{nm}^{(1)} \cdot (E_0^{(m)} - E_0^{(n)}) \psi_0^{(m)} - E_1^{(n)} \psi_0^{(n)} = -\widehat{W} \psi_0^{(n)}, \tag{52.11}$$

$$\sum_{m \neq n} C_{nm}^{(2)} (E_0^{(m)} - E_0^{(n)}) \psi_0^{(m)} - E_2^{(n)} \psi_0^{(m)} = (-\widehat{W} + E_1^{(n)}) \psi_1^{(n)}, \tag{52.12}$$

. . . .

Система энергиясига биринчи тартибли қўшимча $E_1^{(n)}$ нинг аналитик кўринишини топиш учун (52.11) нинг ҳар иккала томонини $\psi_0^{*(n)}$ га кўпайтириб, нолинчи яқинлашишдаги тўлқин функциялари учун ортонормаланганлик шарти

$$\int \psi_0^{*(n)} \psi_0^{(m)} \, d^3\vec{r} = \delta_{mn} \tag{52.13}$$

ни эътиборга олсак

$$E_1^{(n)} = \int \psi_0^{(n)*} \widehat{W} \psi_0^{(n)} \, d^3\vec{r} = W_{nn}, \tag{52.14}$$

яъни $\hat{\mathscr{H}}_0$ гамильтониан хусусий қийматига топилган биринчи тартибли қўшимча ҳад $\widehat{\mathscr{H}}_0$ гамильтониан хусусий функцияларига нисбатан ҳисоблангач $\widehat{\mathscr{H}}'$ нинг ўртача қийматига тенг эканини топамиз. $C_{nm}^{(n)}$ нинг аналитик кўринишини топиш мақсадида (52.11) нинг ҳар иккала томонига чап томондан $\psi_0^{(m)*}$ га кўпайтириб қуйидагига эга бўламиз:

$$C_{nm}^{(1)} = \frac{W_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}}. \tag{52.15}$$

Қўзғалишлар назариясининг биринчи тартибли ҳади билан чегаралангандаги тўлқин функциясининг кўриниши (52.15) ни эътиборга олган ҳолда (52.10) формуладан топилади

$$\psi_1^{(n)} = \sum_{m \neq n} \frac{W_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} \psi_0^{(m)}. \tag{52.16}$$

Юқорида қайд этилган йўсинда энергияга иккинчи тартибли қўшимчанинг кўриниши

$$E_2^{(n)} = \sum_{m \neq n} \frac{W_{nm} \cdot W_{mn}}{E^{(n)} - E_0^{(m)}} = \sum_{m \neq n} \frac{|W_{mn}|^2}{E_0^{(n)} - E^{(m)}} \tag{52.17}$$

қаторга ёйиш коэффициенти учун ёзилган ифода

$$C_{nm}^2 = \sum_{s\neq n} \frac{W_{ms} W_{sn}}{(E_0^{(n)} - E_0^{(s)})(E_0^{(n)} - E_0^{(m)})} - \frac{W_{mn} W_{nm}}{F_0^{(n)} - E_0^{(m)}} \qquad (52.18)$$

эканини топамиз. (52.17) нинг охирги натижасини ёзишда $\hat{W}$ операторининг эрмитлилигини ($W_{mn} = W^*_{nm}$) эътиборга олдик. Қолган тартибли тузатмалар шу йўсинда топилади.

Юқорида олинган натижаларнинг ҳаммасини узлуксиз спектрли физик системаларга ҳам қўллаш мумкин. Бунда фақат тегишли суммани унга мос келувчи интеграл билан алмаштириш кифоя.

Масалан, ҳам дискрет, ҳам узлукли спектрга эга бўлган физик системанинг тўлқин функциясига қўзғалиш оператори таъсирида киритиладиган биринчи тартибли тузатма

$$\psi_1^{(n)} = \sum_{m\neq n} \frac{W_{mn}}{E_0^{(n)} - E_0^{(m)}} \psi_0^{(m)} + \int \frac{W_{\nu n}}{E_0^{(n)} - E_0^{(\nu)}} \psi_0^{(\nu)} d\nu \quad (52.19)$$

кўринишда бўлади. Бунда m, n — дискрет спектрли, ν—узлуксиз спектрли системанинг ҳолатларини характерлайдиган катталиклар (масалан, квант сонлари) дир.

Бу методнинг амалий қўлланишини ойдинлаштириш мақсадида биринчи тартибли тузатмалар аниқлигида олинган ($\psi^{(n)} = \psi_0^{(n)} + \psi_1^{(n)}$) тўлқин функцияларига нисбатан ҳисобланган қандайдир V физик катталикнинг қўзғатилган қиймат учун матрица элементи

$$V_{mn} = V_{mn}^0 + \lambda \sum_{s\neq n} \frac{W_{sn} W_{ms}}{E_0^{(n)} - E_0^{(s)}} \qquad (52.20)$$

каби аниқланади. Бунда $\psi_0^{(n)} + \psi_1^{(n)}$ ўрнига (52.16) ни қўйиб ҳисоблаш юритдик, $V_{mn}^{(0)} - V$ физик катталикнинг қўзғатилмаган тўлқин функциялари $\psi_0^{(m)}$ ва $\psi_0^{(n)}$ га нисбатан ҳисобланган матрица элементи.

53- §. ТУРЛАНИШ МАВЖУДЛИГИДА ҚЎЗҒАЛИШЛАР НАЗАРИЯСИ

Квант физикасининг кўпгина масалаларида турланишга эга бўлган физик системалар билан иш кўришга тўғри келади. $E = E_0^{(n)}$ хусусий энергияси $\hat{\mathcal{H}}_0$ қўзғатилмаган гамильтониан билан характерланувчи турланишга эга бўлган физик

система ҳолатини битта $\psi_0^{(n)}$ тўлқин функцияси эмас, балки бир неча $\psi_0^{(n1)}, \psi_0^{(n2)}, \ldots, \psi_0^{(n\alpha)}, \ldots, \psi_0^{(nf)}$ тўлқин функциялар билан характерланади.

Фараз қилайлик, система $\hat{\mathcal{H}}'$ оператор таъсирида қўзғатилган бўлсин. Бунда $\psi_0^{(n1)}, \psi_0^{(n2)}, \ldots, \psi_0^{(n\alpha)}, \ldots \psi_0^{(nf)}$ функциялар $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1$ гамильтонианнинг нолинчи тартибли тўлқин функциялари ҳисобланади. Айни пайтда $E_0^{(n)}$ энергияли ҳолат функциялари сифатида янги $\varphi_0^{(n1)}, \varphi_0^{(n2)}, \varphi_0^{(ns)}, \ldots, \varphi_0^{(nf)}$ тўлқин функцияларини ҳам танлаш ва уларни $\hat{\mathcal{H}}_0$ гамильтонианнинг хусусий функциялари билан чизиқли ортогонал шакл алмаштириш орқали ифодалаш мумкин, яъни

$$\varphi_0^{(n\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{f} a_{\alpha\beta} \psi_0^{(n\beta)}. \qquad (53.1)$$

$\varphi_0^{(n\alpha)}$ функциялар учун ортонормаланганлик шарти

$$\sum_{\beta=1}^{f} a_{\alpha\beta} a^*_{\alpha'\beta} = \delta_{\alpha\alpha'} \qquad (53.2)$$

кўринишда ёзилади.

Кўриниб турибдики, турланиш мавжудлигида қўзғалишлар назарияси қўзғалиш бўлмаган ҳолдагига нисбатан анчайин мураккаб, чунки $\hat{\mathcal{H}}$ операторининг хусусий функцияси битта эмас, иккита индекс (n, α) билан характерланади. Шу сабабдан (52.10) ифодада n ни ҳамма жойда (n, α) билан алмаштириш зарур:

$$\psi = \sum_{n,\alpha} C_{n\alpha} \psi_0^{(n\alpha)}. \qquad (53.3)$$

Унда $\hat{\mathcal{H}} \psi = E \psi$ Шредингер тенгламасини (52- § даги каби) қуйидаги кўринишда қайта ёзамиз:

$$(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}') \sum_{n,\alpha} C_{n\alpha} \psi_0^{(n\alpha)} = E \sum_{n,\alpha} C_{n\alpha} \psi_0^{(n\alpha)}. \qquad (53.4)$$

Охирги тенгламада $\hat{\mathcal{H}}_0 \psi_0^{(n\alpha)} = E_0^{(n)} \psi_0^{(n\alpha)}$ эканини ва унинг ҳар икки тарафини $\psi_0^{(m\beta)*}$ га кўпайтириб, координаталар бўйича интеграллаб ва тўлқин функцияларнинг ортонормаланганлик шартини жойида қўллаб қуйидаги тенгламага эга бўламиз:

$$(E_0^{(n)} = \mathcal{H}'_{m\beta,m\beta} - E) C_{m\beta} + \sum_{m\beta\neq n\alpha} \mathcal{H}'_{m\beta,n\alpha} C_{n\alpha} = 0. \quad (53.5)$$

Бунда
$$\mathscr{H}'_{m\beta,\,n\alpha} = \langle m\beta | \widehat{\mathscr{H}'} | n\alpha \rangle \tag{53.6}$$

қўзғалиш операторининг матрица элементи. Кўриниб турибдики, турланиш мавжуд системанинг ҳолат энергияси $E_0^{(m)}$ α («квант сони») параметрига боғлиқ эмас.

Энди қўзғатилган квант системанинг $E^{(k)}$ энергетик ҳолати ва $\psi^{(k\alpha)}$ хусусий функциясини аниқлайлик. Масаланинг мураккаблигини эътиборга олиб, энергетик сатҳга киритилган биринчи тартибли тузатма ва нолинчи тартибли тўлқин функцияни топиш билан чегараланайлик. Бунда 52- § дан фарқли ўлароқ, нолинчи тартибли яқинлашишда турланиш мавжуд бўлган қўзғатилган системанинг тўлқин функцияси қўзғатилмаган системанинг тўлқин функцияси билан мос келиши шарт эмас, яъни $C_0^{(k\alpha)} \neq 1$, $C_{(n)}^{(k\alpha)}$ нинг қолган ҳадлари нолга тенг бўлиши шарт эмас. Шу сабабдан турланиш мавжуд бўлган ҳолдаги қўзғалиш назариясида k- квант сатҳи тўлқин функцияси учун нолинчи яқинлашишда

$$C^{(k\alpha)} = C_\alpha^{(k\alpha)} \neq 0,$$
$$C_0^{(n\alpha)} = 0 \quad (n \neq k) \tag{53.7}$$

бўлади ($\alpha = 1, 2, \ldots, f_k$). Буни эътиборга олиб (52.5) тенгламанинг $C^{(k\alpha)}$ нинг нолга тенг бўлмаган ҳадларини қолдириб уни қайта ёзамиз:

$$(E_0^{(k)} + \mathscr{H}'_{k\beta,\,k\beta} - E)\, C_0^{(k\beta)} + \sum_{\alpha \neq \beta} \mathscr{H}'_{f\beta,\,k\alpha} C_0^{(k\alpha)} = 0. \tag{53.9}$$

Ифодаларни ўқишни қулайлаштириш ва k- сатҳнинггина қўзғалишини текшираётганлигимиз учун соддалаштириш мақсадида келгусида k индексни махсус тушириб қолдирамиз (лекин масалани чалкаштиришга олиб келувчи ҳоллардагина k индексни албатта ёзамиз). Унда (53.8)

$$(E_0^{(k)} + \mathscr{H}'_{\beta\beta} - E)\, C_0^{(\beta)} + \sum_{\alpha \neq \beta}^{f_x} \mathscr{H}'_{\beta\alpha} C_0^{(\alpha)} = 0$$
$$(\alpha = 1, 2, \ldots, f_k). \tag{53.9}$$

Бунда

$$\mathscr{H}'_{\beta\beta} = \mathscr{H}'_{k\beta,k\beta} = \int \psi_0^{(k\beta)*}\, \widehat{\mathscr{H}'}\, \psi_0^{(k\beta)}\, d^3\vec{r}.$$

(53.9) тенгламалар системаси $C_0^{(\alpha)}$ номаълумлар учун нолдан фарқли ечимга эга бўлиши учун унинг детерминантини нолга тенглаш зарур:

$$\Delta(E) = \begin{vmatrix} E_0^{(k)} + \mathscr{H}'_{11} - E & \mathscr{H}'_{12} & \dots & \mathscr{H}'_{1f_k} \\ \mathscr{H}'_{21} & E_0^{(k)} + \mathscr{H}'_{22} - E & \dots & \mathscr{H}'_{2f_k} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mathscr{H}'_{f_k 1} & \dots & \dots & E_0^{(k)} + \mathscr{H}'_{1_k f_k} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (53.10)$$

Бу E га нисбатан f_k даражали алгебраик тенгламани «асрий» ёки секуляр тенглама деб номланади. Агар $\mathscr{H}'_{\beta\alpha}$ (нодиагонал) матрица элементларининг қиймати эътиборга олмайдиган даражада кичик бўлса, у ҳолда (53.10) алгебраик тенгламанинг ечимлари бир-бирига жуда яқин бўлади; акс ҳолда бир-биридан фарқли бўлади. Охирги ҳол шундан далолат берадики, сезиларли қўзғатувчи оператор квант системага (сатҳга) таъсир этса, унинг турланганлигини қисман (тенг илдизли ҳолда) ёки бутунлай (ҳамма илдизлар фарқли бўлган ҳол) йўқолади: сатҳлар бир-бирига яқин (дискрет) сатҳларга ажралади.

(53.9) дан кўринаяптики, (53.10) нинг ҳар бир илдизи учун $C_0^{(\beta)}$ амплитуда мос келади.

Шундай қилиб, $\widehat{\mathscr{H}}$ гамильтонианнинг $E = E_0^{(k\alpha)}$ хусусий қийматларига

$$C = C_0^{(\alpha 1)},\ C_0^{(\alpha 2)},\ \dots,\ C^{(\alpha f_k)} \quad (53.11)$$

($\alpha = 1, 2, \dots, f_k$) лар мос келади. Бу ҳолда тўлқин функция

$$\varphi_0^{(k\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{f_k} C_0^{(\alpha\beta)} \psi_0^{(k\beta)} \quad (53.12)$$

кўринишда ёзилади («$\vec{r}$ — тасаввурда» $\varphi = \varphi(\vec{r})$, $\psi_0 = \psi_0(\vec{r})$).

Биз юқорида кўрган қўзғалишлар назарияси (52, 53-§§) стационар қўзғалишлар назариясига киради, чунки бу ҳолда $\widehat{\mathscr{H}}$ гамильтониан ҳар бир ҳади ($\widehat{\mathscr{H}}$ ёки $\widehat{\mathscr{H}'}$) нинг вақтга нисбатан ўзгариши эътиборга олмайдиган даражада кичик деб ҳисобланади. Бироқ айрим масалаларда, масалан, электронларнинг ташқи таъсир остидаги оптик ўтиши масаласида, қўзғатувчи операторнинг вақтга нисбатан ўзгариши эътиборга олишни талаб этади. Бундай масалаларни ҳал қилиш имконини берувчи қўзғалишлар назариясини иостационар қўзғалишлар назарияси дейилади, қайсики буни, вақтинча эътибордан четда қолдириб турамиз.

53.1-§. ИККИ КАРРАЛИ ТУРЛАНГАН САТҲНИНГ АЖРАЛИШИ

Айтайлик, қўзғатилмаган $\widehat{\mathscr{H}}_0$ гамильтониан билан характерланувчи ҳолат энергияси ($\widehat{\mathscr{H}}_0$ нинг хусусий қиймати) $E^{(0)}$ бўлиб, бу ҳолатга икки: $\varphi_1^{(0)}$ ва $\varphi_2^{(0)}$ тўлқин функцияси мос келсин. Соддалик учун қолган ҳолатлар қаралаётган ҳолатдан жуда узоқда жойлашган деб фараз қиламиз.

Суперпозиция принципига асосан $\widehat{\mathscr{H}}_0$ гамильтонианнинг хусусий функциялари $\varphi_1^{(0)}$ ва $\varphi_2^{(0)}$ лардан ортогонал алмаштиришлар билан топилган

$$\psi_1^{(0)} = a_{11}\,\varphi_1^{(0)} + a_{12}\,\varphi_1^{(0)}, \qquad (53.1.1)$$

$$\varphi_2^{(0)} = a_{21}\,\varphi_1^{(0)} + a_{22}\,\varphi_2^{(0)}$$

функциялар ҳам $\widehat{\mathscr{H}}_0$ нинг хусусий функциялари бўлади. Ортогоналлик шарти

$$\sum_{\beta=1}^{2} a_{\alpha\beta}\, a_{\alpha'\beta} = \delta_{\alpha\alpha'} \qquad (53\ 1\ 2)$$

тенгликдан

$$a_{11} = \cos\theta\, e^{i\beta},\ a_{12} = \sin\theta\, e^{-i\beta},$$

$$a_{21} = -\sin\theta\, e^{i\beta},\ a_{22} = \cos\theta\, e^{i\beta} \qquad (53.1.3)$$

каби шакл алмаштириш қилиб

$$\psi_1^{(0)} = \cos\theta\, e^{i\beta}\cdot\varphi_1^{(0)} + \sin\theta\, e^{-i\beta}\cdot\varphi_2^{(0)},$$

$$\psi_2^{(0)} = -\sin\theta\, e^{i\beta}\,\varphi_1^{(0)} + \cos\theta\, e^{-i\beta}\,\varphi_2^{(0)}$$

муносабатларга эга бўламиз. Бунда θ ва β ихтиёрий бурчаклар. Масалан $\theta = \beta = 0$ бўлса, $\psi_1^{(0)}$ ва $\psi_2^{(0)}$ функциялар $\varphi_1^{(0)}$ ва $\varphi_2^{(0)}$ ларга айланади.

Агар бундай система $\widehat{V}$ оператор таъсирида қўзғатилган бўлса, қўзғатилган системанинг тўлқин функцияси $\psi(\widehat{\mathscr{H}}\psi = E\psi,\ \widehat{\mathscr{H}} = \widehat{\mathscr{H}} + \widehat{V})$ ни

$$\psi = C_1\varphi_1^{(0)} + C_2\,\varphi_2^{(0)} \qquad (53.1.4)$$

кўринишда излаймиз. Агар (53.1.4) ни Шредингернинг стационар тенгламаси $\widehat{\mathscr{H}}\psi = E\psi$ га қўйсак

$$\mathscr{H}_{11}C_1 + \mathscr{H}_{12}C_2 = 0,$$
$$\mathscr{H}_{12}C_1 + \mathscr{H}_{22}C_2 = 0 \qquad (53.1.5)$$

эканини топамиз. Бунда $\mathscr{H}_{nn} = E^{(0)} + V_{nn}$, $\mathscr{H}_{nm} = V_{nm}$ ($n \neq m = 1, 2$), V_{nm} — қўзғатувчи оператор V нинг $\varphi_n^{(0)}$, $\varphi_m^{(0)}$ функцияларга нисбатан ҳисобланган матрица элементларидир:

$$V_{nm} = \int \varphi_n^{(0)*} \widehat{V} \varphi_m \, d^3\vec{r}. \qquad (53.1.6)$$

(53.15) да C_1, C_2 ларнинг нолдан фарқли ечимларини топиш учун

$$\begin{vmatrix} V_{11} - (E - E^{(0)}) & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - (E - E^{(0)}) \end{vmatrix} = 0 \qquad (53.1.7)$$

тенгламани ечиш талаб этилади. Бундан $(E - E^{(0)})$ га нисбатан чала квадрат тенглама ҳосил бўлади:

$$(V_{11} - E + E^{(0)})(V_{22} - E + E^{(0)}) - V_{12}V_{21} = 0,$$
$$(E - E^{(0)})^2 - (V_{11} + V_{22})(E - E^{(0)}) +$$
$$+ (V_{11}V_{22} - V_{12}V_{21}) = 0. \qquad (53.1.8)$$

(53.1.8) да $V_{12}V_{21} = V_{12}V_{12}^* = |V_{12}|^2$ эканини ҳисобга олсак,

$$(E - E^{(0)})_{1,2} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}. \qquad (53.1.9)$$

Бундан $E^{(0)}$ энергияли икки каррали турланган сатҳ $\widehat{V}$ таъсирида иккига ажралиб улар ўртасидаги энергетик «масофа» қуйидагига тенг бўлади:

$$\Delta E = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}. \qquad (53.1.10)$$

(53.1.9) ни икки чегаравий ҳолда таҳлил қилайлик.

1. $(V_{11} + V_{22}) \gg |V_{12}|$ тенгсизлик учун ΔE ни тақрибан $V_{11} - V_{22} + \frac{1}{2}\frac{4|V_{12}|^2}{V_{11} - V_{22}}$ деб олсак, (53. 1.9) дан биринчи тартибли кичик ҳадлар билан чегараланган ҳолда

$$E_1 = E_1^{(0)} + V_{11} + \frac{|V_{12}|^2}{E_1^{(1)} - E_2^{(1)}},$$
$$E_2 = E_2^{(0)} + V_{22} + \frac{|V_{21}|^2}{E_1^{(1)} - E_2^{(1)}} \qquad (53.1.11)$$

ифодаларга эга бўламиз.

2. $(V_{11}+V_{22}) \ll V_{12}$ тенгсизлик учун ΔE ни тақрибан $2\left[|V_{12}|+\frac{(V_{11}-V_{22})^2}{8|V_{12}|}\right]$ ифодага тенг деб қарасак, (53.1.9) дан

$$(E-E^{(0)})_{1,2}=\frac{V_{11}+V_{22}}{2}\pm\left[|V_{12}|+\frac{(V_{11}-V_{22})^2}{8|V_{12}|}\right]. \quad (53.1.12)$$

(54.5) тенгламалар системасидан

$$\frac{C_1}{C_2}=\frac{V_{12}}{E-E^{(0)}-V_{11}} \quad (53.1.13)$$

ҳосил бўлади.

(53.1.13) ифодани (53.1.9) ни эътиборга олиб қайта ёзамиз

$$\left(\frac{C_1}{C_2}\right)_{1,2}=\frac{2|V_{12}|e^{2i\beta}}{\frac{V_{11}-V_{22}}{2}\left\{-1\pm\sqrt{1+4\frac{|V_{12}|^2}{(V_{11}-V_{22})^2}}\right\}} \quad (53.1.14)$$

(53.1.14) да $V_{12}=|V_{12}|e^{2i\beta}$ деб ҳисобладик. (C_1/C_2) нинг «1» қийматига «+», «2» қийматига «—» ишора тўғри келади. Агар $\mathrm{tg}\,2\theta=2V_{12}/(V_{11}-V_{22})$ белгилаш киритсак,

$$\left(\frac{C_1}{C_2}\right)_1=\mathrm{ctg}\,\theta\, e^{2i\beta},\ \left(\frac{C_1}{C_2}\right)_2=-\mathrm{tg}\,\theta\, e^{2i\beta}$$

муносабатларга эга бўламиз.

Нормаланганлик шартини ($C_1^2+C_1^2=1$) эътиборга олсак, $(C_1)_1=\cos\theta$, $(C_2)_1=\sin\theta$, $(C_1)_2=-\sin\theta$, $(C_2)_2=\cos\theta$ ифодаларни топамиз. Демак,

$$\psi_1=\cos\theta\, e^{i\beta}\varphi_1^{(0)}-\sin\theta\, e^{-i\beta}\varphi_2^{(0)},$$

$$\varphi_2=-\sin\theta\, e^{i\beta}\varphi_1^{(0)}+\cos\theta\, e^{-i\beta}\varphi_2^{(0)}, \quad (53.1.15)$$

$$e^{2i\beta}=\frac{V_{12}}{V_{21}}$$

келиб чиқади.

Охирги натижаларда қўзғатувчи операторнинг айрим-айрим олинган диагонал ва нодиагонал матрица элементлари ўзаро тенг бўлса, яъни $V_{11}=V_{22}$, $V_{12}=V_{21}$, у ҳолда

$$E_{1,2}=E_1^{(0)}+V_{12},$$

$$\psi_{1,2}=\frac{\varphi_1^{(0)}\pm\varphi_2^{(0)}}{\sqrt{2}} \quad (53.1.16)$$

фойдали муносабатларга эга бўламиз.

53.2-§. ЭЛАСТИК СОЧИЛИШ. БОРН ЯҚИНЛАШИШИ

Квант механикасида заррачаларнинг икки хил сочилиши бўлади: заррача тўқнашувдан сўнг ўз энергиясини ўзгартирмасдан ҳаракат йўналиши (импульси) игина ўзгартирса сочилиш эластик бўлади; акс ҳолда — тўқнашувдан сўнг заррачалар ҳам энергияси, ҳам импульсини ўзгартирса сочилиш ноэластик бўлади [1]. Эластик сочилишга катта энергияли электронлар билан қаттиқ жисмни бомбардимон қилиш мисол бўла олади; нейтронлар билан уран элементини бомбардимон қилиш эса ноэластик сочилиш (тўқнашув) га мисол бўла олади.

Бу бобда симметрияси маълум потенциал майдон (сочувчи марказ) да заррачаларнинг эластик сочилишини кўриб ўтамиз.

Заррачаларнинг нуқтавий сочувчи марказлар таъсири остида кечадиган сочилиш ҳодисаси билан боғланган квант механикасининг **кўпгина масалаларида сочилиш юзаси** тушунчаси қўлланилади. Масаланинг мазмунига ҳар хил сочилиш юзалари киритилади[2].

Айтайлик, $\vec{v}$ тезлик билан заррачаларнинг ўзаро параллел оқимлари сочувчи марказ томон келиб унинг таъсир доирасидан ўтсин. Сочилиш марказн таъсирида заррачаларнинг ҳаракат йўналиши ўзгарсин, яъни заррачаларнинг сочилиши рўй берсин. Сочилиш марказидан узоқда жойлашган ва $\vec{v}$ га тик бўлган $d\sigma$ юзадан ўтаётган заррачалар оқими дастаси θ, φ — азимутал ва қутб бурчаклари билан аниқланувчи йўналишни $d\Omega$ фазовий бурчакка ўзгартирсин. Бундай сочилишини ифодаловчи дифференциал сочилиш юзаси

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{d\sigma}{d\Omega} \tag{53.2.1}$$

билан аниқланади.
(53.2.1.) ифодадан тўла сочилиш юзаси

$$\sigma_0 = \int \sigma(\theta, \varphi) d\,\Omega \tag{53.2.2}$$

эканлиги келиб чиқади. Агар $\sigma(\theta, \varphi) = \sigma(\theta)$ бўлса (53.2.2) ифодадан

---

[1] Бу ҳолда сочувчи марказнинг ички ҳолати ҳам ўзгариши мумкин, лекин бунга эътиборингизни қаратмаймиз.

[2] Агар алоҳида таъкидланмаса, келгусида, масса дейилганда заррачаларнинг келтирилган массаси, координаталар маркази эса инерция маркази билан устма-уст тушади деб фараз қиламиз.

$$\sigma_0 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\, \sigma(\theta) = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma(\theta) \sin\theta\, d\theta. \quad (53.2.3)$$

Кўпгина ҳолларда ўлчанган сочилиш юзаси:

$$\sigma_n = \int d\Omega\, [1 - P_n(\cos\theta)]\, \sigma(\theta) \quad (53.2.4)$$

тушунчаси ҳам ишлатилади. Бунда $P_n(\cos\theta)$ — n- тартибли Лежандр (полиноми) кўпҳади:

$$P_0(x) = 1,\ P_1(x) = x,\ P_2(x) = (3x^2 - 1)/2,\ \ldots$$

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]. \quad (53.2.5)$$

Шуни таъкидлаш жоизки, агар Лежандр кўпҳадининг тартиб рақами жуфт бўлса, у аргументнинг жуфт функцияси; тоқ бўлса, тоқ функциясидир. Умуман олганда $P_n(x)$ x нинг ҳақиқий функциясидир: $P_n^*(x) = P_n(x)$.

Келгуси ҳисобларни соддалаштириш мақсадида қуйидаги фойдали муносабатларни келтириб ўтамиз:

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}\, x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x). \quad (53.2.6)$$

Айрим ҳолларда сочилишнинг транспорт юзаси

$$\sigma_1 = \int d\Omega\, (1 - \cos\theta)\, \sigma(\theta) \quad (53.2.7)$$

тушунчаси ҳам киритилади.

Даставвал классик механикадаги «сочилиш»нинг моҳиятига етайлик. Маълумки, ихтиёрий икки заррачанинг бирининг иккинчисида сочилиши икки катталик заррачаларнинг тезлиги ва «мўлжалланган» масофа (ўзаро таъсирлашмасдан ёнма-ён ўтиб кетаётганда заррачалар орасидаги энг яқин масофа) билан тўла характерланади. Бироқ квант механикасида ноаниқ принципига асосан аниқ тезлик билан ҳаракатланаётган заррачалар ўртасидаги масофа тушунчаси аниқ масофа маъносини йўқотади. Шу сабабли квант механикасида заррачани сочувчи марказ, масалан, атом ёки атомлар системаси таъсири остида сочилиши ўз ҳаракат йўналишини олдинги ҳолатига нисбатан маълум бурчакка буралиш эҳтимоллиги билан характерланади.

(53.2.1) ифоданинг физик моҳиятини тушуниш мақсадида қутб координаталар системаси олиб, унинг марказида жойлашган сочувчи марказ томон $Z > 0$ ўқ бўйлаб заррачалар (оқими) келаётган бўлсин деб фараз қиламиз. Бу борада шундай нормировка танлаймизки, заррачаларнинг оқими зичлиги $|U|^2 \cdot v = |U|^2 \cdot v$ га тенг бўлсин. Бундай холда эркин заррачалар (сочилгунга қадар) тўлқин функцияси $U_0 = \exp(ikz)$ кўринишда, сочилиш марказидан узоқда сочилган заррачаларнинг тўлқин функцияси узоқлашувчи сферик тўлқин функцияси $U_1 = f(\theta) e^{ikr}/r$ дан иборат бўлади (θ — сочилган заррачалар импульси ва Z ўқи орасидаги бурчак), $f(\theta)$ — сочилиш амплитудасидир.

Юқорида қайд этилган ҳол — сферик симметрияли $U(r)$ потенциални ўз ичига олган Шредингер тенгламасининг r нинг катта қийматлари учун олинган ечими

$$U = U_1 + U_0 = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \tag{53.2.8}$$

бўлади. У ҳолда

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \cdot \sin\theta \, |f(\theta)|^2 d\theta \tag{53.2.9}$$

ифода эффектив (сочилиш) юзаси дейилади.

(53.2.1) ва (53.2.9) ифодалардан

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \tag{53.2.10}$$

сферик симметрияли майдонда сочилган заррачалар сочилишининг дифференциал юзаси. Бундай ҳолда сочилиш амплитудаси модулининг квадрати билан аниқланиши келиб чиқади. Агар r нинг катта қийматлари учун U_0 ва U_1 функцияларни Лежандр кўпҳадларига нисбатан қаторга ёйсак

$$U_0 \approx \frac{1}{2ik} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)(-1)^{n+1} P_n(x) \left[\frac{1}{r} e^{-ikr} + \right.$$

$$\left. + (-1)^{n+1} \frac{1}{r} e^{ikr} \right], \tag{53.2.11a}$$

$$U_1 = \frac{1}{2ikr} e^{ikr} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)(e^{2i\eta_n} - 1) P_n(x) \tag{53.2.11б}$$

сочилган заррачаларнинг тўлқин функцияси қатордаги яқинлашувчи тўлқин функциялари коэффициентлари нолга тенг бўлади (53.2.11б) да η_n изланаётган тўлқин функцияси

$$U = \sum_{n=0}^{\infty} A_n P_n(x) R_n(r) \tag{53.2.12}$$

муносабатдаги радиал ташкил этувчилари $R_n(r)$ нинг фазалар силжиши, A_n — доимий сон, $x = \cos\theta$.

r нинг катта қийматлари учун олинган (53.2.12) нинг кўриниши (53.2.8) каби бўлиши учун

$$A_n = (2k)^{-1}(2n+1)\, i^n e^{i\eta_n} \qquad (53.2.13)$$

тенглик ўринлидир. Радиал функция эса

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_n}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{n(n+1)}{r^2}-\frac{2m}{\hbar^2}U(r)\right]R_n=0 \qquad (53.2.14)$$

тенгламани қаноатлантиради.

Шундай қилиб:

1. Агар сочилиш содир бўлмаса ва сочилиш амплитудаси нолга тенг бўлса, радиал функцияларнинг фазалар фарқи $i(n+1)\pi$ бўлади. Бунда яқинлашувчига тўлқин $e^{i(n+1)\pi} = (e^{i\pi})^{n+1} = (-1)^{n+1}$ кўпайтувчига эга бўлган узоқлашувчи тўлқинга айланади.

2. Сферик симметрияли потенциал майдонда заррачалар сочилишининг мавжудлиги марказдан узоқ масофаларда фаза бўйича қўшимча $2\eta_n$ силжишга олиб келади.

3. η_n $(n = 0, 1, 2, 3, \ldots)$ фаза қийматининг тўплами сочилишнинг дифференциал юзасини ва сочилиш амплитудаси $f(\theta)$) ни тўла аниқлайди. Биз кўриб ўтган ҳол учун e^{ikr}/r нинг олд коэффициенти

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\left(e^{2i\eta_n}-1\right)P_n(x) \qquad (53.2.13)$$

кўринишда бўлади.

(53.2.9) нинг ҳар иккала тарафини θ бўйича интеграллаб сочилишнинг тўла юзасини

$$\sigma = 2\pi\int_0^{\pi}|f(\theta)|^2\sin\theta\, d\theta \qquad (53.2.16)$$

ва (53.2.15) ни эътиборга олиб (53.2.16) дан

$$\sigma_0 = 4\pi k^{-2}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\sin^2\eta_n; \qquad (53.2.17)$$

сочилишнинг транспорт юзаси эса

$$\sigma_1 = 4\pi k^{-2}\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)\sin^2(\eta_n-\eta_{n+1}) \qquad (53.2.18)$$

эканини топамиз. Бунда

$$\int_0^{\pi} P_n(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta = 2\,(2n+1) \tag{53.2.19}$$

муносабат эътиборга олинди.

(53.2.17) нинг ҳар бир йиғиндисини сочилишнинг парциал юзаси (σ_n) деб қараш мумкин. У ҳолда σ_n нинг қабул қилиши мумкин бўлган энг катта қиймати қуйидагига тенг бўлади:

$$\sigma_{n,\,\max} = 4\pi\,(2n+1)/k^2. \tag{53.2.20}$$

Биз юқорида заррачаларнинг спинини, спин—орбитал ўзаро таъсирини эътиборга олмадик. Буларни эътиборга олган ҳолни кўриб чиқишни ўқувчининг ўзига ҳавола этамиз.

Энди Борн яқинлашишида сочилиш назариясини кўриб ўтайлик. Агар сочувчи майдондаги заррачанинг потенциал энергиясини ғалаёнлантирувчи сифатида қараш мумкин бўлса, у ҳолда сочилиш юзасини умумий ҳолда топиш мумкин. Бунинг учун қаралаётган масалада ихтиёрий тезликка эга бўлган заррачалар учун $|U| \ll \hbar^2/(ma^2)$; катта тезликли заррачалар учун $|U| \ll \hbar v/a = \hbar^2(ka)/(ma^2)$ тенгсизлик қаноатлантирилиши керак.

Юқорида кўриб ўтганимиздек тўлқин функцияни $U = U^{(0)} + U^{(1)}$ кўринишда ифодалаймиз. Бунда $U^{(0)}$ $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ тўлқин векторли эркин заррачанинг тўлқин функцияси; $U^{(1)}$ ни эса

$$U^{(1)}(r) = -(m/2\pi\hbar^2)\int U(r')\, e^{i(\vec{k}\vec{r}'+kr)}\,\frac{dx'\,dy'\,dz'}{R} \tag{53.2.21}$$

кўринишда ёзамиз. Агар $dV' = dx'\,dy'\,dz'$ элементар ҳажмнинг радиус-вектори $\vec{r}'$ бўлса, $\vec{R} = \vec{R}_0 - \vec{r}'$; R_0 — $U^{(1)}$ ни кузатиш манбаининг радиус-вектори (сочувчи марказ координаталар марказида жойлашган деб ҳисоблаяпмиз). Марказга нисбатан узоқ масофаларда, яъни $R_0 \gg r'$ бўлганда $|\vec{R}| = |\vec{R}_0 - \vec{r}'| \approx R_0 - \vec{r}'\vec{n}'$ бўлади ($\vec{n}'$ — $\vec{R}_0$ йўналишдаги бирлик вектор). Буни эътиборга олсак (53.2.21) ни қайта

$$u^{(1)} \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\,\frac{e^{ikR_0}}{R_0}\int u(r')\,e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}'}\,dV' \tag{53.2.22}$$

кўринишда ёзамиз ($\vec{k}' = k\vec{n}'$). (53. 2. 22) ифодани сочилган заррачалар тўлқин функцияси билан солиштирсак сочилишнинг амплитудаси учун

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\vec{r})\, e^{-i\vec{q}\vec{r}'}\, dV' \qquad (53.2.23)$$

ифодани топамиз. Бунда $\Delta\vec{p} = \hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}' - \vec{k})$ узатилган (ўзгарган) импульс; унинг модули $q = 2k\sin(\theta/2)$, $\theta = \vec{k}\vec{k}'/(kk')$— сочилиш бурчаги, яъни бошланғич ва охирги импульслар орасидаги бурчак. (53.2.23) модулини квадратга кўтариб (53.2.9) ифодага қўйсак $d\Omega$ фазовий бурчак ичида сочилаётган заррачалар сочилишининг эффектив юзаси учун

$$d\sigma = \frac{m^2}{(2\pi\hbar^2)^2}\left|\int U(\vec{r})\, e^{-i\vec{q}\vec{r}}\, dV'\right|^2 d\Omega \qquad (53.2.24)$$

ифодани топамиз.

(53.2.24) кўринишдаги ифода сочилишлар назариясида Борн формуласи деб номланади. Шундай қилиб Борн яқинлашишида заррачанинг импульсини $\hbar\vec{q}$ га ўзгартирувчи сочилиш майдон потенциали $U(\vec{r})$ Фурье компонентасининг модули квадрати билан аниқланади. Бундан кўриняптики Борн яқинлашишида тўғри ($\vec{k}$ ҳолатдан $\vec{k}'$ ҳолатга ўтиш) ва тескари процесслар учун сочилиш амплитудаси бир хил кўринишга эга, яъни $f(\vec{k}, \vec{k}') = f^*(\vec{k}', \vec{k})$ эканлиги келиб чиқади. Бу ҳол, аммо, доимо ўринли бўливермайди. Масалан, ғалаёнлар назариясини сочилиш процессига қўллашда нолинчи, биринчи тартибли яқинлашиш билан бир қаторда иккинчи тартибли яқинлашиш эътиборга олинса, Борн яқинлашиши ўринсиз бўлиб, масаланинг моҳияти ўзгаради, яъни $f(\vec{k}, \vec{k}') = f^*(\vec{k}'\vec{k})$ ҳамма вақт ўринли эмаслиги келиб чиқади ва шу тенгликка асосланган ўзаролик принципи умумийлигини йўқотади.

Шундай қилиб Борн яқинлашиши сферик—симметрияли масалалардагина ўз аксини топар экан.

VIII бобга доир масалалар

1. Кенглиги a бўлган чексиз чуқур потенциал ўрадаги m_0 заррачага $V(x) = V_0 \cos\frac{2\pi}{a}x$ қўзғатувчи майдон таъсир қилади. Иккинчи яқинлашишда стационар ҳолатлар энергиясига киритиладиган тузатма топилсин.

Жавоби: $E_n^{(1)} = V_{nn} = 0$, $E_n^{(2)} = \frac{V_0^2 m_0 a^2}{\pi^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2-4}$ $(n \neq 2)$.

2. Чизиқли гармоник осцилляторнинг асосий ҳолатида потенциал энергиянинг $\Delta V(x) = \alpha x^3 + \beta x^4$ ангармоник қисми туфайли энергияга 1- ва 2- яқинлашишда киритиладиган тузатмани ҳисобланг.

Жавоби: $\Delta E = \frac{3}{4}\, \frac{\hbar^2}{m_0^2 \omega_0^2} \left(\beta - \frac{11}{6}\, \frac{\alpha^2}{m_0 \omega_0^2} \right).$

3. Инерция моменти I ва электр диполь моменти $\vec{d}$ бўлган қаттиқ ротатор $\vec{\mathscr{E}}$ кучланганликли бир жинсли электр майдонига жойлаштирилган. Электр майдонини қўзғалиш сифатида қараб, ротатор асосий ҳолат энергиясига киритиладиган нолдан фарқли 1- тузатмани аниқланг.

Жавоби: $\Delta E = -\frac{\vec{d}^2 \mathscr{E}_0^2}{3\hbar^2} I.$

4. Водород атоми Oz ўқи бўйлаб йўналган $\vec{\mathscr{E}}$ кучланганликли бир жинсли электр майдонига киритилган. Бош квант сонининг $n = 2$ қиймати билан характерланувчи энергетик сатҳнинг ажралишини топинг.

Жавоби: $(\Delta E)_{1,2} = \pm 3 e_0 a_0 \mathscr{E}, \quad (\Delta E)_3 = (\Delta E_4) = 0.$

5. Қўзғалишга учрамаган квант система бир-бирига яқин икки $E_1^{(0)}$ ва $E_2^{(0)}$ энергетик сатҳга эга. Уларнинг ораси қўзғалиш операторининг бу ҳолатлар бўйича ҳисобланган матрица элементига яқин. Биринчи яқинлашишда энергияларга тузатма аниқлансин.

Жавоби:

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}\Big[E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + V_{11} + V_{22} \pm$$
$$\pm \sqrt{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)} + V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}\ \Big].$$

IX БОБ

НУРЛАНИШНИНГ ЯРИМ ФЕНОМЕНОЛОГИК КВАНТ НАЗАРИЯСИ

Биз ҳозиргача микрозаррача ва электромагнит нурланиш ўзаро таъсири билан боғлиқ масалаларга тўхталмадик. Уларни қатъий кетма-кетликда ва тўлиқ ҳажмда ҳал этиш квант механикаси доирасига сиғмайди. Ҳақиқатан, микрозаррачаларнинг олдинги бобларда баён қилинган квант назарияси билан мос келадиган нурланиш назарияси электромагнит майдоннинг Максвелл тенгламаларига ўхшаш квант ҳаракат тенгламаларини текширишни тақозо этади. Бу тенгламалар **квант электродинамикасининг** асосини ташкил этиб, хусусан, Планкнинг машҳур квантлар гипотезасини ўз ичига олади. Бироқ квант системалар ва ёруғликнинг ўзаро таъсирига оид баъзи масалаларни 1917 йилда Эйнштейн яратган нурланишнинг ярим фенаменологик квант назариясига таянган ҳолда ўрганиш мумкин. Шу мақсадда биз бу бобда электромагнит майдонни классик, у билан таъсирлашувчи микрозаррачаларни эса квантомеханик нуқтаи назарлардан қараймиз. Бундай тақрибий ёндашиш (яқинлашиш) ташқи нурланиш майдонининг заррачалар системасига таъсирини ва демак, **ёруғликнинг ютилиши** ҳамда **мажбурий нурланиши** масалаларини яққол, тўғри ҳал этишга имкон беради. Лекин у заррачаларнинг майдонга кўрсатадиган таъсири, хусусан, **ёруғликнинг спонтан нурланиши** бўйича ишончли хулосалар бера олмайди.

54-§. МАЖБУРИЙ ВА СПОНТАН КВАНТ ЎТИШЛАР. ЭЙНШТЕЙН КОЭФФИЦИЕНТЛАРИ

Классик электродинамика қонунларига кўра ёруғлик нурланиши тезланиш билан ҳаракатланаётган зарядли заррачалар томонидан чиқарилади. Унинг интенсивлиги кўпчиликка маълум бўлган

$$I_{кл} = \frac{2}{3}\frac{q^2}{c^3} < \ddot{\vec{r}} >^2 \qquad (54.1)$$

формуладан топилади. Унда c — ёруғлик тезлиги, q ва $< \ddot{\vec{r}} >^2$ — мос ҳолда заррача заряди ва тезланиш квадратининг вақт бўйича ўртача қиймати. Бирор системанинг нурланиши классик назарияга биноан унинг механик хусусиятлари орқали тўлиқ аниқланади. Масалан, энг содда ҳол — чизиқли гармоник осциллятор ҳаракати

$$\vec{r} = \vec{r}_0 \cos \omega_0 t \qquad (54.2)$$

учун нурланиш частотаси осцилляторнинг механик тебраниш частотаси ω_0 га тенг ёки унга каррали, интенсивлиги эса (54.1) ва (54.2) ларга асосан

$$I_{кл} = \frac{2\,\omega_0^4}{3c^3} < \vec{d}_{кл} >^2 \equiv \frac{2}{3}\frac{q^2\omega_0^2}{m_0} E \qquad (54.3)$$

қонуният билан ифодаланади. Охирги муносабатларда $\vec{d}_{кл} = q \cdot \vec{r}$ — осцилляторнинг электр диполь моменти,

$E = \frac{1}{2} m_0 \vec{r}_0^2 \omega_0^2$ — тўла энергияси, m_0 — массаси, r_0 — тебраниш амплитудаси.

Нурланишнинг феноменологик характерли тўғри квантомеханик назариясини биринчи бўлиб Эйнштейн қурди. Бу назария бўйича ёруғликнинг нурланиш ёки ютилиш интенсивлиги атом (молекула, бошқа системалар)нинг бирор энергетик ҳолатдан бошқасига ўтиш эҳтимоллиги билан аниқланади. Эйнштейн атом системанинг икки квант ҳолатлари ўртасидаги ана шундай ўтишлар эҳтимоллигини ифодалаш учун учта коэффициент киритди. Уларга қуйида батафсилроқ тўхталамиз.

Бирор атомнинг энергиялари E_n ва E_m бўлган n ва m квант сонлари билан характерланувчи иккита квант ҳолатларини фикран алоҳида ажратиб кўрайлик. Аниқлик учун $E_n > E_m$ деб ҳисоблаймиз, яъни E_n атомнинг юқори, E_m эса қуйи энергетик сатҳларидир. Айтайлик, текширилаётган атом қутбланмаган ва барча йўналишлар бўйича интенсивлиги бир хилда тақсимланган ёруғлик таъсирида бўлсин. Нурланиш энергиясининг фазовий зичлиги (ω, $\omega + d\omega$) частота оралиғида $\rho_\omega d\omega$ га тенг деб оламиз (2-§ га қаранг). Тушаётган ёруғлик атомнинг электронларида икки хил квант ўтишни юзага чиқара олади. Биринчидан, атом энергиянинг сақланиш қонунини ифодаловчи Бор шарти

$$\varepsilon = \hbar\omega = E_n - E_m = \hbar\omega_{nm} \tag{54.4}$$

га мос келадиган $\varepsilon = \hbar\omega$ энергияли ёруғлик квантини ютиб қуйи m квант ҳолатдан юқори n (қўзғатилган) ҳолатга ўтиши мумкин. Иккинчидан, агар атомнинг бирор электрони қўзғатилган n ҳолатда бўлса, у частотаси (54.4) шартни қаноатлантирувчи ёруғликнинг гармоник ўзгарувчи майдони таъсири остида мажбурий равишда қуйи квант ҳолатга ўтиши ва бунда атом $\hbar\omega = E_n - E_m$ энергияли ёруғлик кванти (ёки тўлқин оптикаси тилида аниқроқ айтганда, тарқалиши йўналиши, қутбланиши, частотаси ҳамда фазаси тушаётган ёруғликнинг худди ана шундай параметрлари билан бир хил бўлган электромагнит тўлқин) чиқариши мумкин. Ташқи ёруғлик ва атом ўзаро таъсирлашувидан содир бўладиган биринчи жараён ($m \to n$ квант ўтиш) **ёруғликнинг ютилишига**, иккинчиси ($n \to m$) эса **мажбурий (индукцияланган, стимуллашган ёхуд когерент) нурланишига** тўғри келади.

Эйнштейн кўрсатишича, ёруғликнинг ютилиш ва мажбурий нурланиш эҳтимолликлари атом билан резонанс равишда

(54.4) шартга қаранг) таъсирлашувчи ёруғлик квантлари сонига пропорционалдир. У ҳолда атомнинг икки квант ҳолати ўртасидаги $m \rightarrow n$ ва $n \rightarrow m$ мажбурий ўтишлар эҳтимолликларини характерловчи B_{mn} ва B_{nm} коэффициентларни қуйидагича киритиш мумкин. Ҳар бир квант энергияси $\hbar\omega$ бўлганлигидан частоталари $(\omega, \omega + d\omega)$ оралиқда ётган ёруғлик квантларининг ҳажм бирлигидаги сони (зичлиги) $\rho_\omega d\omega/\hbar\omega$ га тенг. Демак, агар атом қуйи E_m энергетик ҳолатда бўлса, унинг dt вақт давомида $\hbar\omega$ ёруғлик квантини ютиб юқориги E_n сатҳга ўтиш эҳтимоллигини $B_{mn}\rho_\omega(\omega_{nm})\,dt$ ифода билан аниқлаш мумкин. Худди, шунингдек, агар атом қўзғатилган E_n ҳолатда бўлса, унинг ташқи электромагнит нурланиш билан когерент таъсирлашиш натижасида мажбурий равишда $\hbar\omega = E_n - E_m$ ёруғлик кванти чиқариш йўли билан қуйи E_m ҳолатга ўтиш эҳтимоллиги $B_{nm}\rho(\omega_{nm})\,dt$ га тенг бўлади. Бу ердан кўринадики: B_{mn} ва B_{nm} Эйнштейн коэффициентларининг физик маъноси шуки, улар айни бир ёруғлик кванти билан таъсирлашаётган атомнинг вақт бирлиги ичида мос ҳолда $m \rightarrow n$ (квант ютиш) ва $n \rightarrow m$ (квант чиқариш) **мажбурий квант ўтишларининг эҳтимоллигини** аниқлайди.

Тажриба кўрсатадики, агар атом қўзғатилган n квант ҳолатда бўлса. У ташқи таъсирсиз ўз-ўзидан (спонтан равишда) энергияси (54.4) га тенг ёруғлик чиқариб, қуйи m ҳолатга қайтиши мумкин. Эйнштейн фикрига асосан атомнинг dt вақт оралиғида бундай спонтан ўтиш эҳтимоллиги $A_{nm}dt$ деб олинади. У ҳолда ташқи ёруғлик билан таъсирлашувчи атомнинг юқориги n энергетик сатҳдан қуйи ҳолатга ўтишининг тўлиқ эҳтимоллиги $(B_{nm}\rho_\omega(\omega_{nm}) + A_{nm})\,dt$ бўлади.

Эйнштейн кўрсатишича A_{nm}, V_{nm} ва B_{mn} коэффициентлар ўртасида

$$B_{nm} = B_{mn}, \quad A_{nm} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{nm} \tag{54.5}$$

муносабатлар мавжуд. Уларнинг тўғрилигига ишонч ҳосил қилиш учун, унча қатъий бўлмаса-да, лекин биз учун 2-§ дан таниш бўлган мувозанатли нурланиш масаласи бўйича қуйидаги мулоҳазаларни келтирамиз. Айтайлик, биз юқорида кўрган n ва m квант ҳолатлари мавжуд бўлган маълум сондаги бир хил атомлар T температураси бирор берк соҳада ўз нурланиши билан термодинамик мувозанатда турган бўлсин. У ҳолда аниқки, вақт бирлиги ичида юқоридан қуйи

сатҳга тушувчи атомлар сони $N_n(B_{nm}\rho_\omega(\omega_{nm})+A_{nm})$, қуйи
E_m сатҳдан юқориги E_n сатҳга ўтувчи атомлар сони
$N_m B_{mn}\rho_\omega(\omega_{nm})$ га тенг бўлади:

$$N_n(B_{nm}\rho_\omega(\omega_{nm})+A_{nm})=N_m B_{mn}\rho_\omega(\omega_{nm}).$$

Термодинамик мувозанат жараёнида E_n ва E_m энергетик ҳолатларда (соддалик учун уларни айнимаган деб ҳисоблаймиз) турган атомлар сони N_n ва N_m классик ва квант системалар учун бир хилда ўринли бўлган Больцман тақсимотидан топилади: масалан, $N_n=\mathrm{const}\cdot\exp(-E_n/k_Б T)$. Демак, охирги тенгламада

$$\frac{N_n}{N_m}=\exp\left(-\frac{E_n-E_m}{k_Б T}\right)\equiv\exp\left(-\frac{\hbar\omega_{nm}}{k_Б T}\right)$$

нисбатни эътиборга олсак, (2- § га қаранг)

$$\rho_\omega(\omega_{nm})=\frac{A_{nm}/B_{nm}}{\dfrac{B_{mn}}{B_{nm}}\exp\dfrac{\hbar\omega_{nm}}{k_Б T}-1}$$

натижани ҳосил қиламиз. Уни абсолют қора жисм нурланиши учун машҳур Планк формуласи (2- § га қаранг)

$$\rho=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{\exp\left(\dfrac{\hbar\omega}{k_Б T}\right)-1}$$

билан таққослаб (54.5) муносабатларга келамиз. Бироқ шуни таъкидлаш лозимки, қатъий кетма-кетликдаги квант назарияга амал қиладиган бўлсак, аслида дастлаб Эйнштейн коэффициентларини ҳисобланиши, сўнгра уларга таяниб Планк формуласини квант асосланиши талаб этилади.

Нурланишнинг ҳозирги замон квант назариясини яратиш жараёнида қуйидаги муҳим хулосалар маълум бўлди. Ёруғликнинг ютилиш ва мажбурий нурланиш (яъни мажбурий квант ўтишлар) назарияси нисбатан содда бўлиб, уни Шредингер тенгламаси ёрдамида кўриш мумкин. Биз келгуси икки параграфда ностационар қўзғалишлар назариясини баён этиб, унинг асосида айрим хусусий ҳолларда атомда квант ўтишлар эҳтимоллигини (B коэффициентларни) ҳисоблаш йўлларини кўрсатамиз. Бироқ бу усул атомнинг спонтан нурланишини текшириш учун яроқсиздир. Ҳақиқатан, квант механикасига биноан ташқи таъсир (ёруғлик) бўлмаганда

14—2756

атом қўзғатилган ҳолатда исталганча узоқ вақт тура олади, чунки энергия ҳаракат интеграли (сақланувчи физик катталик) бўлганлигидан маълум энергияли ҳолатлар стационардир (бундай катталиклар учун Пуассоннинг квант қавси нолга тенг бўлишини эсга олинг). Шу ўринда тажриба эса атом жуда қисқа, лекин чекли вақт ичида ёруғлик нурлатиб, нормал (қуйи) ҳолатга қайтиши мумкинлигини кўрсатади. Бундай қарама-қаршилик нурланишнинг тўлиқ квант назариясида бартараф этилади. Бу назарияга мувофиқ атом ва ундаги электронлар ҳаракатидан вужудга келадиган электромагнит майдон ягона таъсирлашувчи квант система деб қаралади. У электромагнит майдоннинг квантлашганлик фактини ҳисобга олувчи математик аппаратга (**иккиламчи квантлаш назарияси**) таянади ва атомда спонтан квант ўтишлар рўй беришининг сабаби ундаги уйғонган ҳолатдаги электрон ҳаракатидан ҳосил бўлаётган ўзгарувчан майдоннинг айни шу электроннинг ўзига таъсири оқибатидир деб қарайди.

55-§. КВАНТ ЎТИШЛАР УЧУН ҚЎЗҒАЛИШЛАР НАЗАРИЯСИ. ФЕРМИНИНГ ОЛТИН ҚОИДАСИ

1. Олдинги параграфдан кўринадики, ёруғликнинг атом системалардан чиқарилиши, ютилиши ва сочилиши каби нурланиш масалалари изчил квант ўтишлар назариясини тақозо этади. Шу муносабат билан квант ўтиш ўзи нима ва унинг эҳтимоллигини қандай ҳисоблаш мумкин, деган саволларга батафсилроқ жавоб беришга киришамиз.

Айтайлик, ҳолати бирор механик катталик M (масалан, энергия — E, импульс — $\vec{P}$, импульс моменти — $\vec{M}$) нинг маълум қиймати $M = M_n$ билан характерланувчи соф квант ансамбли берилган бўлсин. Бизга II бобдан маълумки, бундай квант системани $\widehat{M}$ (мос ҳолда $\widehat{\mathcal{H}}$, $\widehat{\vec{P}}$, $\widehat{\vec{M}}$) операторнинг $M = M_n$ хусусий қийматига тааллуқли ягона $\psi_n \cdot (\vec{r})$ хусусий тўлқин функция билан ўрганиш мумкин ($\widehat{M}\psi_n(\vec{r}) = M_n \psi_n(\vec{r})$). Текширилаётган квант система n квант (стационар) ҳолатда турибди деб ҳисоблаш қабул қилинган. Агар системага маълум ташқи ўзгарувчан майдон таъсир эта бошласа, умуман айтганда, унинг ҳолати вақт ўтиши билан ўзгариб боради. Фараз қилайлик, вақтнинг бирор t пайтига келиб система

$M = M_m$ қиймат ва $\psi_m(\vec{r})$ тўлқин функция билан характерлансин, яъни янги m квант ҳолатда бўлсин. У ҳолда бундай **квант объект ташқи таъсир натижасида n квант ҳолатдан бошқа m квант ҳолатга квант ўтиш содир қилди** деб юритадилар. Демак, квант ўтиш тушунчаси бошланғич (n) ва охирги (m) квант ҳолатларни мажбурий равишда қайд этиб қўйишни талаб қилади. Ҳақиқатан, қатъий олиб қараганда системанинг янги ҳолати $\Psi_m(\vec{r}, t)$ аралашган квант ансамблни ташкил этади:

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \sum_n C_{mn}(t)\,\psi_m(\vec{r}), \tag{55.1}$$

яъни у M_m, $\psi_m(\vec{r})$ хусусий ҳолатли соф ансамбллар суперпозициясидан иборат бўлади. Системанинг ўлчов асбоби билан ўзаро таъсирлашувидагина бу соф ансамблларнинг бирортаси қайд этилади.

Маълумки, квант суперпозиция принципини ифодаловчи (55.1) каби муносабатларда қаторга ёйиш коэффициентлари C_{mn} қуйидагича физик маънога эга:

$$W_{mn}(t) = |C_{mn}(t)|^2 = C^*_{mn}(t)\cdot C_{mn}(t) \tag{55.2}$$

ифода билан аниқланадиган катталик квант системанинг m квант ҳолатда (M_m, ψ_m) топилиш эҳтимоллигини беради. Ўрганилаётган ансамблга татбиқ этадиган бўлсак, бошланғич пайтда ($t = 0$) $m = n$ квант ҳолат учун $C_{mn}(0) = 1$ ва демак, $W_{mn}(0) = 1$), қолган $m \neq n$ ҳолатлар учун эса $C_{mn}(0) = 0$ ($W_{mn} = 0$), яъни

$$C_{mn}(0) = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{агар } m = n \\ 0, & \text{агар } m \neq n. \end{cases} \tag{55.3}$$

Шу сабабдан ихтиёрий бошқа t вақт моменти учун (55.2) билан ифодаланадиган $W_{mn}(t)$ эҳтимолликни квант системанинг t вақт оралиғида дастлабки n ҳолат (M_n, ψ_n) дан янги m ҳолат (M_m, ψ_m) га ўтиш эҳтимоллиги деб қараш мумкин.

2. Квант ўтишлар назариясида энг муҳим масалалардан бири, олдинги параграфда кўрганимиздек, E_n энергияли бошланғич ҳолат (квант сатҳ) дан бошқа E_m энергетик сатҳга ўтиш эҳтимоллигини ҳисоблашдир. Қуйида биз бундай ҳисоблашнинг Шредингер тенгламасини ечишга асосланган усулини баён қиламиз. Умумий ҳолда бошланғич $\psi_n(\vec{r})$ тўлқин функ-

циясига қараб ихтиёрий ўзаро таъсир учун исталган t пайтдаги $\Psi_n(\vec{r}, t)$ функцияни аниқлаш кўпинча принципиал қийинчиликларга дуч келади. Шунинг учун қўзғалиш сифатида қараш мумкин бўлган кучсиз таъсирлар юзага чиқарадиган квант ўтишлар эҳтимоллигини ҳисоблаш билан чегараланамиз.

Қўзғалишга учрамаган квант система (атом, молекула ва бошқалар) учун Шредингер тенгламаси

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \widehat{\mathscr{H}}_0 \Psi(t)$$

қуйидаги

$$\Psi_n^{(0)}(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

кўринишдаги ечимга эга. Бу ерда $\widehat{\mathscr{H}}_0$ — қўзғалмаган системанинг гамильтоннани, унинг хусусий қийматлари E_n ва хусусий функциялари ψ

$$\widehat{\mathscr{H}}_0 \psi_n = E_n \psi_n \qquad (55.4)$$

стационар тенгламани қаноатлантиради. Бошланғич пайтда система n квант ҳолат (E_n, ψ_n) да турибди деб қараймиз. Қўзғатувчи майдон таъсир этаётган ҳолда тўлқин тенгламаси

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\widehat{\mathscr{H}}_0 + \widehat{V}(t)) \Psi \qquad (55.5)$$

кўринишни олади. Қўзғалиш туфайли $\widehat{\mathscr{H}}_0$ гамильтонианга қўшилган тузатма $\widehat{V}$ оператор, умуман олганда, $\vec{r}$, $\dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ ва t параметрларга боғлиқ бўлиши мумкин. Вақт бўйича биринчи тартибли, аслида хусусий ҳосилали, чизиқли дифференциал тенглама (55.5) нинг бошланғич шарт (55.3) ни ҳисобга олувчи хусусий ечимини

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \sum_k C_{kn}(t) \Psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) \qquad (55.6)$$

қатор кўринишида ифодалаймиз. Номаълум C_{kn} коэффициентларни аниқлаш учун (55.6) ни (55.5) га қўйиб, (55.4) ни эътиборга оламиз:

$$i\hbar \sum_k \frac{dC_{kn}(t)}{dt} \Psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) = \hat{V}(t)\Psi_n(\vec{r}, t).$$

Бу тенгламанинг ҳар икки томонини $\Psi_m^{(0)*}(\vec{r}, t)$ га кўпайтириб, сўнгра бутун фазо бўйича интеграллаб

$$i\hbar \frac{dC_{mn}(t)}{dt} = \sum_k C_{kn}(t) V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} \tag{55.7}$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Бу ерда

$$V_{mk} = \int \psi_m^*(\vec{r}) \hat{V} \psi_k(\vec{r}) d^3\vec{r} \equiv \langle m|\hat{V}|k\rangle \tag{55.8}$$

катталик координаталар тасаввурида қўзғалиш энергияси V нинг m ва k квант ҳолатлар бўйича олинган матрица элементи, $\omega_{mk} = (E_m - E_k)/\hbar$ — $k - m$ квант ўтиш учун Бор частотаси. Биз (55.7) ни олишда стационар ҳолатларнинг тўлқин функциялари $\int \psi_m^* \psi_k d^3\vec{r} = \delta_{mk}$ ортонормалангалик шартини қаноатлантиришини ҳам эътиборга олдик.

Квант сонининг тайинли n ва ихтиёрий m қийматлари учун ёзилган (55.7) тенгламалар системаси (55.5) тенгламага эквивалентдир. Энди V_{mk} кичик миқдор, яъни V қўзғалиш эканлигини ҳисобга олайлик. У ҳолда (55.7) нинг ечимини

$$C_{mn} = C_{mn}^{(0)} + C_{mn}^{(1)} + C_{mn}^{(2)} + \ldots \tag{55.9}$$

қатор кўринишида излаймиз. Бу ифоданинг ихтиёрий $C_{mn}^{(l)}$ ҳади $C_{mn}^{(l-1)}$ га нисбатан 1-тартибли кичик миқдордир. Уни (55.7) га қўйиб, кетма-кет яқинлашиш йўли билан (тенгламанинг ҳар икки томонидаги бир хил тартибли ифодаларни тенглаштириб)

$$\frac{dC_{mn}^{(0)}}{dt} = 0 \qquad \text{(0- яқинлашиш)},$$

$$i\hbar \frac{dC_{mn}^{(1)}}{dt} = \sum_k C_{kn}^{(0)} V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} \qquad \text{(1- яқинлашиш)}, \tag{55.10}$$

$$i\hbar \frac{dC_{mn}^{(2)}}{dt} = \sum_k C_{kn}^{(1)} V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} \qquad \text{(2- яқинлашиш)}$$

ва ҳ. к. тенгламалар системаларига эга бўламиз. Уларнинг биринчисидан нолинчи яқинлашишда (қўзғалиш бўлмаганда) $C_{mn}^{(0)} = \text{const}$ келиб чиқади. Бошланғич шарт (55.3) га кўра эса $C_{mn}^{(0)} = \delta_{mn}$. Буни (55.10) нинг иккинчисига қўйиб,

$$i\hbar \frac{dC^{(1)}_{mn}}{dt} = V_{mn}(t)\, e^{i\omega_{mn} t}$$

ёки

$$C^{(1)}_{mn}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{mn}(t)\, e^{i\omega_{mn} t}\, dt \qquad (55.11)$$

биринчи яқинлашишдаги ечимни оламиз. Таъриф (55.2) ва (55.11) лардан бизни қизиқтирган t вақт ичидаги $n \to m$ квант ўтиш эҳтимоллигини топамиз. Шунингдек, (55.11) ни (55.10) га қўйиб иккинчи яқинлашишда $C_{mn}(t)$ ва $W_{mn}(t)$ ларга тузатмаларни ҳосил қилиш мумкин ва ҳ. к.

Олинган (55.11) ифодадан биринчи қарашдаёқ қуйидаги хулосаларга келамиз: $n \to m$ квант ўтиш эҳтимоллиги вақт бўйича гармоник ўзгарувчи қўзғалиш $W_{mn}(t)$ нинг частотаси $\omega = \omega_{mn}$ — Бор шартини қаноатлантирганда максимал бўлади; секин (адиабатик) ўзгарувчи ($\omega \ll \omega_{mn}$) қўзғалиш таъсиридаги $n \to m$ ўтиш эҳтимоллиги кичикдир; вақтга боғлиқ бўлмаган қўзғалиш фақат энергиялари бир хил бўлган ҳолатлар ўртасидагина ўтиш юзага чиқара олади (масалан, заррачаларнинг эластик сочилиши).

3. **Вақт бўйича ўзгарувчи қўзғалиш таъсиридаги квант ўтишлар** эҳтимоллигини ҳисоблашга тўхталамиз. Бунда дискрет ва узлуксиз спектрлардаги ўтишларни алоҳида қараймиз.

а) **Дискрет спектр.** Бирор квант системанинг вақтга ошкор равишда боғлиқ бўлган $V(\vec{r}, t)$ қўзғалиш таъсирида бошланғич E_n энергетик сатҳдан иккинчи бир E_m сатҳга ўтиш эҳтимоллигини ҳисоблайлик. Классик физикадан маълумки, агар механик система ўзгарувчи ташқи майдон таъсирида бўлса, унинг потенциал энергияси ва демак, тўла энергияси тушунчаларидан фойдаланиб бўлмайди. Шунинг учун квант ўтишни юзага чиқарадиган қўзғалиш таъсир этаётган вақт давомида атомнинг бир квант сатҳдан бошқасига ўтиши ҳақидаги масала маънога эга эмас.

Фараз қилайлик, қўзғалиш $\hat{V}(\vec{r}, t)$ фақат $t=0$ дан $t=T$ гача бўлган вақт оралиғидагина нолдан фарқлидир. У ҳолда $t \geqslant T$ вақт моментлари учун (55.11) дан $C^{(1)}_{mn}$ коэффициент ва демак, дискрет спектрлар учун $n \to m$ квант ўтишнинг биринчи яқинлашишдаги эҳтимоллиги W_{mn} вақтга боғлиқ эмасдир. Буни эътиборга олиб, (55.11) ни қуйидагича ёзамиз ($m \neq n$):

$$C^{(1)}_{mn} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t)\, e^{i\omega_{mn} t}\, dt. \qquad (55.12)$$

Фурье интеграли тушунчасидан фойдаланиб охирги ифодани соддалаштириш мумкин. Ҳақиқатан, вақтнинг ихтиёрий функцияси $f(t)$ нинг Фурье интегралига ёйилмаси (спектри)

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega)\, e^{-i\omega t}\, d\omega$$

кўринишда бўлиб, айни бир частотага мос келган Фурье коэффициенти $f(\omega)$ текширилаётган $f(t)$ функция орқали

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{i\omega t} dt$$

ифода (Фурье теоремаси ёки тескари Фурье — алмаштириш) ёрдамида топилади. Охирги формулани қўллаш натижасида (55.12) дан

$$C^{(1)}_{mn} = \frac{2\pi}{i\hbar} V_{mn}(\omega_{mn}) \qquad (55.13)$$

муносабатга келамиз. Бу ерда

$$V_{mn}(\omega_{mn}) = \int \psi_m^* V(\vec{r}, \omega_{mn})\, \psi_n\, d^3 r \equiv$$

$$\equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t)\, e^{i\omega_{mn} t}\, dt \qquad (55.14)$$

қўзғалиш энергияси $V(\vec{r}, t)$ нинг ω_{mn} частотага мос келган Фурье — шакл (коэффициент) идан m ва n квант ҳолатлар ўртасида олинган матрица элементи. Топилган (55.13) ифодани таъриф бўйича (55.2) га қўйиб, изланаётган $n \to m$ квант ўтиш эҳтимоллиги учун ($t \geqslant T$)

$$W_{mn} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{mn}(\omega_{mn})|^2 \qquad (55.15)$$

формулани ҳосил қиламиз. У квант механикасида дискрет спектрдаги квант ўтишлар учун **Ферминнинг олтин қоидаси** номи билан машҳур. (55.15) чуқур физик маънога эга: E_n энергетик сатҳдан E_m сатҳга ўтиш рўй бериши (ман этилмаган бўлиши) учун $V_{mn}(\omega_{mn}) \neq 0$ шарт бажарилиши ва демак, (54.14) га биноан таъсир этувчи қўзғалиш $V(\vec{r}, t)$ спектрида да ўтиш эҳтимоллиги ((55.19) дан) t бўйича бир марта ҳосила олиш билан топилади:

$$w_{\vec{p}\,\vec{p}_0}\, dp_x\, dp_y\, dp_z = \frac{dW_{\vec{p}\,\vec{p}_0}}{dt}\, dp_x\, dp_y\, dp_z =$$

$$= \frac{2}{\hbar} |V_{\vec{p}\,\vec{p}_0}|^2 \frac{\sin\left[E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0) - \hbar\omega\ \frac{t}{\hbar}\right]}{E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0) - \hbar\omega}\, dp_x\, dp_y\, dp_z.$$

(55.20)

Бу формуладаги охирги каср кўпайтувчи t вақтнинг етарлича катта қийматларида ўз хоссалари бўйича Диракнинг δ-функциясини π га кўпайтиришдан ҳосил бўлган функцияга жуда яқиндир. Шунинг учун (55.20) ни

$$w_{\vec{p}\,\vec{p}_0}\, dp_x dp_y\, dp_z = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\vec{p}\,\vec{p}_0}|^2 \cdot \delta\,[E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0) - \hbar\omega]\, dp_x\, dp_y\, dp_z$$

(55.21)

кўринишда қайта ёзиш мумкин. Бу ифода узлуксиз спектрда энергия ютилиши (нурланиш учун $\hbar\omega \to -\hbar\omega$ алмаштириш кифоя) билан ўтадиган квант ўтишлар учун Фермининг олтин қоидасидир. (55.21) дан кўринадики, бу ҳолда ҳам квант ўтишлар резонанс характерга эгадир, чунки δ-функция хоссаларига биноан (55.21) эҳтимоллик фақатгина ташқи қўзғалишнинг ўзгариш частотаси ω $\vec{p}_0 \to \vec{p}$ ўтиш учун

$$\hbar\,\omega = E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0) = \hbar\,\omega_{\vec{p}\,\vec{p}_0}$$

Бор шартини қаноатлантирганда нолдан фарқли холос.

Агар квант системанинг дастлабки ҳолати дискрет спектрда ётса, у ҳолда (55.21) да, масалан, $E(\vec{p}_0)$ ни E_n га ва мос равишда $\psi_{\vec{p}_0}(\vec{r})$ ни $\psi_n(\vec{r})$ га алмаштириш кифоя.

Масала. Атом (55.16) монохроматик ёруглик таъсирида ионлашмоқда. Энергияси E ва импульсининг йўналиши $d\Omega = \sin\ \theta\, d\theta\, d\varphi$ фазовий бурчак ичида ётган электроннинг вақт бирлигида чиқиш эҳтимоллиги ҳисоблансин.

Шартга кўра электроннинг охирги ҳолати эркин, яъни энергияси узлуксиз спектрда ётади. Унинг импульси $\vec{p}$ ва энергияси ўртасида $E = p^2/2m_0$ боғланиш бор. Шунинг учун (55.21) даги импульслар фазосининг элементар ҳажмини

$$dp_x\, dp_y\, dp_z = p^2\, dp\, \sin\,\theta\ d\theta\, d\varphi = m_0^{3/2} \sqrt{2E}\ \ dE\, d\Omega = \rho(E)\, dE\, d\Omega$$

кўринишда (ρ, θ, φ — қутб координаталари) ифодалаш мумкин, $\rho(E) =$

$= m_0 p = m_0^{3/2}\sqrt{2E}$ эркин микрозаррача энергетик холатлар зичлиги.

Охирги ифодани (55.21) га қўйиб ва $E(\vec{p}_0) \to E_n$, $\psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) \to \psi_n(\vec{r})$ алмаштиришдан сўнг ҳосил бўлган натижани берилган E қийматни ўз ичига олган энергия оралиғи бўйича интеграллсак,

$$w_{\vec{p}n}(E, \theta, \varphi)\, d\Omega = \frac{1}{4\pi^2 \hbar^2} \left| \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \cdot V(\vec{r})\, \psi_n(\vec{r})\, d^3\vec{r} \right|^2 \rho(E)\, d\Omega \tag{55.22}$$

қўйилган масаланинг жавоби келиб чиқади. Бу формулани ҳосил қилишда $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$ эркин микрозарранинг δ-функцияга нормаланган тўлқин функцияси эканлигидан ва $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') f(x)\, dx = f(x')$ қоидадан фойдаландик.

4. Доимий қўзғалиш таъсиридаги квант ўтишлар. Амалда вақт ўтиши билан ўзгармай қоладиган қўзғалишлар таъсири остидаги ўтишлар ҳам учрайди. Уларга заррачаларнинг тинч турган атомлар, ионларда сочилиши, доимий электр ёки магнит майдонлар билан таъсирлашиши ва шу каби масалаларда дуч келинади. Бундай масалалар Шредингернинг стационар қўзғалишлар назарияси ёрдамида ҳал этилиши мумкин. (Борн яқинлашишидаги тўқнашишлар назарияси баён қилинган 53.2-§ га қаранг). Бироқ уларни квант ўтишлар тушунчалари асосида ҳам ечиш мумкин. Ҳар икки усул бир хил натижага олиб келади.

Вақтга боғлиқ бўлмаган қўзғалиш таъсиридаги ўтиш эҳтимоллигини ҳосил қилиш учун (55.19), (55.21) формулаларда $\omega = 0$ деб ҳисоблаш етарлидир. Масалан, (55.20) дан $\omega \to 0$ ҳолда

$$w_{\vec{p}\vec{p}_0} = |V_{\vec{p}\vec{p}_0}|^2 \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\sin\left[(E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0))\, t/\hbar\right]}{E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0)} \tag{55.23}$$

формулани оламиз. Охирги ифодадан кўринадики, системадаги сўнишни ҳисобга олмаганда квант ўтиш эҳтимоллиги энергиянинг $E(\vec{p}) = E(\vec{p}_0)$ шартини қаноатлантирувчи қийматда кескин катта (резонанс) бўлади, яъни вақтга қараб ўзгармайдиган қўзғалишлар квант системада энергия ўзгармай қоладиган квант ўтишларни юзага чиқаради.

56-§. ЁРУҒЛИКНИНГ ЮТИЛИШИ ВА НУРЛАНИШИ

Ёруғликнинг атом системаларда ютилиши ёки нурланиши ҳақидаги масалани жузъий ҳолларда ҳал этиш учун олдинги икки параграфга асосан системанинг унга тушаётган ёруғлик таъсирида бир квант ҳолатдан бошқасига ўтиш эҳтимоллигини, аниқроқ айтганда, ўзаро таъсир энергиясининг ўтиш ҳолатлари бўйича олинган матрица элементини ошкор равишда ҳисоблаш керак. Бунинг учун заряди e ва массаси m_0 бўлган заррача (электрон) нинг вектор потенциал $\vec{A}$ ва скаляр потенциал φ билан характерланувчи электромагнит майдондаги ҳаракати учун Шредингер тенгламасини ёзамиз:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left(\widehat{\mathcal{H}}_0+\frac{ie\hbar}{m_0c}\vec{A}\cdot\nabla+\frac{ie\hbar}{2m_0c}\nabla\vec{A}+\frac{e^2}{2m_0c^2}\vec{A}^2+e\varphi\right)\Psi. \tag{56.1}$$

Бу тенгламани ҳосил қилишда классик физикадаги мос Гамильтон функциясининг кўриниши $\widehat{\mathcal{H}}_0=\frac{\left(\vec{P}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m_0}+e\varphi$ ҳамда импульс $\hat{\vec{P}}$ ва $\hat{\vec{A}}$ операторлар учун $\widehat{\vec{P}\vec{A}}-\widehat{\vec{A}\vec{P}}=-i\hbar\nabla\hat{\vec{A}}$ коммутация муносабати ўринли бўлишини эътиборга олдик. Қўзғалишга учрамаган гамильтониан $\widehat{\mathcal{H}}_0$ масалан, атом учун, электроннинг ядро ва бошқа электронлар майдонидаги ҳаракатини ифодалайди.

Классик электродинамикадан маълумки, ёруғликнинг электр $\vec{\mathscr{E}}$ ва магнит $\vec{H}$ майдон кучланганликларини $\vec{A}$ ва φ потенциаллар орқали

$$\vec{\mathscr{E}}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}-\nabla\varphi;\quad \vec{H}=\nabla\times\vec{A}\equiv\mathrm{rot}\,\vec{A} \tag{56.2}$$

кўринишда ёзиш мумкин. Бу боғланишлар маълум маънода бир қийматли эмас. Умумийликни чекламаган ҳолда вакуумда Максвелл тенгламаларининг ечимларига Лоренц шартини қўямиз (кўндаланг тўлқинлар учун):

$$\nabla\vec{A}\equiv\mathrm{div}\,\vec{A}=0;\quad\varphi=0. \tag{56.3}$$

Бу ҳолда Максвелл тенгламаларидан вектор потенциал учун

$$\nabla^2\vec{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2}=0$$

тўлқин тенгламасини ҳосил қилиш катта қийинчилик туғдирмайди. Унинг хусусий ҳолдаги ечими эса

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} + \text{к.қ} \qquad (56.4)$$

ясси монохроматик тўлқин функциясидан иборатдир. Охирги ифодада қисқартирилган «к. қ» белги биринчи қўшилувчи ҳадга комплекс қўшма бўлган ифодани англатади, $\vec{A}_0$ комплекс вектор ($A_0 = |\vec{A}_0| e^{i\alpha}$) эса $\vec{A}(\vec{r}, t)$ функция учун (56.4) кўринишида Фурье коэффициентини аниқлайди. Монохроматик ёруғлик интенсивлиги $I(\omega)$ одатда $\vec{S} = \frac{c}{4\pi}[\vec{E}\times\vec{H}]$ Умов-Пойнтинг векторини тебраниш даври $2\pi/\omega$ га тенг вақт оралиғи бўйича ўрталаштириб топилади. Шунинг учун (56.2)—(56.4) ларга кўра

$$I(\omega) = |\overline{\vec{S}}| = \frac{\omega^2}{2\pi c} |\vec{A}_0|^2. \qquad (56.5)$$

Агар $I(\omega) = \rho_\omega \cdot c$ боғланишни ҳисобга олсак, (56.5) дан бизга қуйида зарур бўладиган $|\vec{A}_0|^2$ ни ёруғлик энергиясининг спектрал зичлиги ρ_ω орқали ифодаловчи

$$|\overline{\vec{A}}|^2 = \frac{2\pi c^2}{\omega^2} \rho_\omega \qquad (56.6)$$

формулани топамиз.

Қабул қилинган (56.3) Лоренц шартига кўра (56.1) нинг ўнг томонидаги учинчи ва бешинчи ҳадлар нолга тенг, тўртинчи ҳаднинг иккинчисига нисбати эса eA/cp тартибида бўлиб, ёруғлик интенсивлигининг бизни қизиқтирадиган чекли қийматларида етарлича кичик миқдордир. Демак, қўзғалишлар назариясининг биринчи яқинлашишида $e^2\vec{A}^2/2m_0c^2$ қўшилувчини ҳисобга олмаслик мумкин. У ҳолда (56.1) тенглама

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (\hat{\mathscr{H}}_0 + \hat{V})\psi \qquad (56.7)$$

кўринишга келади. Бу ифодада

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = -\frac{e}{m_0 c}\vec{A}(\vec{r}, t)\cdot\hat{\vec{P}} \qquad (56.8)$$

атом системанинг ёруғлик таъсирида қўзғалиш энергияси, $\hat{\vec{P}}$ — импульс оператори. Амалий жиҳатдан эришиш мумкин бўлган ёруғлик интенсивликларида (56.7) да $\widehat{\mathscr{H}}_0$ га нисбатан (56.8) билан аниқланадиган $V(\vec{r}, t)$ етарлича аниқлик билан кичик қўзғалиш сифатида қаралиши мумкин. Биз ана шу қўзғалиш таъсирида атомнинг E_n квант сатҳдан E_m сатҳга ўтиш эҳтимоллигини ошкор ҳолда ҳисоблашни қуйида вазифа қилиб қўямиз.

Олдинги параграфдаги квант ўтишлар назарияси натижаларини ушбу хусусий масалага қўллаш учун ёруғлик атомга $t = 0$ дан $t = T$ гача вақт оралиғидагина тушади ва T вақт ёруғлик тўлқинининг тебраниш даврига нисбатан жуда катта деб фараз қиламиз. У ҳолда атомнинг $t \geqslant T$ вақт моментига келиб $E_n \to E_m$ квант ўтиш содир қилишининг эҳтимоллиги (55.15) га асосан

$$W_{mn} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{mn}(\omega_{mn})|^2. \tag{56.9}$$

Бу формулада $V_{mn}(\omega_{mn})$ юқорида (56.8) кўринишда топилган қўзғалиш энергиясидан олинган

$$V_{mn}(t) = -\frac{e}{m_0 c} \int \Psi_m^* (\vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \widehat{\vec{P}}) \Psi_n d^3 \vec{r} \tag{56.10}$$

матрица элементининг $\omega_{mn} = (E_m - E_n) / \hbar$ частотага мос келган Фурье коэффициентидир. Агар ёруғлик қутбланишининг бирлик вектори $\vec{a} = \vec{A} / A$ тушунчасини киритиб, вектор потенциални (56.4) нинг биринчи ҳади кўринишида олсак, $V_{mn}(\omega_{mn})$ учун (56.10) дан

$$V_{mn}(\omega_{mn}) = \frac{eA_0}{m_0 c} \int \Psi_m^* e^{i\vec{k}\vec{r}} (\vec{a} \cdot \widehat{\vec{p}}) \Psi_n d^3 \vec{r} \tag{56.11}$$

ифодани ҳосил қиламиз. Атомнинг одам кўзи сезадиган ёруғлик билан ўзаро таъсирлашиш жараёни учун $\vec{k} \cdot \vec{r}$ кўпайтма $\frac{2\pi}{\lambda} \cdot \vec{r}_0 \ll 1$ кичик миқдордир. Бунда λ — ёруғлик тўлқин узунлиги ($0{,}38 \cdot 10^{-6}$ м $\leqslant \lambda \leqslant 0{,}78 \cdot 10^{-6}$ м) $r_0 \simeq 10^{-10}$ м қўпол ҳолда атом радиуси, аниқроғи, ташқи электрон тўлқин функциясининг ядродан бошлаб ўлчаганда максимумга эришиш масофаси. Шунинг учун (56.11) да $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ ни $\vec{k} \cdot \vec{r}$ бўйича қаторга ёйиб,

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 1 + i\vec{k}\vec{r} + \dots, \tag{56.12}$$

дастлабки ҳадлар билан чегараланиш етарлидир. Ҳозирча биринчи ҳаднигина ҳисобга оламиз. Шунга мэс ҳолда (56.11)

$$V_{mn}(\omega_{mn}) = -\frac{eA_0}{m_0 C}(\vec{a}\cdot\vec{P}_{mn}) \tag{56.13}$$

шаклни олади. Энди импульс операторининг қўзғалмаган m ва n ҳолатлар бўйичг $\vec{P}_{mn}$ матрица элементини ҳисоблайлик:

$$\frac{1}{m_0}\vec{P}_{mn} = \frac{d}{dt}\int \psi_m^* \dot{\vec{r}}\, \psi_n d^3\vec{r} = \frac{i}{\hbar}\int \psi_m^* [\widehat{\mathscr{H}}_0 \vec{r} -$$

$$- \vec{r}\,\widehat{\mathscr{H}}_0]\psi_n d^3\vec{r} = \frac{i}{\hbar}[(\vec{r}\,\psi_n(\widehat{\mathscr{H}}_0\psi_m)^* d^3\vec{r} -$$

$$- E_n\vec{r}_{mn}] = i\omega_{mn}\vec{r}_{mn}.$$

Бу ифодалардаги шакл алмаштиришларда $\vec{P}_{mn}$ матрица учун квантомеханик ҳаракат тенгламасидан $\left(\vec{P}_{mn} = \frac{1}{m_0}\frac{d}{dt}\vec{r}_{mn}\right)$ ва Гамильтон оператори $\widehat{\mathscr{H}}_0$ ўз-ўзига қўшма (эрмит) эканлигидан фойдаландик. Охирги натижани (56.13) га қўйсак,

$$V_{mn}(\omega_{mn}) = \frac{-i\omega_{mn}A_0}{c}(\vec{a}\cdot\vec{d}_{mn}) \tag{56.14}$$

келиб чиқади. Бунда $\vec{d}_{mn} = +e\vec{r}_{mn}$ — атом диполь моментининг E_m ва E_n квант ҳолатлари бўйича олинган матрица элементи. Агар (56.2) ва (56.4) ларни эътиборга олсак (56.14) ни

$$V_{mn}(\omega_{mn}) = -\mathscr{E}(\omega_{mn})(\vec{a}\cdot\vec{d}_{mn}) \tag{56.15}$$

кўринишда қайта ёзиш мумкин. Умумийлик учун ω_{mn} частотали ёруғликнинг атом турган жойдаги электр майдон кучлэнганлигининг тебраниш амплитудасини $\mathscr{E}(\omega_{mn}) = +\frac{i\omega_{mn}}{c}A_0$ билан белгиладик.

Шундай қилиб, агар (56.12) қаторда $\vec{k}\cdot\vec{r}$ кичик миқдор бўйича нолинчи яқинлашиш билан чегаралансак, атомнинг унга тушаётган ёруғлик билан фақат диполь моменти туфайлигина таъсирлашишини ифодаловчи (56.14) ёки (56.15) шаклидаги $V_{mn}(\omega_{mn})$ матрица элементларини ҳосил қиламиз. Шу сабабдан атомнинг бундай диполь яқинлашишдаги ёруғлик ютиш ($E_m > E_n$) ёки чиқариш ($E_m < E_n$) ларини диполь

нурланиш жараёнлари деб қаралади. Агар ҳисоблашлар натижасида $\vec{d}_{mn} = 0$ келиб чиқса, (56.15) га кура $V_{mn} = 0$ ва демак, атомда диполь нурланиш мавжуд бўлмайди ($W_{mn} = 0$), яъни у ман қилинган. Бироқ бундай ҳолларда кўпинча (56.12) каторнинг иккинчи ҳади (биринчи яқинлашиш) билан боғланган кучсиз нурланишлар содир бўлиши мумкан. Атомнинг мгнит — диполь ва квадруполь электр моментлари туфайли кузатиладиган бундай нурланишлар **ман қилинган нурланишлар** деб аталади.

Диполь нурланишни аниқловчи $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$ тенгсизликнинг физик маъноси содда. Ҳақиқатан, тўлқин сони $|\vec{k}| = 2\pi / \lambda$ ва $|\vec{r}| \approx r_0$ атомнинг чизиқли ўлчами эканлигини эътиборга олсак, $\vec{k} \cdot \vec{r} \approx \frac{2\pi r_0}{\lambda} \ll 1$ шартдан (56.4) ифодага биноан фазонинг атом эгаллаган барча нуқталарида электромагнит майдон бир жинсли эканлиги келиб чиқади. Бошқача айтганда атом ўлчамлари унга тушаётган ёруғликнинг тўлқин узунлигидан жуда кичик бўлса, атом ичида тўлқин фазаси сезиларли даражада ўзгариб улгурмайди, яъни электронга ихтиёрий вақт моментида атом ичида бир хил қийматга эга бўлган майдон таъсир қилади. Демак, спектр таркибидаги тўлқинлар берилган атом чегарасида $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$ шартни қаноатлантирадиган номонохроматик ёруғлик учун (56.4) ўрнига умумий ҳолда вектор потенциални фазонинг атом эгаллаган соҳасида

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \equiv \vec{A}(t) = \vec{a} \int_{-\infty}^{\infty} A(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \tag{56.16}$$

кўринишда ёзиш мумкин. Бу ҳолда $V_{mn}(\omega_{mn})$ матрица элементини аниқлаш учун (56.14) да A_0 ни $A(\omega_{mn})$ билан алмаштириш кифоя:

$$V_{mn}(\omega_{mn}) = -\frac{i\omega_{mn}}{c} A(\omega_{mn}) \cdot (\vec{a}\, \vec{d}_{mn}). \tag{56.17}$$

Демак, диполь яқинлашишда номонохроматик ёруғликни атом билан ўзаро таъсир энергиясининг матрица элементи (56.15) универсал формуладан аниқланади. Кўпинча уни аниқлик учун

$$V_{mn}(\omega_{mn}) = -\mathcal{E}(\omega_{mn}) \cdot (\vec{e} \cdot \vec{d}_{mn}) \tag{56.15'}$$

шаклда келтирадилар ва $\vec{e} = \vec{\mathcal{E}} / |\vec{\mathcal{E}}|$ — ёруғликнинг электр вектори бўйича *қутбланишининг бирлик вектори* деб ҳисоблайдилар.

Атомнинг ёруғлик таъсирида $E_n \to E_m$ квант ўтишининг эҳтимоллиги (56.15) ни (56.9) га қўйиб аниқланади:

$$W_{mn} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\mathcal{E}(\omega_{mn})|^2 \cdot |\vec{e} \cdot \vec{d}_{mn}|^2 \quad (56.18)$$

Агар ёруғлик қутбланиш вектори ва атом диполь моменти вектори $\vec{d}_{mn}$ орасидаги бурчакни θ_{mn} орқали белгиласак, у ҳолда (56.18) формула

$$W_{mn} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\mathcal{E}(\omega_{mn})|^2 \cdot |\vec{d}_{mn}|^2 \cdot \cos^2\theta_{mn} \quad (56.18')$$

кўринишни олади. Номонохроматик ёруғлик учун (56.6) ифода

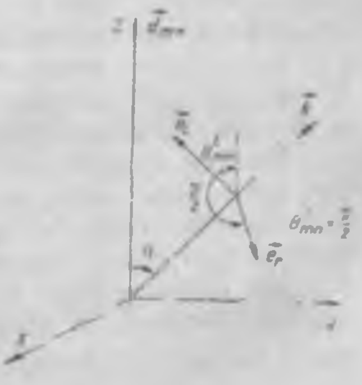
$$|\vec{A}|^2 = \frac{c^2}{\omega^2} \rho_\omega \quad (56.6')$$

шаклга ўтишини исботлаш қийин эмас. Буни эътиборга олиб (56.18) ни

$$\omega_{mn} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\vec{e} \cdot \vec{d}_{mn}|^2 \rho_{\omega_{mn}} \quad (56.19)$$

кўринишда қайта ёзиш мумкин. Вақтга боғлиқ бўлмаган бу ифода ёруғлик таъсирида атом системада вақт бирлиги ичидаги квант ўтиш эҳтимоллигини беради. Шундай қилиб, диполь яқинлашишда квант ўтиш эҳтимоллигини ҳисоблаш учун қўзғатувчи ёруғлик интенсивлигидан ташқари атом системасининг хусусиятини ифодаловчи диполь моментининг матрица элементини ($\vec{d}_{mn}$) билиш кифоядир.

(56.19) формуладан кўринадики, атом (система) томонидан ёруғликнинг ютилиши ёки нурланиш эҳтимоллиги унинг қутбланишига боғлиқ. Бу ҳолни конкретроқ кўрайлик. Маълумки, вакуумда ҳар қандай ёруғликнинг қутбланиш вектори $\vec{e}$ ни тарқа-

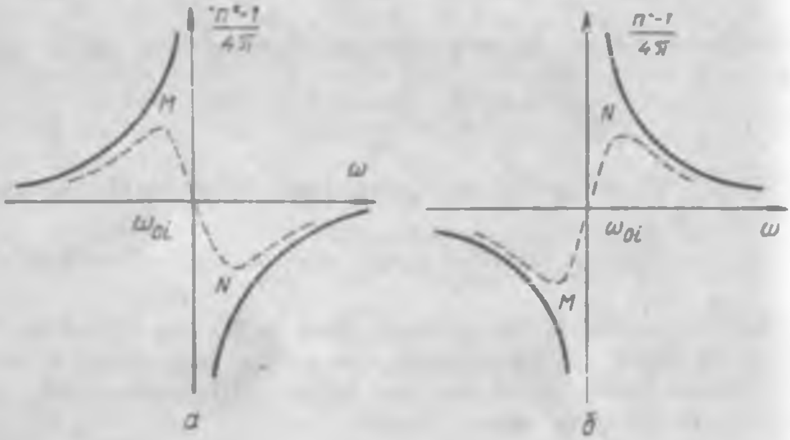


56.1 - расм. Ёруғликнинг тарқалиш йўналишига қараб мустақил қутбланиш векторларини танлаб олиш.

лиш йўналиши $\vec{k}$ га перпендикуляр бўлган текисликда ўзаро тик икки мустақил бирлик векторларга ажратиш мумкин. Айтайлик, Декарт координаталар системасининг Z ўқи атомнинг диполь моменти векторига параллел бўлсин. У ҳолда тўлқин вектори $\vec{k}$ ва $\vec{d}_{mn}$ орасидаги бурчак θ- қутб бурчагига тенг ва азимутал ҳамда меридианал[1] текисликларда ётувчи $\vec{e}_l$, $\vec{e}_r$ бирлик қутбланиш векторларидан фойдаланиш қулайдир (56.1- расм). Бу икки қутбланиш учун (56.19)

$$w^{l}_{mn} = 4\pi^2 |\vec{d}_{mn}|^2 \rho_{\omega_{mn}} \sin^2\theta / \hbar^2, \tag{56.20}$$

$$w^{r}_{mn} = 0$$



56.2- расм. Дисперсия чизиқлари: а) мусбат дисперсия ($\omega_{0i} = \omega_{mn} > 0$); б) манфий дисперсия ($\omega_{0i} = \omega_{nm} > 0$).

кўринишларни олади. Охирги тенглик атом система қутбланиш вектори диполь моментига тик бўлган ёруғлик билан биринчи яқинлашишда, таъсирлашмайди деган классик физикада маълум бўлган хулосани ифодалайди. Агар атомга тушаётган ёруғлик қутбланмаган ва барча йўналишлар бўйича бир хил интенсивликда бўлса, 54- § да кўрилган индукцияланган нурланиш эҳтимоллиги ($E_n > E_m$) (56.20) тенгламаларни фазовий йўналишлар ва икки қутбланиш ҳолати бўйин-

---

[1] Азимутал текислик $\vec{k}$ — вектор ва Z ўқ орқали, меридианал текислик эса уларга тик ҳолда ўтувчи текисликлардир.

ча ўртачалаштириб топилади:

$$B_{nm}\rho_{\omega_{mn}} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}|\vec{d}_{mn}|^2 \cdot \rho_{\omega_{mn}} \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin^2\theta \cdot \sin\theta\, d\theta.$$

Бу ердан Эйнштейн коэффициенти индукцияланган нурланиш ёки ютилиш учун

$$B_{nm} = \frac{4}{3}\frac{\pi^2}{\hbar^2}|d_{mn}|^2 \tag{56.21}$$

эканлигини аниқлаймиз. (54.5) формулаларнинг иккинчисига ва (56.21) га мувофиқ спонтан нурланиш учун

$$A_{nm} = \frac{4}{3}\frac{\omega_{nm}^3}{\hbar c^3}|\vec{d}_{mn}|^2 \tag{56.22}$$

Эйнштейн коэффициентига келамиз. ($\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$). Вақтнинг бирор моментида қўзғалган E_n ҳолатдаги атомлар сони N_n бўлса, у ҳолда спонтан нурланиш интенсивлигини

$$I_{\text{кв}}^{\text{сп}} = N_n \hbar\omega_{nm} \cdot A_{nm} = N_n \frac{4}{3}\frac{\omega_{nm}^4}{c^3}|\vec{d}_{mn}|^2 \tag{56.23}$$

формула билан ҳисоблаймиз. Демак, атом системаси томонидан 1 с давомида спонтан нурлатиладиган энергия $\frac{4}{3}\frac{\omega_{nm}^4}{c^3}|\vec{d}_{mn}|^2$ хусусий тебраниш частотаси $\omega_0 = \omega_{nm}$ ва ўртача диполь моменти $<\vec{d}_{\text{кл}}^2> = |\vec{d}_{mn}|^2$ каби аниқланадиган классик осцилляторнинг нурланиш интенсивлиги (54.3) билан мос тушар экан.

Агар вақтнинг берилган t пайтида мавжуд атомларнинг $N_n(t)$ таси қўзғалган E_n ҳолатда, қолган $N_m(t)$ таси қуйи E_m энергетик сатҳда бўлса, индукцияланган нурланиш

$$I_{\text{кв}}^{\text{инд}} = B_{nm} \cdot N_n \hbar\omega \cdot \rho_\omega \tag{56.24}$$

ва мажбурий ютилиш

$$I_{\text{кв}}^{\text{ют}} = B_{mn} N_m \hbar\omega \cdot \rho_\omega \tag{56.25}$$

интенсивликларини билган ҳолда натижавий нурланиш интенсивлигини

$$I_{\text{кв}} = I_{\text{кв}}^{\text{сп}} + I_{\text{кв}}^{\text{инд}} - I_{\text{кв}}^{\text{ют}} = A_{nm} N_n \hbar\omega\left[1 + \frac{\rho_\omega}{\rho_0}\left(1 - \frac{N_m}{N_n}\right)\right] \tag{56.26}$$

формула ёрдамида ҳисоблаш мумкин. Бу ерда ρ_ω частотаси $\omega = \omega_{nm}$ бўлган ташқи ёруғликнинг спектрал зичлиги, $\rho^0_\omega = \hbar\omega^3/\pi^2c^3$. (56.26) дан кўринадики, $N_n > N_m$ шарт бажарилса, ташқи ёруғлик атомлар муҳитидан ўтишда кучайиши мумкин. Бундай қўзғатилган ҳолатдаги муҳит атомларининг энергетик сатҳлари электронлар билан *инверсион эгалланган* ($E_n > E_m$, $N_n > N_m$) дейилади. Ёругликнинг инверсион ҳолатли муҳитдан ўтишда кучайиш эффекти ҳозирги замон лазерларида кенг қўлланишга эга.

56.1-§. ДИПОЛЬ НУРЛАНИШ УЧУН ТАНЛАШ ҚОИДАСИ

Диполь нурланишнинг вақт бирлиги ичида чиқарилиш ёки ютилиш эҳтимоллиги (56.19) га асосан электр диполь моменти матрица элементининг ёруғлик қутбланиш вектори йўналишидаги проекцияси квадратига пропорционал. $\vec{d}_{mn}$ матрица элементининг сон қиймати эса квант ўтишлар содир қилаётган атом системанинг тўлқин функцияларига боғлиқ. Берилган системанинг энергетик спектри учун ҳисобланган баъзи $\vec{d}_{mn}$ моментлар нолга тенг бўлиб қолиши мумкин. У ҳолда ёруғлик таъсирида $n \to m$ квант ўтишлар рўй бермайди ва ω_{nm} частота квант система томонидан нурлатилмайди ва ютилмайди. Демак, энергетик спектрда фикран мумкин бўлган барча $E_n \to E_m$ ўтишлардан фақат

$$\vec{d}_{mn} = e \int \psi^*_m \vec{r}\, \psi_n\, d^3\vec{r} \neq 0 \qquad (56.1.1)$$

шартни қаноатлантирганларигина реал ҳолда юз бера олади. Бу тенгсизликдан келиб чиқадиган ва ёруғликнинг ютилиш ёки нурланиш мумкинлигини аниқлайдиган шартлар *диполь нурланиш учун танлаш қоидаси* дейилади. Аниқлик учун шуни таъкидлаш лозимки, (56.1.1) га кўра ёруғлик билан диполь таъсирлашиш туфайли мумкин бўлмаган $n \to m$ квант ўтиш бошқа бир қўзғалиш томонидан амалга оширилиши мумкин.

Биз қуйида конкрет ҳолларда баъзи содда квант системалар учун танлаш қоидасини аниқлаймиз.

Чизиқли гармоник осциллятор

Маълумки, (40-§ га қаранг), X ўқи бўйлаб тебранаётган чизиқли гармоник осцилляторнинг квантлашган энергетик сатҳлари ва хусусий тўлқин функциялари мос равишда

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad n = 0, 1, 2, \ldots . \tag{56.1.2}$$

$$\psi_n(\eta) = C_n e^{-\frac{1}{2}\eta^2} H_n(\eta), \quad \eta = \frac{x}{x_0}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 \omega_0}} \tag{56.1.3}$$

формулалардан топилади. Эрмит полиноми

$$H_n(\eta) = (-1)^n e^{\eta^2} \frac{d^n}{d\eta^n} e^{-\eta^2} = (2\eta)^n -$$

$$- \frac{n(n-1)}{1!}(2\eta)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2\eta)^{n-4} - \ldots \tag{56.1.4}$$

(40.12) тенгламанинг ечимидир ($\chi = 2\pi + 1$, $\varphi = H_n$):

$$H_n'' - 2\eta H_n' + 2n H_n = 0. \tag{56.1.5}$$

Агар (56.1.4) дан

$$H_n' = \frac{dH_n}{d\eta} = 2n\left[(2\eta)^{n-1} - \frac{(n-1)(n-2)}{1!}(2\eta)^{n-2} + \ldots\right] \equiv$$

$$\equiv 2n \cdot H_{n-1},$$

$$H_n'' = \frac{d^2 H_n}{d\eta^2} = 2n \cdot H_{n-1}' = 2n \cdot 2(n-1) H_{n-2}$$

ҳосилаларни аниқлаб, уларни (56.1.5) га қўйсак ва сўнгра $n \to n + 1$ алмаштириш қилсак, Эрмит полиномлари учун

$$\eta H_n = n H_{n-1} + \frac{1}{2} H_{n+1} \tag{56.1.6}$$

рекуррент муносабатга келамиз.

Энди (56.1.1) дан чизиқли гармоник осциллятор диполь моментининг матрица элементини (56.1.3) ва (56.1.6) лар асосида ҳисоблайлик:

$$d_{mn}^x = e x_{mn}, \quad x_{mn} = x_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \eta \psi_n \, d\eta = \tag{56.1.7}$$

$$= x_0^2 C_m C_n \left[m \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\eta^2} H_{m-1} H_n \, d\eta + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\eta^2} H_{m+1} H_n \, d\eta\right].$$

Бу ерда Эрмит полиномларидан яна қайтадан ψ_n тўлқин функцияларга ўтсак ва

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n \, d\eta = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & \text{агар} \quad m = n, \\ 0, & \text{агар} \quad m \neq n \end{cases}$$

ортонормаланганлик шартини эътиборга олсак,

$$d_{mn}^x = ex_0 \left[(n+1) \frac{C_{n+1}}{C_n} \delta_{m-1,\, n} + \frac{1}{2} \frac{C_{n-1}}{C_n} \delta_{m+1,\, n} \right] \tag{56.1.8}$$

ифодани ҳосил қиламиз. Ундан кўринадики, нолдан фарқли матрица элементлари фақат $n \to m = n + 1$ ва $n \to m = n - 1$ квант ўтишлар учунгина мавжуддир, яъни танлаш қоидаси (56.1.2) даги квант сони n учун

$$d_{mn}^x \neq 0, \text{ агар } m = n \pm 1 \text{ ёки } \Delta n = n - m = \pm 1 \tag{56.1.9}$$

кўринишни олади. Демак, диполь яқинлашишда чизиқли гармоник осциллятор учун фақат қўшни энергетик сатҳлар орасидагина ўтишлар рухсат этилган ва бунда хусусий частота ω_0 нурлантирилади ёки ютилади холос.

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \pm \omega_0. \tag{56.1.10}$$

Агар (40.23) дан C_n нинг қийматларини (56.1.8) га қўйсак, нолга тенг бўлмаган d_{mn} матрица элементларини ва квант ўтиш эҳтимолликларини аниқлаймиз:

$$d_{n-1,\, n}^x = ex_0 \sqrt{\frac{n}{2}}, \quad A_{n,\, n-1} = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_0^2}{m_0 c^3} n \text{ — спонтан нурланиш,}$$

$$d_{n+1,\, n}^x = ex_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}}, \quad B_{n,\, n+1} = \frac{2}{3} \frac{\pi^2 e^2}{m_0 \hbar\, \omega_0} (n+1) \text{ — ютилиш.}$$

Қаттиқ ротатор

Моддий нуқтанинг сфера сиртидаги ҳаракати (ротатор) учун Шредингер тенгламасининг ечимлари қуйидагича (46-§):

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, \quad I = m_0 a^2 = \text{const}, \quad l = 0, 1, 2 \ldots; \tag{56.1.11}$$

$$\psi_{lm} = \text{const} \cdot Y_l^m(\theta, \varphi), \quad Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{C_l^m}{\sqrt{2\pi}} P_l^m(\theta)\, e^{im\varphi}. \tag{56.1.12}$$

Ротатор ҳаракатини физик жиҳатдан уч қисмга ажратиб ўрганиш мумкин: Z ўқи бўйича тебранма ҳаракат ва xy текисликда айлана бўйлаб ўнг ёки чап ҳаракат. Уларни мос ҳолда

$$
\begin{aligned}
z &= a\cos\theta,\\
\xi &= x + iy = a\sin\theta\, e^{i\varphi},\\
\eta &= x - iy = a\sin\theta\, e^{-i\varphi}
\end{aligned}
$$

координаталар билан ифодалаш қулай. Демак, ротатор квант сонларининг ўзгариши учун танлаш қоидасини аниқлаш (56.1.1) ва (56.1.12) ларга кўра

$$z_{l'm',\, lm} = \int Y_{l'}^{m'*} \cos\theta\, Y_l^m\, d\Omega, \quad d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi, \tag{56.1.13}$$

$$\xi_{l'm',\, lm} = \int Y_{l'}^{m'*} \sin\theta e^{i\varphi}\, Y_l^m\, d\Omega, \tag{56.1.14}$$

$$\eta_{l'm',\, lm} = \int Y_{l'}^{m'*} \sin\theta\, e^{-i\varphi}\, Y_l^m\, d\Omega \tag{56.1.15}$$

матрица элементларини ҳисоблашга келтирилади. Бу формулаларга шар функциясининг (56.1.12) ифодасини қўйяйлик:

$$z_{l'm',\, lm} = C_l^m C_{l'}^{m'} \int_{-1}^{1} P_{l'}^{m'}\, x\, P_l^m\, dx\, \delta_{m'm}, \quad x = \cos\theta, \tag{56.1.13'}$$

$$\xi_{l'm',\, lm} = C_l^m C_{l'}^{m'} \int_{-1}^{1} P_{l'}^{m'} \sqrt{1-x^2}\, P_l^m dx\, \delta_{m'-1,\, m} dx, \tag{56.1.14'}$$

$$\eta_{l'm',\, lm} = C_l^m C_{l'}^{m'} \int_{-1}^{1} P_{l'}^{m'} \sqrt{1-x^2}\, P_l^m\, dx\, \delta_{m'+1,\, m}. \tag{55.1.15'}$$

Охирги натижаларни ҳосил қилишда φ ўзгарувчи бўйича интеграллар бевосита бажарилди:

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi}\, d\varphi = \delta_{m'm}, \quad \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i[m-(m'\pm 1)]\varphi}\, d\varphi = \delta_{m'\pm 1,\, m}$$

(56.1.13′) — (56.1.15′) ифодалардан кўринадики, z, ξ ва η координаталарнинг матрица элементлари фақат мос ҳолда $m' = m$, $m' = m+1$ ва $m' = m-1$ квант ўтишлар учунгина нолдан фарқлидир. Демак, *магнит квант сони ўзгариши учун танлаш қоидаси*

$$\Delta m = m - m' = 0 \text{ ёки } \pm 1 \tag{56.1.16}$$

дан иборат. Энди Y_l^m шар функциясининг маълум

$$xY_l^m = \sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}}\, Y_{l+1}^m + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\, Y_{l-1}^m,$$

(56.1.17)

$$\sqrt{1-x^2}\, Y_l^m = \left\{ -\sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\, Y_{l+1}^{m-1} + \right.$$

$$\left. + \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\, Y_{l-1}^{m-1} \right\} e^{i\varphi}$$

хусусиятларидан фойдаланамиз. Уларни текшириб кўриш учун функциянинг (56.1.12) ифодасидан фойдаланиш етарли бўлади. У ҳолда Лежандр қўшма полиномлари P_l^m учун

$$x P_l^m = a_{lm} P_{l+1}^m + b_{lm} P_{l-1}^m,$$

(56.1.18)

$$\sqrt{1-x^2}\, P_l^m = c_{lm} P_{l+1} + d_{lm} P_{l-1}^{m-1}$$

муносабатларни ёзиш мумкин. Бу рекуррент формулаларни қўллаб ва шар функциясининг ортонормаланганлик шартини ҳисобга олиб (56.1.13′) — (56.1.15′) ларни қуйидаги кўринишларга келтирамиз:

$$z_{l'm',\, lm} = \left[\frac{a_{lm} C_l^m}{C_{l+1}^m}\, \delta_{l',\, l+1} + \frac{b_{lm} C_l^m}{C_{l-1}^m}\, \delta_{l',\, l-1} \right] \delta_{m'm},$$

$$\xi_{l'm',\, lm} = \left[\frac{c_{l'm'} C_{l'}^{m'}}{C_{l'+1}^{m'-1}}\, \delta_{l'+1,\, l} + \frac{d_{l'm'} C_{l'}^{m'}}{C_{l'-1}^{m'-1}}\, \delta_{l'-1,\, l} \right] \delta_{m'-1,\, m},$$

$$\eta_{l'm',\, lm} = \left[\frac{c_{lm} C_l^m}{C_{l+1}^{m-1}}\, \delta_{l',\, l+1} + \frac{d_{lm} C_l^m}{C_{l-1}^{m-1}}\, \delta_{l',\, l-1} \right] \delta_{m'-1,\, m}.$$

Агар (56.1.17) (56.1.18) лардан a_{lm}, b_{lm}, c_{lm}, d_{lm} коэффициентларни аниқлаб охирги ифодаларга қўйсак, ниҳоят

$$z_{l'm'\, lm} = \left[\sqrt{\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}}\, \delta_{l',\, l+1} + \right.$$

$$\left. + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\, \delta_{l',\, l-1} \right] \delta_{m'm}, \qquad (56.1.19)$$

$$\xi_{l'm',\, lm} = \left[\sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\, \delta_{l',\, l+1} - \right.$$

$$\left. - \sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\, \delta_{l',\, l-1} \right] \delta_{m',\, 1+m}, \qquad (56.1.20)$$

$$\eta_{l'm',\,lm} = \left[-\sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\,\delta_{l',\,l+1} + \right.$$

$$\left. + \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\,\delta_{l',\,l-1}\right]\delta_{m',\,m-1}. \qquad (56.1.21)$$

формулаларга келамиз. Улардан кўринадики, қаралаётган матрица элементлари мумкин бўлган барча $(lm) \to (l'm')$ квант ўтишлардан *орбитал квант сонининг ўзгариши*

$$\Delta l = l - l' = \pm 1 \qquad (56.1.22)$$

шартни (танлаш қоидасини) қаноатлантирганлари учунгина нолдан фарқлидир. Шундай қилиб, (56.1.16) ва (56.1.22) шартлар ротатор квант ўтишлари учун танлаш қоидасини аниқлайди.

Ротаторнинг энергетик сатҳлари (56.1.11) дан фақат унинг орбитал импульс моменти $M_l = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ қийматига боғлиқ холос, $\vec{M}_l$ векторнинг фазодаги турли йўналишлари (магнит квант сони m) бўйича турланишга эга. Демак, (56.1.22) га мувофиқ ротатор фақат қўшни энергетик сатҳлар уртасидагина квант ўтиш содир қила олади ва бунда

$$\omega_{ll'} = \frac{E_l - E_{l'}}{\hbar} = \frac{\hbar}{2J}\left[l(l+1) - l'(l'+1)\right].$$

Бор шартига кўра

$$\omega = \frac{\hbar}{J}\cdot l \qquad (56.1.23)$$

частоталарни чиқаради ёки ютади.

Водород атоми

Спинни ҳисобга олмаганда водород атомининг энергияси ва тўлқин функциялари (48-§ га қаранг)

$$E_n = -\frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}, \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots, \qquad (56.1.24)$$

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad (56.1.25)$$

формулалар билан аниқланади. Атомдаги ягона электрон[1] диполь моментининг матрица элементларини (56.1.25) функция-

[1] Бу ерда олинадиган танлаш қоидалари водородсимон ионлар (He^+, Li^{++}, ...) ва ишқорий атомларнинг оптик электронлари учун ҳам ўринлидир.

лар орқали ҳисоблаш зарур. (56.1.1) га асосан $\vec{d}_{n'l'm',\,nlm} =$ $= -e_0 \vec{r}_{n'l'm',\,nlm}$ бўлганлигидан $\vec{r}$ вектор проекцияларининг матрица элементларини топиш кифоядир. Аммо (56.1.25) функциялар учун x, y, z декарт координаталари ўрнига, юқорида кўрганимиздек,

$$\xi = x + iy = r\sin\theta\, e^{i\varphi},\quad \eta = x - iy = r\sin\theta\, e^{-i\varphi},$$

$$z = r\cos\theta$$

аралаш сферик координаталар матрицаларини ҳисоблаш қулайлик туғдиради. У ҳолда худди (56.1.13) — (56.1.15) лар каби

$$\xi_{n'l'm',\,nlm} = \int_0^\infty R_{n'l'} R_{nl} r^3\, dr \int_0^{4\pi} Y_{l'}^{m'*} \sin\theta\, e^{i\varphi}\, Y_l^m d\Omega, \tag{56.1.26}$$

$$\eta_{n'l'm',\,nlm} = \int_0^\infty R_{n'l'} R_{nl}\, r^3\, dr \int_0^{4\pi} Y_{l'}^{m'*} \sin\theta\, e^{-i\varphi}\, Y_l^m,\, d\Omega, \tag{56.1.27}$$

$$z_{n'l'm',\,nlm} = \int_0^\infty R_{n'l'} R_{nl}\, r^3\, dr \int_0^{4\pi} Y_{l'}^{m'*} \cos\theta\, Y_l^m\, d\Omega, \tag{56.1.28}$$

ифодаларни ёзиш мумкин. Бу ерда θ ва φ бурчаклар бўйича интеграллаш айнан (56.1.19) — (56.1.21) натижаларга олиб келади. Демак, орбитал l ва магнит квант сонларининг рухсат этилган ўзгаришлари учун яна (56.1.16) ва (56.1.22) танлаш қоидаларини оламиз. Қўйилган масалани тўла ҳал этиш учун

$$R_{n'l',\,nl} = \int_0^\infty R_{n'l'} R_{nl}\, r^3\, dr \tag{56.1.29}$$

интегрални $R_{nl}(r)$ радиал функциянинг (48.2) ифодасидан фойдаланиб ҳисоблаш талаб қилинади. Бироқ биз бу ерда (55.1.29) интегрални конкрет бажариш билан шуғулланмасдан, $R_{n'l',\,nl}$ матрица элементи бош квант сонининг ихтиёрий n, n' қийматларида нолдан фарқли бўлишини таъкидлаб ўтамиз. Шундай қилиб, водород атомида электрон квант ўтишлар учун

$$\Delta n = n - n' \quad \text{— ихтиёрий},$$

$$\Delta l = l - l' = \pm 1, \qquad (56.1.30)$$
$$\Delta m = m - m' = 0, \ \pm 1$$

танлаш қоидаларини оламиз. (56.1.24) энергетик спектр ва l квант сонлари бўйича турланишга эга бўлганлигидан водород атомининг нурланиш ёки ютилиш спектри

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = \frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (56.1.31)$$

частоталар билан, яъни фақат бош квант сонининг ўзгариши билан аниқланади.

Спектроскопияда орбитал квант сонининг $l = 0$, $l = 1$, $l = 2$, ... қийматлари билан аниқланувчи ҳолатларни мос равишда s-терм, p-терм, d-терм ... деб белгилаш қабул қилинган. Квант механикаси қатъий яратилганга қадар атомларда оптик квант ўтишлар s- ва p-терм, p- ва d-терм, d- ва f-терм ..., яъни фақат қўшни термлар ўртасидагина рўй бериши мумкинлиги аниқланган эди. Бу ҳол эса (56.1.30) нинг иккинчи шартидан яққол кўриниб турибди. Ундан хусусий ҳолда Бальмер спектрал сериясини ҳосил қилувчи квант ўтишлар

$$np \rightarrow 2s$$
$$ns \rightarrow 2p$$
$$nd \rightarrow 2p$$

лардан иборатлигини кўрсатиш қийин эмас.

Агар электроннинг $(nlm) \rightarrow (n'l'm')$ квант ўтишида спини ўзгармай қолса, у ҳолда (56.1.30) нинг учинчи шартига кўра атом уч хил қутбланган ёруғлик кванти (фотон) нурлатади: а) $\Delta m = 0$ — чизиқли қутбланган ёруғлик кванти (фотон) нурлатади: а) $\Delta m = 0$ — чизиқли қутбланган, б) $\Delta m = -1$ ўнг доиравий; в) $\Delta m = +1$ — чап доиравий қутбланган.

57-§. ЁРУҒЛИК ДИСПЕРСИЯСИНИНГ НАЗАРИЯСИ

Маълумки, ёруғлик дисперсияси бирор муҳит синдириш кўрсаткичининг (n) ёруғлик частотасига боғлиқ бўлиш хусусиятидир: $n = f(\omega)$. Бу боғланишни келтириб чиқариш ёруғлик табиатинигина эмас, балки муҳитнинг конкрет моделини ва ёруғликнинг муҳит зарралари билан ўзаро таъсир механизмини ҳам билишни талаб этади. Максвеллнинг электромагнит назариясига кўра изотроп муҳитнинг синдириш кўрсаткичи унинг диэлектрик (ε) ва магнит (μ) киритувчанликлари билан аниқланади:

$$n = \sqrt{\varepsilon\mu}. \qquad (57.1)$$

Кўпчилик моддалар учун $\mu \approx 1$ бўлганлигидан Максвелл муносабатини $n \approx \sqrt{\varepsilon}$ шаклида ёзиш мумкин. Бироқ бу назарияда ε муҳитнинг макроскопик параметри сифатида феноменологик йўл билан киритилади ва дисперсиянинг моҳияти очилмайди. Ёруғлик дисперсиясининг классик назарияси Френель, Коши ва Зельмейерларнинг «эластик эфир» ҳақидаги тасаввурларга асосланган ишларида ривожлантирилиб, электрон назарияда тугал бир таълимот кўринишига келди. У нормаль $\left(\frac{dn}{d\omega} > 0\right)$ ва аномаль $\left(\frac{dn}{d\omega} < 0\right)$ дисперсияларни тажрибага мос ҳолда тушунтира олади. Манфий дисперсия каби нозик ҳодисалар эса квант назариядагина ўз талқинини топди.

а) Дисперсиянинг классик (электрон) назарияси

Атомлари изотроп хусусиятли газсимон муҳитнинг синдириш кўрсаткичини ҳисоблайлик. Классик электрон назарияга мувофиқ манфий зарядли электронлар атом ичида мувозанат ҳолатида бўладилар. Ташқи электр майдони $\vec{\mathscr{E}}$ таъсирида бу зарядлар бирор $\vec{r}$ масофага силжийди ва натижада ҳар бир электрон туфайли атом $\vec{d} = e\vec{r}$ электр диполь момент ($e = -e_0$ электрон заряди) ҳосил қилади. Агар соддалик учун муҳитнинг ҳажм бирлигида бир хил типдаги N та атом мавжуд ва улар биттадан электронга эга деб фараз қилсак, муҳитнинг қутбланиш вектори (ҳажм бирлигидаги электр моментлар йиғиндиси)

$$\vec{\mathscr{P}} = N \cdot \vec{d} = Ne\vec{r} \qquad (57.2)$$

га тенг бўлади. У ҳолда диэлектрик киритувчанликни

$$\vec{\mathscr{D}} = \varepsilon\vec{\mathscr{E}} = \vec{\mathscr{E}} + 4\pi\vec{\mathscr{P}} = \vec{\mathscr{E}} + 4\pi Ne\vec{r} \qquad (57.3)$$

тенгликдан аниқлаш мумкин. Бу ерда $\vec{\mathscr{D}}$ — муҳитнинг электростатик индукция вектори. Шундай қилиб, изотропик диэлектрик муҳитнинг синдириш кўрсаткичини ҳисоблаш масаласи (57.1) ва (57.3) ифодаларга кўра битта электроннинг ёруғлик даврий ўзгарувчи электр майдони таъсиридаги силжиши $\vec{r}$ ни аниқлашга келади. Бунда албатта, ҳаракат частотаси ёруғлик тўлқинининг частотасига яқин тартибда бўлган электронларни текшириш зарур. Ана шундай оптик электронлар ёруғлик билан кучлироқ таъсирлашиб, катта силжишга учрайди ва дисперсияда муҳим роль ўйнайди.

Айтайлик, атомга электр майдон кучланганлиги

$$\vec{\mathscr{E}} = \vec{\mathscr{E}}_0 \cos \omega t \tag{57.4}$$

гармоник ўзгарувчи монохроматик ёруғлик тушаётган бўлсин. Ёруғлик тўлқин узунлиги λ атомнинг чизиқли ўлчами a дан жуда катта ва демак, ўтган параграфлардаги мулоҳазаларга кўра фазонинг атом жойлашган соҳасида $\vec{\mathscr{E}}$ берилган вақтда ўзгармас деб қабул қиламиз. Атом электрони учун Ньютоннинг ҳаракат тенгламасини ёзамиз:

$$m_0 \ddot{\vec{r}} = e\vec{\mathscr{E}} - k\vec{r} - g\dot{\vec{r}}. \tag{57.5}$$

Бу ерда тенгламанинг ўнг томонидаги 1-ҳад мажбур этувчи куч. 2-ҳад — мувозанат вазиятига қайтарувчи куч, 3-ҳад — диссипацияга олиб келувчи ишқаланиш кучи, k — атомнинг электронни тутиб турувчи эластик боғланиш доимийси, g — муҳитнинг табиатига боғлиқ бўлган доимий катталик — сўниш доимийси. (57.5) тебранишлар назариясидан яхши маълум бўлган заряди e ва массаси m_0 осцилляторнинг ишқаланишли муҳитдаги мажбурий тебраниш тенгламасидир. Сўнишни ҳисобга олмасдан ($g = 0$) (57.5) ни ҳар икки томонини m_0 га бўлиб,

$$\ddot{\vec{r}} + \omega_0^2 \vec{r} = \frac{e}{m_0} \vec{\mathscr{E}} \cos \omega t \tag{57.6}$$

кўринишда қайта ёзиш мумкин. Охиргида $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$ — электроннинг хусусий тебраниш частотасини киритдик. (57.6) нинг ечими

$$\vec{r} = \vec{r}_0 \cos \omega t \tag{57.7}$$

дан иборат. Агар (57.7) ни (57.6) га қўйсак,

$$\vec{r}_0 = \frac{e\vec{\mathscr{E}}_0}{m_0(\omega_0^2 - \omega^2)}$$

ни топамиз. У ҳолда буни эътиборга олиб (57.7) ва (57.4) ни (57.3) га қўйишдан

$$\varepsilon \vec{\mathscr{E}}_0 \cos \omega t = \vec{\mathscr{E}}_0 \cos \omega t + 4\pi Ne \cdot \frac{e\vec{\mathscr{E}}_0}{m_0(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos \omega t$$

ёки бу тенгликдан

$$\delta = n^2 = 1 + 4\pi N \frac{e^2}{m_0} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \tag{57.8}$$

дисперсия муносабати келиб чиқади. (57.8) дан кўринадики, частотанинг $\omega = 0$ дан $\omega = \omega_0$ гача оралиғида синдириш кўрсаткичи $n > 1$ ва ω ортиши билан ўсиб боради (нормаль дисперсия); $\omega = \omega_0$ нуқтада $n^2 = \pm\infty$; $\omega > \omega_0$ қийматларда эса $n^2 < 1$ ва частота ортиши билан $n = -\infty$ дан $n = 1$ гача ортади (нормаль дисперсия). Бироқ $n^2 = \pm\infty$ қийматлар физик маънога эга эмас. Улар (57.5) да осцилляторнинг реал сўнишини ҳисобга олувчи ($-g\dot{r}$) ҳадни ташлаб юборишдан келиб чиқди. Агар сўниш эътиборга олинса, дисперсия чизиғи ($n(\omega)$ — боғланиш) 57.1-*а* расмда кўрсатилганидек резонанс частота $\omega = \omega_0$ яқинида иккита узуқ чизиқдан иборат бўлмасдан, балки узлуксиз ўзгарувчи узиқ-узиқ чизиқни беради. Дисперсия чизиғининг MN қисмида частота ортиши билан синдириш кўрсаткичи камайиб боради (аномаль дисперсия).

Агар ёруғлик тарқалаётган муҳитда турли ω_{0i} хусусий частоталарда тебрана оладиган ва ҳар хил зарядли e_i, массали m_{0i} заррачалар (осцилляторлар) мавжуд бўлади деб ҳисобласак, у ҳолда (57.8)

$$\varepsilon = n^2 = 1 + 4\pi N \sum_i \frac{e_i}{m_{0i}} \frac{f_i}{\omega_{0i}^2 - \omega^2} \tag{57.9}$$

кўринишда қайта ёзилиши мумкин. Бу дисперсия муносабати тажрибага мос келиши учун *осциллятор кучи* деб аталувчи f_i катталик феноменологик равишда киритилади. Осциллятор кучи берилган i типдаги осцилляторларнинг дисперсия ҳодисасида қатнашиш ҳиссасини ёки эффективлигини ифодалайди.

Дисперсиянинг классик назарияси умумий тарзда тажрибага маълум даражада мос келса-да, бироқ у анча қўпол ва осциллятор кучининг физик маъносини тўғри очиб бера олмайди.

б) Дисперсиянинг квант назарияси

Ёруғлик дисперсиясининг квант назариясини қуриш нурланиш квант назариясининг муҳим масалаларидан биридир. Квант механикаси нуқтаи назаридан дисперсия ҳодисаси қуйидагича тушунтирилади. Муҳитга тушаётган бирламчи ёруғлик квантлари унинг атомларида мажбурий квант ўтишлар (нурланиш ёки ютилиш) содир қилади ва натижада иккиламчи — когерент (частотасини ўзгартирмасдан) сочилган ёруғлик квантларини юзага чиқаради. Бу иккиламчи ёруғликнинг турли йўналишлар бўйича интерференцияси охир-оқибатда дисперсияга олиб келади. Дисперсияни ҳисоблашда атомдаги электронларнинг ёруғлик майдони таъсирида гармоник тебранишлари (осцилляторлар) ўрнига конкрет атом энергетик сатҳлари ўртасидаги когерент сочилиш билан боғлиқ квант ўтишларнин қараш талаб этилади. Демак, бу бобнинг ўтган параграфларида қурилган квант ўтишлар назариясини ушбу масала учун ривожлантириш зарур. Бироқ биз содда йўлдан бориб, (57.1)—(57.3) формулаларга таянамиз. Бунда фақат (57.2) даги атом диполь моментини дисперсияда асосий роль ўйнаётган, масалан, E_n квант ҳолатдаги унинг ўртача қиймати билан алмаштирамиз:

$$\vec{d} \to \vec{d}_{nn} = \int \Psi_n^*(t)\,\vec{d}\cdot\Psi_n(t)\,d^3\vec{r}. \qquad (57.10)$$

Айтайлик, ёруғлик тушгунча атом электрони E_n энергетик сатҳда бўлсин ва ҳолати $\Psi_n^0(\vec{r})$ тўлқин функция билан ифодалансин. Мақсадимиз (57.10) га кўра ёруғликнинг даврий ўзгарувчи (57.4) майдони таъсиридаги $\Psi_n(t) = \Psi(\vec{r}, t)$ тўлқин функцияни аниқлашдан иборат. Ушбу масалани ечиш учун қўзғалишлар назарияси методидан фойдаланамиз. Электроннинг қўзғалиш энергияси (57.4) га асосан

$$\widehat{W} = -e(\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{r})\cos\omega t \qquad (57.11)$$

бўлади. У ҳолда $\Psi_n(t)$ функция

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_n(t)}{\partial t} = (\widehat{\mathcal{H}}^0 + \widehat{W})\varphi_n(t). \qquad (57.12)$$

Шредингер тенгламасидан топилади. Қўзғалмаган ҳолатнинг гамильтониани $\widehat{\mathcal{H}}^0$ стационар тенглама

$$\widehat{\mathcal{H}}^0\psi^0(\vec{r}) = E\psi^0(\vec{r}) \qquad (57.13)$$

орқали шу ҳолатнинг энергияси E_n ва тўлқин функцияси $\psi_n^0(\vec{r})$ ларни аниқлайди. (57.13) нинг ечимлари ортонормаланган:

$$\int \psi_m^{0*}\psi_n^0 d^3\vec{r} = \delta_{mn}. \qquad (57.14)$$

Қўзғалиш бўлмаганда ($\widehat{W} = 0$), (57.12) аниқ ечимга эга деб фараз қиламиз:

$$\Psi_n^0(t) = \psi_n^0(\vec{r})\, e^{-i\omega_n t}, \qquad (57.15)$$

$\omega_n = E_n/\hbar$. У ҳолда (57.12) нинг ечимини қўзғалишлар назариясига кўра биринчи яқинлашишда

$$\Psi_n(t) = \Psi_n^0(t) + \Psi_n'(t) \qquad (57.16)$$

кўринишида излаймиз. Бу ерда $\Psi_n'(t)$ «нолинчи» функция $\Psi_n^0(t)$ га нисбатан 1-тартибли кичик миқдор. (57.16) ва (57.11) ни (57.12) га қўйиб, номаълум $\Psi_n'(t)$ функция учун

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \widehat{\mathscr{H}}^0\right)\Psi_n'(t) = -\frac{1}{2}e(\vec{\mathscr{E}}_0\vec{r})\,\psi_n^0(\vec{r})\,[e^{-i(\omega_n-\omega)t} + e^{-i(\omega_n+\omega)t}] \qquad (57.17)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Бунда биз (57.13) ни эътиборга олдик ва иккинчи яқинлашишга тааллуқли $\widehat{W}\cdot\Psi_n'$ кўпайтмани ташлаб юбордик. (57.17) нинг ўнг томонидан кўринадики, унинг ечимини янги u ва v функциялар киритиш йўли билан

$$\Psi_n'(t) = u(\vec{r})\,e^{-i(\omega_n-\omega)t} + v(\vec{r})\,e^{-i(\omega_n+\omega)t} \qquad (57.18)$$

ифодалаш мумкин. Охиргини (57.17) га қўйиб, u ва v лар учун

$$[\widehat{\mathscr{H}}^0 - \hbar(\omega_n - \omega)]\,u(\vec{r}) = \frac{1}{2}e(\vec{\mathscr{E}}_0\vec{r})\,\psi_n^0(\vec{r}), \qquad (57.19)$$

$$[\widehat{\mathscr{H}}^0 - \hbar(\omega_n + \omega)]\,v(\vec{r}) = \frac{1}{2}e(\vec{\mathscr{E}}_0\vec{r})\,\psi_n^0(\vec{r}) \qquad (57.19)$$

тенгламаларга келамиз. Уларнинг бири иккинчисидан математик жиҳатдан ω ни $-\omega$ га алмаштириш билан ҳосил қилинади. Шу сабабдан $v(\vec{r})$ функцияни аниқлаш учун $u(\vec{r})$ функциянинг топилган ифодасида ω ни $-\omega$ га ўзгартириш кифоя.

(57.19) тенгламанинг ечимини унга мос (57.13) стационар тенгламанинг ортогонал ечимлари бўйича қаторга ёйиб текширамиз:

$$u(\vec{r}) = \sum_m C_m \psi_m^0(\vec{r}). \qquad (57.20)$$

Номаълум C_m коэффициентларни топиш мақсадида (57.20) ни (57.19) га қўямиз:

$$\sum_m C_m \hbar(\omega_{mn} + \omega) \psi_m^0(\vec{r}) = \frac{1}{2} e(\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{r}) \psi_n^0(\vec{r}). \qquad (57.21)$$

Бу ерда

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \qquad (57.22)$$

нурланиш частотаси ($E_m > E_n$). Агар (57.21) нинг ҳар икки томонини чапдан $\psi_{m'}^{0*}(\vec{r})$ га кўпайтириб, электрон координатаси $\vec{r}$ нинг барча қийматлари бўйича интеграллаcак ва (57.14) ортонормалланганлик шартини ҳисобга олсак, C_m лар учун

$$C_{m'} = \frac{\vec{\mathcal{E}}_0 \cdot \vec{d}^{\,0}_{m'n}}{2\hbar(\omega_{m'n} + \omega)} \qquad (57.23)$$

ифодани оламиз. Бунда

$$\vec{d}^{\,0}_{m'n} = \int \psi_{m'}^{0*}(\vec{r})(e\vec{r})\psi_n^0(\vec{r})\, d^3\vec{r} \qquad (57.24)$$

— атом диполь моментининг қўзғалмаган m' ва n квант ҳолатлар бўйича олинган матрица элементи. (57.23) ни (57.20) га қўйиб,

$$u(\vec{r}) = \frac{1}{2\hbar} \sum_m \frac{\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}^{\,0}_{mn}}{\omega_{mn} + \omega} \psi_m^0(\vec{r}) \qquad (57.25)$$

ечимни оламиз. Юқорида келтирилган мулоҳазаларга асосан

$$v(\vec{r}) = \frac{1}{2\hbar} \sum_m \frac{\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}^{\,0}_{mn}}{\omega_{mn} - \omega} \psi_m^0(\vec{r}). \qquad (57.26)$$

Шундай қилиб, (57.4) ёруғлик майдони билан таъсирлашаётган атомнинг n-квант ҳолатидаги электроннинг тўлқин функцияси (57.16) (57.15), (57.18), (57.25) ва (57.26) ларга асосан

$$\Psi_n(t) = \psi_n^0(\vec{r})\, e^{-i\omega_n t} + \frac{1}{2\hbar} e^{-i(\omega_n - \omega)t} \sum_m \frac{\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}^{\,0}_{mn}}{\omega_{mn} + \omega} \psi_m^0(\vec{r}) +$$

$$+\frac{1}{2\hbar}e^{-i(\omega_n+\omega)t}\sum_m \frac{\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{d}^0_{mn}}{\omega_{mn}-\omega}\,\psi^0_m(\vec{r}) \qquad (57.27)$$

муносабатдан аниқланади. Бу ифодани соддалаштириб қуйидагича ҳам ёзиш мумкин:

$$\Psi_n(t) = e^{-i\omega_n t}\Big[\psi^0_n(\vec{r}) +$$

$$+\frac{1}{\hbar}\sum_m \frac{\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{d}^0_{mn}}{\omega^2_{mn}-\omega^2}(\omega_{mn}\cos\omega t - i\omega\sin\omega t)\psi^0_m(\vec{r})\Big]. \qquad (57.28)$$

Энди (57.28) ни (57.10) га қўйиб, (57.3) тенгламани қайта ёзамиз ва бунда иккинчи тартибли кичик миқдорларни ташлаб юборамиз:

$$\varepsilon\vec{\mathcal{E}}_0\cos\omega t = \vec{\mathcal{E}}_0\cos\omega t + 4\pi N\Big\{\vec{d}^0_{nn} +$$

$$+\frac{1}{\hbar}\sum_m \frac{1}{\omega^2_{mn}-\omega^2}\,\omega_{mn}\cos\omega t\,[(\vec{\mathcal{E}}_0\cdot\vec{d}^0_{mn})\,\vec{d}^0_{nm} + (\vec{\mathcal{E}}_0\cdot\vec{d}^{0*}_{mn})\,\vec{d}^0_{mn}] -$$

$$-i\omega\sin\omega t\,[(\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{d}^0_{mn})\,\vec{d}^0_{mn} - (\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{d}^{0*}_{mn})\,\vec{d}^0_{mn}]\Big\}. \qquad (57.29)$$

Тенгламанинг ўнг томонидаги катта қавс ичида турган биринчи ҳад ($\vec{d}^0_{nn}$) атомнинг ψ^0_n мувозанат ҳолатидаги диполь моментини, йиғинди ишораси остидаги иккинчи ҳад эса ёруғлик таъсирида бизни қизиқтираётган n- квант ҳолатдан ихтиёрий бошқа m ҳолатлар билан аралашиш туфайли атомда индукцияланадиган қўшимча диполь моментини аниқлайди. Ана шу қўшимча момент $\vec{d}_{nn}$ ёруғлик майдони $\vec{\mathcal{E}}$ га чизиқли боғлиқ, $\vec{\mathcal{E}}$ билан бир хил ω частотада эса ва доимий фазалар фарқида даврий ўзгариб туради. Ёруғликнинг когерент сочилишига, яъни ёруғлик дисперсиясига атомнинг айнан $\vec{d}_{mn}$ индукцияланган электр диполь моменти сабаб бўлади.

Агар юқорида қайд этган атом изотроп хусусиятга эга деган фаразни эсга солсак,

$$\vec{d}^0_{nn} = \int\psi^{0*}_m(\vec{r})\,e\vec{r}\,\psi^0_n(\vec{r})d^3\vec{r} = 0$$

(атом мувозанат ҳолатда диполь моментига эга эмас),

$$(\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{d}^0_{mn})\,\vec{d}^0_{nm} + (\vec{\mathcal{E}}_0\vec{d}^{0*}_{mn})\vec{d}^0_{mn} = 2\vec{\mathcal{E}}_0\,|\vec{d}^0_{mn}|^2,$$

$$(\vec{\mathscr{E}}_0 \vec{d}^{\,0}_{mn})\vec{d}^{\,0}_{nm} - (\vec{\mathscr{E}}_0 \vec{d}^{\,0*}_{mn})\vec{d}^{\,0}_{mn} = 0$$

$(\vec{\mathscr{E}}_0 \parallel \vec{d},\ \vec{d}^{\,0*}_{mn} \equiv \vec{d}^{\,0}_{nm})$ муносабатлар ўринли бўлганлигидан (57.29) тенглама

$$\varepsilon \vec{\mathscr{E}}_0 \cos\omega t = \vec{\mathscr{E}}_0 \cos\omega t + \frac{8\pi N}{\hbar}\vec{\mathscr{E}}_0 \cos\omega t \sum_m \frac{\omega_{mn} |\vec{d}^{\,0}_{mn}|^2}{\omega^2_{mn} - \omega^2}$$

кўринишга келади. Ниҳоят, бу ердан

$$\varepsilon = n^2 = 1 + \frac{8\pi N}{\hbar}\sum_m \frac{\omega_{mn}|\vec{d}^{\,0}_{mn}|^2}{\omega^2_{mn} - \omega^2} \tag{57.30}$$

дисперсия формуласини оламиз. Осциллятор кучи деб аталадиган

$$f_{mn} = \frac{2m_0}{\hbar e^2}\omega_{mn}|\vec{d}^{\,0}_{mn}|^2 \tag{57.31}$$

катталикни киритсак (57.30) классик назарияда олинган (57.9) каби

$$\varepsilon = n^2 = 1 + 4\pi N\frac{e^2}{m_0}\sum_m \frac{f_{mn}}{\omega^2_{mn} - \omega^2} \tag{57.32}$$

шаклда ёзилиши мумкин. Агар (57.12) Шредингер тенгламасида диссипатив сўнишни ҳисобга олсак, (57.32) нинг резонанс ҳадида $\omega \to \omega_{mn}$ да n нинг чекли қийматига олиб келувчи тузатма ҳад келиб чиқади ($\omega^2_{mn} - \omega^2$ ўрнига $\omega^2_{mn} - \omega^2 - i\omega\Gamma$, Γ — сўнишни аниқлайди).

Бир қарашда (57.32) квант механикаси берган ифода (57.9) классик ифодага айнан ўхшаш бўлса-да, бироқ улар физик маъно жиҳатдан кескин фарқланадилар. Ҳақиқатан, биринчидан, квант назарияси бўйича аномал дисперсия частотанинг атомда рухсат этилган квант ўтишлар ($\vec{d}^{\,0}_{mn} \neq 0$ — танлаш қоидаси) частотаси ω_{mn} га яқин соҳаларида ётса, классик нуқтаи назардан эса бу соҳа электроннинг механик айланиш частотаси ω_{0i} га яқин бўлиши керак эди. Иккинчидан, энг муҳими, (57.31) муносабат билан аниқланадиган осциллятор кучи мусбат ҳам ($\omega_{mn} > 0$), манфий ҳам ($\omega_{mn} < 0$) қийматларни қабул қилиши мумкин. Демак, 57.1-*а* расмда келтирилган *мусбат дисперсия* билан бир қаторда 57.1-*б* расмда тасвирланган *манфий дисперсия* ҳам рўй беради. Классик назарияда феноменологик киритилган f_i катталик ўз маъносига кўра фақат мусбат қийматлар олади, холос.

(57.32) ва (57.31) формулаларга асосан мусбат дисперсия ҳодисаси ёруғликни қуйи энергетик ҳолатда турган атомлар томонидан, манфий дисперсия эса—уйғонган ҳолатдаги атомларда когерент сочилишидан юзага келади. Улар учун осциллятор кучи

$$f_{mn} \sim \omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

мос ҳолда $f_{mn} > 0$ ва $f_{mn} < 0$. Тажрибада мусбат дисперсия Д. С. Рождественский ишларида мукаммал текширилган бўлса, манфий дисперсия Ладенбург томонидан биринчи бўлиб кузатилган.

57.1- §. КОМБИНАЦИОН СОЧИЛИШ

Биз юқорида ёруғликнинг квант системада когерент (эластик), яъни ўз частотасини ўзгартирмасдан сочилиши туфайли юзага чиқадиган дисперсия ҳодисасига тўхтадик. Бунда ёруғлик томонидан атомнинг тайинли n- квант ҳолатида индукцияланадиган электр диполь моменти $\vec{d}_{nn}$ ва у билан боғлиқ муҳитнинг синдириш кўрсаткичи ҳособланади.

Агар $\hbar\omega$ ёруғлик кванти атом системада E_n энергетик сатҳдан E_m сатҳга квант ўтиш содир қилиб $\hbar\omega'$ энергияли фотон кўринишида қайта нурланган бўлса, бундай ноэластик жараён *ёруғликнинг комбинацион сочилиши* ёки Раман эффекти деб номланади. Сочилган ёруғлик частотаси ω' иккита частота—ω ва $|\omega_{mn}|$ ларнинг

$$\omega' = \omega \pm |\omega_{mn}| \qquad (57.1.1)$$

икки хил комбинацияси кўринишида аниқланади ($\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$). Демак, Раман эффекти сочилган ёруғлик спектрида атомга тушаётган ёруғлик частотаси ω дан чапда ҳам, ўнгда ҳам бир хил оралиққа силжиган иккита «йўлдош» спектрал чизиқлар шаклида кузатилиши мумкин. Улар мос ҳолда Стокс ($\omega' = \omega_- = \omega - |\omega_{mn}|$) ва антистокс ($\omega' + \omega_+ = \omega + |\omega_{mn}|$) чизиқлари номини олган. Стокс чизиғи ($\omega' < \omega$) ёруғликнинг сочилиши натижасида атом қўзғалган ҳолатга, ($E_m > E_n$) антистокс чизиғи ($\omega' > \omega$ эса атомнинг қуйи энергетик ҳолатга ($E_m < E_n$) ўтиб қолиши туфайли юзага келади.

Ёруғликнинг комбинацион сочилишини тажрибада биринчи марта ҳинд физиклари Ч. В. Раман ва Қ. С. Кришнан ҳамда рус физиклари Г. С. Ландсберг ва Л. И. Мандельштам 1928 йилда бир неча ой фарқ билан бир-бирларидан мустақил равишда кузатганлар. Уларнинг тажрибаларида $|\omega_{mn}|$ частота мос ҳолда суюқлик молекулаларининг тебраниш частоталари ва молекуляр кристалл панжараларининг тебраниш частоталари бўлган. Энг қизиғи шундаки, бу тебранишлар частотаси спектрнинг инфрақизил соҳасида ётади ва уларни бевосита кузатиш катта қийинчилик туғдиради. Комбинацион сочилишда эса юқори частотали нурлар билан иш кўрилади ва уларнинг частотасини ўзгаришига қараб юқоридаги тебранишлар спектрини осон ўрганиш мумкин. Ҳозирги пайтда *комбинацион сочилиш спектроскопияси* мустақил илмий йўналишга айланди ва молекулалар суюқ ҳамда қаттиқ жисмлар энергетик спектрини ўрганишда кучли методлардан биридир.

Ёруғликнинг комбинацион сочилишидан атом системасида рўй берган $n \to m$ квант ўтиш унда қўшимча $\vec{d}_{mn}$ электр диполь моментининг индукцияланишига ва демак, муҳитнинг диэлектрик киритувчанлиги ҳам унга мос ҳолда қўшимча тузатма олишига сабаб бўлади. Ўтган параграф натижаларидан фойдаланиб,

$$\vec{d}_{mn} = \int \Psi_m^*(t)\, e\vec{r}\, \Psi_n(t) d^3\vec{r} \qquad (57.1.2)$$

диполь моментини ҳисоблаш унчалик қийин эмас. Ҳақиқатан, атомнинг $\Psi_m^0(\vec{r})_t^{-i\omega_m t}$ ҳолатидан ёруғлик таъсирида вужудга келадиган ҳолатининг $\Psi_m(t)$ тўлқин функциясини (57.27) да $n \to m$, $m \to k$ алмаштириб

$$\Psi_m(t) = e^{-i\omega_m t}\Big[\Psi_m^0(\vec{r}) +$$

$$\frac{1}{2\hbar}\sum_k (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}_{km}^0)\left(\frac{e^{i\omega t}}{\omega_{km}+\omega} + \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{km}-\omega}\right)\Psi_k^0(\vec{r}) \qquad (57.1.3)$$

аниқлаш мумкин. Ушбу ҳолда (57.27) ни

$$\Psi_n(t) = e^{-i\omega_n t}\Big[\Psi_n^0(\vec{r}) +$$

$$+\frac{1}{2\hbar}\sum_k (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}_{kn}^0)\left(\frac{e^{i\omega t}}{\omega_{kn}+\omega} + \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{kn}-\omega}\right)\Psi_k^0(\vec{r}) \qquad (57.14)$$

кўринишда қайта ёзамиз. $\Psi_m(t)$ ва $\Psi_n(t)$ функцияларнинг бу ифодаларини (57.1.2.) га қўйиб, иккинчи тартибли кичик миқдорларни ташлаб юборсак,

$$\vec{d}_{mn}(t)=\vec{d}^{0}_{mn}e^{i\omega_{mn}t}+\vec{d}^{(+)}_{mn}\,e^{i(\omega_{mn}+\omega)t}+\vec{d}^{(-)}_{mn}\,e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} \qquad (57.1.5)$$

натижага келамиз. Бу ерда $\vec{d}^{0}_{mn}$ (57.24) каби аниқланади,

$$\vec{d}^{(+)}_{mn}=\frac{1}{2\hbar}\sum_{k}\left[\frac{(\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{d}^{\,0}_{kn})\,\vec{d}^{\,0}_{mk}}{\omega_{nk}-\omega}+\frac{(\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{d}^{\,0}_{mk})\,\vec{d}^{\,0}_{kn}}{\omega_{mk}+\omega}\right],$$

$$\vec{d}^{(-)}_{mn}=\frac{1}{2\hbar}\sum_{k}\left[\frac{(\vec{\mathcal{E}}_0\,\vec{d}^{\,0}_{kn})\vec{d}^{\,0}_{mk}}{\omega_{nk}+\omega}+\frac{(\vec{\mathcal{E}}_0\vec{d}^{\,0}_{mk})\,\vec{d}^{\,0}_{kn}}{\omega_{mk}-\omega}\right].$$

(57.1.5.) да 1- ҳад атом системанинг $\Psi^0_n(\vec{r})$, $\Psi^0_m(\vec{r})$ тўлқин функцияларнинг фазовий қопланиши билан боғлиқ хусусий электр диполь моментни ифодалайди ва у (56.19) га кўра $n \rightleftarrows m$ квант ўтишларга мос келган когерент мажбурий нурланиш ёки ютилишни аниқлайди; 2- ҳамда 3- ҳадлар ёруғлик таъсирида $n \rightleftarrows m$ ўтиш натижасида индукцияланадиган қўшимча диполь моментлар бўлиб, улар вақт ўтиши билан мос ҳолда $\omega + |\omega_{mn}|$ ва $\omega - |\omega_{mn}|$ частотада даврий ўзгаради. Худди ана шу $\vec{d}^{(+)}_{mn}$ ва $\vec{d}^{(-)}_{mn}$ моментлар ёруғликнинг частотасини ўзгартириб сочилишига — Раман эффектига олиб келади. Комбинацион сочилган ёруғлик частотаси ω' тушаётган ёруғлик частотаси ω ва атом системанинг хусусий частоталаридан бири $|\omega_{mn}|$ нинг йиғиндиси ёки айирмасига тенг бўлади.

IX бобга доир масалалар

1. Даврий ўзгарувчи

$$V(\vec{r},t)=a(\vec{r})\cos(\omega t+\varphi)$$

қўзғатувчи потенциал таъсирида атом системанинг дискрет сатҳлари орасидаги квант ўтиш эҳтимоллигининг биринчи яқинлашишда вақтга боғланиши топилсин.

Жавоби: $W_{mn}(t)=\frac{1}{\hbar^2}\,|V_{mn}|^2\,\frac{2\,[1-\cos(\omega-\omega_{mn})t\,]}{(\omega-\omega_{mn})^2}.$

2. Монохроматик ва номонохроматик ёруғликлар учун мос ҳолда (56.6) ва (56.19) формулалар ўринли эканлиги исботлансин.

3. Атом системанинг E_n қўзғалган ҳолатда E_m сатҳга спонтан нурланиш чиқариб ўтишга нисбатан яшаш вақтини ва E_n сатҳнинг кенглигини диполь яқинлашишда ҳисобланг.

Жавоби: $\tau_{mn} = \dfrac{3c^2\hbar}{4\omega_{mn}^3|\vec{d}_{mn}|^2}$, $\Delta E_n = \dfrac{\hbar}{\tau_{mn}}$.

4. Водород атомлари ўз нурланиши билан термодинамик мувозанатда турибди. Атомларнинг $T=300\ K$ да $2p$ сатҳдан спонтан ва индукцияланган нурланиш эҳтимолликларининг нисбатини аниқланг. Бу эҳтимолликлар қандай температурада тенглашади?

Жавоби: $w^{сп}/w^{инд} \approx 10^{34}$, $T = 1{,}7\cdot10^5\ K$.

5. Водород атоми учун танлаш қоидасидан фойдаланиб Пашен, Брэкет Пфунд серияларини хосил қилувчи квант ўтишларни спиктрал термлар (nl) орқали кўрсатинг.

6. Агар $\nu = 10$ МГц частотали радиотўлқин учун ионосферанинг синдириш кўрсаткичи $n = 0{,}90$ бўлса, ундаги эркин электронлар концентрациясини топинг.

Жавоби: $n_0 = 2{,}4\cdot10^7$ см$^{-3}$.

7. Электронга $F = -kx$ — квазиэластик куч, $G = gx$ — ишқаланиш кучидан ташқари ёруғлик майдони ҳам $e_0\mathcal{E}_{0x}\cos\omega t$ куч билан таъсир қилади. Электроннинг ҳаракат қонунини топинг.

Жавоби: $x = x_0\cos(\omega t + \varphi)$, $x_0 = \dfrac{e_0\mathcal{E}_{ox}/m_0}{\sqrt{(\omega_0^2-\omega^2)^2 - 4\beta^2\omega^2}}$,

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{2\beta\omega}{\omega^2-\omega_0^2},\ \beta = g/2m_0,\ \omega_0 = \sqrt{k/m_0}.$$

8. Молекулалар айланма ҳаракатини ифодаловчи квант сони l нинг ўзгариши учун танлаш қоидаси $\Delta l = \pm1$. Ёруғликнинг молекулалар айланма спектрида комбинацион сочилиши учун танлаш қоидаси $\Delta l = 0, \pm2$ бўлишини исбот қилинг.

X БОБ

ЭЛЕКТРОН СПИНИ

Марказий симметрик потенциал майдонида ҳаракат қилаётган электрон учун Шредингер тенгламасини ечиб электрон энергиясининг хусусий қийматларини ва унга мос келган ҳолат функциясини аниқладик. Бунда n, l ва m квант сонларига эга бўлдик, уларга қиймат бериб атомдаги электроннинг турли ҳолатларини аниқлаш мумкин бўлди. Шредингер тенгламасини ечиб электрон учун бундан ортиқ натижа олиш мумкин эмас. Шунинг учун бу натижалар электроннинг ҳаракати билан боғлиқ бўлган барча ҳодисаларни тушунтириш лозим эди. Аммо бир қанча тажрибалардан маълумки, уларнинг натижаларини тушунтириш учун Шредингер тенгламаси ёрдамида электрон учун аниқланган маълумотлар етарли бўлмай қолди. Учта n, l, m квант сонларидан ташқари электроннинг ички хусусиятига боғлиқ бўлган тўртинчи квант сонини киритиш зарур бўлди. У *спин* деб аталади.

58- §. ТАЖРИБА ФАКТЛАРИ. ЭЛЕКТРОННИНГ СПИН ОПЕРАТОРЛАРИ

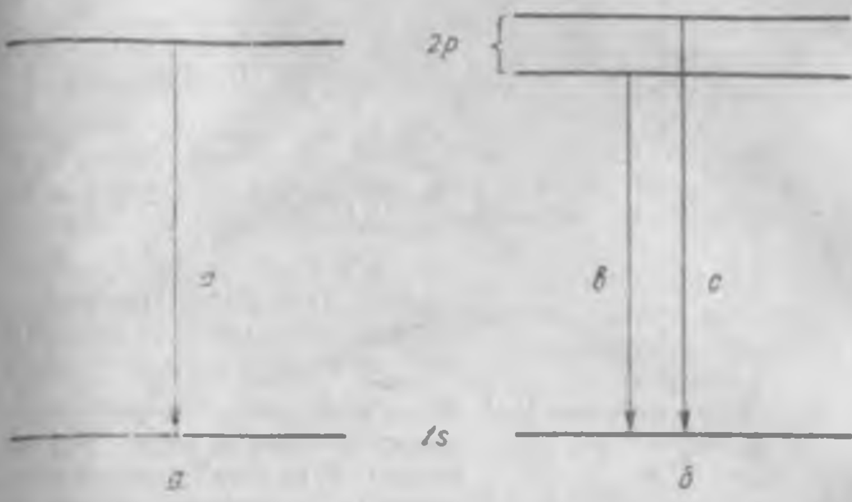
Электроннинг спинга эга бўлишини исботловчи тажриба фактлари жуда кўп. Уларнинг энг дастлабкилари ва соддалари билан танишайлик. Шундай тажрибалардан бири Штерн ва Герлах (1921 й.) тажрибаси. Улар оптик электрони аниқ s ҳолатда бўлган кумуш атоми оқимини кучли, бир жинсли бўлмаган магнит майдонидан (5.3- расмга қаранг) ўтказганлар. Натижада атомлар оқими магнит майдон таъсирида иккига ажраган. Демак, кумуш атомида ташқи магнит моменти билан таъсир этишувчи ва унга нисбатан икки хил вазиятдагина бўлувчи магнит момент бор. Бундай моментнинг пайдо бўлишига уч сабаб бўлиши мумкин:

а) атом ядросининг магнит моменти. Бу ҳолда атомлар оқимининг иккига ажралиш катталиги жуда кичик бўлиши керак эди. Чунки нуклоннинг магнит моменти $\left(\mu_0 \approx \approx 5{,}05 \cdot 10^{-27} \frac{Ж}{Т}\right)$ жуда кичик;

б) электроннинг ядро атрофида айланма ҳаракати туфайли ҳосил бўлган орбитал магнит моменти (кумуш атоми оптик электронлари $\vec{s}$ ҳолатда) орбитал импульс момент нолга тенг, демак, орбитал магнит момент ҳам нолга тенг; ички қобиқдаги электронлар моментларининг векториал йиғиндиси ҳам нолдир;

в) кумуш атомлари оқимининг магнит майдонида иккига ажралишига унинг s ҳолатдаги жуфтлашмаган электронларининг ички хусусиятига боғлиқ бўлган параметр бор деб фараз қилиш мумкин.

Иккинчи муҳим тажриба фактларидан бири ишқорий металл атомлари спектрининг дублетлигидир (иккига ажралиш). Ажратиш қобилияти юқори бўлган спектрал асбоблар ёрдамида ишқорий металл атомларининг спектри текширилганда, у битта чизиқдан (a) иборат бўлмай, бир-бирига яқин иккита (b, c) чизиқдан иборатлиги аниқланади (58.1- расм). Масалан, Na атоми учун бу спектрал чизиқлар 5895,93 Å ва 5889,96 Å тўлқин узунлиликка мос келади. Электроннинг марказий сим-



58.1- расм. Атом 2 p ҳолатининг Шредингер назариясидан (a) фарқли ўлароқ тажрибада ($б$) кузатилган дублет структураси.

метрик потенциал майдонда ҳаракати масаласига (43- §) мувофиқ $2p$ ҳолат иккита эмас магнит квант сонига боғлиқ ҳолда учта термдан ($m = 0, +1, -1$) иборат бўлиши керак эди. Шу билан бирга $2p$ ҳолатнинг учта термга ажралиши атом ташқи магнит майдонида бўлганда юз беради. Аммо ишқорий металл атомлари спектрининг дублети (b, c) магнит майдонсиз кузатилган. Демак, бу ҳодиса ҳам электроннинг ички хусусиятига боғлиқ бўлган тўртинчи параметр киритилишини тақозо этади.

Учинчи муҳим тажрибалардан бирини А.Эйнштейн ва де Гааз (1915 й.) ўтказган. Уларнинг мақсади атомдаги гиромагнит нисбатни аниқлаш бўлган. Маълумки, ядро атрофида ҳаракатланаётган электрон орбитал моментининг Z ўқига проекцияси (45- § га қаранг)

$$M_z = \hbar m \tag{58.1}$$

га тенг. Бу ерда m магнит квант сони. Фараз қилайлик, электрон орбитал ҳаракати туфайли магнит моментга эга бўлсин. Унинг Z ўқига проекцияси:

$$\mu_z = -\frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} m \tag{58.2}$$

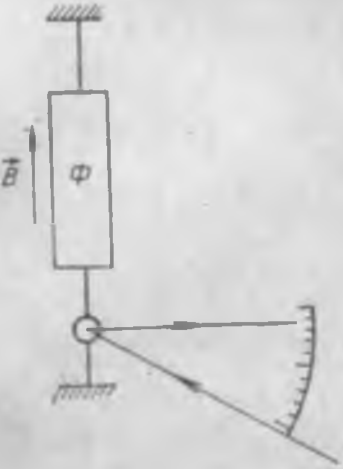
нинг (58.1) га нисбати

$$\frac{\mu_z}{M_z} = -\frac{e_0}{2m_0 c} \tag{58.3}$$

бўлиб, унга гиромагнит нисбат дейилади. (58.3) формуладан

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_0c} M_z. \qquad (58.4)$$

Охирги формулада e_0, m_0, c — ўзгармас катталиклар. M_z нинг ўзгаришига қараб μ_z ни ҳисоблаш мумкин. Тажрибада ферромагнит моддадан тайёрланган ва ипга осилган цилиндр шаклидаги таёқча (Ф) (58.2- расм) $\vec{B}$ магнит майдонига жойлаштирилган. Магнит майдон йўналиши қарама-қарши томонга ўзгартирилганда таёқчанинг магнит моменти μ ҳам ўзгарган. Бу эса ўз навбатида таёқчанинг механик моментини ҳам ўзгартирган. Уни таёқча ипига ўрнатилган кўзгунинг буралишидан аниқлаш мумкин. Буралиш бурчагини ўлчаш йўли билан (58.3) нисбатни текшириш мумкин бўлади. Тажриба натижаларига кўра



58.2- расм. Эйнштейн- де-Гааз тажрибасининг схемаси.

$$\frac{\mu_z}{M_z} = -\frac{e_0}{m_0c} \qquad (58.5)$$

келиб чиқади.

Шундай қилиб, Штерн ва Герлах тажрибасига мувофиқ электроннинг магнит моменти

$$\mu_z = -\frac{e_0\hbar}{2m_0c} \qquad (58.6)$$

бўлса, Эйнштейн ва де Гааз тажрибасидан

$$\mu_z = -\frac{e_0\hbar}{m_0c} m_s \qquad (58.7)$$

келиб чиқади. Агар магнит момент электроннинг орбитал ҳаракати туфайли келиб чиққан бўлса, (58.7) формуладаги $m_s = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ қийматлар олиши керак эди. Аммо бу ҳолда ҳар иккала тажриба натижалари бир-бирига мос келмайди. Уларни мос келтириш учун Уленбек ва Гаудсмит (58.7) формуладаги $m_s = \pm\frac{1}{2}$ қиймат олиши керак деб тушунтирдилар. Ана шу квант сони m_s спин квант сони дейилади. Электроннинг спинга — хусусий импульс моментга эга бўлиши нуқтаи назаридан юқоридаги тажриба натижаларини осонликча тушунтириш мумкин (буни ўқувчининг ўзига ҳавола қиламиз).

Шундай қилиб, заррачалар ҳолатини тўла характерлаш учун янги — тўртинчи квант сони спин киритилди. Унинг классик ўхшатмаси йўқ. Спин заррачанинг ички хусусиятига боғлиқ бўлган квант сонидир.

Спин квант сони электрон ҳолатини аниқлайдиган тўртинчи динамик катталикни характерлайди. Квант механикасида ҳар қандай динамик катталик ўз операторига эга. Спин ҳам ўз операторига эга бўлиши керак, уни аниқлаймиз. Энг аввало шуни таъкидлаш лозимки спин оператори ҳам квант механикасининг бошқа операторлари каби ўзига комплекс қўшма ва чизиқли бўлиши керак. Спин операторини $\hat{\vec{S}}$ билан белгилайлик. $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ унинг координата ўқлари бўйича проекциялари бўлсин. Электроннинг спини $\frac{\hbar}{2}$ спин операторининг хусусий қиммати бўлиши шарт (13- §). Шунинг учун спин оператори кўриниши

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}} \tag{58.8}$$

бўлади. Бу ерда $\hat{\vec{\sigma}}$ — вектор (58.8) нинг ташкил этувчилари қуйидагича бўлади:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z. \tag{58.9}$$

Электроннинг хусусий импульс моменти (спини) унинг орбитал моментига ўхшаш бўлганлиги сабабли $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ ва $\hat{S}_z$ операторлари ҳам $\hat{M}_x$, $\hat{M}_y$, $\hat{M}_z$ операторларига ўхшаш ўзаро комутацияланмаслиги керак, яъни

$$\begin{aligned} \hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x &= i\hbar\hat{S}_z, \\ \hat{S}_y\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{S}_y &= i\hbar\hat{S}_x, \\ \hat{S}_z\hat{S}_x - \hat{S}_x\hat{S}_z &= i\hbar\hat{S}_y. \end{aligned} \tag{58.10}$$

(58.9) да $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ фақат иккита диагонал элементига эга бўлган икки қаторли матрицадан иборат бўлиши керак. Чунки ўша иккита қиймат электрон спинининг проекцияси икки хил вазиятда бўлишига тўғри келади. Демак, шартга кўра

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix} \tag{58.11}$$

Буларни **спин матрицалари** дейилади ва хусусий қимматлари ± 1 дир. Уларни диагонал кўринишига келтирса

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{58.12}$$

келиб чиқади. (58.12) кўринишдаги матрицаларни **Паули матрицалари** дейилади. Спин матрицаларининг айрим хусусиятлари билан танишайлик. (58.9) ни (58.10) га қўйсак,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x &= 2i\, \hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= 2i\, \hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_z &= 2i\, \hat{\sigma}_y \end{aligned} \tag{58.13.}$$

келиб чиқади. $\hat{\sigma}_x^2$, $\hat{\sigma}_y^2$, $\hat{\sigma}_z^2$ ларнинг хусусий қимматлари бирлик матрицали σ_0^2 га тенг:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{\sigma}_0^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1},$$

$$\hat{\vec{\sigma}}^2 = \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = 3. \tag{58.14}$$

Бирлик матрица ҳар қандай тасаввурда ҳам ўз кўринишини ўзгартирмайди. Спин операторининг ташкил этувчилари ўзаро антикомутацияланади:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y &= -\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = i\, \hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z &= -\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = i\, \hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x &= -\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_y. \end{aligned} \tag{58.15.}$$

(58.12) **ни** (58.9) га, чиққан натижани (58.8) га қўйиб спин оператори квадратини аниқласак,

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \tag{58.16}$$

келиб чиқади. Охирги ифодани электроннинг орбитал ҳаракат миқдор моменти операторининг хусусий қиммати $M = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ га ўхшатиб ёзайлик:

$$S = \hbar\sqrt{l_s(l_s+1)}. \qquad (58.17)$$

Бу ердаги $l_s = \frac{1}{2}$ бўлса, (58.17) дан (58.16) келиб чиқади. l_s — спин квант сони дейилади. (58.17) нинг бирор танланган ўққа (Z) проекцияси

$$S_z = \hbar m_s \qquad (58.18)$$

бўлиб, бу ерда $m_s = \pm\frac{1}{2}$ дир.

59- §. СПИННИ ҲИСОБГА ОЛУВЧИ ТЎЛҚИН ФУНКЦИЯСИ

Шундай қилиб, электрон ўзининг ички хусусиятига боғлиқ бўлган тўртинчи квант сонига—спин квант сонига эга эканлиги ҳам тажрибада, ҳам назарий йўл билан (58-§) исботланди. Спинга фақат электрон эмас жуда кўп бошқа заррачалар (қолган лептонлар, мезонлар, адронлар, резонанслар) ҳам эга. Биз асосан электроннинг ҳаракати билан боғлиқ бўлган масалаларни кўрамиз. Шунинг учун спинни ҳисобга олганда электрон тўлқин функциясининг кўринишини аниқлаймиз. Равшанки, электроннинг берилган вақт моментида фазовий (X, Y, Z) ва спин ($\vec{S}$) ҳолатини ифодаловчи Ψ функцияси қуйидагича ёзилиши керак:

$$\Psi = \Psi(x, y, z; \vec{s}, t). \qquad (59.1)$$

Спин икки хил қийматга тенг бўлганлиги сабабли (59.1) ифодани электронни ҳаракат ҳолатлари учун қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\Psi_1 = \Psi\left(x, y, z; +\frac{\hbar}{2}, t\right), \qquad (59.2)$$

$$\Psi_2 = \Psi\left(x, y, z; -\frac{\hbar}{2}, t\right).$$

Ψ_1 функцияси спини Z ўқи бўйича йўналган электроннинг ҳолат функцияси бўлса, Ψ_2 — спин Z ўққа қарама-қарши йўналган электроннинг ҳолат функциясидир.

Квант механикасида бу ҳар икки функцияни умумлаштириб бир устунли матрица кўринишида ёзиш қабул қилинган:

$$\widehat{\Psi}=\begin{vmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{vmatrix}. \qquad (53.3)$$

Бундай функциянинг ўзига қўшмаси $\widehat{\Psi}^+$ эса бир қаторли матрица кўринишида ёзилади:

$$\widehat{\Psi}^+=|\Psi_1^*\ \Psi_2|. \qquad (59.4)$$

Математика тили билан айтганда $\widehat{\Psi}^+$ функция $\widehat{\Psi}$ га нисбатан эрмит қўшма матрицадир. У ҳолда заррача ҳолат эҳтимоллигининг зичлиги қуйидаги формула билан аниқланади:

$$\Psi^+\Psi=|\Psi_1^*\ \Psi_2|\begin{vmatrix}\Psi_2\\ \Psi_1\end{vmatrix}=\Psi_1^*\Psi_1+\Psi_2\Psi_2. \qquad (59.5)$$

Ψ функциясининг кўриниши электрон спин магнит моменти билан унинг орбитал ҳаракати туфайли ҳосил бўлган доиравий ток магнит майдонининг ўзаро таъсирига боғлиқ. Буни **спин-орбитал ўзаро таъсир** дейилади. Электроннинг спин-орбитал ўзаро таъсир энергияси унинг ядро билан кулон ўзаро таъсир энергиясидан катта бўлса, турли спин ҳолатига мос келган Ψ_1 ва Ψ_2 функциялар бир-биридан фарқ қилади. Бу ҳодиса одатда оғир атомларда кузатилади. Акс ҳолда, яъни спин-орбитал ўзаро таъсир кучсиз бўлганда умумий ҳолат функциясини фазовий ва спин функцияларининг кўпайтмасидан иборат қилиб ёзиш мумкин:

$$\Psi_i=\Psi(x, y, z;\ t)\,\varphi_i(\vec{s}). \qquad (59.6)$$

Бу ерда $\Psi(x, y, z;\ t)$ — электронни координатасига боғлиқ бўлган функция, яъни фазовий функция, $\varphi(\vec{s})$ эса спин функциясидир. (59.6) нинг келиб чиқишини эҳтимоллик назариясига биноан қуйидагича тушунтириш мумкин. Иккита бир-бирига боғлиқ бўлмаган мураккаб ҳодисанинг бир вақтда бўлиш эҳтимоллиги ҳар иккала ҳодисалар бўлиш эҳтимолликларининг кўпайтмасига тенг. $\widehat{\varphi}(s)$ — спин функцияси умуман $2s+1$ қиймат олиши мумкин. Электрон учун $s=\frac{1}{2}$ бўлганлиги сабабли $\varphi(s)$ фақат 2 та қиймат олади:

$$\varphi_1\left(+\frac{1}{2}\right)=a_1,\quad \varphi_2\left(-\frac{1}{2}\right)=a_2.$$

(59.6) ни (59.3) га қўйиб фазовий функцияни матрицадан чиқарсак,

$$\widehat{\Psi}=\Psi(x, \vec{r}, z;\ t)\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\end{pmatrix} \qquad (59.7)$$

ҳосил бўлади. a_1 ва a_2 лар умуман олганда комплекс бўлиши мумкин. $|a_1|^2$ ва $|a_2|^2$ мос ҳолда электрон спинининг Z ўқига проекцияси мос ҳолда $+\frac{\hbar}{2}$ ва $-\frac{\hbar}{2}$ тенг бўлиш эҳтимоллигини билдиради. Шубҳасиз,

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$$

Агар $a_1 = 1$, $a_2 = 0$ бўлса, спин проекцияси $+\frac{\hbar}{2}$ бўлиб, спин фунциясининг кўриниши

$$\widehat{\varphi}(\vec{S}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

бўлади. Аксинча, $a_1 = 0$ ва $a_2 = 1$ бўлса, электрон спини $-\frac{\hbar}{2}$ бўлиб, спин функцияси

$$\widehat{\varphi(\vec{S})} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

кўринишда ёзилади. Агар $a_1 \neq 0$, $a_2 \neq 0$ бўлса, электрон спинининг проекцияси аниқ бир қийматга тенг бўлмайди.

60- §. СПИН ОПЕРАТОРИНИНГ ХУСУСИЙ ҚИЙМАТИ ВА ХУСУСИЙ ФУНКЦИЯСИ

Квант механикасида қўлланиладиган операторлар хусусий қиймат ва хусусий функцияга эга. Демак, спин оператори ҳам хусусий қиймат ва функцияга эга бўлиши керак, уларни аниқлайлик. Таърифга (10- §) кўра

$$\widehat{S}_i \varphi_i = S_i \varphi_i \quad (i = x, y, z). \tag{60.1}$$

Бу ерда S_i — $\widehat{S}_i$ операторнинг хусусий қиймати, φ_i эса унинг S_i қийматга мос келган хусусий функцияси бўлиб, икки қаторли бир устунли матрицадан иборат:

$$\widehat{\varphi}(\vec{S}) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}.$$

Маълумки,

$$\widehat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\widehat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

61- §. ПАУЛИ ТЕНГЛАМАСИ

Электрон спинга эга бўлганлиги туфайли магнит моментига ҳам эга. Электроннинг бу ички хусусиятини ҳисобга олувчи квант механикасининг тенгламаси Паули тенгламасидир. Бу тенглама Шредингер тенгламасидан фойдаланиб келтириб чиқарилади.

Индукция вектори $\vec{B}$ бўлган ташқи магнит майдонда магнит моменти $\vec{\mu}$ га тенг бўлган электрон ҳаракат қилаётган бўлсин. Электроннинг магнит моментини спини орқали қуйидагича ифодалаш мумкин:

$$\vec{\mu} = -\mu_0 \vec{\sigma}. \tag{61.1}$$

Бу ерда $\mu_0 = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c}$ Бор магнетони, $\hat{\vec{\sigma}}$ — Паули матрицаси бўлиб унинг ташкил этувчилари:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{61.2}$$

Электрон магнит моменти билан ташқи магнит майдон ўзаро таъсир энергияси

$$U = -(\vec{\mu}\,\vec{B}) \tag{61.3}$$

бўлсин. Буни эътиборга олсак, Гамильтон оператори (13- §) қуйидагича ёзилади:

$$\hat{\mathscr{H}} = \frac{1}{2m_0}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\,\Phi - U_n. \tag{61.4}$$

Гамильтон операторини қуйидагича ёзайлик:

$$\hat{\mathscr{H}} = \hat{\mathscr{H}}_0 + \hat{U}. \tag{61.5}$$

Бу ерда $\hat{\mathscr{H}}_0 = \frac{1}{2m_0}\left(\vec{p} - \frac{e_0}{c}A\right)^2 + e_0\Phi$ — электрон спини ҳисобга олинмагандаги Гамильтон оператори.

У ҳолда Шредингернинг стационар тенгламасини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$[E - \hat{\mathscr{H}}_0 + (\vec{\mu}\vec{B})]\,\psi = 0. \tag{61.6}$$

(61.1) ва (61.2) муносабатларни ҳисобга олсак, Шредингер тенгламасининг кўриниши қуйидагича бўлади:

$$\left\{\left(E - \hat{\mathscr{H}}_0\right)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \mu_0\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}B_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}B_y + \right.\right.$$

$$+\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}B_z\Big]\Big\}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=0. \qquad (61.7)$$

Биз буни ёзишда электроннинг спинини ҳисобга олувчи $\widehat{\psi}$ функцияси икки каторли ва бир устунли матрица кўринишида бўлишини эътиборга олдик ва тенгламани спинга боғлиқ бўлмаган ҳадини бирлик матрица $\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$ га кўпайтириб қуйдик. (61.6) ёки (61.7) кўринишидаги тенгламага Паули тенгламаси дейилади.

ψ_1 ва ψ_2 функциялар электрон спинини икки хил вазиятига мос келади. Матрица кўринишдаги (61.7) тенгламани иккита оддий тенгламага ажратиб ёзиш мумкин.

$$[E-\widehat{\mathscr{H}}_0-\mu_0 B_z]\psi_1-\mu_0(B_x-iB_y)\psi_2=0, \qquad (61.8)$$

$$(E-\widehat{\mathscr{H}}_0+\mu_0 B_z)\psi_2-\mu_0(B_x+iB_y)\psi_1=0. \qquad (61.9)$$

Фараз қилайлик, ташқи майдон Z ўқи бўйича йўналган бўлсин. У ҳолда

$$B_x=B_y=0,\ B_z=B\left(A_x=-\frac{1}{2}yB,\ A_y=\frac{1}{2}xB\right)$$

бўлиб, $\frac{e}{m_0 c}\vec{A}\cdot\vec{p}=\frac{eB}{2m_0 c}\,\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=-\frac{e_0 B}{2m_0 c}\widehat{L}_z=$

$$=-\mu_0 B\widehat{L}_z,\ (\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2\approx\widehat{\vec{p}}^2+\frac{2e_0}{c}\vec{A}\widehat{\vec{p}}.$$

Буларни ҳисобга олсак, Гамильтон оператори

$$\widehat{\mathscr{H}}_0=\frac{1}{2m_0}\left(-\hbar^2\nabla^2+2\frac{\mu_0 m_0}{\hbar}B\widehat{L}_z\right)+e\Phi=$$

$$=\frac{\mu_0}{\hbar}B\widehat{L}_x+e\Phi+\frac{\widehat{p^2}}{2m_0}$$

кўринишни олади. У ҳолда водородсимон атомлар учун $(\widehat{L}_z\psi=\hbar m\psi)$ (61.8) ва (61.9) ларни мос ҳолда қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\left\{E-e_0\Phi-\mu_0 mB-\mu_0 B-\frac{\widehat{p^2}}{2m_0}\right)\psi_1=0, \qquad (61.10)$$

$$\left(E-e_0\Phi-\mu_0 mB+\mu_0 B-\frac{\widehat{p^2}}{2m_0}\right)\psi_2=0. \qquad (61.11)$$

Бу тенгламаларда $\mu_0 mB$ — электрон орбитал моментининг ташқи магнит майдон билан ўзаро таъсир энергияси, $\pm\mu_0 B$ эса спин моментининг ташқи майдон билан ўзаро таъсир энергияси. Агар электрон S ҳолатда десак ($m=0$):

$$\left(E-e_0\Phi-\mu_0 B-\frac{\hat{p}^2}{2m_0}\right)\psi_1=0, \qquad (61.12)$$

$$\left(E-e_0\Phi+\mu_0 B-\frac{\hat{p}^2}{2m_0}\right)\psi_2=0. \qquad (61.13)$$

X бобга доир масалалар

1. Паули матрицалари $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ ва $\hat{\sigma}_z$ билан ифодаланувчи операторнинг хусусий қийматларини ва хусусий функцияларини аниқланг.

Жавоби: $\sigma_x=\pm 1$, $\sigma_y=\pm 1$, $\sigma_z=\pm 1$;

$$\varphi_{+1}^{(x)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\ \varphi_{-1}^{(x)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},\ \varphi_{+1}^{(y)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix},$$

$$\varphi_{-1}^{(y)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix},\ \varphi_{+1}^{(z)}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\ \varphi_{-1}^{(z)}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

2. Электрон спинининг ихтиёрий $\vec{a}$ йўналишига проекциясининг квадратини ҳисобланг.

Жавоби: $\left(\frac{\hat{\vec{S}}\,\vec{a}}{a}\right)^2=\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}.$

3. Спинга эги бўлган заррачанинг $\vec{B}$ индукцияли магнит майдонидаги гамильтонианидан фойдаланиб, $\frac{d\hat{\sigma}_x}{dt}$ операторни ҳисобланг.

Жавоби: $\frac{d\hat{\sigma}_x}{dt}=\frac{e_0}{dt}\ (\hat{\sigma}_y B_z-\hat{\sigma}_z B_y).$

4. Водород атомининг асосий ҳолатдаги магнит моментини топинг.
Жавоби: $\mu=\sqrt{3}\,\mu_0$, $\mu_0=e_0\hbar/(2m_0c)$ — Бор магнетони.

5. Атомнинг ${}^2F$ ҳолатдаги механик моменти $\vec{I}$ кучланганлиги $H=0{,}5$ кЭ бўлган магнит майдонида $\omega_H=5{,}5\cdot 10$ рад/с бурчак частота билан процессияланади. Атомнинг механик ва магнит моментларини топинг.

Жавоби: $I=2\sqrt{5}\,\hbar$, $\mu=5\sqrt{\frac{5}{4}}\,\mu_0$.

XI БОБ

АЙНАН ЎХШАШ ЗАРРАЧАЛАР СИСТЕМАСИ

62-§. АЙНАН ЎХШАШЛИК ПРИНЦИПИ

Микрооламни ўрганишда заррачаларнинг айнан ўхшашлик принципи муҳим масалалардан биридир. Заряди, массаси, спини ва бошқа катталиклари бир хил бўлган заррачалар айнан ўхшашдир. Масалан, электронлар, протонлар, нейтронлар, фотонлар, ионлар ва ҳ.к. Аммо классик физика нуқтаи назаридан ҳар қандай заррачани ҳам белгилаб, вақт ўтиши билан уларнинг ҳар бирини алоҳида-алоҳида ҳаракатини ўрганса бўлади. Масалан, 10 та электрон берилган бўлса, уларнинг ҳар бирини алоҳида номерлаб ҳаракатини ўрганиш мумкин. Аммо бу метод квант механикаси принципларига тўғри келмайди. Чунки ҳар бир заррачани номерлаб вақт ўтиши билан унинг фазодаги ўринларини белгилаб бериш заррача траекторияга эга деган хулосага олиб келади. Микрооламда эса траектория тушунчаси йўқ. Иккинчидан, заррачаларни индивидуаллаштириш улар ўртасида микрооламда пайдо бўладиган алмашув (69-§) энергиясининг келиб чиқишини тушунтира олмайди. Фараз қилайлик, N та айнан бир хил заррачалар берилган бўлсин. Улар учун умумий гамильтон операторини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\hat{\mathscr{H}}(q_1, q_2, \ldots, q_k, q_l, \ldots, q_N, t) =$$

$$= \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_k^2 + U(q_k, t) \right] + \sum_{k>j=1}^{N} W(q_k, q_j). \quad (62.1)$$

Бу ерда q_k— k- заррача координатаси: (62.1) тенгламанинг ўнг томонидаги биринчи ҳад барча заррачалар кинетик ва потенциал энергияларини йиғиндиси, иккинчи ҳад эса заррачалар жуфтининг ўзаро таъсир энергияси. Агар биз k- заррача билан j- заррача ўрнини алмаштирсак (62.1) тенгламанинг ўнг томонидаги суммалар ва уларнинг йиғиндиси ўзгармайди. Чунки бундай ўрин алмаштиришда йиғинди остидаги қўшилувчи ҳадлар ўрни алмашади, холос. Демак, (62.1) формула билан аниқланувчи N та заррача гамильтонианни $\widehat{\mathscr{H}}$ ҳам, заррачаларнинг ўрни алмашганида, қимматини ўзгартирмайди:

$$\widehat{\mathscr{H}}(q_1, q_2, \ldots, q_k, \ldots, q_j, \ldots, q_N, t) =$$

$$= \widehat{\mathscr{H}}(q_1, q_2, \ldots, q_j, \ldots, q_k, \ldots, q_N, t). \tag{62.2}$$

Аммо бу N та айнан бир хил заррачаларнинг бирортаси бошқа хил бўлганда (масалан, $N-1$ та электрон ва битта протон ёки нейтрон) (62.2) тенглик ўринли бўлмайди. Битта бошқа хил заррачани N та заррачани ҳар бири билан ўрин алмаштирсак, ҳар сафар янги гамильтониан ҳосил бўладики (62.2) тенглик ўринли бўлмай қолади. Шундай қилиб *айнан бир хил заррачалар гамильтонианн заррачалар ихтиёрий жуфтининг ўрин алмаштиришига нисбатан инвариант (симметрик)дир.* Заррачалар ўринларини алмаштириш улар ҳолатини аниқловчи бирор функцияга $\widehat{P}_{kj}$ оператори билан таъсир этиш туфайли бўлади. Заррачалар ўрни алмашганда умумий гамильтонианнинг ўзгармаслиги ўрин алмаштириш оператори $\widehat{P}_{kj}$ билан гамильтон оператори $\widehat{\mathscr{H}}$ нинг ўзаро комутацияланишини билдиради:

$$\widehat{P}_{kj}\widehat{\mathscr{H}}(q_1, \ldots, q_k, \ldots, q_j, \ldots, q_N) =$$

$$= \widehat{\mathscr{H}}(q_1, \ldots, q_k, \ldots, q_j, \ldots, q_N)\,\widehat{P}_{kj}. \tag{62.3}$$

Аммо N га заррача ҳолатини ифодаловчи $\Psi(q_1, q_2, \ldots, q_k, \ldots, q_j, \ldots, q_N, t)$ функциясида ихтиёрий иккита k, j заррача ўрнини алмаштириш янги $\Psi'(q_1, q_2, \ldots, q_j, \ldots, q_k, \ldots, q_N, t)$ функцияга олиб келади:

$$\widehat{P}_{k} \Psi(q_1, \ldots, q_k, \ldots, q_j, \ldots, q_N, t) =$$

$$= \Psi'(q_1, \ldots, q_j, \ldots, q_k, \ldots, q_N, t). \tag{62.4}$$

Фараз қилайлик, $\Psi_N(t)$ Шредингер тенгламасининг ечими бўлсин (қисқалик учун N индексни ёзмайлик):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \widehat{\mathscr{H}}\Psi(t). \tag{62.5}$$

Бу тенгламага ўрин алмаштириш оператори $\widehat{P}_{kj}$ билан таъсир этайлик ва (62.3) ни ҳисобга олайлик:

$$i\hbar \frac{\partial \widehat{P}_{kj}\Psi(t)}{\partial t} = \widehat{P}_{kj}\widehat{\mathcal{H}}\,\Psi(t) = \widehat{\mathcal{H}}\,\widehat{P}_{kj}\,\Psi(t).$$

Ёки (4) ни эътиборга олсак,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'(t)}{\partial t} = \widehat{\mathcal{H}}\,\Psi'(t) \tag{62.6}$$

Демак, ўрин алмаштириш туфайли $\Psi(t)$ функциядан ҳосил бўлган $\Psi'(t)$ функция ҳам Шредингер тенгламасининг ечими бўла олади. Шундай йўл билан заррачалар ўрнини алмаштириш туфайли ҳосил бўлган $\Psi''(t)$, $\Psi'''(t)$, . . . функциялар ҳам Шредингер тенгламасининг ечими бўлишларини исботлаш мумкин. Юқоридагилардан шундай хулоса келиб чиқадики, микрооламда айнан бир хил заррачаларнинг ўрни алмашишлари туфайли янги ҳолат вужудга келмайди. Микрооламда айнан бир хил заррачаларнинг ҳолатлар бўйича тақсимотини эмас, балки барча айнан бир хил заррачалар системаси ҳақида гапириш лозим. Айнан бир хиллик принципи қуйидагидан иборат: *бир хил заррачалар тўпламида заррачалар ўрнини алмаштириш туфайли ўзгармайдиган система ҳолатларигина қайд этилади.*

63-§. СИММЕТРИК ВА АНТИСИММЕТРИК ҲОЛАТЛАР

Соддароқ қилиб айтганда N та заррача ҳолат функцияси

$$\Psi(q_1, q_2, \ldots, q_k, \ldots, q_j, \ldots, q_N, t) \tag{63.1}$$

бўлсин. Улардан ихтиёрий иккитасини, масалан, k ва j заррачалар ўрнини алмаштирсак, янги ҳолат функцияси

$$\Psi'(q_1, q_2, \ldots, q_j, \ldots, q_k, \ldots, q_N, t) \tag{63.2}$$

ҳосил бўлади. $\Psi'(t)$ ҳам $\Psi(t)$ функция каби Шредингер тенгламасининг ечими бўлади. Аммо заррачаларнинг айнан ўхшашлиги принципи туфайли $\psi'(t)$ ва $\psi(t)$ функцияларнинг ҳеч қандай фарқи йўқ. Ҳар иккиси ҳам айнан бир хил бўлган N та заррачанинг умумий ҳолатини ифодалайди. Битта системанинг ҳолатини ифодаловчи турли функциялар бирбирларидан фақат ўзгармас доимийликка фарқ қилишлари мумкин. Шунинг учун $\Psi'(t)$ ва $\Psi(t)$ функциялар ўртасидаги муносабатни қуйидагича ёзса бўлади:

$$\Psi'(q_1, \ldots, q_j, \ldots, q_N, t) =$$
$$= \lambda\,\Psi(q_1, \ldots, q_k, \ldots, q_j, \ldots, q_N, t). \tag{63.3}$$

Алмаштириш оператори P_{kq} ёрдамида охирги тенгликни қуйидагича ёзамиз:

$$\widehat{P}_{kl}\psi(q_1, \ldots, q_k, \ldots, q_l, \ldots, q_N, t) =$$

$$= \lambda\psi(q_1, \ldots, q_k, \ldots, q_l, \ldots, q_N, t). \quad (63.4)$$

Бу ердан кўринадики, λ алмаштириш оператори $\widehat{P}_{kl}$ нинг хусусий қиймати, $\Psi(t)$ эса $\widehat{P}_{kl}$ операторнинг λ хусусий қийматига мос келган хусусий функциясидир. λ нинг қийматини аниқлайлик. Шу мақсадда (63.4) нинг ҳар икки томонига $\widehat{P}_{kl}$ билан таъсир этамиз:

$$\widehat{P}^2_{kl}\Psi(t) = \lambda\widehat{P}_{kl}\Psi(t). \quad (63.5)$$

$\Psi(t)$ функцияга $\widehat{P}_{kl}$ билан икки марта кетма-кет таъсир қилиш $\Psi(t)$ нинг кўринишини ўзгартирмайди. Демак, (63.5) ни чап томони $\Psi(t)$ нинг ўзига тенг. Ўнг томони учун эса (63.4) ни ҳисобга оламиз. У ҳолда (63.5) тенгламадан

$$\Psi(t) = \lambda^2\Psi(t)$$

ёки $\lambda^2 = 1$ келиб чиқади. Бундан $\lambda = \pm 1$. Шундай қилиб, айнан бир хил заррачалар учун ўрин алмаштириш операторининг хусусий қиймати $+1$ ёки -1 га тенг бўлиши мумкин экан. Унинг маъноси қуйидагича. Айнан бир хил бўлган N та заррача ҳолат функциясига ўрин алмаштириш оператори $\widehat{P}_{kl}$ билан таъсир этсак, ҳолат функциясининг ишорасини ўзгартириши мумкин

$$\widehat{P}_{kl}\Psi(t) = -\Psi(t), \; \lambda = -1$$

ёки ўзгартирмаслиги мумкин

$$\widehat{P}_{kl}\Psi(t) = +\Psi(t), \; \lambda = +1.$$

Ўрин алмаштириш оператори билан таъсир этганимизда ишорасини ўзгартирувчи ҳолат функцияларини *антисимметрик ҳолат функциялари* дейилади:

$$\widehat{P}\Psi_a(t) = -\Psi_a(t).$$

Ишорасини ўзгартирмайдиган ҳолат функцияларини *симметрик функциялар* дейилади.

$$\widehat{P}\Psi_c(t) = \Psi_c(t).$$

Табиатда айнан бир хил заррачалар системаси икки ҳолатнинг фақат биттасида антисимметрик ёки симметрик ҳолатда бўлишлари мумкин. Вақт ўтиши билан ташқи таъсир ҳар қандай бўлганда ҳам система симметрияси ўзгармайди. Яъни системанинг ҳолати антисимметрик ҳолатдан симметрик ҳолатга ва аксинча ўтиши мумкин эмас.

64-§. АЙНАН БИР ХИЛ ЗАРРАЧАЛАР СТАТИСТИКАСИ

Маълум бўлдики, (63-§); микроолам заррачалари икки хил: антисимметрик ва симметрик ҳолатларнинг фақат биттасида бўлиши мумкин. Қайси бир ҳолатда бўлиши ташки таъсирга эмас, заррачаларнинг ички хусусиятларига, яъни уларнинг спинларига боғлиқдир. Микрооламнинг 400 дан ортиқ заррачалари ўзларининг ички структурасига боғлиқ ҳолда $\hbar/2$ га нисбатан хилма-хил спинларга эга.

Спини $\hbar/2$ га тенг бўлган айнан бир хил заррачалар: электрон, нейтрон, протон, лептонларнинг ҳолат функцияси антисимметрик бўлади. Бундай спинли заррачаларнинг статистикасини Ферми ва Дирак ишлаб чиққан

$$n_{\Phi-D}=\frac{n_0}{e^{\hbar\omega/kT}+1}$$

Уларни *фермионлар* дейилади.

Спини $0\hbar$, $1\hbar$ га тенг бўлган айнан бир хил заррачалар ($\pi^{\pm}$, π^0, K^-, K^0 кабилар, фотон) ҳолати симметрик функция билан аниқланади. Уларнинг статистикасини Бозе ва Эйнштейн аниқлаганлар: $n_{Б-Э}=n_0\,[\exp(\hbar\omega/k_Б\,T)-1]^{-1}$. Бундай статистикага бўйсунувчи заррачаларни б о з о н л а р дейилади. Демак, фермионларнинг ҳолат функцияси ҳамма вақт антисимметрик бўлиши, бозонларники эса симметрик бўлиши керак. Фермионлар учун Паули принципи мавжуддир: битта квант ҳолатда фермионлардан битта бўлиши мумкин ёки умуман бўлмаслиги мумкин.

Бозонларнинг ҳолатлар бўйича тақсимоти эса Паули принципига амал қилмайди: битта ҳолатда бозонлардан бир нечта бўлиши мумкин.

Фермионлар ва бозонларнинг бу хусусиятлари уларнинг ҳолат функциясида акс этиши керак.

65-§. ҲОЛАТ ФУНКЦИЯЛАРИ

Шундай қилиб, микрооламда заррачалар ҳолати учта фазовий, битта ички эркинлик даража сонига эга бўлиб, айнан бир хил заррачалар фақат битта антисимметрик ёки симметрик ҳолат функцияси билан ифодаланади. Икки заррача системаси учун бу ҳолат функциясини аниқлайлик. Биринчи заррачанинг фазовий квант сонлари n_1, l_1, m_1 ва спини s_1 бўлсин. Соддароқ ёзиш мақсадида n_1, l_1, m_1 квант сонларини q_1 билан алмаштирамиз. У ҳолда биринчи заррачанинг ҳолат функцияси $\psi_1(q_1, s_1, r_1)$ ва иккинчи заррачанинг ҳолат функцияси $\psi_2(q_2, s_2, r_2)$ бўлади. Бу икки тўлқин функция суперпозициясидан икки заррачали системанинг қуйидаги тўлқин функциясини тузиш мумкин:

$$\psi(q_1, s_1, r_1; q_2, s_2, r_2) = C_1\psi_1(q_1, s_1, r_1)\,\psi_2(q_2, s_2, r_2) + C_2\psi_1(q_2, s_2, r_2)\,\psi_2(q_1, s_1, r_1). \tag{65.1}$$

C_1, C_2 — коэффициентлар тўлқин функциясининг ортонормаланганлик шартидан топилади:

$$\int \psi^*(q_1, s_1, r_1; q_2, s_2, r_2)\,\psi(q_1, s_1, r_1; q_2, s_2, r_2)\,dV = 1.$$

Бу ерда (65.1) ни қўйиб, $\psi_1(q_1, s_2, r_1)$ ва $\psi_2(q_2, s_2, r_2)$ ларнинг ўзаро ортогоналлигини ва нормаланганлигини эътиборга олсак, $|C_1| = |C_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ бўлади.

Агар ҳар иккала заррача фермион бўлса, ψ функцияси антисимметрик бўлиши талаб этилади. Шунинг учун (65.1) формула қуйидагича ёзилади:

$$\psi^a(q_1, c_1, r_1; q_2, s_2, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_1(q_1, s_1, r_1)\,\psi_2(q_2, s_2, r_2) - \psi_2(q_1, s_1, r_1)\,\psi_1(q_2, s_2, r_2)\}. \tag{65.2}$$

Агар ҳар иккала заррача битта ҳолатда бўлса $q_1 = q_2$, $s_1 = s_2$ ва $\psi^a(q_1, s_1, r_1; q_2, s_2, r_2) = 0$. Демак, фермион учун бундай ҳол бўлиши мумкин эмас (Паули принципи). (65.1) ифодани симметрик ҳолат учун

$$\psi^s(q_1, s_1, r_1; q_2, s_2, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_1(q_1, s_1, r_1)\,\psi_2(q_2, s_2, r_2) + \psi_1(q_2, s_2, r_2)\,\psi_2(q_1, s_1, r_1)\} \tag{65.3}$$

ёзиш мумкин. Агар $q_1 = q_2$; $s_1 = s_2$ ёки ҳар иккала заррача битта ҳолатда десак, $\psi^s(q_1, s_1, r_1; q_2, s_2, r_2) \neq 0$. Демак, симметрик ҳолат функция билан аниқланувчи бозонлардан битта квант ҳолатда ихтиёрий бўлиши мумкин.

1. Квант система спинлари 1/2 ва 0 квант сонлар билан характерланувчи иккита заррачадан ташкил топган. Бу заррачаларнинг узаро таъсир қонуни қандай булишидан қатъи назар орбитал импульс моменти $\vec{M}$ ҳаракат интеграли булишини исботланг.

2. Агар бир заррачали тулқин функциялар $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots, \psi_N$ уртасида чизиқли боғланиш мавжуд булса, у ҳолда N заррачали системанинг антисимметрик тулқин функцияси нолга тенглигини курсатинг.

3. Ҳар бирининг спини S булган иккита бир хил заррачадан ташкил топган квант системанинг мумкин булган симметрик ва антисимметрик спин функцияларини ёзинг.

Жавоби: $\Phi^{(c)}_{S_z S_z} = \varphi^{(1)}_{S_z}\varphi^{(2)}_{S_z}$.

$$\Phi^{(c)}_{S_z S'_z} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi^{(1)}_{S_z}\varphi^{(2)}_{S'_z} + \varphi^{(1)}_{S'_z}\varphi^{(2)}_{S_z}\right],$$

$$\Phi^{(a)}_{S_z S'_z} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi^{(1)}_{S_z}\varphi^{(2)}_{S'_z} - \varphi^{(1)}_{S'_z}\varphi^{(2)}_{S_z}\right].$$

4. Спини $s = 0$ ва массаси m_0 булган иккита айний бозонлар $U = k\,(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2$ потенциал майдон билан боғланган. Бундай квант системанинг энергетик спектрини аниқланг.

Жавоби: $E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{3}{2}\right)$, $n = 0, 2, 4, \ldots$; $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$.

5. Энергия буйича тақсимот функциясидан фойдаланиб $s = \frac{1}{2}$ спин сони билан характерланувчи фермионларнинг тезликлар буйича тақсимотини келтириб чиқаринг.

Жавоби: $$dn(v) = \frac{m_0^3}{\pi^2\hbar^3}\,\frac{v^2 dv}{\exp\left[\left(\frac{m_0 v^2}{2} - E_F\right)/k_Б T\right] + 1}.$$

E_F — Ферми энергияси.

XII БОБ

ЭЛЕКТР ВА МАГНИТ МАЙДОНИДА АТОМ

Квант механикасининг юқорида қаралган масалаларида ташқи магнит майдони таъсирини эътиборга олувчи ҳолларга эътибор берилмади.

Ёруғлик таъсирида содир буладиган ҳодисаларнинг табиатини яққол кузатиш ва ойдинлаштириш мақсадида бу ҳодисани ташқи магнит майдонида кузатилади.

Шунга ухшаш масалаларга Фарадей ҳаётининг охирида жуда қизиққан эди, бироқ у ишлатган ўлчов ва кузатиш асбобларининг аниқлик даражаси бундай нозик тажрибаларни визуал кузатишга имкон бермаганлиги туфайли аниқ натижага эриша олмади.

Маълумки, атом электронлари ва ядроси хусусий магнит моментларига эга. Шундай бўлса ҳам келгусида магнит майдоннинг атомга таъсирини норелятивистик яқинлашишда ҳал этамиз. Чунки заррачаларнинг магнит ўзаро таъсири релятивистик ҳодисалар гуруҳига киради ва махсус (дирак тенгламалари деб номланувчи) тенгламаларга мурожаат этишга тўғри келади.

66- §. ЭЛЕКТР ВА МАГНИТ МАЙДОНИДАГИ ЗАРРАЧА УЧУН ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИ

e зарядли, m_0 массали заррачанинг электромагнит майдондаги ҳаракатини спинини эътиборга олмаган ҳолда кўрайлик.

Келгусида норелятивистик квант назарияси мулоҳазаларидан фойдаланганлигимиз сабабидан магнит майдонга ташқи магнит майдон сифатида қараймиз. У ҳолда қаралаётган заррачалар системасининг гамильтониани қуйидаги кўринишда бўлади.

$$\hat{\mathscr{H}} = \frac{1}{2m_0}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\Phi. \tag{66.1}$$

Бунда Φ — электромагнит майдоннинг скаляр, $\vec{A}$—вектор потенциалидир, $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ — импульс оператори. Агар заррачаларнинг спинларини эътиборга олиш зарурияти туғилса, у ҳолда (66.1) ифодада заррача хусусий магнит моменти билан ташқи магнит майдон ўртасида содир бўладиган ўзаро таъсирни ўз ичига олувчи ҳадни ҳам қўшиб ёзмоқ керак. Шу сабабдан алоҳида зарурият тақозо қилмагунга қадар заррача спинини эътибордан четда қолдирамиз.

Умуман олганда

$$\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = \hat{p}^2 - \frac{e}{c}(\hat{\vec{p}}\vec{A} + \vec{A}\hat{\vec{p}}) + \frac{e^2}{c^2}A^2 \tag{66.2}$$

ва импульс оператори билан электромагнит майдоннинг вектор потенциали ўзаро коммутациялашмайди:

$$\hat{\vec{p}}\vec{A} - \vec{A}\hat{\vec{p}} = -i\hbar \operatorname{div}\vec{A}. \tag{66.3}$$

Охирги ифодадан $\operatorname{div}\vec{A} = 0$ бўлгандагина $\hat{\vec{p}}$ ва $\vec{A}$ вектор катталиклар ўзаро коммутацияланади. Хусусан, бундай талаб бир жинсли магнит майдонлар учун бажариладиган ҳол. Масалан, соленоидал доимий магнит майдон учун вектор-потенциалини $\vec{A} = \frac{1}{2}[\vec{B} \times \vec{r}]$ кўринишда ёзиш мумкин. Бунда $\vec{B}$ — магнит майдон индукция вектори.

Ташқи магнит майдонга киритилган атом электронлари бир вақтнинг ўзида электр майдон таъсирида ҳам бўлган ҳолни кўрайлик. Бу масала юқорида қайд этилган зарядли заррачаларнинг электромагнит майдондаги ҳаракати тўғрисидаги масаланинг хусусий ҳолидир.

Маълумки, Шредингернинг стационар ҳолдаги тенгламаси

$$\hat{\mathscr{H}}\psi = E\psi \tag{66.4}$$

кўринишда ёзилади. (66.2), (66.1) ифодаларни эътиборга олиб (66.4) ни қайта қуйидагича ёзиш мумки:

$$\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_0} - \frac{e}{m_0 c}\,\frac{\hat{\vec{p}}\vec{A} + \vec{A}\hat{\vec{p}}}{2} + \frac{e^2}{2m_0 c^2}A^2 + e\Phi\right)\psi = E\psi. \tag{66.5}$$

Нерелятивистик квант механикасининг кўпгина масалаларини ҳал этишда (66.5) даги учинчи йиғинди ташлаб кетилади.*

(66.4) ни эътиборга олсак, магнит майдон ҳисобига гамильтонианга киритилган қўшимча ҳад

$$-\frac{e}{m_0 c}\,\frac{\hat{\vec{p}}\vec{A} + \vec{A}\hat{\vec{p}}}{2} = -\frac{e}{2m_0 c}[\vec{B} \times \vec{r}]\,\hat{\vec{p}} =$$

$$= -\frac{e}{2m_0 c}\vec{B}\,[\vec{r} \times \vec{p}] = -\frac{e}{m_0 c}\,\vec{B}\hat{\vec{M}} \tag{66.6}$$

кўринишга келиб

$$\hat{\vec{M}} = [\vec{r} \times \hat{\vec{p}}] \tag{66.7}$$

заррачанинг орбитал ҳаракат миқдори (импульс) моменти оператори. У ҳолда Шредингер тенгламасининг кўриниши

$$\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_0} - q_m\,\vec{B}\hat{\vec{M}} + \frac{e^2}{8m_0 c^2}[\vec{B}\vec{r}]^2 + e\Phi\right)\psi = E\psi \tag{66.8}$$

---

* Бундай яқинлашиш, масалан, кам интенсивлилик электромагнит тўлқинлар ёрдамида уйғотилган атомлар хусусиятини ўрганишда сезиларли хатоликка олиб келмайди. Бироқ ҳозирги замон лазер нурлари таъсирида атомларнинг оптик хусусиятларини ўрганишда, масалан, кўп фотонли ютилишларда, $e^2A^2/(2m_0c^2)$ ҳадини эътиборга олиш керак.

бўлиб, бунда $q_m = e/2m_0c$ — электроннинг гиромагнит нисбатидир. (66.8) ташқи электр ва магнит майдонларида ҳаракатланаётган заррача учун Шредингер тенгламасидир.

Ҳисоб-китоблар шуни кўрсатадики, Зееман эффекти (67-§ ни қаранг) кузатилиши мумкин бўлган магнит майдонида ($|\vec{H}|=30$ кГс, $\vec{H}$ — магнит майдон кучланганлиги) (66.8) нинг иккинчи ҳади учинчи ҳадидан бир неча юз марта (~ 1000) катта. Шу сабабдан кичик магнит майдонларда (66.8) нинг учинчи ҳадини ташлаб юбориш мумкин. Бундай ҳолда иккинчи ҳадни атомни қўзғатувчи катталик (оператор) сифатида қараш имкони туғилади. (66.8) дан кўриняптики, ташқи магнит майдоннинг зарядли заррачага таъсирини ўрганишда заррача $\hat{\vec{\mu}}_e = g_m\hat{\vec{M}}$ магнит моментига эга деб қараш мумкин. Масалан, атом ядроси ҳосил қилган марказий симметрик потенциал майдонда электроннинг ҳаракатини текширайлик. Бунда $e\Phi = -Ze_0^2/r$ бўлади (42-§). Ташқи магнит майдон статик, бир жинсли ва OZ ўқи бўйлаб йўналган бўлсин: $B_x = B_y = 0$, $B_z = B$. У ҳолда магнит майдон вектор-потенциали

$$A_x = -\frac{1}{2}yB,\quad A_y = \frac{1}{2}xB,\quad A_z = 0 \text{ эканидан } \vec{A}\hat{\vec{p}} = A_x\hat{p}_x - $$

$$- A_y\hat{p}_y + A_z\hat{p}_z = \frac{B}{2}(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}BL_z.$$

Буларни ҳисобга олсак, учинчи ҳадни ташлаб юборсак, (66.8) дан

$$\left[\nabla^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \frac{e_0B}{2m_0c}\hat{M}_z + \frac{Ze_0^2}{r}\right)\right]\psi = 0 \qquad (66.9)$$

тенгламага эга бўламиз. Марказий симметрик потенциал майдон учун $\hat{M}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ бўлиб, хусусий қиймати (46-§) $l_z = m\hbar$ га тенг. Буни ҳисобга олсак, Шредингер тенгламасининг кўриниши (66.9) дан қуйидагича бўлади:

$$\left[\nabla^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E' + \frac{Ze_0^2}{r}\right)\right]\psi = 0. \qquad (66.10)$$

Бунда

$$E' = E - \frac{e_0 B\hbar}{2m_0c}\, m. \qquad (66.11)$$

(66.10) тенглама ташқи магнит майдон бўлмаганда марказий симметрик потенциал майдон учун ёзилган Шредингер тенгламаси (42-§) га айнан ўхшаш бўлиб, электроннинг энергияси

$$E' = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \qquad (66.12)$$

га мос келувчи хусусий функциялари

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) \qquad (66.13)$$

бўлади. (66.12) ни (66.11) га қўйсак,

$$E_{nm} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} + \frac{eB\hbar}{2m_0c}\, m \qquad (66.14)$$

келиб чиқади. (66.14) ташқи, статик ва бир жинсли магнит майдондаги водородсимон атом электронининг энергиясидир: ташқи магнит майдони бўлмаса, электроннинг энергияси фақат бош квант сони (n) билан аниқланади; магнит майдон иштирокида эса электрон энергияси бош квант сонидан ташқари бир вақтда магнит квант сони (m) билан ҳам аниқланади.

(66.14) $B = 0$ бўлганида водородсимон атоми учун топилган спектрга ўтади. Шундай қилиб, (66.14) даги иккинчи ҳад электроннинг орбитал ҳаракати туфайли ҳосил бўладиган айланма микроток магнит моментининг ташқи магнит майдон билан ўзаро таъсири натижасида ҳосил бўлган қўшимча энергиядир. Бу қўшимча энергияни қуйидагича қайта ёзиш мумкин:

$$\Delta E = -\vec{\mu}\,\vec{B} = -\mu_z B. \qquad (66.15)$$

У ҳолда

$$\mu_z = -\frac{e_0\hbar}{2m_0c}\, m = -\mu_0 m \qquad (66.16)$$

келиб чиқади. Бунда $\mu_0 = \frac{|e_0|\,\hbar}{2m_0c} = 9{,}27\cdot 10^{-21}$ Ж/Т. Бу катталикка Бор магнитони дейилади. Бор магнетони атом магнит моментининг бирлиги қилиб олинган.

Оғир зарраларнинг магнит моменти ядровий магнетон $\mu_я = \frac{|e_0|\,\hbar}{2m_pc} = 5{,}05\cdot 10^{-27}$ Ж/Т (m_p — протоннинг массаси)ларда ўлчанади. Масалан, протоннинг эксперментал ўлчанган хусусий магнит моменти $\mu_p = 2,79\,\mu_я$ булиб, ўз спини бўйлаб йўналган, нейтрон учун эса $\mu_n = -1,91\,\mu_я$ булиб, ўз спинига тескари йўналишга эга.

67- §. ЗЕЕМАН ЭФФЕКТИ

Магнит майдонга киритилган ёруғлик манбаининг оптик спектри ўзгаради: спектрал чизиқлар силжиши ёки бир неча спектрал чизиқларга ажралиши мумкин. Бу ҳолни биринчи бўлиб голланд физиги П. Зееман (1896 й.) кузатган. Шунинг учун бу ҳодиса—ташқи магнит майдонда спектрал чизиқларнинг бир нечтага ажралиш ҳодисаси *Зееман эффекти* дейилади. Квант физикаси ёрдамида содда (нормал) Зееман эффекти ҳар бир спектрал чизиқнинг учга ва мураккаб (аномал) Зееман эффекти — ҳар бир спектрал чизиқнинг кўп компоненталарга ажралишини тушунтириш мумкин, ваҳоланки, классик физика ёрдамида нормал Зееман эффектини тушунтириш мумкин, холос.*

Магнит майдондаги атомнинг энергетик сатҳларини ҳисоблаш учун энергия оператори — гамильтониани

$$\widehat{\mathscr{H}} = \widehat{T} + \widehat{U}_к + U_{SL} + \widehat{U}_{SB} + \widehat{U}_{LB} \qquad (67.1)$$

кўринишда олинган Шредингер тенгламасини ечишга тўғри келади. Бунда $\widehat{T}$ — кинетик энергия оператори, $\widehat{U}_к$ — потенциал энергия оператори (Кулон энергияси), $\widehat{U}_{SL}$ — электроннинг спин-орбитал ўзаро таъсирига боғлиқ бўлган оператор. Бу учала оператор ташқи магнит майдонга боғлиқ бўлмаган ҳолда танланган. $\widehat{U}_{SB}$ — электроннинг спин моментининг, $\widehat{U}_{LB}$ — эса орбитал моментининг магнит майдон билан ўзаро таъсирини эътиборга олувчи операторлар.

Дастлаб нормал Зееман эффектини кўрайлик. Бу ҳолда атом кичик магнит майдон таъсирида бўлганлиги туфайли (67.1) нинг охирги иккала ҳади ҳам атом структурасининг юпқа (нозик) структураси ҳисобига ҳосил бўлган дискрет сатҳларни сезиларли ўзгартира олмайди.

* Нормал Зееман эффекти катта магнит майдонда юзага келади. Шу сабабли бу ходиса текширилишда гамильтониандаги магнит майдон кучланганлиги квадратига пропорционал бўлган ҳад ташлаб юборилмайди. Кичик магнит майдонда эътиборга олинмайди.

Шунинг учун ташқи магнит майдонда атом нозик структурасида айрим олинган энергетик сатҳнинг титилишини кўрайлик. У ҳолда атом валент электронларининг ташқи магнит майдон билан ўзаро таъсир энергияси оператори

$$\widehat{\mathscr{H}}_1 = B\mu_0(\widehat{M}_z + \widehat{S}_z)\ \frac{1}{\hbar} \tag{67.2}$$

кўринишда бўлади. Бунда $B = (0,\ 0,\ B)$, μ_0 — Бор магнетони,

$$M_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{67.3}$$

орбитал моментнинг z — компонентаси, $\widehat{S}_z = \hbar\,\widehat{\sigma}_z$, $\widehat{\sigma}_z$ — Паули атрицаси. Қўзғалмаган гамильтонианни қуйидагича олсак,

$$\widehat{\mathscr{H}}_0^{(0)} = \frac{1}{2m_0}\widehat{\vec{p}}^2 - e\Phi. \tag{67.4}$$

У ҳолда Шредингернинг ностационар тенгламасининг кўриниши қуйидагича бўлади:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \widehat{\mathscr{H}}\psi = (\mathscr{H}_0^0 + \mathscr{H}_1)\,\widehat{\psi} = \mathscr{H}_0^0\,\widehat{\psi} + \\ + \frac{\mu_0 B}{\hbar}\,(\widehat{\mu}_z + \hbar\,\widehat{\sigma}_z)\,\psi. \tag{67.5}$$

Электроннинг тўлқин функциясини

$$\widehat{\Psi}(\vec{r}, t) = \widehat{\psi}(\vec{r})\,e^{-i\frac{Et}{\hbar}},\ \widehat{\psi}(\vec{r}) = \begin{bmatrix}\psi_1(\vec{r})\\ \psi_2(\vec{r})\end{bmatrix} \tag{67.6}$$

кўринишда изласак, (67.5) иккита тенгламалар системасига ажралади

$$\begin{vmatrix} \mathscr{H}_0^0\psi_1 + \frac{1}{\hbar}\,\mu_0 B\,(\widehat{\mu}_z + \hbar)\,\psi_1 = E\psi_1, \\ \mathscr{H}^0\psi_2 + \frac{1}{\hbar}\,\eta_0 B\,(\mu_z - \hbar)\,\psi_2 = E\psi_2. \end{vmatrix} \tag{67.7}$$

Бунда $\widehat{\sigma}_z\,\widehat{\psi} = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{vmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{vmatrix} = \begin{vmatrix}\psi_1\\ -\psi_2\end{vmatrix}$ эканини эътиборга олдик.

Магнит майдон йўқлигида спиннинг «юқорига» ($|\uparrow\ > = \begin{vmatrix}1\\0\end{vmatrix}$) ва «пастга» ($|\downarrow\ > = \begin{vmatrix}0\\1\end{vmatrix}$) қараган $E = E_{nl}^0$ ҳолатлари учун тўлқин функцияларини

$$\psi'_{nlm} = \psi_{nlm} \mid \uparrow >,$$
$$\psi''_{nlm} = \psi_{nlm} \mid \downarrow >,$$
$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\vartheta, \varphi) \qquad (67.8)$$

каби қайта ёзиб, $\hat{M}_z \psi_{nlm} = \hbar m \psi_{nlm}$ эканини эътиборга олсак, $\mid \uparrow >$ ҳолат учун

$$E = E'_{nlm} = E^{(0)}_{nl} + (m+1)\,\mu_0 B \qquad (67.9)$$

$\mid \downarrow >$ ҳолат учун

$$E = E''_{nlm} = E^{(0)}_{nl} + (m-1)\,\mu_0 B \qquad (67.10)$$

эканини топамиз. Бунда $E^0_{nl} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2}$ — электроннинг ташқи магнит майдон бўлмагандаги энергияси.

Демак, нормал Зееман эффектида:

1. Тўлқин функциялар ўзгаришсиз қолганликлари учун ташқи магнит майдони таъсирида атом деформацияланмайди.

2. Ташқи магнит майдондаги электроннинг энергияси ажралиши магнит квант сони m га, яъни электрон магнит моментининг магнит майдонга нисбатан ориентациясига боғлиқлиги келиб чиқади.

Аномал Зееман эффектини кўришда электрон хусусий (спин) магнит моменти билан эффектив магнит майдон ўртасидаги ўзаро таъсирни ҳам эътиборга олиш керак. Бу қўшимча ҳад $U_{SB} = \vec{M}\sigma$. Буни эътиборга олиб (67.5) тенгламани юқоридагидек мулоҳаза юритиб ечсак, қузғалиш энергияси $|m| \leqslant l - 1/2$ учун

$$E_{nlm} = E^{(0)}_{nlm} - \frac{kl}{4} + B\mu_0 m \pm \frac{1}{2}\varepsilon, \qquad (67.11)$$

$m = \pm\left(l + \frac{1}{2}\right)$ учун

$$E_{nlm} = E^{(0)}_{nlm} + \frac{kl}{2} \pm B\mu_0 (l+1) \qquad (67.12)$$

ифодалар ёрдамида топилади. Бунда k — потенциал энергия операторига боғлиқ сон,

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\left[k^2\left(l + \frac{1}{2}\right) + 2B\mu_0 km + B^2\mu_0^2\right]^{1/2} \qquad (67.13)$$

$B \ll k/\mu_0$ тенгсизликни қаноатлантирувчи магнит майдон учун энергетик сатҳларнинг ажралиши кенглиги

$$\delta E_{nlm}=\begin{cases}\frac{k}{2}\, l+Bm\mu_0\frac{2(l+1)}{2l+1}, & |m|=l+\frac{1}{2},\\ -\frac{k}{2}\,(l+1)+Bm\mu_0\frac{2l}{2l+1}, & -\left(l+\frac{1}{2}\right)\leq m\leq l-\frac{1}{2}\end{cases}$$

муносабатдан аниқланади. Бу ҳол ҳамма энергетик сатҳларнинг ажралишига мос келади ва аномал Зееман эффектини характерлайди.

Ташқи магнит майдон таъсирида электроннинг энергетик сатҳлари майда ҳолатларга ажралади. Ана шундай ҳолатда бўлган атом нурланиш частотасини нормал Зееман эффекти учун аниқлайлик. Электрон nm квант ҳолатидан $n'm'$ квант ҳолатига ўтсин. ($|E_{nm}|>|E_{n'm'}|$). Бу ҳолда атом томонидан сочилган нурланиш частотаси ҳар галгидек қуйидаги формула билан аниқланади:

$$\omega=\frac{E_{nm}-E_{n'm'}}{\hbar}.$$

Бундан

$$\omega=\omega_{nn'}+\omega_Л\Delta m \tag{67.14}$$

ҳосил бўлади. Бу ерда

$$\omega_{nn'}=R\hbar Z^2\left(\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right)$$

ташқи магнит майдон бўлмагандаги частота, $\omega_Л=\frac{e_0B}{2m_0c}$ — Лармор частотаси, $\Delta m=m-m'$, m, m' — магнит квант сонлари.

Ўтиш қоидаларидан (56.1-§) маълумки, магнит квант сонининг ўзгариши $\Delta m=0,\pm 1$ бўлиши керак. Демак, ташқи магнит майдон бўлмагандаги нурланиш частотаси атом магнит майдонга киритилганда (67.14) формулага мувофиқ учта частотага ажрайди.

$$\omega=\begin{cases}\omega_{nn'}+\omega_Л, & \Delta m=1 \text{ бўлганда},\\ \omega_{nn'}, & \Delta m=0 \text{ бўлганда},\\ \omega_{nn'}-\omega_Л, & \Delta m=-1 \text{ бўлганда}.\end{cases}$$

Охирида шуни таъкидлаш керакки: а) Зееман эффектининг классик назариясида бу ҳодиса магнит майдонида электрон орбитасининг Лармор частотасига тенг частота билан гир-гир айланиш (процессияси) билан тушунтирилади;

б) Зееман эффектининг квант назариясида бу ҳодиса электрон импульс моментининг магнит майдон йўналишн гир-гир айланиши (процессияси) ҳисобига содир бўлади;

в) ҳар иккала ҳолда ҳам магнит майдон таъсирида ажралган сатҳлар ўртасидаги ўтиш частоталари Планк доимийсини ўз ичига олмайди, яъни $\hbar \to 0$ ўтишни ҳис қилмайди.

67.1-§. ПАШЕН — БАК ЭФФЕКТИ

Ҳаракатланаётган заррачанинг магнит моменти билан ташқи магнит майдонининг ўзаро таъсири спин-орбитал ўзаро таъсирни юзага келтиради. Спин-орбитал ўзаро таъсир релятвистик эффект ҳисоблангаилиги учун қуйида бу масалага сифатли қараш билан чегараланамиз.

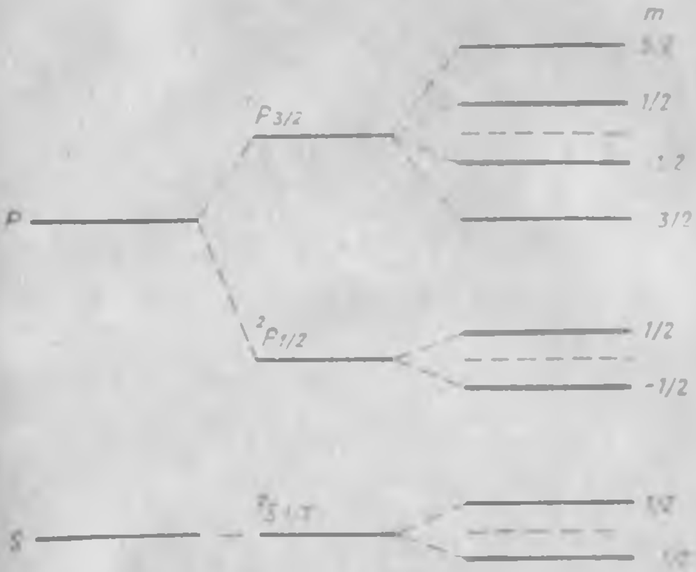
Солиштириш мақсадида спин-орбитал ўзаро таъсир заррачаларнинг электростатик ўзаро таъсирнга нисбатан жуда кучсиз эканлигини айтиб ўтиш кифоя. Шу сабабли спин-орбитал ўзаро таъсир операторини қўзғатувчи оператор сифатида қараш мумкин.

Юқорида қайд этилгандек Зееман эффектини юзага келтирувчи ҳад — Зееман ҳади (67.2) ифода билан аниқланади.

Етарлича катта магнит майдонида система гамильтонианининг Зееман ҳади спин-орбитал ўзаро таъсир ҳадидан сезиларли катта бўлиши мумкин. Бундай ҳолда Зееман ҳади ҳам, спин-орбитал ҳад ҳам гамильтонианнинг қўзғатувчи ҳади сифатида қаралиши мумкин. Бу ҳол квант механикасида Пашен — Бак эффекти сифатида машҳурдир. Бундай ҳолда орбитал магнит момент μ_L ва спин магнит моменти μ_s ташқи магнит майдони билан мустақил равишда ўзаро таъсир этишиша бошлайди. Шунинг учун электроннинг энергиясини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$E = E_n - (\vec{\mu}_L \vec{B}) - (\vec{\mu}_s \vec{B}). \qquad (67.1.2)$$

Бу ерда $(\vec{\mu}_L \vec{B})$ — орбитал магнит моментининг, $(\vec{\mu}_s \vec{B})$—спин магнит моментининг ташқи магнит майдон билан ўзаро таъсир энергияси. Мисол сифатида натрий атоми s ва p сатҳларининг кучли магнит майдонда сатҳчаларга ажралишини кўрайлик (67.1-расм). Шаклдан кўринадики, p сатҳ кучли магнит майдонда 6 тага ажрайди, s сатҳ эса, орбитал ҳара-



67.1- расм. Натрий атомида s ва p энергетик сатхларнинг кучли магнит майдонда ажралиши.

катларнинг йўклиги туфайли спин моментларнинг вазиятига мос ҳолда фақат иккитага ажрайди, холос. Кучли магнит майдонида бўлган атомнинг нурланиш частотасини аниқлаш мақсадида ташқи магнит майдони $\vec{B}$ Z ўқига параллел бўлсин деб ҳисоблайлик. У ҳолда (67.1.2) формулани қуйидагича ёзиш мумкин:

$$E_{nm} = E_n - E_L - E_S. \qquad (67.1.3)$$

Бу ерда

$E_L = \mu_L B = \mu_0 Bm$, $E_S = \mu_S B = r\,\mu_0 Bm_S$, $m_S = \pm\dfrac{1}{2}$ спин квант сони. Электрон nm ҳолатдан $n'm'$ ҳолатга ўтсин. У ҳолда атом томонидан нурланган фотон частотаси

$$\omega = \frac{E_{nm} - E_{n'm'}}{\hbar} = \omega_{nn'} + \omega_Л \Delta m + \omega_S \Delta m_S \quad (67.1.4)$$

бўлади. Ўтиш қоидасига биноан (56.1-§) магнит квант сонининг ўзгариши $\Delta m = 0,\ \pm 1$, спин квант сонининг ўзгариши $\Delta m_S = 0$. Шунинг учун (67.14) формуланинг ўнг томонидаги охирги ҳад нолга тенг. Буни эътиборга олсак, (67.1.4)ни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\omega = \omega_{nn'} + \omega_Л \Delta m. \qquad (67.1.5)$$

Бу натижани Зееман эффекти учун ҳам аниқлаган эдик (67-§). Демак, кучли магнит майдонида электроннинг энергетик сатҳлари турлича ажралгани билан нурланиш частотаси (спин квант сони ўзгармаганлиги туфайли) нормал Зееман эффекти билан бир хил бўлади, яъни спектрал чизиқ фақат учтага ажрайди. Демак. Пашен — Бак эффекти кучли магнит майдонда Зееман аномал эффектининг нормал эффектга айланишидир.

68-§. ШТАРК ЭФФЕКТИ

Z ўқи буйлаб йўналган $\vec{\mathscr{E}}$ кучланганликли ташқи электр майдони таъсири остида атомдаги стационар энергетик ҳолатларнинг ўзгаришини кўриб ўтайлик. Бундай майдон таъсирида атом Z ўқи атрофида айланишларга, Z ўқига параллел текисликларга нисбатан кўзгули аксланиш (тасвир)га нисбатан инварнантлигича қолади.

Майдон таъсири йўқлигида стационар ҳолат $|njm>$ ва m квант сонига нисбатан айниган E_{nl} энергия билан ифодаланса, майдон таъсирини система гамильтониани $\widehat{\mathscr{H}}_0$ га қўшилган $\widehat{\mathscr{H}}' = -e\mathscr{E}z = -\vec{\mathscr{E}}\vec{d}$ ҳад орқали ифодалаш мумкин (бунда $\vec{d} = e\vec{z}$ — электроннинг диполь моменти оператори), яъни

$$\widehat{\mathscr{H}} = \widehat{\mathscr{H}}_0 + \widehat{\mathscr{H}}' = \frac{\widehat{\vec{p}^2}}{2m} - \frac{Ze^2}{r} - ez\mathscr{E}. \qquad (68.1)$$

Бу ифодадан кўриняптики, $\widehat{\mathscr{H}}$ оператор Z ни ўзгармас қолдирувчи ихтиёрий симметриявий шакл алмаштиришга нисбатан инвариантдир.

Магнит майдон таъсирига ўхшаш доимий электр майдони таъсирида $\widehat{\mathscr{H}}$ Z ўқи атрофида бурашга нисбатан инвариант. Бироқ магнит майдондан фарқли ўлароқ электр майдон таъсирида ҳаракат миқдори моменти проекцияси m нинг ишорасини ўзгаришга олиб келувчи кўзгули аксланишга нисбатан ҳам $\widehat{\mathscr{H}}$ инвариантлигича қолади. Шу сабабли E_{nl} m га нисбатан икки каррали айнигандир.

Ҳолат энергиясининг ўзгаришини қўзғалишлар назарияси ёрдамида ҳисобласак, биринчи тартибли яқинлашишда

$$\Delta E^{(1)} = -\mathscr{E} < njm\,|ez|\,njm > \qquad (68.2)$$

$|njm>$ ҳолат функциясига нисбатан ҳисобланган диполь моменти Z ўқига проекциясининг ўртача қиймати билан аниқланади. Бироқ диполь моментининг фазовий инверсияга нисбатан тоқлиги (ишорасини ўзгартириш) ни эътиборга олсак, $\Delta E^{(1)} = 0$ келиб чиқади. Шу сабабдан ҳолат энергиясининг ўзгаришини қўзғалишлар назариясининг иккинчи тартибли яқинлашиши билан ҳисоблаш керак. Келгусида электроннинг спинини ва спин-орбитал ўзаро таъсирларни эътиборга олмаймиз, чунки электр майдон электрон спинига таъсир этмайди.

Текширишни водород атомига нисбатан олиб борсак, электр майдон таъсирида водород атомининг $n = 1$ ($1s$) ҳолати ўзгармайди (юқорида қайд этилган сабабга кўра). Демак, биринчи бўлиб $n = 2$ га мос келувчи ҳолат қўзғалади. Бу ҳолат тўрт каррали айниган ($\psi_1 = |2, 0, 0>$, $\psi_2 = |2, 1, 0>$, $\psi_3 = |2, 1, 1>$, $\varphi_4 = |2, 1, -1>$) эканлигини эътиборга олиб, биринчи яқинлашиш ҳисоблашларида суперпозиция принципини қўлласак, ҳолат энергиясининг ўзгариши

$$\Delta E^2 \, (\Delta E^2 - \mathcal{H}_{12}^2) = 0 \qquad (68.3)$$

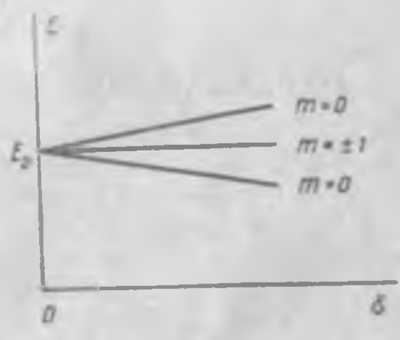
тенгламани қаноатлантиришини аниқлаймиз. Бунда $\Delta E = E - E_0$, E ва E_0 қўзғалган ва қўзғалмаган ҳолатлар энергиялари.

$$\mathcal{H}_{12} = -e\mathcal{E} < 2, 0, 0 \; z | \; 2, 1, 0 > = -3ea_Б\mathcal{E}, \qquad (68.4)$$

$a = \hbar^2/(2m_0 a_Б^2)$ — Бор радиуси.

У ҳолда (68.3) ва (68.4) ифодалардан $\Delta E_1 = 0$, $\Delta E_2 = 0$, $\Delta E_3 = 3a_Б e\mathcal{E}$, $\Delta E_4 = -3ea_Б\mathcal{E}$ эканини топамиз. Охирги муносабатлардан кўриняптики, тўрт каррали айниган энергетик ҳолат ташқи доимий электр майдони таъсирида 3 та сатҳга ажралиб, биттаси ($m = \pm 1$) икки каррали айниган ҳолатда қолади (68.1-расм).

Бу ҳол чизиқли Штарк эффекти дейилади. Бундай эффект Кулон потенциали мавжуд атомлардагина кузатилиши мумкин. Акс ҳолларда l квант сонига мос келувчи ҳолатлар жуфтлиги билан фарқланади ва диполь моментининг ўртача қиймати нолга тенг бўлади. Бундай ҳолларда ҳолат энергиясининг ўзгари-



68.1-расм. Водород атомида $n = 2$ энергетик сатҳ учун чизиқли Штарк эффекти.

ши иккинчи тартибли яқинлашишда ҳисоблашни талаб этади:

$$\Delta E_{nlm} = e^2 \mathcal{E}^2 \sum_{l'n'} \frac{<nlm\ |z|\ n'l'm><n'l'm\ |z|\ nlm>}{E^{(0)}_{nl} - E^{(0)}_{n'l'}}. \quad (68.5)$$

Демак, Кулон ўзаро таъсир мавжуд бўлмаган атомларнинг энергетик ҳолатлари ташқи электр майдон таъсирида унинг кучланганлиги квадратига пропорционал ўзгаради. Бу ҳолда m ва $(-m)$ квант сонларига нисбатан ҳолатларнинг айниганлиги қолади. Шу сабабдан энергетик ўзгариш m га нисбатан жуфт функциядир.

XII бобга доир масалалар

1. Магнит майдонида $d \to p$, $f \to d$ ҳолатлар ўртасида мумкин бўлган квант ўтишлар схемасини кўрсатинг.

2. Тўлқин узунлиги $\lambda = 0{,}612$ мкм бўлган спектрал чизиқ оддий Зееман эффектига учраяпти. Агар магнит майдон кучланганлиги $H = 10$кЭ бўлса, бу чизиқнинг чеккадаги компонентлари қандай $\Delta\lambda$ интервалда бўлади?

Жавоби: $\Delta\lambda = 0{,}35$ Å.

3. Кучсиз магнит майдонда H, He, Li, Be, B ва C атомларининг спектрал чизиқлари қандай Зееман эффектига учрайди?

4. Атомлари $^2D_{3/2}$ квант ҳолатдаги газ бир вақтнинг ўзида доимий $\vec{H}$ ва унга перпендикуляр йўналишда $\nu = 2{,}8 \times 10^9$Гц частотада ўзгарувчи $\vec{H}_\nu$ магнит майдонга киритилган. H нинг қандай қийматида резонанс ютилиш кузатилади?

Жавоби: $H = \hbar\omega/g\mu_0 = 2{,}5$кЭ.

5. Атомларда чизиқли ва квадратик Штарк эффектлари ҳамда автоионлашиши ҳодисаси ўртасидаги тафовутлар нимадан иборат?

XIII БОБ

МУРАККАБ АТОМЛАРНИНГ ТУЗИЛИШИ

Гелий атоми водород атомидан кейинда жойлашган кўп электронли атомларнинг биринчиси бўлиб, мураккаб атомларнинг энг соддаси ҳисобланади. Унинг ядросида иккита протон ва иккита нейтрон бўлиб, ядро атрофида иккита электрон ҳаракатда бўлади.

Асосий вазифамиз ана шу электронларнинг ядро билан ва ўзаро таъсирини эътиборга олган ҳолда ҳолат функциясини топишдан иборат. Равшанки, бу масалани ҳал қилиш учун ярим классик ва ярим квант характерли бўлган Бор назариясидан фойдаланиш ҳеч қандай натижа бермайди. Чунки Бор назарияси водородсимон атомлар хусусиятларини ҳам тўғри тушунтира олмаган. Гелий атомида электронлар сони иккита бўлганлиги туфайли заррачаларнинг айнан бир хиллик принципига мувофиқ богланиш энергиясининг янги бир тури — алмашинув энергияси пайдо бўлади. Бундай энергия барча кўп электронли атом электронлари ўртасида мавжуд бўлиб, ҳеч қандай классик ўхшашлиги йўқ. Бу энергиянинг физик моҳиятини фақат квант механикаси тушунтира олади. Шундай қилиб, гелийсимон атомлар (He, Li^-, Be^{++},...) назарияси микрооламнинг яна бир хусусияти алмашинув энергиясининг пайдо бўлишини ва хусусиятларини ўрганишга имкон беради. Бу масалани дастлаб электронларнинг спинини эътиборга олмасдан ўрганамиз.

69-§. ГЕЛИЙ АТОМИ. ЭЛЕКТРОНЛАР СПИНИНИ ҲИСОБГА ОЛМАГАНДАГИ АСОСИЙ ТЕНГЛАМАЛАР ВА УЛАРНИ ЕЧИШ

Гелийсимон атом (бундан буён гелий атоми деб юритамиз, аниқланган натижалар a нинг қийматига қараб бошқа гелийсимон атомлар учун ҳам қўлланишига эга) ядроси ҳисоблаш системанинг бошланишига қўйилган бўлсин (69.1-расм). Ҳар иккала электроннинг ҳолати, спинини ҳисобга олмаганимизда, учта фазовий квант сонлари n, l, m ларга қиймат бериш билан топилади. Фараз қилайлик, биринчи электроннинг фазодаги ҳолати n_1, l_1, m_1 квант сонлари ва $\vec{r}_1$ радиус вектори билан, иккинчи электроннинг ҳолати эса n_2, l_2, m_2 квант сонлари ва $\vec{r}_2$ радиус вектори билан аниқлансин. Соддароқ ёзиш мақсадида n_1, l_1 ва m_1 квант сонларини q_1 билан n_2, l_2 ва m_2 ни эса q_2 билан белгилаймиз. Электронлар ҳолатини аниқлаш учун одатдагидек Шредингернинг стационар тенгламасини ечиш лозим:

$$(E - \mathcal{H}^0 - U')\,\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0. \quad (69.1)$$

69.1-расм. Гелийсимон атомнинг схематик тасвири.

Бу ерда $E = -\sum_{j=1,2} \frac{RhZ^2}{n_j^2}$ — электронлар энергияларнинг йиғиндиси, $\mathcal{H}^0 = \sum_{j=1,2} \mathcal{H}_j$ — қўзғалишини ҳисобга олмагандаги гамильтониан, $\mathcal{H}_j = T_j + U_j$, $T_j = \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\hbar}{i}\Delta_j\right)^2$ —кинетик энергия оператори, $U_j = -\frac{Ze^2}{r_j}$ — потенциал энергия $U' = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{e^2}{r_{12}}$ — ҳар иккала электроннинг кулон қонунига биноан ўзаро таъсир энергияси

$\psi(\vec{r}, \vec{r}_2)$ биринчи ва иккинчи электроннинг координатига боғлиқ бўлган умумий тўлқин функцияси бўлиб, нормаланганлик шартини қаноатлантиради:

$$\int\int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,dV_1\,dV_2 = 1 \qquad (69.2)$$

Интеграллар ҳар бир электроннинг координати бўйича ҳисобланади. (69.1) тенгламани умумий ҳолда ечиш катта математик қийинчиликларга эга. Шунинг учун уни тақрибий ҳисоблаймиз. Шредингер тенгламасини тақрибий ҳисоблашлардан бири қўзғалиш назариясидир (VIII боб). Агар ҳар иккала электроннинг ўзаро таъсир энергияси U' ҳисобга олинмаса, у ҳолда электронлар ҳаракат қилаётган потенциал майдон фақат ҳар бир электроннинг ядро билан ўзаро алоқасига боғлиқ. Бу ҳолда (69.1) тенгламанинг ечими учун водородсимон атомлар назариясидан фойдаланса бўлади. Аммо бу йўл билан аниқланган гелий атомининг энергетик структураси тажриба натижаларига мос келмайди.

Қўзғалиш назариясига биноан (69.1) тенгламани қуйидаги

$$U_j \gg U' \qquad (69.3)$$

тенгсизлик ўринли бўлганда ечиш тўғри бўлади. Бу ҳолда ҳар иккала электроннинг кулон қонунига биноан ўзаро таъсир энергияси U' ҳар бир электроннинг ядро билан алоқа энергияси U_j дан жуда кичик бўлиб, электронларнинг бир-бирига боғлиқ бўлмагандаги ҳаракат потенциал энергиясига кичик бир тузатиш бўлади (ҳолатни кичик миқдорда қўзғатади.)

Маълумки, бирор тенгламани қўзғалиш назариясига биноан ечиш учун унинг нолинчи яқинлашишидаги (яъни қўзғалишини ҳисобга олмагандаги) ечимини билиш керак. Нолинчи яқинлашиши учун ($U' = 0$) (69.1) тенгламани қуйидагича ёзиш мумкин:

$$(E^0 - \mathscr{H}^0)\,\psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0. \qquad (69.4)$$

Бу ерда: $E^0 = E_{n_1} - E_{n_2}$ — ўзаро таъсир этишмайдиган ҳар иккала электрон энергияларининг йиғиндиси, $\mathscr{H}^0 = \mathscr{H}_1 + \mathscr{H}_2$ ҳар иккала электрон гамильтонианларининг йиғиндиси. $\psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ҳар иккала электроннинг умумий тўлқин функцияси. Нолинчи яқинлашишда электронлар бир-бирларига дахлсиз бўлганликлари сабабли ψ^0 функцияни иккита мустақил функцияларнинг кўпайтмаси сифатида ифодалаш мумкин:

$$\psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_1 = \psi_{q_1}(\vec{r}_1)\,\psi_{q_2}(\vec{r}_2). \qquad (69.5)$$

Бу ечим биринчи электрон координатаси $\vec{r}_1$ радиус-вектор билан, квант сонлари q_1 билан, иккинчи электрон эса $\vec{r}_2$, q_2 катталиклар билан аниқланишини кўрсатади. Шунингдек, ҳар иккала электроннинг ўринлари алмашган ҳол ҳам бўлиши мумкин. У ҳолда ечим қуйидагича ёзилади:

$$\psi^0(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \varphi_2 = \psi_{q_1}(\vec{r}_2)\,\psi_{q_2}(\vec{r}_1). \qquad (69.6)$$

Бу ҳолда биринчи электрон ҳолати $\vec{r}_1$ радиус-вектор ва q_2 квант сонлари билан, иккинчи электрон ҳолати эса $\vec{r}_2$ радиус-вектор ва q_1 квант сонлари билан аниқланади. (69.5) ва (69.6) лардан кўринадики, $\vec{r}_1$ ни $\vec{r}_2$ билан ва $\vec{r}_2$ ни $\vec{r}_1$ билан алмаштирсак, φ_1 функция φ_2 га, φ_2 функция φ_1 га айланади.

Демак, электронларнинг айнан бир хиллиги туфайли ҳолат қўшимча турланган бўлади. Ҳар иккала электрон битта ҳолатда бўлса, бу турланиш йўқолади ва уларнинг ҳолати битта функция билан аниқланади:

$$\varphi_1 = \varphi_2 = \psi_{q_1}(\vec{r}_1)\,\psi_{q_2}(\vec{r}_2). \qquad (69.7)$$

$q_1 \neq q_2$ бўлганда система φ_1 ва φ_2 ҳолат функциялари билан аниқланганлиги учун суперпозиция принципига биноан нолинчи яқинлашишдаги умумий ечимни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi^0 = C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2. \qquad (69.8)$$

Бу ердаги C_1 ва C_2 коэффициентлар нолинчи яқинлашишдаги ечимларнинг нормаланганлик шартига биноан ўзаро боғланган:

$$\int\!\!\int \psi^{0*}\psi^0\,dV_1 dV_2 = 1. \qquad (69.9)$$

Маълумки, (29-§) $|C_1|^2$ биринчи электронни q_1 квант сонлар билан характерланувчи ҳолатда $\vec{r}_1$ координата атрофида топилиш эҳтимоллигини, иккинчи электронни q_2 квант сонлари билан характерланувчи $\vec{r}_2$ координата атрофида топилиш эҳтимоллигидир. $|C_2|^2$ эса уларнинг ўрин алмашган ҳолатда, яъни биринчи электрон $\vec{r}_2$ координат атрофида, иккинчи электрон эса $\vec{r}_1$ координат атрофида топилиш эҳтимоллигидир. Қўзғалиш назариясига биноан (69.1) тенгламанинг ечимини ва унга мос энергияни биринчи яқинлашишда қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\psi = \psi^0 + \psi', \tag{69.10}$$

$$E = E^0 + E'. \tag{69.11}$$

Бу ерда ψ^0, E^0 (69.1) тенгламанинг нолинчи яқинлашишдаги (қўзғалишни ҳисобга олмагандаги) (69.4) кўринишдаги ечими ва унга мос келган энергиясидир. (69.10) ва (69.11) ечимларда ψ'', ψ''', ... ва E'', E''', ... ҳадлар иккинчи ва учинчи тартибли кичик қийматлар бўлганлиги сабабли уларни ташлаб юбордик (VIII боб, 59-§).

(69.10) ва (69.11) ечимларни (69.1) га қўямиз:

$$(E^0 - \mathscr{H}^0)\psi^0 + (E^0 - \mathscr{H}^0)\psi' + (E' - U')\psi^0 + (E' - U')\psi' = 0.$$

Бу ердаги биринчи ҳад (69.1) тенгламанинг нолинчи яқинлашишдаги кўриниши, охирги ҳад эса биринчи ҳадга нисбатан иккинчи тартибли кичик ҳад. Уни ташлаб юбориш мумкин. Буни ва (69.1), (69.8) ларни эътиборга олиб, охирги тенгламани қуйидагича ёзамиз:

$$(E^0 - \mathscr{H}^0)\psi' = -(E' - U')(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2). \tag{69.12}$$

Маълумки, бундай кўринишдаги бир жинсли бўлмаган тенгламанинг ўнг томони қўзғалишини ҳисобга олмагандаги бир жинсли тенгламанинг ечимларига нисбатан ортогоналдир. Қўзғалишни эътиборга олмагандаги ечимлар иккита: φ_1 ва φ_2 бўлганлиги сабабли ортогоналлик шартини иккита мустақил кўринишда ёзиш мумкин:

$$\int\int \varphi_1^* (E' - U')(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2)\, dV_1\, dV_2 = 0, \tag{69.13}$$

$$\int\int \varphi_2^* (E' - U')(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2)\, dV_1\, dV_2 = 0. \tag{69.14}$$

Юқорида қайд этганимиздек (69.14) тенгламада $\vec{r}_1$ ни $\vec{r}_2$ билан

$(\vec{r}_1 \to \vec{r}_2)$ ва $\vec{r}_2$ ни $\vec{r}_1$ билан $(\vec{r}_2 \to \vec{r}_1)$ алмаштирсак, φ_1 функция φ_2 га ва φ_2 функция φ_1 га айланади. Натижада (69.14) нинг кўриниши

$$\iint \psi_1^* (E' - U') (C_1 \varphi_2 + C_2 \varphi_1) dV_1 dV_2 = 0 \qquad (69.15)$$

бўлади. Бу ердан кўринадики, C_1 ни C_2 билан $(C_1 \to C_2)$ C_2 ни C_1 билан $(C_2 \to C_1)$ алмаштирсак, (69.15) дан (69.13) келиб чиқади. Демак, (69.13) ва (69.14) тенгламаларнинг ҳар иккиси ўрнига (69.13) ни ечиб, чиққан натижада $\vec{r}_1 \rightleftarrows \vec{r}_2$ ва $C_1 \rightleftarrows C_2$ алмаштиришлар қилсак, (69.14) тенгламанинг ечимини топган бўламиз. Шу мақсадда (69.13) га φ_1 ва φ_2 ларни қўйилик:

$$\iint \psi_{q_1}^* (\vec{r}_1) \psi_{q_2}^* (\vec{r}_2) (E' - U') [C_1 \psi_{q_1}(\vec{r}_1) \psi_{q_2}(\vec{r}_2) +$$

$$+ C_2 \psi_{q_1}(\vec{r}_2) \psi_{q_2}(\vec{r}_1)] dV_1 dV_2 = 0. \qquad (69.16)$$

Қуйидагича белгилашлар киритамиз:

$$\psi_{q_1}^* (\vec{r}_1) \psi_{q_1} (\vec{r}_1) = W_{11}(\vec{r}_1), \qquad (69.17)$$

$$\psi_{q_2}^* (\vec{r}_2) \psi_{q_2} (\vec{r}_2) = W_{22} (\vec{r}_2), \qquad (69.18)$$

$$\psi_{q_1}^* (\vec{r}_1) \psi_{q_2} (\vec{r}_1) = W_{12}(\vec{r}_1), \qquad (69.19)$$

$$\psi_{q_2}^* (\vec{r}_2) \psi_{q_1} (\vec{r}_2) = W_{21}(\vec{r}_2). \qquad (69.20)$$

Бу ердан кўриниб турибдики, $W_{11}(\vec{r}_1)$ катталик q_1 квант сонларига эга бўлган электроннинг $\vec{r}_1$ координата, $W_{22}(\vec{r}_2)$ эса q_2 квант сонли электроннинг $\vec{r}_2$ нуқта атрофида топилиш эҳтимоллик зичликларини ифодалайди. Шунингдек, $W_{12}(\vec{r}_1)$ ва $W_{21}(\vec{r}_2)$ лар ҳар иккала электронларнинг аралаш ҳолатда бўлиш эҳтимолликларига мос келган алмашинув заряди зичликларини аниқлайди, деб ҳисоблаш мумкин.

(69.7) — (69.20) белгилашларни эътиборга олиб (69.16) тенгламани қайта ёзамиз:

$$C_1 \left\{ E_1 - \iint W_{11}(\vec{r}_1) U' W_{22}(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 \right\} +$$

$$+ C_2 \iint W_{12} (\vec{r}_1) U' W_{21} (\vec{r}_2) dV_1 dV_2 = 0. \qquad (69.21)$$

Бу тенгламани ҳосил қилишда нолинчи яқинлашишдаги ечимларнинг нормаланганлик

$$\int W_{11}(\vec{r_1})\,dV_1 \int W_{22}(\vec{r_2})\,dV_2 = 1$$

ва ортогоналлик

$$\int W_{12}(\vec{r_1})\,dV_1 \int W_{21}(\vec{r_2})\,dV_2 = 0$$

шартларини эътиборга олдик.

Аниқланган (69.21) тенгламада

$$K = \iint W_{11}(\vec{r_1})\,n'W_{22}(\vec{r_2})\,dV_1dV_2 = e^2 \iint \frac{W_{11}(\vec{r_1})\,W_{22}(\vec{r_2})}{|\vec{r_1} - \vec{r_2}|}\,dV_1dV_2. \tag{69.22}$$

q_1 ва q_2 квант сонлари билан аниқланувчи ҳолатларда бўлган ҳар иккала электроннинг Кулон қонунига биноан ўзаро таъсир энергияси.

$$A = \iint W_{12}(\vec{r_1})\,U'W_{21}(\vec{r_2})\,dV_1dV_2 =$$

$$= e^2 \iint \frac{W_{12}(\vec{r_1})\,W_{21}(\vec{r_2})}{|\vec{r_1} - \vec{r_2}|}\,dV_1dV_2 \tag{69.23}$$

— ҳар иккала электроннинг аралаш q_1 ва q_2 ҳолатларда бўлиши туфайли келиб чиққан боғланиш энергияси бўлиб, уни *алмашинув энергияси* дейилади. Равшанки, K энергия классик физикада ҳам мавжуд бўлиб, зарядли заррачаларнинг электр майдон орқали ўзаро таъсир этишиш энергиясидир. Аммо алмашинув энергиясининг классик физикада ўхшатмаси йўқ, у микроолам заррачаларининг айнан ўхшашлиги туфайли, уларнинг ҳолати эҳтимоллик назарияси ёрдамида аниқланганлиги сабабли келиб чиққан бўлиб, атом ва молекулалар электрон структурасини аниқлаш учун муҳим аҳамиятга эга.

(69.22) ва (69.23) ларни эътиборга олиб (69.21) ни қайта ёзамиз:

$$C_1(E' - K) - C_2A = 0. \tag{69.24}$$

Юқорида тушунтирилганидек, (69.21) тенгламада $C_1 \rightleftarrows C_2$ алмаштириш қилсак, (69.14) тенгламадан

$$C_2(E' - K) - C_1A = 0 \tag{69.25}$$

келиб чиқади.

(69.24) ва (69.25) дан $(E' - K)^2 - A^2 = 0$ бўлиб, $E'_{1,2} = K \pm A$ натижа ҳосил бўлади. E' нинг бундай қийматларга эга бўлиши қуйидаги икки ҳолда бўлади:

а) $C_1 = C_2$, яъни электронлар ўрнини алмаштирганимизда

$(\vec{r}_1 \rightleftarrows \vec{r}_2)$ уларнинг умумий ҳолат функцияси ўз ишорасини ўзгартирмайди. Бундай хусуснятга эга бўлган тўлқин функциясини симметрик функция дейилади. Бундай тўлқин функцияси ифодалайдиган ҳолатни эса симметрик ҳолат дейилади. Юқоридагиларга асосан симметрик ҳолат учун қуйидаги натижаларни ёзиш мумкин:

$$\psi_C^0 = C_1 (\varphi_1 + \varphi_2), \tag{69.26}$$

$$E_C = E^0 + K + A; \tag{69.27}$$

б) $C_1 = -C_2$, яъни электронлар ўрни алмаштирилганда $(\vec{r}_1 \rightleftarrows \vec{r}_2)$ уларнинг умумий ҳолат функциясининг ишораси карама-қаршига ўзгаради. Бундай хусусиятга эга бўлган тўлқин функциясини антисимметрик функция, ҳолатни антисимметрик ҳолат дейилади. Антисимметрик ҳолат учун:

$$\psi_a^0 = C_1 (\varphi_1 - \varphi_2), \tag{69.28}$$

$$E_a = E^0 + K - A, \tag{69.29}$$

симметрик ва антисимметрик функциялар ҳам функциянинг нормаланганлик шарти (69.9) ни қаноатлантириши керак:

$$\iint \psi_C^{0*} \psi_C^0 dV_1 dV_2 = \iint \psi_a^{0*} \psi_a^0 dV_1 dV_2 = 1.$$

Бу ерга ψ_c^0 ёки ψ_a^0 функцияларни қўйиб φ_1 ва φ_2 ларнинг нормаланганлигини ва ўзаро ортогоналлигини эътиборга олсак, $C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ келиб чиқади. Демак, ҳолат функцияларини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\psi_C^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2), \tag{69.30}$$

$$\psi_a^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 - \varphi_2). \tag{69.31}$$

Шундай қилиб, гелий атомининг иккита электрони q_1 ва q_2 квант сонлари билан аниқланувчи икки хил ҳолатда бўлиши билан бирга улар микрооламга хос бўлган объектив хусусиятлар туфайли аралаш ҳолатда ҳам бўлиши натижасида алмашинув энергияси A келиб чиқди. Бу энергия фазовий ҳолатлари симметрик бўлган электронларнинг умумий энергиясини орттирса, фазовий антисимметрик ҳолатда бўлган электронларнинг умумий энергиясини камайтиради.

Агар гелийнинг ҳар иккала электрони бир хил фазовий квант сонлари билан ($q_1 = q_2$) аниқланувчи ҳолатда бўлишса, φ_1 ва φ_2 функциялар айнан бир хил бўладилар. Шунинг учун $\psi_a^0 = 0$ бўлиб, умумий ҳолат функцияси фақат симметрик бўлади:

$$\psi_C^0 = \sqrt{2}\,\varphi.$$

У ҳолда (69.13) ва (69.14) тенгламалар бир хил бўлиб, қуйидагича ёзилади:

$$\iint \varphi^* (E' - U')\,\varphi\, dV_1 dV_2 = 0.$$

Бу ердан $E' = K$ бўлиб, $A = 0$ эканлиги яққол кўринади. Демак, гелий атомининг ҳар икки электрони бир хил фазовий ҳолатда бўлганда улар ўртасида алмашинув энергияси келиб чиқмайди. Кулон кучи ва алмашинув энергиялари билан батафсилроқ танишайлик.

70-§. КУЛОН КУЧИ ЭНЕРГИЯСИ

Гелий атомининг электрон структурасини аниқлаш учун Шредингер тенгламасини стационар қўзғалиш назариясига биноан ечдик. Бу албатта тақрибий метод, шунинг учун хатолик бўлиши мумкин. Хатоликни баҳолаш, гелий атоми электронларининг ҳолат функциясини аниқлашда қўзғалиш назариясидан фойдаланиш қанчалик мақсадга мувофиқ эканлигини аниқлаш мақсадида Кулон кучи энергиясини ҳисоблайлик. Бунинг учун ҳар иккала электрон бир хил энг кичик энергетик ҳолатда ($n_1 = n_2 = 1$) деб ҳисоблаймиз. У ҳолда ҳар иккала электроннинг энергияси ва тўлқин функцияси мос ҳолда водородсимон атомлар назариясига биноан қуйидагиларга тенг бўлади:

$$E_1 = E_2 = -\frac{Ze^2}{2a_0}, \quad \psi_1(\vec{r}_1) = \psi_2(\vec{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr_1/a_0}$$

$$\psi_2(\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr_2/a_0} = \psi_1(\vec{r}_2). \qquad (70.1)$$

Бу ерда a_0 — биринчи Бор радиуси.

Бу функцияларни Кулон кучи энергияси

$$K = e^2 \iint \frac{W_{11}(\vec{r}_1)\, W_{22}(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, dv_1 dv_2 \qquad (70.2)$$

га қўямиз ва интегрални ҳисоблаймиз.

(70.1) ни ҳисобга олсак,

$$W_{11}(\vec{r_1}) = \psi_1^2(\vec{r}),\ W_{22}(\vec{r_2}) = \psi_2^2(\vec{r})$$

бўлади. Маълумки, $|\vec{r_1} - \vec{r_2}| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta}$ бўлиб, бу ерда θ $\vec{r_1}$ ва $\vec{r_2}$ радиус-векторлар орасидаги бурчак. Фараз қилайлик, $\vec{r_1}$ вектор Z ўқ бўйлаб йўналган бўлсин. Буларни эътиборга олиб, (70.1) функцияларни (70.2) га қўйиб интегрални $0 \leqslant r_1 \leqslant \infty$ ва $r_1 \leqslant r \leqslant \infty$ оралиқда ҳисобласак, қўзғалиш энергияси

$$K = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a_0}. \tag{70.3}$$

келиб чиқади. У ҳолда электронларнинг тўла энергияси қуйидагига тенг бўлади:

$$E = E^0 + K = 2E_1 + K = -\frac{Z^2e^2}{a_0} + \frac{5}{8} Z\frac{e^2}{a_0}. \tag{70.4}$$

Бу аниқланган натижанинг тўғрилигини ёки тажрибага қанчалик яқин келишини баҳолаш учун гелий атомининг бир каррали ионлаштириш учун зарур бўлган энергияни топайлик.

Гелий атоми бир каррали ионлашганда, ундаги битта электроннинг ядро билан боғланиш энергияси

$$E_1 = -\frac{Z^2e^2}{2a_0} \tag{70.5}$$

бўлади. (70.4) формула эса ионлашмаган гелийдаги электронларнинг тўла энергияси бўлади. Демак, (70.5) билан (70.4) нинг фарқи гелий атомини бир каррали ионлаштириш учун керак бўлган энергияни назарий ҳисоблашга имкон беради

$$E^{\text{ион}}_{\text{наз}} = E_1 - E = \frac{e^2_0}{2a_0} Z\left(Z - \frac{5}{4}\right). \tag{70.6}$$

Гелий учун $Z = 2$ эканлигини ҳисобга олсак, (70.6) дан

$$E^{\text{ион}}_{\text{наз}} = 0{,}75 \frac{e_0^2}{a_0} = 20{,}40\,\text{эВ} \tag{70.7}$$

келиб чиқади. Тажрибада эса

$$E^{\text{ион}}_{\text{наз}} = 0{,}9 \frac{e^2}{a_0} = 24{,}48\ \text{эВ}. \tag{70.8}$$

Атом физикасида бу фарқ катта ҳисобланади. Унинг пайдо бўлиши гелий атоми электрон структурасини аниқлаш учун қўзғалиш назариясидан фойдаланиш қўполлигини, унинг аниқлик даражаси кичиклигини кўрсатади. Ҳақиқатан, мазкур масалани ҳал қилишда қўзғалиш назариясидан фойдаланиш учун $U \gg U'$ бўлиши ёки

$$|E^0| \gg K \tag{70.9}$$

тенгсизлик бажарилиши керак. Бу ерга энергияларнинг қийматларини қўйсак,

$\left|\frac{4e^2_0}{a_0}\right| \gg \frac{5}{4}\frac{e^2}{a_0}$ ёки $16 \gg 5$ ҳосил бўлади.

Кўриниб турибдики, 16 га нисбатан 5 жуда кичик эмас. Шунинг учун қўзғалиш назарияси тажрибага яқин натижа бермайди. Аммо қўзғалиш назарияси, анча кўргазмали ва алмашинув энергиясининг моҳиятини тушунишга имкон беради.

Математикада тақрибий ҳисоблашнинг яна бир методи — танлаш (вариация) методи бор. Унинг кўргазмалилиги яхши бўлмагани билан тажрибага яқин натижаларни ҳосил қилиш мумкин. Ритц, Хиллеранс ва бошқалар вариация методидан фойдаланиб гелий атомининг ионлашиш энергияси учун қуйидаги натижани аниқлашди:

$$E^{\text{ион}}_{\text{наз}} = 0{,}85\frac{l^2_0}{a_0} = 23{,}12\text{эВ}.$$

Бу тажриба натижаларига анча яқиндир.

Қўзғалиш назарияси, вариация методидан ташқари яна бошқа мураккаброқ тақрибий ҳисоблаш усуллари (Хартри — Фок методи, статистик метод, Томас — Ферми методи) ҳам бор. Уларнинг ҳар бири тажрибага янада яқинроқ натижа олишга имкон беради.

71-§. АЛМАШИНУВ ЭНЕРГИЯСИ

Юқорида қайд этганимиздек гелий атомининг электрон структурасини квант механикаси нуқтаи назаридан аниқлашимизда электронлар ўртасида классик физика учун ёд бўлган янги алоқа энергияси — алмашинув энергияси тушунчаси пайдо бўлди. Унинг физик моҳияти билан, микроолам учун аҳамияти билан батафсилроқ танишайлик. Бунинг учун гелий атомида электронларнинг умумий тўлқин функцияси вақт ўтиши билан қандай ўзгаришини кузатамиз. Симметрик ва антисимметрик ҳолатлар учун уларни қуйидагича ёзамиз:

$$\Psi_c(t) = \psi_c e^{-\frac{i}{\hbar}E_c t}, \quad \Psi_a(t) = \psi_a e^{-\frac{i}{\hbar}E_a t}, \qquad (71.1)$$

Бу ерда Ψ_c ва Ψ_a —мос ҳолда симметрик ва антисимметрик функцияларининг фақат координатга боғлиқ бўлган қисми бўлиб, 70-§ да аниқланган эди:

$$\psi_c = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2), \quad \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_2). \qquad (71.2)$$

Бу ерда

$$\varphi_1 = \psi_{q_1}(\vec{r}_1)\,\psi_{q_2}(\vec{r}_2), \quad \varphi_2 = \psi_{q_1}(\vec{r}_2)\,\psi_{q_2}(\vec{r}_1).$$

(71.1) формуладаги E_c ва E_a лар мос ҳолда симметрик ва антисимметрик ҳолатлардаги ҳар иккала электроннинг умумий энергияси бўлиб, Шредингер тенгламасини қўзғалиш назариясига биноан ечиш туфайли аниқланган

$$E_c = E^0 + K + A, \quad E_a = E^0 + K - A. \qquad (71.3)$$

Қуйидагича белгилашлар киритамиз:

$$E^0 + K = \hbar\omega, \quad A = \hbar\delta.$$

У ҳолда (71.1) функцияларни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\Psi_c(t) = \psi_c e^{-i\omega t - i\delta t}, \quad \Psi_a(t) = \psi_a e^{-i\omega t + i\delta t}. \qquad (71.4)$$

Маълумки, бирор система $\Psi_c(t)$ ва $\Psi_a(t)$ ҳолатларда бўла олса, у ҳар иккала ҳолатнинг суперпозициясидан иборат бўлган қуйидаги учинчи бир ҳолатда ҳам бўлиши мумкин:

$$\Psi(t) = C_c\Psi_c(t) + C_a\Psi_a(t). \qquad (71.5)$$

Бу функциянинг вақт ўтиши билан ўзгаришини кузатайлик. Фараз қилайлик, дастлаб, яъни $t = 0$ да биринчи электрон q_1 квант сонлари билан характерланувчи, иккинчи электрон эса q_2 квант сонлари билан характерланувчи ҳолатларда бўлсин. У ҳолда системанинг умумий функцияси φ_1 бўлади:

$$\psi(0) = C_c\psi_c(0) + C_a\psi_a(0) = \varphi_1.$$

Бу ерга $\psi_c(0)$ ва $\psi_a(0)$ ларни (71.2) дан қўямиз:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(C_c + C_a)\varphi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}(C_c - C_a)\varphi_2 = \varphi_1. \qquad (71.6)$$

Бу тенглик бажарилишн учун $C_c = C_a$ бўлиши керак. У ҳолда (71.6) дан

$$C_c = C_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (71.7)$$

келиб чиқади. Буни ва (71.4) ни (71.5) формулага қўйиб, $e^{ix} = \cos x + i \sin x$ Эйлер формуласини эътиборга олсак, қуйидаги натижа ҳосил бўлади.

$$\Psi(t) = e^{-i\omega t}(C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2). \quad (71.8)$$

Бу ерда

$$C_1 = \cos \delta t, \; C_2 = -i \sin \delta t. \quad (71.9)$$

Равшанки, C_1 ва C_2 коэффициентлар қуйидаги нормаланганлик шартини қаноатлантиради:

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1. \quad (71.10)$$

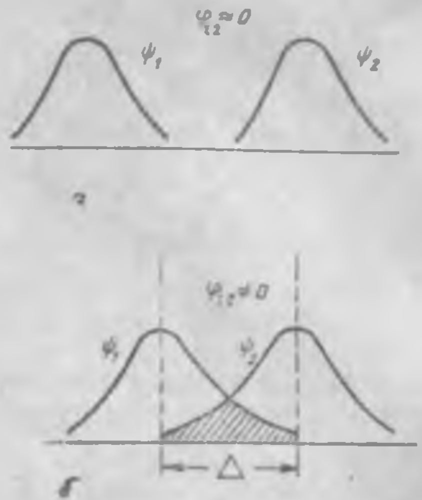
Бошланғич ҳолатда, яъни $t = 0$ да (71.9) муносабатлардан кўринадики, $C_1 = 1$ ва $C_2 = 0$ бўлади. Юқорида қабул қилганимиздек, биринчи электрон q_1, иккинчи электрон эса q_2 ҳолатда бўлади. Энди қанча вақтдан сўнг бу электронларнинг ўрни алмашишини, яъни биринчи электрон q_2, иккинчи электрон эса q_1 квант сонлари билан аниқланувчи ҳолатда бўлишини топайлик. (71.9) муносабатлардан кўриниб турибдики,

$$\delta t = \delta\tau = \frac{\pi}{2} \quad (71.11)$$

бўлганда $C_1 = 0$ ва $C_2 = -i$ бўлиб, (71.10) га биноан $|C_2| = 1$ келиб чиқади, яъни электронлар ўринларини алмаштиришади, уларнинг ҳолати φ_1 функция билан эмас, φ_2 функция билан аниқланади. (71.11) га δ нинг қийматини қўйиб, қуйидагини топамиз:

$$\tau = \frac{\pi}{2\delta} = \frac{\pi\hbar}{2A}. \quad (71.12)$$

Бу гелий атомида икки хил q_1 ва q_2 ҳолатда бўлган электронларнинг ўрин алмаштиришлари учун кетган вақт бўлиб, алмашинув энергиясига тескари пропорционал экан. Агар алмашинув энергияси $A = 0$ бўлса $\tau = \infty$ бўлиб, электронлар ўринларини умуман алмаштирмайдилар. Шуни эътиборга олиш кераки, алмашинув энергиясининг келиб чиқиши заррачанинг тўлқин хусусиятга эга эканлиги ва шу туфайли уларнинг фазодаги ҳолати маълум эҳтимоллик билан аниқланиши натижасидадир.



71.1-расм. Икки заррача тўлқин функцияларини фазовий ўзаро кириишмаган (*а*) ва қопланган (*б*) холларининг схематик тасвири.

71.1-расмда заррачанинг бир ўлчовли фазода топилиш эҳтимоллик зичлигининг тақсимоти келтирилган: а) ҳолатда заррачалар бир-бирига нисбатан шундай масофада жойлашганки, уларнинг тўлқин хоссалари бир-бирига даҳлсиздир; б) расмда эса ҳар иккала электрон шундай масофада жойлашганки, уларнинг тўлқинлари бир-бирини қисман қоплайди. Бундай соҳада (Δ) электронлар аралаш ҳолатда бўлади. Ҳисоблашларга кўра, гелий атомининг электронлари 1*s* ва 2*s* ҳолатларда бўлганда, улар $\tau \sim 10^{-15}$ с да ўрин алмаштириб турадилар. Агарда бу электронлар 1*s* ва 10*s* да жойлашган бўлсалар, алмашинув вақти бир неча йилга тенг бўлади.

72-§. МОМЕНТЛАРНИ ҚЎШИШ

Маълумки, атомда ядро ҳам, электронлар ҳам моментларга эга. Аммо ядро моментлари электрон моментларидан жуда кичик бўлганлиги сабабли ($\sim 10^3$ марта) улар электрон ҳолатига таъсир этмайди. Шунинг учун атомда моментларни қўшиш деганда ундаги электрон моментларини қўшишни тушунамиз. Ўз навбатида электрон моментлари орбитал, яъни уларнинг орбитал ҳаракати билан боғлиқ бўлган моментларга (M, M_z) ва хусусий моментларга (S, S_z) бўлинади. Уларни классик физикадаги векторларни қўшишга ўхшатиб қўшиб бўлмайди. Моментларни қўшишда уларнинг квантлашишини эътиборга олишимиз керак.

Квант механикаси нуқтаи назаридан векторлар шундай қўшилиши керакки, уларнинг алгебраик йиғиндиси бутун сон бўлса, вектор йиғиндиси ҳам бутун сон бўлиб чиқиши керак: алгебраик йиғинди ярим бутун бўлса, вектор йиғинди ҳам шундай бўлиши керак. Бунинг учун векторлар маълум бурчаклар остида қўшилишлари лозим. Атомда электронлар моментларини қўшишнинг икки хил усули бор:

1. MS-боғланиш. Бунда ҳар бир электрон орбитал моментлари (M_1, M_2, ... , M_N) алоҳида қўшилиб умумий орбитал момент аниқланади:

$$\vec{M} = \vec{M}_1 + \vec{M}_2 + \ldots + \vec{M}_N. \qquad (72.1)$$

Электронлар спинлари алоҳида қўшилиб, умумий спин топилади:

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \ldots + \vec{S}_N.$$

Бу ерда N — атомдаги электронлар сони. Сўнгра умумий орбитал момент ва спин қўшилиб, натижавий момент аниқланади:

$$\vec{I} = \vec{M} + \vec{S}. \qquad (72.2)$$

Моментларни бундай қўшиш методига Рассель — Саундерс ёки MS-усули дейилади.

2. j, j-боғланиш. Бу усулга мувофиқ атомда ҳар бир электроннинг орбитал моменти ва спини алоҳида қўшилиб битта электрон учун умумий момент j топилади:

$$\vec{j}_i = \vec{M}_i + \vec{S}_i \quad (i = 1 \div N). \qquad (72.3)$$

Сўнгра барча электронларнинг умумий моментлари ўзаро қўшилиб атомнинг натижавий моменти $\vec{I}$ аниқланади:

$$\vec{I} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2 + \ldots + \vec{j}_N. \qquad (72.4)$$

Бундай методга j—j усули дейилади. Ҳар икки усулда аниқланган моментлар ўзаро тенг эмас:

$$\vec{M} + \vec{S} \neq \vec{j}_1 + \vec{j}_2 + \ldots + \vec{j}_N. \qquad (72.5)$$

Моментларни қўшишнинг қандай усулидан фойдаланиш электроннинг спин — орбитал ўзаро таъсир энергияси E^{c-o} билан электронлар ўртасидаги Кулон кучига боғлиқ бўлган ўзаро таъсир энергияси K орасидаги нисбатга боғлиқ. Агар спин орбитал ўзаро таъсир энергия кулон кучи энергиясидан ортиқ бўлса ($E^{c-o} > K$), моментли j — j усули билан қўшиш лозим. Бу кўп электронли атомларда кузатилади.

Спин орбитал ўзаро таъсир энергияси E^{c-o} электронларнинг ўзаро таъсир энергияси K дан кичик бўлса ($E^{c-o} < K$)

уларнинг моментларини MS-усули билан қўшиш лозим. Енгил атомларда умумий моментлар шу усул билан топилади. Масалан, гелий атоми учун

$$E^{c-0} \simeq 16Rh\alpha^2, \qquad (72.6)$$

$$K \simeq 2Rh. \qquad (72.7)$$

Бу ерда $\alpha \simeq 1/137$. Демак, гелий атоми электронлари учун $E^{c-0} < K$ шарт ($1 < 2346$) жуда яхши бажарилади ва шунинг учун моментлар MS усули билан қўшилиши керак.

Шундай қилиб, гелий атомида иккита электроннинг умумий моменти Рассель — Саундерс усули билан қўшилиши керак. Уни аниқлайлик. Электроннинг орбитал моментларини мос ҳолда $\vec{M}_1$ ва $\vec{M}_2$ ва спинларини $\vec{S}_1$ ва $\vec{S}_2$ деб белгилаймиз. Биринчи пунктда баён қилинган қоидага мувофиқ электронларнинг умумий орбитал моменти

$$\vec{M} = \vec{M}_1 + \vec{M}_2. \qquad (72.8)$$

Умумий спин

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2. \qquad (72.9)$$

73-§. ГЕЛИЙ АТОМИДА ЭЛЕКТРОН СПИНИНИ ҲИСОБГА ОЛИШ

Атомда электроннинг тўлқин функцияси унинг фазовий квант сонларига (nlm), хусусий ҳаракат миқдори моментига ($\vec{S}$) ва координатага ($\vec{r}$) боғлиқ $\psi(nlm, \vec{S}, \vec{r})$. Соддароқ ёзиш мақсадида аввалгидек фазовий квант сонларини q билан белгилаймиз. У ҳолда электроннинг умумий тўлқин функциясини $\psi(q, \vec{S}, \vec{r})$ кўринишида ёзиш мумкин. Бу функция, одатда, заррачанинг тўлқин корпускуляр хусусиятини эътиборга олувчи ҳаракат тенгламасини ечиш туфайли аниқланиши лозим. Биз ҳозирча бундай тенгламалардан Шредингер тенгламасини биламиз. Аммо Шредингер тенгламаси заррачанинг спинини эътиборга ололмайди. Шунга қарамасдан унинг ечимидан электроннинг спини ҳисобга олинган ҳолда ҳам фойдаланиш мумкин.

Ўтган параграфда (72-§) аниқладикки, гелий атоми электронларининг умумий моменти MS қоидасига биноан қўшилади. Бу қоида электроннинг спин орбитал ўзаро таъсири кучсиз бўлганда тўғрилигини тушундик. Демак, гелий атоми электронларининг спин ҳолати уларнинг орбитал ҳаракатига тахминан боғлиқ эмас. Шунинг учун орбитал ҳаракатга ва спин ҳолатга боғлиқ бўлган $\psi(q, \vec{S}, \vec{r})$ функцияни бир-бирига боғлиқ бўлмаган иккита мустақил функцияларнинг кўпайтмасидан иборат қилиб ёзиш мумкин:

$$\psi(q, \vec{S}, \vec{r}) = \psi_q(\vec{r}) \cdot \varphi(\vec{S}). \tag{73.1}$$

Бу ерда $\psi_q(\vec{r})$ — электроннинг фазовий ҳолатига боғлиқ бўлган функция бўлиб Шредингер тенгламасининг ечимидир.

$\varphi(\vec{S})$ — спин функцияси бўлиб, электрон хусусий ҳаракат миқдор моментининг фазодаги вазиятига боғлиқ. Спин функциясининг турли кўринишлари 59-§ да аниқланган.

74-§. УМУМИЙ ТЎЛҚИН ФУНКЦИЯСИ

Гелий атомининг ҳар иккала электрони учун умумий тўлқин функциясини (73.1) дан фойдаланиб қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\psi(q_1, \vec{S_1}, \vec{r_1}; q_2, \vec{s_2}, \vec{r_2}) = \psi_{q_1 q_2}(\vec{r_1}, \vec{r_2})\,\varphi(\vec{S_1}, \vec{S_2}). \tag{74.1}$$

Бу ерда $\psi_{q_1 q_2}(\vec{r_1}, \vec{r_2})$ ва $\varphi(\vec{S_1}, \vec{S_2})$ ҳар иккала электроннинг умумий фазовий ва умумий спин функцияси. Электронлар фермионлар бўлганликлари сабабли уларнинг (74.1) умумий тўлқин функцияси фақат антисимметрик бўлиши керак. Иккита функциянинг кўпайтмаси антисимметрик бўлиши учун албатта уларнинг бири симметрик, иккинчиси антисимметрик бўлиши шарт (иккаласи антисимметрик бўлса, кўпайтмаси симметрик функция бўлади):

$$\psi^{a}(q_1, \vec{S_1}, \vec{r_1}; q_2, \vec{S_2}, \vec{r_2}) = \psi^{a}_{q_1 q_2}(\vec{r_1}, \vec{r_2})\,\varphi^{c}(\vec{S_1}, \vec{S_2}), \tag{74.2}$$

$$\psi^{a}(q_1, \vec{S_1}, \vec{r_1}; q_2, \vec{S_2}, \vec{r_2}) = \psi^{c}_{q_1 q_2}(\vec{r_1}, \vec{r_2})\,\varphi^{a}(\vec{S_1}, \vec{S_2}). \tag{74.3}$$

Демак, иккита электроннинг фазовий функцияси антисимметрик бўлса, уларнинг спин функцияси албатта симметрик (электронларнинг спинлари бир томонга йўналган) (74.3) ва аксинча фазовий функциялари симметрик бўлса спин функциялари албатта антисимметрик (электронларнинг спинлари қарама-қарши) (74.4) бўлишлари керак. Фазовий функциянинг симметрик ва антисимметрик кўринишлари маълум (69-§).

$$\psi^{c}_{q_1 q_2}(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2), \tag{74.4}$$

$$\psi^{a}_{q_1 q_2}(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_2). \tag{74.5}$$

Бу ерда

$$\varphi_1 = \psi_{q_1}(\vec{r_1})\,\psi_{q_2}(\vec{r_2}),\ \varphi_2 = \psi_{q_1}(\vec{r_2})\,\psi_{q_2}(\vec{r_1}) \qquad \text{ва}$$

электрон спинлари ҳам бир-бирига даҳлсиз. Шунинг учун ҳар иккала электроннинг умумий спин функцияси ҳар бир электрон спин функциясининг кўпайтмасидан иборат қилиб ёзиш мумкин:

$$\varphi(\vec{S_1}, \vec{S_2}) = \varphi_2(\vec{S_1})\,\varphi_2(\vec{S_2}). \tag{74.6}$$

Бу функцияни симметрик ва антисимметрик кўринишда қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\varphi^{c}_{1}(\vec{S_1}, \vec{S_2}) = \varphi_1\left(\frac{1}{2}\right)\varphi_2\left(\frac{1}{2}\right), \tag{74.7}$$

$$\varphi^{c}_{2}(\vec{S_1}, \vec{S_2}) = \varphi_1\left(-\frac{1}{2}\right)\varphi_2\left(-\frac{1}{2}\right), \tag{74.8}$$

$$\varphi^{c}_{3}(\vec{S_1}, \vec{S_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_1\left(\frac{1}{2}\right)\varphi_2\left(-\frac{1}{2}\right) + \varphi_1\left(-\frac{1}{2}\right)\varphi_2\left(\frac{1}{2}\right)\right], \tag{74.9}$$

$$\varphi^{a}(\vec{S_1}, \vec{S_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_1\left(\frac{1}{2}\right)\varphi_2\left(-\frac{1}{2}\right) - \varphi_1\left(-\frac{1}{2}\right)\varphi_2\left(\frac{1}{2}\right)\right]. \tag{74.10}$$

Барча симметрик спин функцияларида ҳар иккала электроннинг спини бир томонга, антисимметрик спин функциясида қарама-қарши томонга йўналгандир. Юқоридаги спин функцияларига қуйидаги спин операторлари

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}\hbar(\sigma_{z_1} + \sigma_{z_2}), \tag{74.11}$$

$$\hat{S}^2 = \hbar^2\left[\frac{3}{2} + \frac{1}{2}(\vec{\sigma_1}, \vec{\sigma_2})\right] \tag{74.12}$$

билан таъсир этсак, қуйидаги натижалар келиб чиқади:

$$\hat{S}_z\,\varphi^{c}_{1}(\vec{S_1}, \vec{S_2}) = \hbar\,\varphi^{c}_{1}(\vec{S_1}, \vec{S_2}), \tag{74.13}$$

$$\hat{S}_z\,\varphi^{c}_{2}(\vec{S_1}, \vec{S_2}) = -\hbar\,\varphi^{c}_{2}(\vec{S_1}, \vec{S_2}), \tag{74.14}$$

$$\hat{S}_z\,\varphi^{c}_{3}(\vec{S_1}, \vec{S_2}) = 0, \tag{74.15}$$

$$\widehat{S}^2 \varphi^c_{1,2,3}(\vec{S}_1, \vec{S}_2) = \hbar^2 S(S+1)\varphi^c_{1,2,3}(\vec{S}_1, \vec{S}_2), \qquad (74.16)$$

$$\widehat{S}_z \varphi^a = 0, \qquad (74.17)$$

$$S^2 \varphi^a = 0. \qquad (74.18)$$

(74.13) ифода ҳар иккала электрон спини Z ўқи бўйлаб, (74.4) ифода эса спинларнинг Z ўқига тескари ва ниҳоят (74.5) электрон спинларининг ўқига тик йўналганлигини билдиради. (74.16) натижа симметрик функцияда ҳар иккала электронлар спинлари ўзаро параллел эканлигини, (74.17) ва (74.18) лар эса антисимметрик функцияда электронлар спини қарама-қарши йўналганлигини билдиради.

Агар ҳар иккала электрон бир хил ҳолатда $q_1 = q_2$ ($\varphi_1 = \varphi_2$) бўлса, (74.5) га биноан антисимметрик фазовий функция нолга тенг бўлади. Шунинг учун бу ҳолда (74.3) га биноан спинни ҳисобга олувчи умумий функция фақат симметрик фазовий ва антисимметрик (74.10) спин функцияларидан иборат бўлади:

$$\psi_a(q_1, \vec{S}_1, \vec{r}_1; q_2, \vec{S}_2, \vec{r}_2) = \psi^a_{q_1 q_2}(r_1 r_2)\varphi^c_3(\vec{S}_1, \vec{S}_2).$$

Шундай қилиб, гелий атоми электронларининг спинини ҳисобга олувчи умумий тўлқин функцияларини аниқладик. Бу функциялар (74.2) ва (74.3) га мувофиқ икки хил бўлар экан: биринчиси — (74.2) электронлар координаталарини алмаштиришга нисбатан антисимметрик бўлиб, спинлари бир томонга йўналган (йиғиндиси бирга тенг) дир. Бундай ҳолдаги гелий атомига ортогелий (74.1-расм) дейилади, иккинчиси (74.2), электронлар ўрнини алмаштиришга нисбатан симметрик бўлиб электронларнинг спини қарама-қарши йўналгандир (йиғиндиси нолга тенг). Бундай ҳолдаги гелий

74.1-расм. Гелий атомида электронлар спинларининг йўналиши.

атомига парагелий дейилади. Ҳар иккала турдаги гелий атомлари тажрибада кузатилган ва улар ўз-ўзидан бири иккинчисига айланмайди.

75-§. ГЕЛИЙ АТОМИНИНГ ЭНЕРГЕТИК СПЕКТРИ

Аввалги параграфларда ўрганилган натижалардан фойдаланиб гелий атомида электронларнинг энергетик сатҳларини аниқлайлик. Бу сатҳлар электронлар моментларининг қўшиш тартибига, натижасига бевосита боғлиқ. Маълумки, гелий атомида моментлар MS-усули билан (72-§) қўшилади ва умумий момент $\vec{I}$ аниқланади:

$$\vec{I} = \vec{M} + \vec{S}. \quad (75.1)$$

Бу ерда $\vec{S}$ — электронлар спинларининг йиғиндиси, $\vec{M}$ орбитал моментларининг йиғиндиси:

$$\vec{M} = \vec{M}_1 + \vec{M}_2. \quad (75.2)$$

Юқорида қайд этилганидек L қуйидаги қийматларни олиши мумкин:

$$M = l_1 + l_2,\ l_1 + l_2 - 1,\ \ldots,\ |l_1 - l_2|. \quad (75.3)$$

Электронларнинг умумий орбитали моменти M нинг қийматига қараб ҳолатлар алоҳида номланади:

$M = 0$ s — ҳолат,
$M = 1$ P — ҳолат
$M = 2$ D — ҳолат
$M = 3$ F — ҳолат ва ҳоказо

(орбитал квант сонининг қийматига қараб битта электроннинг энергетик ҳолати ҳам шунга ўхшаш фақат кичик ҳарфлар билан номланар эди).

Фараз қилайлик $l_1 = l_2 = 1$ бўлсин, яъни у ҳар иккала электрон p ҳолатда (аммо бош квант сони n турлича) дейлик. У ҳолда умумий орбитал момент қуйидаги қийматларга тенг бўлади (75.1-расм):

а) $M = 2$, агар ҳар иккала

75.1-расм. Гелий атомида электронлар орбитал моментларининг қўшилиши.

электроннинг орбитал моментлари ўзаро параллел бўлса ($\vec{M}_1 \uparrow\uparrow \vec{M}_2$);

б) $M = 1$, агар ҳар иккала электрон орбитал моментлари орасидаги бурчак 60° бўлса,

$$M = l_1 + l_2 - 1 = 1;$$

в) $M = 0$, агар ҳар иккала электрон орбитал моментлари бир-бирига антипараллел (қарши) йўналган бўлса,

$$M = l_1 + l_2 - 2 = 0.$$

Электрон сатҳ қуйидагича белгиланади:

$$(n_1\ l_1;\ \ n_2\ l_2)^{\gamma}\ M_l.$$

Қавс ичида биринчи ва иккинчи ҳадлар электронларининг ҳолатлари. Қавс ташқарисида умумий орбитал момент M нинг қийматига қараб ҳолатлар кўрсатилади. Ҳолатнинг юқориги индекси γ — мультиплетлик сони, пастки индекс эса умумий момент қиймати. Шу нуқтаи назардан парагелий ва ортогелий энергетик ҳолатларининг электрон конфигурациясини ёзайлик:

Парагелий учун электронлар спинларини йиғиндиси $s = 0$. Шунинг учун мультиплетлик

$$\gamma = 2s + 1 = 1$$

бўлади. Демак, парагелий энергетик ҳолатлари синглет бўлади. Бундай атомлар магнит майдонига жойлаштирилганда нормал Зееман эффекти кузатилади.

Юқоридагиларга асосан парагелийнинг энергетик сатҳлари қуйидагича ёзилади:

$(1s,\ 1s)'\ S_0$ — биринчи электрон $1s$ ҳолатда, иккинчи электрон ҳам $1s$ ҳолатда, электронлар s ҳолатда бўлганликлари учун умумий орбитал момент $M = 0$ (қавсдан сўнг s белги), парагелийда ҳамма вақт спинлар йиғиндиси нолдир ($s = 0$). Шунинг учун умумий момент $l = 0$. Бу энг қуйи энергетик сатҳдир. $(1s,\ 2s)'\ s_0$ — биринчи электрон $1s$ ҳолатда, иккинчи электрон иккинчи сатҳнинг ($n = 2$) s ҳолатида ($l_2 = 0$), шунинг учун моментларнинг йиғиндисида ўзгариш йўқ.

$(1s\ 2p)'\ P$ — биринчи электрон аввалги ҳолатида, иккинчи электрон иккинчи сатҳнинг ($n = 2$) p ҳолатида ($l_2 = 1$) маълум орбитал моментга эга. Шу сабабли умумий орбитал момент $M = 1$ га тенг (спин $s = 0$) ва умумий момент ҳам $l = 1$ га тенг. Бу парагелийнинг энг юқориги энергетик сатҳи ҳисобланади.

Ортогелий учун $s = 1$. Шунинг учун унинг мультиплетлиги $\gamma = 3$ бўлиб триплет ($M + 1$; M; $M - 1$) ҳолатларини ҳосил қилади. Унинг энергетик сатҳлари қуйидагича ёзилади:

$(1s, 2s)^3 s_1$ — биринчи электрон $1s$ ҳолатда иккинчи, электрон $2s$ ҳолатда (у $1s$ да бўла олмайди, чунки спинлари ўзаро параллел). Умумий орбитал момент нол (S) га тенг, аммо спинлар ҳисобига умумий момент 1 га тенгдир. Бу энг кичик энергетик сатҳ ҳисобланади.

$(1s, 2p)^3 P_1$ — биринчи электрон ўз ҳолатида, иккинчи электрон иккинчи сатҳ ($n = 2$) нинг p ҳолатида. Шунинг учун умумий орбитал момент $M = 1$, спин $s = 1$ ва улар ($\vec{M}$ ва $\vec{s}$) ўзаро параллел йўналганлиги учун умумий момент $I = 2$.

$(1s, 2p)^3 p_1$ бундан аввалги ҳолатнинг ўзи, фақат $\vec{M}$ ва $\vec{s}$ моментлар ўзаро 60° бурчак ҳосил қилганлиги учун умумий момент $I = 1$ га тенг.

75.2- расм. Парагелий ва ортогелийнинг энергетик сатҳлари.

$(1s\ 2p)^3 P_0$ сатҳ ҳам аввалги ҳолатнинг ўзи, фақат $\vec{M}$ ва $\vec{s}$ моментлар бир-бирига қарама-қарши йўналган. Шунинг учун умумий момент $\vec{I} = 0$. Бу энг юқориги энергетик сатҳ ҳисобланади.

Пара ва ортогелий электронларининг энергетик сатҳлари 75.2-расмда келтирилган.

XIII бобга доир масалалар

1. Икки электронли квант система заррачаларнинг ўзаро таъсири $\widehat{V}_{12}$ ни кичик қўзғалиш деб ҳисоблаб энергетик сатҳларининг алмашинув ажралишини топинг.

$$Жавоби:\ \Delta E = E_{пара} - E_{орто} = 2I_{алм},$$

$$I_{алм} = \int d^3 \vec{r}_1\, \psi_1^*(\vec{r}_1)\, \psi_2(\vec{r}_1)\, \widehat{V}_{12}\, \psi_2^*(\vec{r}_2)\, \psi_1(\vec{r}_2)\, d\vec{r}_2 .$$

2. Гелий атомининг электронлари $1s$ ва $2s$ ҳолатларда бўлгандаги алмашинув энергиясини ҳисобланг.

$$Жавоби:\ I_{алм} = 0{,}0017 \frac{Z e_0^2}{a_0} \approx 0{,}09\ эВ.$$

3. Электрон конфигурацияси $1s^1 2s^2$ бўлган атом (ион) ларнинг пара ва орто-ҳолатлари учун умумий тўлқин функцияларини ёзинг.

4. Бош квант сони турлича бўлган иккита p-электронлардан ташкил топган квант системанинг мумкин бўлган термларини кўрсатинг.

Жавоби: $^1S,\ ^3S,\ ^1P,\ ^3P,\ ^1D,\ ^3D.$

5. Электрон конфигурацияси nl^3 бўлган атомнинг электронлар йиғинди спини $S = 3/2$ га тўғри келган эркли ҳолатлари сони қанча?

$$Жавоби:\ 4 \frac{(2l+1)!}{3!\,(2l-2)!}.$$

6. ^3D ҳолатдаги атом тўлиқ механик моменти максимал қийматга эришганда спин ва тўлиқ механик момент векторлари орасидаги бурчакни топинг.

Жавоби: $35{,}2°$.

XIV БОБ

ЭЛЕМЕНТЛАР ДАВРИЙ СИСТЕМАСИНИНГ ТУЗИЛИШИ

Марказий симметрик потенциал майдонда микрозаррачанинг ҳаракати масаласининг натижалари мураккаб атомларнинг тузилишини ўрганишга имкон бериши керак. Моддаларнинг хусусиятлари уни ташкил этган атомлар структурасига узвий боғлиқ. Аммо атомда электронлар сони ортиши билан уларнинг ўзаро таъсири ҳам ортиб бораверади, уларнинг марказий симметрик майдондаги ҳолати ядродан ташқари электронларнинг жойлашишига ҳам боғлиқ бўлади. Бу фактларни эса марказий симметрик потенциал майдон учун ёзилган Шредингер тенгламасида акс эттириш мураккаб масаладир. Бу ҳол эътиборга олинганда ҳам тенгламани ечиш катта математик қийинчиликлар туғдиради. Шунинг учун мураккаб атомлар электрон структураларини аниқлашда айрим тақрибий ҳисоблашлар қилинади. Ана шундай ҳисоблашлардан фойдаланиб атом электрон қаватларининг тўлишини, даврий системада элементларнинг группаларга, даврларга бўлиб жойлашиш қонуниятини тушунтиришга ҳаракат қиламиз.

76-§. ЭЛЕКТРОН ҚАВАТЛАРНИНГ ТУЗИЛИШИ

Мураккаб атомлар электрон қаватларини тушунтириш учун мукаммал ўрганилган ягона назария — водородсимон атомлар назариясидир. Унга биноан атомда ҳар бир электроннинг ҳолати тўртта n, l, m, m_s квант сонларининг қийматлари билан аниқланади. Бош квант сони n атом ядроси атрофидаги электрон энергетик сатҳларни аниқлайди. Унинг ҳар бир қийматига мос келган ҳолатлар алоҳида номланиб, уларни электрон қаватлар дейилади:

$n = 1$, K — қават　　$n = 5$　O — қават
$n = 2$, L — қават　　$n = 6$, P — қават
$n = 3$, M — қават　　$n = 7$, Q — қават
$n = 4$, N — қават　　ва ҳ.к

Ҳар бир электрон қават орбитал квант сони l нинг қийматига қараб қаватчаларга бўлинади. Уларни кўпинча «ҳолатлар» дейилади.

$l = 0$, s — ҳолат　$l = 4$, g — ҳолат
$l = 1$, p — ҳолат　$l = 5$, h — ҳолат
$l = 2$, d — ҳолат　$l = 6$, i — ҳолат
$l = 3$, f — ҳолат　$l = 7$, j — ҳолат ва ҳ.к.

Ҳар бир ҳолат ўз навбатида магнит квант сонининг қийматига қараб $2l + 1$ каррали турланган, бундаги ҳар бир сатҳ эса электрон спинига қараб 2 каррали турланган бўлади. Ҳар бир ҳолатда бўлиши мумкин бўлган максимум электронлар сонини қуйидаги формулалар ёрдамида аниқлаш мумкин. Паули принципига биноан n, l, m, m_s нинг аниқ бир қийматига фақат битта электрон тўғри келади. $m_s = \pm 1/2$ бўлганлиги учун магнит квант сонининг ҳар бир қийматига спин квант сони билан фарқ қилувчи иккита электрон мос келади. Берилган орбитал квант сонининг ҳар бир қийматига (яъни ҳар бир ҳолатга) бир-биридан m ва m_s квант сонлари билан фарқ қилувчи

$$N_l = 2(2l+1) \tag{76.1}$$

электрон тўғри келади. Ҳар бир электрон қаватдаги электронлар бир-бирларидан албатта l, m ва m_s квант сонлари билан фарқ қилиши керак. Уларнинг умумий сони қуйидаги формула билан аниқланади:

$$N_n = \sum_{l=1}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2. \tag{76.2}$$

Юқоридаги формулалардан фойдаланиб, ҳар бир қаватда, ҳолатда бўлиши мумкин бўлган максимум электронлар сони қуйидаги жадвалда келтирилган. Атомда электронлар ҳолатини аниқлашда қандай квант сонларидан фойдаланиш электронларнинг ўзаро алоқасига боғлиқ. Маълумки, енгил атом электронлари Рассель—Саундерс боғланишига эга. Шунинг

қаватлар		ҳолатлар							
№/№	белгиси	$l=0$ s	$l=1$ p	$l=2$ d	$l=3$ f	$l=4$ g	$l=5$ h	$l=6$ i	N_n
1	K	s							2
2	L	s	p						8
3	M	s	p	d					18
4	N	s	p	d	f				32
5	O	s	p	d	f	g			50
6	P	s	p	d	f	g	h		72
7	Q	s	p	d	f	g	h	i	98
N_l		2	6	10	14	18	22	26	

учун уларнинг ҳолати водородсимон атом электрони учун аниқланган тўртта n, l, m, m_s квант сонлари билан аниқланади.

Оғир (кўп электронли) атом электронлари орасида jj-боғланиш бўлади (72-§). Шунинг учун уларнинг ҳолати қуйидаги тўртта квант сони билан аниқланади:

1) бош квант сони $n = 1, 2, 3, 4, 5, \ldots, \infty$;

2) орбитал квант сони $l = 0, 1, 2, 3, \ldots, n-1$;

3) ички квант сони $j = \left(l \pm \frac{1}{2}\right)$;

4) тўла моментнинг Z ўқига проекциясини аниқловчи квант сони

$$m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j.$$

Аммо ҳар иккала боғланиш турларида ҳам ҳолатлар сони бир хил бўлади.

77-§. ЭНЕРГЕТИК САТҲЛАРНИНГ ЭЛЕКТРОНЛАР БИЛАН ТЎЛИШИ

Шундай қилиб, идеал қонунга мувофиқ атом ядроси атрофида электрон учун $1 \div \infty$ электрон қаватлар бўлиб, уларнинг ҳар бири $2n^2$ миқдордаги ҳолатлардан иборат бўлади. Бу ҳолатларнинг электронлар билан тўлиши қуйидаги учта принципга амал қилган ҳолда бўлади.

1. Минимум энергия принципи. Бу принципга биноан электрон энг аввало кичик энергияли сатҳни тўлдиради. Маълумки, сатҳларнинг энергияси E_n электронларнинг ўзаро таъсирини эътиборга олмаганда, бош квант сони n га қиймат бериш билан топилади:

$$E_n = -\frac{Z \cdot R\hbar}{n^2}. \qquad (77.1)$$

Демак, электронлар дастлаб бош квант сонининг кичик қийматига мос келган қаватларни тўлдиради. Қават ичида эса орбитал квант сонининг кичик қийматларига мос келган ҳолатлардан (s, p, d, f, ...) бошлаб электронлар билан тўлади.

2. Паули принципи. Бу принципга биноан ҳар бир атомда (у қанча мураккаб бўлмасин) тўртта квант сони бир хил бўлган иккита электрон бўлиши мумкин эмас.

3. Гунд қонуни. Бу қонунга биноан электронлар ҳар бир ҳолатни спинларининг йиғиндиси максимум бўлишига интилиб жойлашади. Масалан, p ҳолатга жойлашадиган 6 та электрон бирданига қарама-қарши спин билан жойлашмасдан дастлаб спинлари максимум бўладиган ҳолатда жойлашади (3 та). Сўнгра навбатдаги электронлар қарама-қарши спин билан жойлашади.

Атомда ҳолатларнинг электронлар билан тўлиб боришини электрон конфигурация орқали ифодалаш қабул қилинган. У қуйидагича белгиланади:

$$n\,l^N\,.$$

Бу ерда n — бош квант сони, l — орбитал квант сонининг қийматига мос келган ҳолат белгиси, унинг юқори индекси шу ҳолатда бўлган электронлар сонини билдиради. Масалан, $1s^2\ 2s^2\ 2p^3$. Бу белги биринчи электрон қаватининг s ҳолатида 2 электрон (тўлган), иккинчи электрон қават s ҳолатида 2 электрон ва иккинчи электрон қаватнинг p ҳолатида 3 та электрон борлигини билдиради. Бу атомда жами 7 электрон бўлиб даврий системанинг 7 катагида жойлашган азот элементи ($_7N^{14}$) нинг электрон конфигурацияси эканлигини билдиради. Электрон конфигурацияда ҳарфларнинг юқориги индекслар йиғиндиси шу элементнинг даврий системада жойлашган катак номерига мос келади.

Юқорида баён қилинган фикрлар энергетик сатҳларнинг электронлар билан тўлишининг идеал қонунидир. Бунда электронларнинг ўзаро таъсири ҳисобга олинмади. Албатта амалда электронларнинг ўзаро таъсири туфайли ҳолатларнинг экранланиши ва бу қонундан оғиш бўлади.

78-§. ЭЛЕМЕНТЛАР ДАВРИЙ СИСТЕМАСИНИНГ ТУЗИЛИШИ

Элементлар даврий системаси квант механикасидан анча илгари 1869 йили Д. И. Менделеев томонидан кашф қилинган. У пайтда 63 та элемент бор эди. Ҳозир эса элементлар сони 107 га[1] етди. Дастлаб атом оғирлигининг ортиб боришига химиявий хусусиятларининг даврий қайтарилишига қараб барча элементлар 7 та даврга 8 та группага бўлинган катакчаларга жойлаштирилди. Айрим ҳолларда масса сони катта бўлган элемент масса сони кичик бўлган элементдан олдин жойлашиб қолган ҳоллар ҳам бўлди (масалан $^{40}_{18}Ar$ — $^{39}_{19}K$, $^{128}_{52}Te$ — $^{127}_{53}I$). Аммо умумий қоидадан бундай четлашиш

[1] Углерод изотопи C^{12} массасининг $^1/_{12}$ қисмига массанинг атом бирлиги дейилади.

ҳам, элементлар системасининг ўзи ҳам физиканинг XIX асрдаги ривожланиш даражасида мукаммал баён қилинмади.

Физика фанининг кейинги ютуқлари, квант механикасининг пайдо булиши даврий система тузилишининг туб моҳиятини, унинг чегараси мавжудлигини асослаб беради. Масалан, атомларнинг юқори энергияли, чизиқли рентген спектрини ўрганиш нурланиш частотасини илдиз остидаги қиймати

$$\sqrt{\omega} = Z - a$$

ядронинг мусбат зарядлар миқдорига, яъни даврий системада элементларнинг катак номерига пропорционаллигини кўрсатади (Мозли қонуни). Демак, даврий системада элементлар атом оғирлигининг ортишига қараб эмас ядрода протонлар сонининг ортишига ёки ядро атрофидаги электронлар сонининг ортишига қараб тартиб билан жойлаштирилган. Шу билан бирга тажриба йўли билан аниқланган юқоридаги атомларнинг характеристик рентген нурланиши атомларнинг ички (ядрога яқин жойлашган) қаватларининг электрон структураси барча элементлар учун бир хил, ташқи қаватлари эса даврий ўзгаришини курсатди. Демак, элементлар химиявий, физик хусусиятларининг даврий ўзгариши ташқи қаватнинг электрон структурасига боғлиқ. Шунинг учун ҳам ҳар қандай атомнинг ташқи қаватидаги электронлари валентли ёки оптик электронлар дейилади. Ҳар қайси (n) электрон қаватнинг электронлари билан тўлиш тартиби ўзидан аввалги (n—1) қаватнинг электронлар билан тўлиш тартибини қайтаради. Шунинг учун элементларнинг химиявий, физик хусусиятлари ҳам такрорланади. Водородсимон атомлар назариясига асосланиб аниқланган электрон конфигурация ёрдамида даврий системанинг тузилишини ва назариянинг тажрибага мос келмаслик сабабларини ўрганайлик.

Даврий система водород атомидан бошланади. Унинг электрон конфигурацияси $1s^1$. Маълумки, s ҳолатга иккитагача электрон жойлашади. Шунинг учун водороддан кейинги элемент гелийнинг электрон конфигурацияси $1s^2$. Биринчи ($n = 1$) электрон қаватда фақат битта s ҳолат бўлиб, у гелий атомида электрон билан тўлди. Навбатдаги электрон иккинчи қаватнинг s ҳолатига жойлашади, шунинг учун янги иккинчи давр бошланади. Иккинчи даврнинг биринчи элементи Li бўлиб унинг электрон конфигурацияси $1s^2\ 2s^1$. Бу конфигурацияни (He) $2s^1$ деса ҳам бўлади. Яъни даврий систсманинг учинчи катагида жойлашган Li элементининг электрон конфигурацияси ундан аввалги гелий атомининг электрон конфигурациясини қайтаради ва $2s$ ҳолати тўла бошлайди. Тўртинчи катакда жойлашган Be да $2s$ ҳолат электронлар билан тўлади. Унинг электрон конфигурацияси $1s^2\ 2s^2$ ёки (He) $2s^2$. Бешинчи катакда жойлашган B (бор) элементдан бошлаб иккинчи электрон қаватнинг p ҳолати тўла бошлайди. Унинг электрон конфигурацияси $1s^2\ 2s^2\ 2p^1$ ёки Be $2p^1$. Маълумки, p ҳолатида 6 тагача электрон жойлаша олади. Шунинг учун B элементидан бошлаб Ne гача (B, C, N, O, F, Ne) $2p$ ҳолат тўла боради. Ne нинг электрон конфигурацияси $1s^2\ 2s^2\ 2p^6$.

Na элементи билан учинчи давр бошланади. Унинг электрон конфигурацияси $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$ ёки қисқача (Ne) $3s^1$. Ar элементида $3p$ ҳолат тўлади. Унинг электрон конфигурацияси (Ne) $3s^2\ 3p^6$. Учинчи электрон қаватда s, p ҳолатлардан ташқари d ҳолат ҳам мавжуд. Шунинг учун Ar дан кейинги элементда $3d$ ҳолат электронлар билан тўла бошлаши керак эди. Аммо навбатдаги электрон $3d$ ҳолатни эмас $4s$ ҳолатни тўлдира бошлайди. Элементлар даврий системаси тузилишининг идеал қонунияти — ҳар бир даврда бўлиши мумкин бўлган максимум элементлар сони 76-§ нинг жадвалида келтирилган. Уни тажриба йўли билан аниқланган натижа билан солиштирайлик:

Даврлар		1	2	3	4	5	6	7
элементлар сони	амалда	2	8	8	18	18	32	21
	назария	2	8	18	32	50	72	98

Демак водород атоми назарияси 1- ва 2-даврлар тузилишини тўғри тушунтира олади. 3-даврдан бошлаб назария тажрибага мос келмайди. Бунинг боиси энергетик сатҳларни назарий йўл билан аниқлашда электронларнинг ўзаро таъсирини эътиборга олинмаганлигидадир. Ҳақиқатан ҳам, ишқорий метал атомларининг нурланиш спектрини аниқлашда маълум бўлдики, электронларнинг ўзаро таъсирини эътиборга олсак, $3d$ ҳолатга мос келган энергия $4s$ га мос келган энергиядан катта:

$$E_{3d} = -\frac{R\hbar}{(3-0{,}146)^2} = -\frac{R\hbar}{2{,}854^2},$$

$$E_{4s} = -\frac{R\hbar}{(4-2{,}23)^2} = -\frac{R\hbar}{1{,}772},$$

яъни $E_{3d} > E_{4s}$. Шунинг учун ҳам минимум энергия принципига биноан (78- §) электронлар $3p$ ҳолатдан сўнг $3d$ ҳолатга жойлашмай $4s$ га жойлашади. Учинчи давр давом этмасдан 4 давр бошланади. Учинчи даврдан бошлаб назариянинг тажрибадан оғиши бошланади. Бу ердан кўринадиган оғишни бартараф қилувчи даврий системанинг тажрибага мос келган тўлиш тартибини В. М. Клечковский аниқлаган.

79- §. КЛЕЧКОВСКИЙ ҚОИДАСИ

Атомда электрон қаватларнинг тўлишини бош квант сонидан ташқари орбитал квант сонини ҳам эътиборга олиб тушунтирайлик. Бунинг учун $n+l$ ортиб боришига қараб ёзамиз. Унинг ҳар бир қиймати алоҳида ҳолатни ифодалайди. Электронлар $n+l$ йиғиндини энг кичик қийматидан бошлаб тўлдира бошлайди.

$n+l$ йиғинди группалари ичида бир хил қийматлилар ҳам учрайди. Бу ҳолда энг аввало энергия нуқтаи назаридан бош квант сони кичик бўлган сатҳ тўлиши керак. Жадвалдан кўринадики (78- §) биринчи ва иккинчи даврнинг электронлар билан тўлиши идеал қонунга мос келади. Учинчи даврда $3s$ $3p$ тўлгандан сўнг навбатда $n+l=5$ ҳолат электронлар билан тўлмайди. Чунки ҳали тўлмаган $n+l=4$ ҳолат мавжуд. Аммо у навбатдаги тўртинчи даврга тегишли. Шунинг учун учинчи давр $3s$ $3p$ билан тугаб тўртинчи давр $4s$ нинг тўлиши билан бошланади. $4s$ дан сўнг $n+l=5$ бўлган $4p$ ҳолат тўлиши керак эди. Аммо $n+l=5$ бўлган учинчи даврга тегишли $3d$ ҳолат бўш қолган. Унинг бош квант сони эса $4p$ никидан кичик. Шунинг учун $4p$ ҳолатдан аввал илгари бўш қолган $3d$ электронлар билан тўлади, сўнгра $4p$ га навбат келади. Шундай қилиб, жадвалдан кўринадики, сатҳларнинг электронлар билан тўлиш тартиби Клечковский қоидасига мувофиқ кўрсатилади ва ҳар бир даврга тўғри келган элементлар сони тажрибада аниқланган натижага мос келади.

Юқоридагилардан кўринадики, ҳар қандай (H, He дан ташқари) атомнинг ташқи қаватида фақат S, P қаватлар бўлиб уларга максимум 8 та электрон сиғади. Шунинг учун ҳам элементлар даврий системаси 8 та группага бўлинган. Элементларнинг химиявий ва физикавий хусусиятлари ҳам ана шу ташқи S ва P қаватдаги электрон сони ва активлиги билан белгиланади.

80-§. ВАЛЕНТЛИК НАЗАРИЯСИ

Атомлар бирлашиб молекулани, яъни модданинг энг кичик заррачасини ҳосил қилади. Маълум миқдордаги бир элемент атоми билан иккинчи элемент атомларининг бирлашиш қобилиятига валентлик дейилади. Атомларнинг бирлашиш қобилияти эса унинг электрон структурасига узвий боғлиқ. Шунинг учун ҳам валентликнинг табиатини, ўзгаришини, тўйиниш хусусиятини ва йўналишига эга бўлиши атом тузилишининг квант назарияси ёрдамида тўғри тушунтириш унинг моҳиятини англаш мумкин. Атомларнинг валентлик хусусиятларини уларнинг электрон конфигурацияси ёрдамида тушунишга ҳаракат қиламиз.

Химиявий боғланишлар қандай бўлмасин бунда асосий ролни атомнинг ташқи қаватидаги s ва p ҳолатларда бўлган электронлари асосий ролни ўйнайди. Атомлар бир-бирига яқинлашганда бир атом бошқасига ташқи қаватдаги электронини узатиш хусусиятига эга. Бундай атомлар мусбат валентликка эга бўлади. Иккинчи атомлар электронларни бирлаштириб олиш қобилиятига эга. Бундай атомлар манфий валентликка эга. Элементнинг мусбат ёки манфий валентликка эга бўлиши ташқи қаватдаги электроннинг ядро билан боғланиш энергиясига боғлиқ. Шу билан бирга атомлар бир-бирлари билан электронларини алмаштирмасдан ҳам молекула ҳосил қилишлари мумкин. Масалан H_2 молекуласи. Бундай боғланишларни ковалентли боғланиш дейилади.

Валентликни тушунишни элементлар даврий системасининг биринчи катагига жойлашган водород элементидан бошлайлик. Унинг электрон конфигурацияси $1s^1$ ҳолатда бўлган битта электронга яна битта қарама-қарши спин билан электрон жойлашиши мумкин. Шунинг учун H атоми бир валентлидир. Гелий атомининг электрон конфигурацияси $1s^2$. Биринчи электрон қаватда фақат битта s ҳолат бўлиб унга иккитагача электрон жойлашиши мумкин. Гелий атомида бу ҳолат тўла. Шунинг учун He валентликка эга эмас. Учинчи катакда жойлашган литий элементининг электрон конфигурацияси $1s^2\ 2s$ ҳолатга яна битта электрон жойлашиши мумкин. Шунинг учун у бир валентли. Ундан кейинда жойлашган бериллий атомида асосий ҳолатда $1s^2$ $2s^2$ электрон конфигурацияга эга. Бу ҳолатларга бошқа электрон жойлашмайди. Демак, асосий ҳолатда Be валентликка эга эмас. Аммо ташқи энергия ҳисобига $2s$ ҳолатдаги электрони $2p$ га ($2s \rightarrow 2p$) ўтказиш мумкин. Бунга жуда кичик, тахминан 2,7 эВ энергия зарур холос. Натижада Be электрон конфигурацияси $1s^2$ $2s^1$ $2p^1$ бўлиб қолади. Бундай ҳолатда бўлган Be атоми спини компенсацияланмаган $2s^1$ $2p^1$ ҳолатдаги иккита электронга қарама-қарши спин билан иккита электрон олиши мумкин. Шунинг учун Be икки валентли ҳисобланади. $2s$ даги битта электронни яна $2p$ га ўтказиш билан валентлик ўзгармайди.

B элементининг электрон конфигурацияси $1s^2$ $2s^2$ $2p^1$. $2p^1$ ҳолатга қарама-қарши спин билан битта электрон олиши мумкин. Шунинг учун B асосий ҳолатда бир валентли ҳисобланади. Ташқи таъсир туфайли B нинг $2s^2$ ҳолатдаги битта электронини $2p$ ҳолатга ўтказилса, унинг электрон конфигурацияси $1s^2$ $2s^1$ $2p^2$ бўлади. $2p$ га ўтган электрон Гунд қоидасига мувофиқ (77-§) спинлари бир йўналишда жойлашади. Шунинг учун B нинг кейинги ҳолатга учта электрон қабул қилиниши мумкин.

Бордан кейинда жойлашган углероднинг электрон конфигурацияси $1s^2$ $2s^2$ $2p^2$. Бу ҳолда у икки валентли. $1s^2$ $2s^2$ $2p^2 \rightarrow 1s^2$ $2s^1$ $2p^3$ ўзгариши туфайли бор элементи тўрт валентли бўлади.

Азотнинг электрон конфигурацияси $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$ бўлиб, у уч валентлидир. $2s \rightarrow 2p$ ўзгариш, яъни электрон конфигурациянинг $1s^2$ $2s^1$ $2p^4$ валентликнинг ўзгаришига олиб келмайди. Демак, азот ҳамма вақт 3 валентлидир. Кислороднинг электрон конфигурацияси $1s^2$ $2s^2$ $2p^4$ бўлиб, у икки валентли ҳисобланади. Бу элемент атомида ҳам $2s \rightarrow 2p$ ўтиш валентлигини ўзгартирмайди, у икки валентлилигича қолади.

Тўртинчи катакда жойлашган фтор эса $1s^2$ $2s^2$ $2p^5$ электрон конфигурацияга эга бўлиб фақат бир валентлидир. Иккинчи даврнинг охирги катагида жойлашган He да иккинчи қаватнинг барча ҳолатлари электронлар билан тўлган бўлади. Шунинг учун He нинг электрон конфигурацияси $1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ бўлиб, электрон учун бирорта ҳам бўш ўрни йўқ. Шу сабабларга кўра He инерт газ, яъни бошқа элемент атомлари билан реакцияга киришмайдиган элемент ҳисобланади. Аммо XeF_2 молекулалар ҳосил қилинган. Бунинг сабаби ксенонда ташқи таъсир туфайли электронларнинг спинли боғланишларининг узилиши ва янги боғланишлар ҳосил қилиш имкониятининг пайдо бўлишидир. Шундай усул билан даврий системадаги барча элементларнинг валентлигини, унинг ўзгаришини тушунтириш мумкин.

Атомлар бирлашиб турли хил шаклли молекулаларнинг ҳосил қилиши S ва P қаватдаги электронлар тақсимотининг симметриясига, атомлар қандай йўналишда яқинлашаётганлигига ва боғланиш ҳосил қилувчи электронлар тўлқин функцияларини ўзаро қопланиш даражасига боғлиқ.

XIV бобга доир масалалар

1. Нормал ҳолатда K- , L-қобиқлари, $3s$- ва $3p$-қобиқчалари тўлган атомлардаги электронлар сони топилсин.

Жавоби: Ne = 18—Ar атоми.

2. Kr ва Cs атомларнинг электрон конфигурацияларини ёзинг.

Жавоби: $_{36}Kr^{84}$ — $1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^6\,3d^{10}\,4s^2\,4p^6$.
$_{55}Cs^{133}$—$1s^2\,2s^2\,2p^6\,3s^2\,3p^6\,3d^{10}\,4s^2\,4p^6\,4d^{10}\,5s^2\,5p^6\,6s^1$.

3. Батамом тўлган $n = 4$—қобиқда магнит квант сони $m = +1$ ва спин квант сони $m_s = 1/2$ бир хил бўлган электронлар сони қанча?

Жавоби: 3.

4. Атомда қуйидаги квант сонлари бир хил бўлган максимум электронлар сонини аниқланг: а) n; б) n, l, в) n, l,m; г) n, l, m, m_s.

Жавоби: а) $2n^2$; б) $2(2l + 1)$; в) 2; г) 1.

5. Агар кескин спектрал сериянинг бош чизиғи ва унинг қисқа тўлқин чегараси мос ҳолда 0,813 мкм ва 0,349 мкм бўлса, Li атомининг асосий ҳолатдаги валент электронининг ионлашиш энергиясини топинг.

Жавоби: $E_{бог} = 5,37$ эВ.

XV БОБ

ЭНГ СОДДА МОЛЕКУЛАЛАР НАЗАРИЯСИ

Молекула модданинг химиявий хоссаларини ўзида акс эттирувчи энг кичик заррача бўлиб, химиявий боғланиш кучлари билан бириккан атомлардан ташкил топади. Молекулада иккитадан тартиб (H_2, O_2, N_2, CO), то юзта ва мингтагача (полимерлар, витаминлар, оқсиллар) атомлар боғлана олади. Инерт газларнинг атомлари кўпинча бир атомли молекула деб аталса-да, бироқ қатъий қаралганда улар молекулалар эмас. Молекуладаги атомлар тинимсиз тебранма ҳаракат қиладилар, баъзи шароитларда (масалан, газ фазасида) айланма ва илгариланма ҳаракатда бўлишлари ҳам мумкин. Атом сингари молекуланинг ҳам қатъий чегараси (шакли) йўқ. Фанга маълум молекулаларнинг эффектив радиуси $10^{-8} \div 10^{-5}$ см оралиғида ўзгаради. Уларни қуролланмаган кўз ёки оптик микроскоп ёрдамида бевосита кўриб бўлмайди, лекин қатор физик ҳодисалар (броун ҳаракати, диффузия, рентген нурлари, электронлар ва нейтронлар дифракцияси) молекулалар мавжудлигини шубҳасиз тасдиқлайди. Одатдаги температураларда газлар (инерт газлардан ташқари), барча суюқликлар ва молекуляр кристаллар молекулалардан ташкил топган.

Молекула асосий ҳолатда электр жиҳатдан нейтраль ва кўп заррали мураккаб квант объект ҳисобланади. Шредингер тенгламаси ёрдамида унинг дискрет энергия сатҳларини аниқлаш, электронлар булути зичлигининг фазовий тақсимотини топиш ва молекуладаги атомлар жойлашиш симметриясини ўрганиш квант химиясининг асосий масалаларидир.

Бу бобда химиявий боғланиш кучлари ва турғун молекуланинг ҳосил бўлиши ҳақида айрим сифатли мулоҳазалар, энг содда молекула — водород молекуласининг қўзғалишлар назариясига асосланган қатъий квантомеханик ҳисоби, икки атомли молекулалар энергетик ва нурланиш, спектрларининг умумий назарияси ҳамда Ван-дер-Ваальс кучларининг содда таҳлили келтирилади.

81-§. ХИМИЯВИЙ БОҒЛАНИШ КУЧЛАРИНИНГ ТАБИАТИ. МОЛЕКУЛАЛАР ҲОСИЛ БЎЛИШИ

Турғун молекула ҳосил бўлишини энергетик нуқтаи назардан молекула *ички* (электрон, тебранма ва айланма ҳаракатлар) энергиясининг уни ташкил этган атомларни изоляцияланган ҳолатларидаги энергиялари йиғиндисидан кичик бўлиши билан тушунтирилади. Бу икки энергиялар фарқи молекуланинг *боғланиш энергиясидан* иборатдир.

Атомларни турғун молекула сифатида боғлаб турувчи (химиявий боғланиш) кучлар асосан электр табиатга эга. Ҳар қандай икки нейтраль атом ёки атомлар группаси ўртасида тортишиш ва итаришиш кучлари таъсир этишига 1873 йилдаёқ голланд физиги И. Д. Ван-дер-Ваальс эътибор берган эди. Тортишиш *Ван-дер-Ваальс кучлари*нинг юзага келиш механизмини сифат жиҳатдан қисқача, хусусий ҳолда

(85- § га қаранг), қуйидагича тушунтириш мумкин. Айтайлик, дастлаб асосий ҳолатда электр диполь моменти нолга тенг икки нейтраль атом бир-биридан мустақил ва чексиз узоқ масофада турган бўлсин. Демак, улардаги электронларнинг фазовий тақсимланиш эҳтимолликлари (тўлқин функциялари) ҳар бир атом учун мутлақо мустақил ва ўрта ҳисобда диполь момент ҳосил қилмайди. Агар бу икки атом ташқи қобиқларидаги электронлар булути сезиларли қопланишгача яқинлаштирилса, у ҳолда бу электронлар ҳаракатидаги мустақиллик бузилиб, ўзаро боғланиш (корреляция) вужудга келади. Электронлар булути ядроларини туташтирувчи тўғри чизиқ бўйича қутбланганда бу икки атом системасининг потенциал энергияси минимум бўлади. Ҳар бир атомнинг ўртача диполь моменти нолга тенглигича қолса-да, бироқ энди бу икки электр диполь моментлари кўпайтмасининг ўртача қиймати корреляция туфайли нолдан фарқлидир. Бу эффект фақат квант табиатга эга. Шундай қилиб, ташқи электронларнинг ҳаракат ҳолатлари ўзаро боғланиб қолиши натижасида боғланган оний электр диполларга айланган икки атом ўртасида тортишиш кучлари вужудга келади. Бундай кучлар қутбланишга эга бўлмаган молекулалар орасида ҳам таъсир этади ва қатъий қилиб айтганда, *молекулалараро дисперсион ўзаро таъсир кучлари* деб номланади.

Бироқ Ван-дер-Ваальс кучлари иссиқлик ҳаракати туфайли атомларни молекулада тутиб тура олмайди. Бу молекуляр кучлар ҳосил қиладиган боғланиш энергияси ҳар бир атомга нисбатан $\sim 0{,}1$ эВ тартибида бўлади. Улар соф ҳолда молекула тузилишида қатнашмаса-да, лекин реал газлар, суюқликлар ва баъзи кристалларнинг хоссаларида муҳим роль ўйнайди.

Молекула ҳосил бўлишига олиб келадиган химиявий боғланиш кучлари икки турга ажратилади.

1. Ион (гетерополяр) боғланиш кучлари. Бундай кучлар бир атомнинг кучсиз боғланган битта ёки бир неча электронларини бошқа бир электронга ўч атомга ўтиши натижасида вужудга келадиган мусбат ва манфий ионлар ўртасидаги электростатик тортишиш кучлари сифатида намоён бўлади. Гетерополяр боғланиш LiF, NaCl, KJ каби тузларнинг молекулалари учун характерли бўлиб, унинг механизмини XIX аср бошларидаёқ швед химиги Й. Берцелиус тушуниб етган эди.

Немис физиги В. Коссель квант механикаси яратилгунга қадар (1916 йил) Борнинг атом назарияси тасаввурларидан фойдаланиб гетерополяр боғланишнинг биринчи назариясини қурди. Бу назария асосида гетерополяр валентлик гояси ётади. Маълумки, атомлар электронлар йўқотиш ёки бириктириб олиш йўли билан ташқи электрон қобиғини ўзига энг яқин турган инерт газ атомининг мос қобиғига ўхшаш тўлдириб олишга интилади. Бу эса мазкур атомни тайинли сондаги бошқа элемент атомлари билан боғланиш хусусиятнга олиб келади. Гетерополяр валентлик атомнинг бошқа атомларга берадиган (мусбат валентлик) ёки улардан оладиган (манфий валентлик) электронлар сони билан аниқланади. Ион боғланишли молекулалар ҳосил бўлишида атомларнинг ташқи қобиғидаги электронлар қайта тақсимланиб, уларнинг валентлиги тўйинади.

Ош тузи NaCl молекуласи ҳосил бўлиш жараёнини сифат жиҳатдан анализ қилишга уриниб кўрайлик. Ишқорий метали натрий ва галогенлар гуруҳига (группасига) кирувчи хлор атомларининг электрон конфигурациялари мос ҳолда $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$ ва $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^5$ бўлиб, фақат ташқи электрон қобиқларининг тузилиши билан фарқланади. Уларда ички K ва L электрон қобиқлар мутлақо тўлган. Натрий атомининг M қобиғида «атом қолдиғи» билан кучсиз боғланган ягона электрон мавжуд. Бу $3s$ қобиқчадаги электроннинг боғланиш энергияси атиги 5,1 эВ. Хлор атомининг M қобиғи батамом тўлиши учун эса $3p$ қобиқчада битта электрон етишмайди. Бундай ортиқча электронни хлор атоми нисбатан катта — 3,7 эВ энергия (хлор атомининг электронга ўхшик энергияси) билан тутиб тура олади. Демак, бир-бирларидан етарлича масофага узоқлаштирилган натрий атомидан электронни хлор атомига олиб бериш учун 5,1 — 3,7 = 1,4 эВ энергия сарфлаш зарур. Бироқ ҳосил бўлган ионлар бир-бирига тортилади ва яқинлашиш жараёнида энергия ажралиб чиқади (экзотермик жараён). Табиийки, агар бу энергия 1,4 эВ дан катта бўлса, молекула ҳосил бўлади, акс ҳолда молекула вужудга келмайди. Тажриба ва ҳисоблар кўрсатадики, Na ва Cl атомлари NaCl молекуласига бирикаётганда 4,2 эВ энергия ажралиб чиқади. Демак, Na^+ ва Cl^- ионларининг турғун молекуладаги электростатик тортишиш энергияси 4,2 + + 4,1 = 5,5 эВ ни ташкил этади. Агар бу кулон энергияси учун қўпол ҳолда $E_{кл} = e_0^2/R$ формулани қўлласак, NaCl молекуласининг чизиқли ўлчами учун $R = 2{,}5 \cdot 10^{-8}$ см ҳақиқатга жуда яқин натижа келиб чиқади.

Шуни қайд қилиш лозимки, фақат ион боғланиш кучлари турғун молекула ҳосил бўлишини таъминлай олмайди. Зарядлар ўртасидаги кулон тортишиш кучларидан ташқари кичик масофаларда атомларнинг ички тўлган қобиқларининг қопланиши натижасида вужудга келадиган итарилиш кучларини ҳам ҳисобга олиш зарур. Паули принципи тўлган электрон қобиқларнинг ўзаро киришишини ман этади. Бироқ бундай кучларни классик физика асосида киритиб бўлмайди.

2. Ковалент (гомеополяр) боғланиш кучлари. Бу кучлар қўшни атомларнинг валент электронларини электрон жуфтлар ҳосил қилиш йўли билан умумлаштириши (алмашиниб туриши) натижасида юзага чиқади. Улар соф квант характердаги алмашинув кучлари бўлиб, молекуладаги электронларнинг махсус кулон ўзаро таъсиридан вужудга келади. Ковалент боғланишли молекулаларига H_2, N_2, CO, NO, CH_4 кабилар мисол бўла олади. Айни бир хил атомлардан турғун молекула ҳосил бўлишини ион боғланиш ёки Ван-дер-Ваальс кучлари билан умуман тушунтириб бўлмайди. Водород молекуласи учун ковалент боғланишнинг биринчи квант назарияси В. Гайтлер ва Ф. Лондон ишларида қурилди (1927 йил). Ҳозирча бу назария тафсилотини баён қилишни келгуси параграфлардан бирига қолдириб, ковалент боғланиш табиатини водород молекуласининг ҳосил бўлиш жараёнида сифат жиҳатдан тушунишга ҳаракат қилиб кўрайлик.

Икки водород атомини фикран электрон қобиқлари жиддий равишда ўзаро кириишиб кетгунга қадар бир-бирига яқинлаштирамиз. Асосий ҳолатда ҳар бир водород атомининг K қобиғида боғланиш энергияси 13,6 эВ га тенг биттадан $1s$ электрони бор. Улар бу электронларини умумлаштириш йўли билан K қобиқларини тўлдириб тўйинган валентли икки атом системасига боғланади. Ҳосил бўлган H_2 молекуласининг квантлашган энергетик сатҳларини аниқлаш учун икки протон майдонида жойлашган икки электрон учун Шредингернинг стационар тенгламасини ечиш талаб этилади. Бироқ бу тенгламани ечмасдан ҳам айрим мулоҳазаларни келтириш мумкин. Биринчидан, водород молекуласининг минимал энергияли айнимаган асосий ҳолати атомларнинг $1s$ квант ҳолатларидан ташкил топганлиги сабабли фақатгина спинлари қарама-қарши йўналган икки электронни жойлаштира олади, холос. Иккинчидан, молекулада, электрон ҳаракатланадиган соҳа атомдагига қараганда кенгроқ бўлганлигидан ноаниқлик принципига мувофиқ ($x \cdot p_x \geqslant \hbar/2$) икки атомли системанинг минимал энергияси ёлғиз атомникидан қуйироқ булади. Ҳақиқатан, тажриба натижаларига кура H_2 молекуласи ҳосил булишида 4,5 эВ, яъни NaCl молекуласидагига қараганда ҳам купроқ энергия ажралиб чиқади. Аммо бундай сифатли мулоҳазалар ёрдамида спинларининг йуналиши бир хил булган водород атомлари турғун молекулага бирикишлари мумкинми, деган саволга жавоб бериш осон эмас. Тажриба ва қатъий назарий ҳисоблар курсатадики, иккала электронларининг спинлари бир хил йуналган водород молекуласи вужуга кела олмайди.

Шундай қилиб, *туйинган валентли ковалент боғланиш* соф квант характерга эга булиб, қушни атом валент электронларнинг йиғинди спини нолга тенг жуфтларга бирикишидан юзага келади. Бундай электрон жуфтлар атомлардан ҳеч бирига тааллуқли булмайди, балки яхлит молекула буйлаб умумлашгандир. Масалан, N_2 молекуласида қушни атомларнинг учтадан $2p$ валент электронлари умумлашиб 3 жуфт ковалент боғлар ҳосил қилишда қатнашадилар. Метан CH_4 молекуласида эса углерод атомининг L қобиғидаги туртта $2s^22p^2$ электронлари жуфт-жуфт ҳолда туртта водород атомларининг электронлари билан боғланадилар. Худди шундай ковалент богланиш кучлари туфайли мураккаб углеводород ва деярли барча органик молекулалар вужудга келади. Туйинган валентли ковалент боғланишидаги молекулалар барча электронларнинг умумий йиғинди спини нолга тенглиги учун асосий ҳолатда диамагнетик хусусиятга эга. Уларнинг ташқи магнит майдон билан кучсиз узаро таъсири фақат электронлар орбитал ҳаракатларининг процессиясидангина юзага келади. Шуниси қизиқки, табиатда кенг тарқалган O_2, NO каби бир қатор молекулаларда ковалент боғланиш спинлари параллел булган электронлар жуфтидан ҳосил булади. Шунинг натижаси уларoқ бу молекулалар парамагнитлардир. Бундай *туйинмаган валентли ковалент боғланишлар* атомларнинг айниган энергетик сатҳларидаги электронларининг умумлашишидан вужудга келади.

Турли химиявий боғланишдан ҳосил булган молекулалар боғланиш энергияларини урганиш шуни курсатадики, ковалент богланиш кучлари ион боғланиш кучларидан кучсиз эмас. Иккинчидан, бу кучлар аслида молекулаларда таъсир этадиган химиявий боғланиш кучларнинг идеал икки чегаравий холидир. Одатда реал молекулаларда у ёки бу даражада ҳам ковалент, ҳам ион боғланишлар биргаликда қатнашадилар. Химиявий боғланишни юзага чиқарадиган валент электронлар умумлашиб (ковалент боғланиш), улар булутларининг фазовий зичлиги атомлар ўртасида қайта тақсимланади (ион боғланиш).

82-§. АДИАБАТИК ЯҚИНЛАШИШ. МОЛЕКУЛА ЭНЕРГИЯСИ ҲАҚИДА ДАСТЛАБКИ МУЛОҲАЗАЛАР

Молекула квант назариясининг бош масаласи унинг квантлашган стационар ҳолатларини аниқлашдир. Бу масала ўзаро таъсирлашувчи бир неча атом ядролари ва уларнинг майдонларида ҳаракатланувчи электронлардан ташкил топган кўп заррачали система учун умумий ҳолда ечилиши жуда қийин бўлган машҳур «кўп жисм масаласи»дан иборат. Бироқ М. Борн ва Р. Оппенгеймер биринчи бўлиб кўрсатганларидек, ушбу масалани тақрибий равишда ечишни осонлаштирадиган ҳолат бор. Гап шундаки, электронларнинг массаси ядролар массасига нисбатан жуда кичик, аммо уларга молекулада бир хил тартибдаги электр кучли таъсир қилади. Шунинг оқибатидан ядролар электронларга қараганда ниҳоятда секин ҳаракатланадилар. Биринчи яқинлашишда атом ядролари қўзғалмас деб ҳисоблаб, уларнинг тайинли вазиятларига мос келган натижавий майдонда фақат электронлар ҳаракатини текшириш мумкин. Электронларнинг бундай динамик ҳолати ядролар ҳосил қилаётган майдон потенциалининг ўзгаришига мос ҳолда *адиабатик ўзгаради*. Бундай яқинлашиш молекулада ядролар ва электронлар ҳаракатларини мустақил равишда олиб қараш имконини беради. У квант механикасида *адиабатик яқинлашиш* номи билан аталади.

Молекуланинг яхлит бир заррача сифатида илгарилама ҳаракатини ҳисобга олмасдан унинг ички ҳаракати учун Шредингер тенгламасини адиабатик яқинлашишда таҳлил қилайлик. Ядро ўзгаришлари, релятивистик ва спин эффектларни эътибордан четда қолдириб, ихтиёрий молекуланинг стационар ҳолати учун Шредингер тенгламасини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\hat{\mathcal{H}}\,\psi\,(\vec{r}, \vec{R}) = E\,\psi\,(\vec{r}, \vec{R}). \qquad (81.1)$$

Бу ерда

$$\widehat{\mathscr{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_i \nabla^2_{\vec{r}_i} - \frac{\hbar^2}{2}\sum_\alpha \frac{1}{M_\alpha}\nabla^2_{\vec{R}_\alpha} + V(\vec{r}, \vec{R}) \quad (82.2)$$

— молекула учун Гамильтон оператори,

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{i<j}\frac{e_0^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{\alpha<\beta}\frac{Z_\alpha Z_\beta e_0^2}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} - $$

$$- \sum_{i,\alpha}\frac{Z_\alpha e_0^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \quad (82.3)$$

— электронлар ва ядроларнинг кулон ўзаро таъсир энергияси, e_0 ва m_0 — электроннинг заряди ва массаси, M_α — α-ядронинг массаси, $\vec{r}_i$, $\vec{r}_j$ ва $\vec{R}_\alpha$, $\vec{R}_\beta$ — мос ҳолда i-, j-электронлар ва α-, β-ядроларнинг радиус-векторлари, Z_α, Z_β— — α-, β-ядроларнинг заряд сонлари.

Молекуланинг тўла ички энергияси E ва тўлқин функцияси $\psi(\vec{r}, \vec{R}) \equiv \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_i, \ldots; \vec{R}_1, \vec{R}_2, \ldots, \vec{R}_\alpha, \ldots)$ унинг барча хоссаларини аниқлайди. Шу сабабдан (82.1) тенгламани ечиш молекуланинг тузилиши, иссиқлик, электромагнит ва оптик хусусиятлари билан боғлиқ барча саволларга жавоб топиш имконини беради. Адиабатик яқинлашишда ($m_0 \ll M_\alpha$) бу тенгламани соддалаштиришга уриниб кўрайлик. Дастлаб эътиборни электронлар ҳаракатига қаратиб, оғир ядролар қўзғалмас деб ҳисоблаймиз. Бу эса (82.2) Гамильтон операторида ядролар кинетик энергиясига мос келувчи иккинчи ҳадни ҳозирча ташлаб юбориш учун асос бўлади. У ҳолда қўзғалмас ядролар майдонида ҳаракатланаётган электронларнинг тўлқин функцияси

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_i \nabla^2_{\vec{r}_i} + V(\vec{r}, \vec{R})\right]\psi_e(\vec{r}, \vec{R}) = E_e(\vec{R})\,\psi_e(\vec{r}, \vec{R}) \quad (82.4)$$

тенгламани қаноатлантиради. Ушбу тенгламада ядроларнинг координаталари $\vec{R}_\alpha$ (қисқалик учун уларни $\vec{R}$ билан кўрсатяпмиз) энди ўзгарувчи катталик эмас, балки ядролар потенциал майдонини аниқловчи параметр сифатида қаралади. $V(\vec{r}, \vec{R})$ энергия учун (82.3) ифодадан фойдаланаётганлигимиз учун (82.4) тенгламанинг хусусий қийматлари $E(\vec{R})$ ядроларнинг ўзаро таъсир кулон энергиясини ҳам ўз ичига олади. Шундай қилиб, (82.4) дан ядроларнинг тайинли бир конфигурацияси учун молекула электрон системасининг хусусий энергияси E_e ва хусусий тўлқин функцияси ψ_e топилади.

Молекуланинг тўла тўлқин функциясини адиабатик яқинлашишда электронлар ψ_e ва ядролар ψ_N мустақил тўлқин функциялари орқали

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}) = \psi_e(\vec{r}, \vec{R})\, \psi_N(\vec{R}) \tag{82.5}$$

кўринишда тасвирлайлик. Бу функцияни (83.1) тенгламага қўйиб (82.4) ни эътиборга олсак,

$$-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{\alpha}\frac{1}{M_\alpha}\left[\psi_e \nabla^2_{\vec{R}_\alpha}\psi_N + 2\nabla_{\vec{R}_\alpha}\psi_e \nabla_{\vec{R}_\alpha}\psi_N + \right.$$

$$\left. + \psi_N \nabla^2_{\vec{R}_\alpha}\psi_e\right] + E_e(\vec{R})\,\psi_e\psi_N = E\,\psi_e\psi_N \tag{82.6}$$

тенгламани ҳосил қиламиз. (82.6) нинг ҳар икки томонини ψ_e^* функцияга кўпайтириб, сўнгра барча электронларнинг $\vec{r}_i$ координаталари бўйича интеграллаш

$$-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{\alpha}\frac{1}{M_\alpha}\nabla^2_{\vec{R}_\alpha}\psi_N + \left[E_e(\vec{R}) - \frac{\hbar^2}{2}\sum_{\alpha}\frac{1}{M_\alpha}\int \psi_e^* \nabla^2_{\vec{R}_\alpha}\psi_e d^3\vec{r}_1 \times\right.$$

$$\left.\times d^3\vec{r}_2 \cdot \ldots \cdot d^3\vec{r}_i \ldots\right]\psi_N = E\,\psi_N \tag{82.7}$$

натижани беради. Бунда биз электронлар тўлқин функцияси

$$\int \psi_e^* \psi_e\, d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \cdot \ldots \cdot d^3\vec{r}_i \cdot \ldots = 1 \tag{82.8}$$

нормаланиш шартини қаноатлантиради ва молекулада макроскопик токлар мавжуд бўлмаганлиги учун:

$$2\psi_e^* \nabla_{\vec{R}_\alpha}\psi_e = \nabla_{\vec{R}_\alpha}(\psi_e^*\psi_e) + \psi_e^*\nabla_{\vec{R}_\alpha}\psi_e -$$

$$-\psi_e\nabla_{\vec{R}_\alpha}\psi_e^* = \nabla_{\vec{R}_\alpha}(\psi_e^*\psi_e),$$

демак, (82.8) га асосан

$$2\int \psi_e^*\nabla_{\vec{R}_\alpha}\psi_e d^3\vec{r}_1 \cdot d^3\vec{r}_2 \cdot \ldots = \nabla_{\vec{R}_\alpha}\int \psi_e^*\psi_e d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \cdot \ldots = 0$$

муносабатлар ўринли деб ҳисоблайдик. Аслини олганда $\psi_e(\vec{r}, \vec{R})$ функция $m_0/M_\alpha \ll 1$ шартга биноан ядролар коор-

координаталари $\vec{R}_\alpha$ га кучсиз боғлиқ. Шунинг учун (82.7) да ноадиабатик эффектларга олиб келувчи, $\nabla^2_{\vec{R}_\alpha}\psi_e$ ифодани ўз ичига олган ўрта қавсдаги иккинчи ҳадни биринчи яқинлашишда ташлаб юбориш мумкин. У ҳолда (82.7) дан фақат ядролар ҳаракатини ифодаловчи

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\sum_\alpha \frac{1}{M_\alpha}\nabla^2_{\vec{R}_\alpha} + E_e(\vec{R})\right]\psi_N(\vec{R}) = E\psi_N(\vec{R}) \quad (82.9)$$

Шредингер тенгламасига келамиз. Бу ердан кўринадики, $\psi_N(\vec{R})$ тўлқин функция электронлар ҳосил қилаётган ўртача потенциал майдондаги ядролар ҳаракатини ифодалайди.

Шундай қилиб, молекула учун Шредингер тенгламасини ечиш масаласи адиабатик яқинлашишда ундан соддароқ икки масалани ечишга келтирилади: 1) қўзғалмас ядролар майдондаги электронлар ҳаракати учун (82.4) тенглама ва 2) электронларнинг ядролар кулон ўзаро таъсир энергиясини ҳисобга олган ўртача майдонда ҳаракатланаётган атом ядролари учун (82.9) тенглама. Бошқача айтганда, молекуляр ички ҳаракатларни бир-биридан мустақил электронлар ва ядролар ҳаракатига ажратиш мумкин. Агар митти электронлар ядролар атрофида жуда тез орбитал ҳаракатни бажарса, оғир ядролар эса молекула масса марказига нисбатан суст айланиши ва унинг минимал энергияли мувозанат вазияти яқинида тебранишлари мумкин. Молекуланинг ана шу *электрон, тебранма ва айланма ҳаракат энергияларини* қўпол равишда баҳолаш йўли билан бирбирига таққослаб кўрайлик.

Молекуланинг чизиқли ўлчами a валент электронларнинг ҳаракат амплитудаси тартибидаги катталик бўлиб, одатда $a \approx 10^{-8}$ см. Бундай электронлар ҳаракати билан боғлиқ бўлган *молекуланинг электрон энергияси* E_e атом энергияси тартибидаги катталикдир. Масалан, водород атомининг асосий ҳолати учун $E_1 = \frac{e_0^4 m_0}{2\hbar^2} = -\frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2} = -13{,}6$ эВ $\left(a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2} = 0{,}529\ \text{Å}\right.$ — Бор радиуси ((48.6) га қаранг). Молекула учун абсолют қиймат бўйича

$$E_e \sim \frac{\hbar^2}{m_0 a^2} \quad (82.10)$$

тартибда олиш мумкин. Бундай натижага ноаниқликлар муносабатига асосланган мулоҳазалар бўйича ҳам келса бўлади. Ҳақиқатан, молекулада электрон импульсининг ноаниқлиги қўпол ҳолда $\hbar/a$ га тенг ва унга $\hbar^2/m_0a^2$ тартибида кинетик энергия тўғри келади. Бу кинетик энергия электроннинг молекула асосий ҳолатида боғланиш энергияси ва электрон энергетик сатҳлари оралиғи тартибидаги қийматга эга. (82.10) энергия молекула нурланиш спектрида кўзга кўринадиган ва ультрабинафша нурлар соҳасига тўғри келади.

Ядроларнинг айланма ҳаракат энергияларини баҳолаш учун молекулани қўпол ҳолда инерция моменти Ma^2 бўлган қаттиқ ротаторга ўхшатиш мумкин. У ҳолда *молекула айланма ҳаракат энергияси* учун (46.5) га асосан

$$E_{NA} \sim \frac{\hbar^2}{Ma^2} \qquad (82.11)$$

тартибдаги қийматни олиш мумкин. Бу энергияга мос келган нурланиш частотаси спектрнинг инфрақизил соҳасида ётади.

Молекулада ядро тебранишларини биринчи яқинлашишда, энергия сатҳлари квантлашган чизиқли гармоник осциллятор сифатида қараймиз. Агар ядролардан бири турғун мувозанат ҳолатга нисбатан a масофага четлатилса, молекула қўшимча $\frac{1}{2}M\omega^2a^2$ потенциал энергия олади (ω — тебранишнинг циклик частотаси). Бу ҳол деярли атомлардан бирини молекуладан ажралишига ва демак, молекула энергиясини E_e тартибида ўзгаришига олиб келади, яъни

$$M\omega^2a^2 \approx \hbar^2/m_0a^2.$$

Бу ердан эса

$$\omega \approx \hbar/\sqrt{m_0M}\,a^2$$

ва молекула тебранма ҳаракат энергияси

$$E_{NT} \approx \hbar\omega \approx \frac{\hbar^2}{\sqrt{m_0M}\,a^2} \qquad (82.12)$$

тартибида ўзгартувчи катталик эканлиги келиб чиқади. (82.12) энергияли нурланиш квантларининг частотаси спектрнинг микротўлқинлар соҳасида ётади. Агар (82.10)—(82.12) ларни таққосласак, у ҳолда

$$E_e \gg E_{NT} \gg E_{NA} \qquad (82.13)$$

бўлишини топамиз. Молекула массаси M ядролар массасига

яқин деб ҳисобласак, $\varkappa = m_0/M$ нисбат кўпчилик молекулалар учун $10^{-3} \div 10^{-5}$ оралиқда ўзгарувчи кичик миқдордир. Бу параметрдан фойдаланиб E_e, E_{NA} ва E_{NT} энергиялар ўртасидаги муносабатни

$$E_{NA} \approx \varkappa^{\frac{1}{2}} E_{NT} \approx \varkappa E_e \qquad (82.14)$$

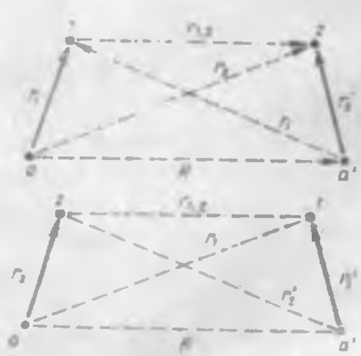
шаклда кўрсатиш мумкин. Энергетик сатҳлар оралиғи классик нуқтаи назардан даврий ҳаракатлар ва улардан юзага чиқадиган нурланиш частотасини беради. Шунинг учун (82.14) га кўра молекулада электронлар ҳаракати ядролар тебранма ва айланма ҳаракатларига қараганда мос ҳолда тахминан 100 ва 10000 марта тезроқдир.

83-§ ВОДОРОД МОЛЕКУЛАСИНИНГ НАЗАРИЯСИ

Водород молекуласи ковалент боғланишли энг содда молекула бўлиб, унинг квант назариясини қуриш молекуляр физикада, худди атом физикасидаги водород атоми назарияси каби принципиал аҳамиятга эга. Қуйида водород молекуласи учун Гайтлер ва Лондон таклиф этган ҳисоблаш усулини баён этиб, нейтрал молекулалар ўртасида юзага чиқадиган ковалент боғланиш кучларининг табиатини тушунишга ҳаракат қиламиз.

Молекуладаги иккита протонларни (ядроларни) a, a' ҳарфлар билан, қолган иккита электронларни 1 ва 2 рақамлар билан белгилайлик. Адиабатик яқинлашишда ядролар орасидаги масофа $R = \text{const}$ деб ҳисоблаймиз. Биринчи ва иккинчи электронларнинг ядрога нисбатан вазиятини $\vec{r}_1$ ва $\vec{r}_2$, a' ядрога нисбатан эса $\vec{r}_1{}'$ ва $\vec{r}_2{}'$ радиус-векторлар орқали аниқлаймиз (83.1-расм). Расмдан кўринадики,

$$\vec{r}_1{}' = \vec{r}_1 - \vec{R}, \quad \vec{r}_2{}' = \vec{r}_2 - \vec{R}. \qquad (83.1)$$



83.1-расм. Водород молекуласида мумкин бўлган ўзаро таъсирлар схемаси.

Асосий мақсадимиз водород молекуласининг электронлари учун (82.4) тенгламани ечиб икки водород атомининг ўзаро таъсир энергиясини ҳисоблаб топишдан иборат. Агар $E_e(\vec{R})$ энергияда протонларнинг ўзаро таъсир кулон энергияси e_0^2/R ни алоҳида қўшилувчи сифатида

$$E_e(\vec{R}) = \mathcal{E}_e(R) + \frac{e_0^2}{R} \tag{83.2}$$

кўринишда ажратсак ва электронлар системасининг тўлқин функцияси учун қулайроқ $\psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ белгилаш киритсак (82.4) тенглама

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,\psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathcal{E}_e(R)\,\psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \tag{83.3}$$

шаклга келади. Бу ерда Гамильтон оператори

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\nabla^3_{\vec{r}_1} + \nabla^2_{\vec{r}_2}\right) -$$

$$-\frac{e_0^2}{r_1} - \frac{e_0^2}{r_2'} - \frac{e_0^2}{r_1'} - \frac{e_0^2}{r_2} + \frac{e_0^2}{r_{12}}. \tag{83.4}$$

1 ва *2* электронларнинг кинетик энергия операторларини $\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}(\nabla^2_{\vec{r}_1} + \nabla^2_{\vec{r}_2})\right)$, кулон итаришиш потенциал энергиясини $\left(\frac{e_0^2}{r_{12}}\right)$ ва a, a' ядролар билан ўзаро кулон тортишиш потенциал энергияларини $\left(-\frac{e_0^2}{r_1} - \frac{e_0^2}{r_2'} - \frac{e_0^2}{r_1'} - \frac{e_0^2}{r_2}\right)$ ўз ичига олади. $R = \text{const}$ бўлганлигидан (83.1) га мувофиқ:

$$\nabla_{\vec{r}_1} = \nabla_{\vec{r}_1'},\ \nabla_{\vec{r}_2} = \nabla_{\vec{r}_2'}. \tag{83.5}$$

(83.3) кўп заррачали Шредингер тенгламасини (83.4) гамильтониан билан фақат тақрибий ечиш мумкин холос. Биз бу ҳолда 69-§ да Не атоми учун қўлланган қўзғалишлар назарияси усулидан фойдалансак бўлади.

Нолинчи яқинлашиш сифатида ўзаро таъсирлашмайдиган, яъни бир-биридан $R \to \infty$ масофага узоқлаштирилган икки водород атоми системасини олиб қараймиз. Бунда бир атомни бошқа атомдаги электронга таъсирини ҳисобга олмаслик мумкин. Ҳар бир атомнинг асосий ҳолатдаги энергиясини E_0 ($E_0 = -13{,}6$ эВ) десак, бу ҳолда электронлар энергияси $\mathcal{E}_0$ ($R \to$

$\to \infty) = \mathscr{E}_{e}^{0}$ ҳар бир атомдаги электрон энергиясининг йиғиндисига ($2E_0$) тенг бўлади, яъни

$$\mathscr{E}_{e}^{0} = 2E_0. \tag{83.6}$$

Энди энергиянинг бу хусусий қийматига мос келган $\psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ тўлқин функциясини тўғри танлаб олишга уннаб кўрайлик. Бунинг учун дастлаб *1* электрон *a* атомда, *2* электрон *a'* атом атрофида ҳаракатланади деб фараз қиламиз. У ҳолда (83.4) гамильтонианни қуйидагича группалаб ёзиш мумкин:

$$\widehat{\mathscr{H}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \widehat{\mathscr{H}}_1^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \widehat{W}_{12}, \tag{83.7}$$

$$\widehat{\mathscr{H}}_1^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \widehat{\mathscr{H}}_{a1}(\vec{r}_1) + \widehat{\mathscr{H}}_{a'2}(\vec{r}_2'), \tag{83.8}$$

$$\widehat{W}_{12} = -\frac{e_0^2}{r_2} - \frac{e_0^2}{r_1'} + \frac{e_0^2}{r_{12}}, \tag{83.9}$$

$$\widehat{\mathscr{H}}_a(\vec{r}_1) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla_{\vec{r}_1}^2 - \frac{e_0^2}{r_1},$$

$$\widehat{\mathscr{H}}_{a'2}(\vec{r}_2') = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla_{\vec{r}_2'}^2 - \frac{e_0^2}{r_2'}. \tag{83.10}$$

Бу ерда $\mathscr{H}_{a1}(\vec{r}_1)$ ва $\mathscr{H}_{a'2}(\vec{r}_2')$ гамильтонианлар *1* ва *2* электронларни мос ҳолда мустақил *a* ва *a'* водород атомларидаги ҳолатларини ифодалайди. Етарлича катта *R* масофаларда (83.9) формула билан аниқланувчи $\widehat{W}_{12}$ потенциал энергияни (83.7) $\widehat{\mathscr{H}}_1^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ гамильтонианга нисбатан кичик тузатма-ғўзғалиш сифатида олиб қараймиз. Шунга мувофиқ равишда (83.3) тенгламани нолинчи яқинлашишда

$$\widehat{\mathscr{H}}_1^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\,\psi_{e1}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathscr{E}_e^0\,\psi_{e1}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \tag{83.11}$$

кўринишда ёзиш мумкин. Агар юқорида келтирганимиздек, *1* электрон *a* атомда ва *2* электрон *a'* атомда асосий ҳолатларда турибди деб қабул қилсак, у ҳолда водородсимон атомлар назариясидан маълумки (48-§ га қаранг) бу мустақил электронларнинг тўлқин функциялари

$$\psi_a(\vec{r}_1) = \psi_1(\vec{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\,e^{-\frac{r_1}{a_0}}, \tag{83.12}$$

$$\psi_{a'}(\vec{r_2'}) = \psi_a(\vec{r_2'}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r_2'}{a_0}}$$

формулалар билан аниқланади ва қуйидаги бир электронли Шредингер тенгламаларини қаноатлантиради:

$$\widehat{\mathscr{H}}_{a1}(\vec{r_1})\psi_a(\vec{r_1}) = E_a\psi_a(\vec{r_1}),\ \widehat{\mathscr{H}}_{a'2}(\vec{r_2'}) = E_{a'}\psi_{a'}(\vec{r_2'}). \quad (83.13)$$

Юқоридаги ифодаларда $a_0 = \hbar^2/m_0e_0^2 - 1$ — Бор радиуси, $E_a = E_{a'} = E_0 = -\frac{e_0^2}{2a_0}$. Энди нолинчи яқинлашишдаги (83.11) тенгламанинг ечимини

$$\psi_{e1}^0(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \psi_a(\vec{r_1})\psi_a(\vec{r_2}) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{r_1+r_2'}{a_0}} \quad (83.14)$$

шаклда олиш мумкин. Бунга эса (83.6), (83.8), (83.13) ва (83.14) ларни (83.11) га қўйиб бевосита ишонч ҳосил қилса бўлади.

Агар молекуланинг энг қуйи энергетик ҳолати айнимаган (турланмаган) бўлганда эди, (83.14) функцияни (83.3) тенглама учун нолинчи яқинлашишдаги тўлқин функция сифатида қабул қилса бўларди. Аммо табиатига кўра электронлар бир-бирларидан фарқланмасликлари туфайли водород молекуласидаги *1* ва *2* электронларнинг ўринларини алмаштириш унинг квант ҳолатида ўзгариш ҳосил қилмайди (заррачаларнинг аниқлик принципи —62-§). Демак, молекуланинг энергетик ҳолати икки каррали *алмашинув айнишига* эга. Табиийки, (83.6) нолинчи энергияга мос келган иккинчи ечим

$$\psi_{e2}^0(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \psi_a(\vec{r_2})\psi_a(\vec{r_1'}) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{r_2+r_1'}{a_0}} \quad (83.15)$$

кўринишда бўлиб, у (83.14) тўлқин функциядан a ва a' атомлардаги *1* ва *2* электронларнинг ўринлари алмашганлиги билан фарқланади (83.1-расмга қаранг). Бу ҳолда, яъни a атом атрофида *2* электрон, a' атомда эса *1* электрон ҳаракатланаётган ҳол учун (83.7) — (83.10) операторларни қуйидагича ўзгартириб ёзиш керак:

$$\widehat{\mathscr{H}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \widehat{\mathscr{H}}_2^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \widehat{W}_{21}, \tag{83.7'}$$

$$\widehat{\mathscr{H}}_2^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \widehat{\mathscr{H}}_{a2}(\vec{r}_2) + \widehat{\mathscr{H}}_{a'1}(\vec{r}_1'), \tag{83.8'}$$

$$\widehat{W}_{21} = -\frac{e_0^2}{r_1} - \frac{e_0^2}{r_2'} + \frac{e_0^2}{r_{12}}, \tag{83.9'}$$

$$\widehat{\mathscr{H}}_{a2}(\vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla_{\vec{r}_2}^2 - \frac{e_0^2}{r_2},$$

$$\widehat{\mathscr{H}}_{a'1}(\vec{r}_1') = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla_{\vec{r}_1'}^2 - \frac{e_0^2}{r_1'}. \tag{83.10'}$$

(83.15) функция худди (83.11) га ўхшаш мазкур a ва a' атомлар учун ўзаро таъсирни ҳисобга олмайдиган ($\widehat{W}_{21} = 0$)

$$\widehat{\mathscr{H}}_2^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{e2}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathscr{E}_e^0 \psi_{e2}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \tag{83.11'}$$

Шредингер тенгламасини қаноатлантиради.

Шундай қилиб, водород молекуласидаги икки атом бир-биридан етарлича узоқ масофада турган ҳол учун (83.3) асосий тенглама энергиянинг (83.6) хусусий қийматига тўғри келган иккита (83.14) ва (83.15) ечимга эга. Айниш мавжуд бўлган барча ҳоллардаги каби бу ерда ҳам нолинчи яқинлашишдаги тўғри тўлқин функцияни бу икки ечимнинг чизиқли комбинацияси

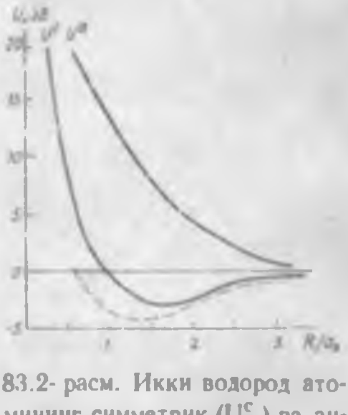
$$\psi_e^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_1\psi_{e1}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + C_2\psi_{e2}^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \tag{83.16}$$

шаклида танлаб оламиз (C_1 ва C_2 — аниқланиши зарур бўлган доимий коэффициентлар).

Биз қўйилган масалани ҳал этишда қўзғалишлар назариясининг биринчи яқинлашиши билан чегараланиб, (83.3) тенгламанинг ечимларини

$$\mathscr{E}_e(R) = \mathscr{E}_e^0 + \mathscr{E}_1^e(R), \tag{83.17}$$

$$\psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_e^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi_e'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \tag{83.18}$$



83.2- расм. Икки водород атомининг симметрик (U^c) ва антисимметрик (U^a) квант ҳолатларида ўзаро таъсир энергиясининг улар орасидаги масофага боғланиши (назария). Штрих чизиқ билан эксперимент натижаси кўрсатилган.

ифодалаймиз. Бу ерда $\mathscr{E}'_e$ ва ψ'_e мос ҳолда $\mathscr{E}^0_e$ ва ψ^0_e ларга нисбатан биринчи тартибли кичик миқдорлар деб қаралади. Албатта бундай ёндашиш $\widehat{W}_{12}$, $\widehat{W}_{21}$ ўзаро таъсир потенциаллари $\widehat{\mathscr{H}}^0_1$, $\widehat{\mathscr{H}}^0_2$ гамильтонианларга қўзғалиш тариқасида қўшилган ҳоллардагина мақсадга мувофиқ натижалар беради. Аниқроқ қилиб айтганда назарий ҳисоблашда содда хусусий (асимптотик) ҳол билан чегараланиб хаёлан a ва a' атомларни шундай масофаларгача яқинлаштирамизки, бунда 1 ва 2 электронлар энергиясининг ўзгариши $\mathscr{E}'_e(R)$ изоляцияланган водород атомидаги E_0 ва биринчи уйғонган $E_1 = E_0/4$ энергетик сатҳлар оралиғидан етарлича кичик бўлиб қолсин:

$$(\mathscr{E}'_e(R) \ll |E_1 - E_0| = 10{,}15 \text{ эВ}).$$

Энди (83.17) ва (83.18) ифодаларни (83.3) Шредингер тенгламасига қўйиб, (83.11), (83.11′) ва (83.16) ларга асосан

$$\widehat{\mathscr{H}}\,\psi^0_e(\vec r_1, \vec r_2) = C_1\,\widehat{\mathscr{H}}\,\psi^0_{e1}(\vec r_1, \vec r_2) + C_2\,\widehat{\mathscr{H}}\,\psi^0_{e2}(\vec r_1, \vec r_2) =$$

$$= C_1\,[\widehat{\mathscr{H}}^0_1(\vec r_1, \vec r_2) + \widehat{W}_{12}]\,\psi^0_{e1}(\vec r_1, \vec r_2) +$$

$$+ C_2\,[\widehat{\mathscr{H}}^0_2(\vec r_1, \vec r_2) + \widehat{W}_{21}]\,\psi^0_{e2}(\vec r_1, \vec r_2) =$$

$$= \mathscr{E}^0_e\,\psi^0_e(\vec r_1, \vec r_2) + C_1\,\widehat{W}_{12}\,\psi^0_{e1}(\vec r_1, \vec r_2) +$$

$$+ C_2\,\widehat{W}_{21}\,\psi^0_{e2}(\vec r_1, \vec r_2)$$

бўлишини эътиборга олсак,

$$[\widehat{\mathscr{H}}(\vec r_1, \vec r_2) - \mathscr{E}^0_e - \mathscr{E}'_e(R)]\,\psi'_e(\vec r_1, \vec r_2) =$$

$$= [\mathscr{E}'_e(R) - \widehat{W}_{12}]\,C_1\psi^0_{e1}(\vec r_1, \vec r_2) +$$

$$+ [\mathscr{E}'_e(R) - \widehat{W}_{21}]\,C_2\,\psi^0_{e2}(\vec r_1, \vec r_2) \tag{83.19}$$

тенгламага дуч келамиз. Агар бу ердаги $\widehat{\mathscr{H}}(\vec r_1, \vec r_2)$ гамильтониан кетма-кет равишда (83.7) ва (83.7′) формулалар орқали алмаштирилиб, $\mathscr{E}'_e\psi'_e$, $\widehat{W}_{12}\psi'_e$, $\widehat{W}_{21}\psi'_e$ иккинчи тартибли кичик миқдорлар ташлаб юборилса, (83.19) дан

$$[\widehat{\mathscr{H}}^0_1(\vec r_1, \vec r_2) - \mathscr{E}^0_e]\,\psi'_e(\vec r_1, \vec r_2) =$$

$$= [\mathscr{E}'_e(R) - \widehat{W}_{12}]\,C_1\,\psi^0_{e1}(\vec r_1, \vec r_2) +$$

$$+[\mathcal{E}'_e(R)-\widehat{W}_{21}]\ C_2\,\psi^0_{e2}\ (\vec{r}_1,\ \vec{r}_2), \tag{83.20}$$

$$[\widehat{\mathcal{H}}^0_2\ (\vec{r}_1, \vec{r}_2)-\mathcal{E}^0_e]\ \psi'_e\,(\vec{r}_1, \vec{r}_2)=$$

$$=[\mathcal{E}'_e(R)-\widehat{W}_{12}]\ C_1\,\psi^0_{e1}\,(\vec{r}_1, \vec{r}_2)+$$

$$+[\mathcal{E}'_e(R)-\widehat{W}_{21}]\ C_2\,\psi^0_{e2}\,(\vec{r}_1,\ \vec{r}_2) \tag{83.20'}$$

бир жинсли бўлмаган тенгламаларни ҳосил қиламиз. Бир жинсли бўлмаган тенглама ечими унга мос келган бир жинсли тенглама ечимига ортогонал бўлиши керак деган маълум теоремага асосланамиз. (83.20) ва (83.20′) ўнг томонсиз мос ҳолда ψ^0_{e1} ва ψ^0_{e2} ечимларга эга ((83.11) ва (83.11′) ларга қаранг). У ҳолда (83.20) ни ψ^0_{e1} га ва (83.20′) ни ψ^0_{e2} га кўпайтириб, *1* ва *2* электронлар ҳаракатланадиган фазолар бўйича интеграллаб

$$\int\{[\mathcal{E}'_e(R)-\widehat{W}_{12}]\ C_1\,\psi^0_{e1}\,(\vec{r}_1, \vec{r}_2)+$$

$$+[\mathcal{E}'_e(R)-W_{21}]\ C_2\,\psi^0_{e2}\ (\vec{r}_1, \vec{r}_2)\}\ \psi^0_{e1}\ (\vec{r}_1,\ \vec{r}_2)\ d^3\vec{r}_1\,d^3\,\vec{r}_2=0, \tag{83.21}$$

$$\int\{[\mathcal{E}'_e(R)-\widehat{W}_{12}]\,C_1\psi^0_{e1}\,(\vec{r}_1, \vec{r}_2)+$$

$$+[\mathcal{E}'_e(R)-W_{21}]\ C_2\,\psi^0_{e2}\ \ (\vec{r}_1, \vec{r}_2)\}\ \psi^0_{e2}\ (\vec{r}_1,\ \vec{r}_2)\ d^3\,\vec{r}_1\,d^3\,\vec{r}_2=0' \tag{83.21}$$

муносабатларга эга бўламиз. Бу ерда қуйидаги характерли интегралларни киритамиз:

1). Нормалаш шарти:

$$\int[\psi^0_{e1}\ \ (\vec{r}_1, \vec{r}_2)]^2\ d^3\,\vec{r}_1\,d^3\,\vec{r}_2=\int[\psi^0_{e2}\ \ (\vec{r}_1, \vec{r}_2)]^2\ d^3\,\vec{r}_1\,d^3\,\vec{r}_2=0. \tag{83.22}$$

2). *Қопланиш интегралининг* квадрати:

$$S^2=\int\psi^0_{e1}\,(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\ \psi^0_{e2}\ (\vec{r}_1,\ \vec{r}_2)\ d^2\vec{r}_1\ d^3\vec{r}_2. \tag{83.23}$$

3) Икки водород атомининг *кулон ўзаро таъсир энергияси*:

$$K=\int\widehat{W}_{12}\ [\psi^0_{e1}\ (\vec{r}_1,\ \vec{r}_2)]^2\ d^3r_1\,d^3\,\vec{r}_2=$$

$$=\int\widehat{W}_{21}\ [\psi^0_{e2}\ (\vec{r}_1, \vec{r}_2)]^2\ d^2\,\vec{r}_1\ d^3\vec{r}_2. \tag{83.24}$$

4). Икки атомнинг *алмашинув ўзаро таъсир энергияси:*

$$A = \int \widehat{W}_{12}\, \psi^0_{e1}\, (\vec{r}_1, \vec{r}_2)\ \psi^0_{e2}\, (\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, d^3\vec{r}_1\, d^3\vec{r}_2 =$$

$$= \int \widehat{W}_{21}\, \psi^0_{e2}\, (\vec{r}_1, \vec{r}_2)\ \psi^0_{e1}\, (\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2. \qquad (83.25)$$

Шуни таъкидлаш лозимки, ҳақиқий қўзғалишлар назариясига мувофиқ қўзғалмаган холатга мос келган нолинчи ечимлар (тўлқин функциялар) ҳамма вақт ўзаро ортогонал бўлиши талаб қилинади. Бироқ ҳозирги текширилаётган масалада ψ^0_{e1} ва ψ^0_{e2} функциялар ортогонал эмас ($R \to \infty$ ҳол бундан мустасно). Шу сабабдан Гайтлер — Лондон назарияси қатъий қараганда қўзғалишлар методидан бир оз фарқ қилади. Юқоридаги белгилашлардан фойдаланиб (83.21), (83.21′) ларни қайта ёзамиз:

$$\begin{aligned} &[\mathcal{E}'_e(R) - K]\ C_1 + [\mathcal{E}'_e(R)\ S^2 - A]\ C_2 = 0, \\ &[\mathcal{E}'_e(R)\ S^2 - A]\ C_1 + [\mathcal{E}'_e(R) - K]\ C_2 = 0. \end{aligned} \qquad (83.26)$$

C_1 ва C_2 номаълум коэффициентларга нисбатан бир жинсли алгебраик тенгламалар системасининг нолдан фарқли ечими унинг детерминанти нолга тенг бўлгандагина мавжуддир:

$$[\mathcal{E}'_e(R) - K]^2 - [\mathcal{E}'_e(R)\ S^2 - A]^2 = 0.$$

Бу тенгламадан энергия тузатмаси $\mathcal{E}'_e(R)$ учун иккита ечим топамиз:

$$\mathcal{E}'_{e1}(R) = \frac{K + A}{1 + S^2}, \qquad (83.27)$$

$$\mathcal{E}'_{e2}(R) = \frac{K - A}{1 - S^2}. \qquad (83.27')$$

Охирги қийматларни (83.26) лардан бирига бирин-кетин қўйиб, $\psi^0_e(\vec{r}, \vec{r}_2)$ функциянинг

$$\int [\psi^0_e\ (\vec{r}_1, \vec{r}_2)]^2\ d^3\vec{r}_1\, d^3\vec{r}_2 = C_1^2 + 2C_1C_2 + C_2^2 = 1$$

нормалаш шартидан фойдалансак,

$$C_1 = + C_2 = \frac{1}{\sqrt{2(1 + S^2)}},\ \text{агар}\ \mathcal{E}'_e = \mathcal{E}'_{e1}, \qquad (83.28)$$

$$C_1 = - C_2 = - \frac{1}{\sqrt{2(1 - S^2)}},\ \text{агар}\ \mathcal{E}'_e = \mathcal{E}'_{e2} \qquad (83.28')$$

қийматларни оламиз.

Шундай қилиб, (83.16), (83.17), (83.27) ва (83.28) лардан водород молекуласининг электронлар энергияси учун биринчи яқинлашишда ҳамда тўлқин функцияси учун нолинчи яқинлашишда қуйидаги икки ечимга эга бўламиз.

1) симметрик ечим:

$$\mathcal{E}_e^c(R) = 2E_0 + \frac{K + A}{1 + S^2}, \quad \psi_e^c = \frac{\psi_{e1}^0 + \psi_{e2}^0}{\sqrt{2(1 + S^2)}}. \qquad (83.29)$$

Шуниси қизиққи, топилган бу натижалар He атоми учун олинган (69.26) — (69.29) формулаларга ўхшашдир. Адиабатик яқинлашишда H_2 молекуласининг тўла энергиясини ҳосил қилиш учун (83.29) ва (83.29′) ларни (83.2) га қўямиз:

$$E_e^c(R) = 2E_0 + \frac{e_0^2}{R} + \frac{K + A}{1 + S^2}, \qquad (83.30)$$

$$E_e^a(R) = 2E_0 + \frac{e_0^2}{R} + \frac{K - A}{1 - S^2}. \qquad (83.30')$$

Табиийки, охирги ифодаларда $2E_0$ ҳадни ташлаб юборсак мос ҳолда симметрик ва антисимметрик квант ҳолатларда бўлган икки водород атомининг биринчи яқинлашишдаги ўзаро таъсир (потенциал) энергиясини оламиз:

$$U^c(R) = \left(\frac{e_0^2}{R} + K\right) + A - S^2\,\frac{K + A}{1 + S^2}, \qquad (83.31)$$

$$U^a(R) = \left(\frac{e_0^2}{R} + K\right) - A + S^2\,\frac{K - A}{1 - S^2}. \qquad (83.31')$$

Таҳлил қилиш учун қулайроқ шаклда ёзилган бу формулаларда 1-ҳад $\left(\frac{e_0^2}{R} + K\right)$ бир-биридан R масофадаги икки водород атомининг ўртача кулон энергиясини, 2-ҳад ($\pm A$) улар электронларининг алмашинув энергиясини, охирги ҳад эса $\left(\mp S^2\,\frac{K \pm A}{1 \pm S^2}\right)$ айни бир электронни бир вақтнинг ўзида у ёки бу даражада ҳар икки атомга тааллуқли бўлиши билан боғлиқ энергияни ифодалайдилар.

Охирги тасдиқни бир оз ойдинлаштирайлик. Бунинг учун (83.14) ва (83.15) функцияларни эътиборга олиб (83.23) интегрални аниқроқ ёзамиз:

$$S^2 = \int \psi_a(\vec{r}_1)\,\psi_a(\vec{r}_2)\cdot\psi_a(\vec{r}_2)\,\psi_a(\vec{r}_1)\,d^3\vec{r}_1\,d^3\vec{r}_2 =$$

$$= \int \psi_a (\vec{r}_1)\, \psi_a (\vec{r} - \vec{R})\, d^3 \vec{r}_1 \int \psi_a (\vec{r}_2)\, \psi_a (\vec{r}_2 - \vec{R})\, d^3 \vec{r}_2.$$

Ўзгарувчилари ажраган охирги икки интегралга $\vec{r}_1$ ва $\vec{r}_2$ координаталар симметрик ҳолда киради. Шунинг учун табиийки,

$$S(R) = \int \psi_a (\vec{r}_1)\, \psi_{a'} (\vec{r}_1 - R)\, d^3 \vec{r}_1 =$$

$$= \int \psi_a (\vec{r}_2)\, \psi_{a'} (\vec{r}_2 - \vec{R})\, d^3 \vec{r}_2 \qquad (83.32)$$

қопланиш интеграли *1* ва *2* электронлар учун бир хил қийматга эга. (83.32) дан кўринадики, $S = S(R)$ *1* ёки *2* электроннинг a ва a' атомлардаги ҳолатларига мос келган тўлқин фунцияларининг бир-бирига фазовий киришиш (қопланиш) даражасини аниқлайди. Атом тўлқин функциялари ψ_a ва $\psi_{a'}$ ядродан бўлган масофага қараб экспоненциал равишда камайиб боради. Табиийки, атомлар бир-биридан узоқлашганда $S(R)$ кескин камаяди ва $R \to \infty$ электрон фақат битгина атомда локаллашиб қолади ($S \to 0$). Аксинча, агар $R = 0$ деб фараз қилсак, ψ_a ва $\psi_{a'}$ функциялар айни бир атомнинг тўлқин функциясига айланади ва уларни нормалаш шартига кўра

$$S(0) = \int \psi_0^2 (\vec{r}_1)\, d^3 \vec{r}_1 = \int \psi_a^2 (\vec{r}_2)\, d^3 \vec{r}_2 = 1$$

келиб чиқади. Демак, қопланиш интегралининг ўзгариш соҳаси $0 \leqslant S \leqslant 1$ дан иборат. Водород атоми учун юқорида келтирган (83.12) кўринишдаги $\psi_a (\vec{r}_1)$, $\psi_{a'} (\vec{r}_1')$ ёки $\psi_a (\vec{r}_2)$, $\psi_{a'} (\vec{r}_2')$ функцияларни (83.32) га қўйиб қопланиш интеграли учун

$$S(R) = e^{-R/a_0} \left(1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3} \frac{R^2}{a_0^2} \right) \qquad (83.32')$$

формулани олиш мумкин.

Энди кулон K ва алмашинув A энергияларини ҳам таҳлил қилайлик. Агар *1* ва *2* электронлар ҳосил қилаётган *одатдаги* электр зарядларининг ўртача зичлиги

$$\rho_a (\vec{r}_1) = - e_0 \psi_a^2 (\vec{r}_1), \quad \rho_{a'} (\vec{r}_2) = - e_0 \psi_{a'}^2 (\vec{r}_2) \qquad (83.33)$$

ҳамда уларнинг a ва a' ядролар ўртасида алмашиниши туфайли вужудга келадиган электр зарядларининг (*алмашинув*) ўртача зичлиги

$$\rho_{aa'} (\vec{r}_1) = - e\, \psi_a (\vec{r}_1)\, \psi_{a'} (\vec{r}_1 - \vec{R}), \qquad (83.34)$$

$$\rho_{aa'}(\vec{r}_2) = -e_0\psi_a(\vec{r}_2 - \vec{R})\,\psi_{a'}(\vec{r}_2)$$

тушунчаларини киритсак, (83.24) ва (83.25)

$$K(R) = \int \frac{e_0\rho_a(\vec{r}_1)}{r_1'}\, d^3\vec{r}_1 + \int \frac{e_0\rho_{a'}(\vec{r}_2)}{r_2}\, d^3\vec{r}_2 +$$

$$+ \int \frac{\rho_a(\vec{r}_1)\rho_{a'}(\vec{r}_2)}{r_{12}}\, d^3\vec{r}_1\, d^3\vec{r}_2, \qquad (83.35)$$

$$A(R) = S(R)\cdot\left[\int \frac{e_0\rho_{aa'}(\vec{r}_1)}{r_1'}\, d^3\vec{r}_1 + \int \frac{e_0\rho_{aa'}(\vec{r}_2)}{r_2}\, d^3\vec{r}_2\right] +$$

$$+ \int \frac{\rho_{aa'}(\vec{r}_1)\,\rho_{aa'}(\vec{r}_2)}{r_{12}}\, d^3\vec{r}_1\, d^3\vec{r}_2 \qquad (83.36)$$

кўринишларни олади. Кулон энергияси (83.35) даги 1- ва 2-интеграллар мос ҳолда a атомдаги 1 электронни a' ядро билан ва a' атомдаги 2 электронни a ядро билан тортишиш энергияларини, 3-интеграл эса турли атомлардаги икки электроннинг кулон итаришиш энергиясини ифодалайди. Демак, $\frac{e_0^2}{R} + K(R)$ ҳақиқатан ҳам икки водород атомининг *электростатик ўзаро таъсир энергиясидир*. Алмашинув энергияси (83.36) даги охирги ҳад Не атомидаги (69.22) каби табиатга эга, яъни у «икки алмашинув зарядининг кулон итаришиш энергияси» деб талқин қилиш мумкин, $S(R)$ га пропорционал биринчи икки ҳадни эса «алмашинув зарядининг a атомда туриб a' ядро билан (1-ҳад) ҳамда a' атомда туриб a ядро билан (2-ҳад) кулон тортишиш энергияларини аниқлайди» деса бўлади. Агар электронларнинг тўлқин функциялари координаталар фазосида ўзаро киришмаса ($\rho_{aa'}=0$), у ҳолда қопланиш интеграли ва демак, алмашинув энергияси нолга тенг. (83.32) ва (83.24) ларга кўра

$$\int \rho_{aa'}(\vec{r}_1)\, d^3\vec{r}_1 = \int \rho_{aa'}(\vec{r}_2)\, d^3\vec{r}_2 = -e_0 S(R).$$

Биз бу ерда K ва A интегралларни конкрет ҳисоблаш билан шуғулланмаймиз. (Қизиқувчи ўқувчиларнинг ҳукмига ушбу адабиётни ҳавола этамиз: Дж.Слэтер. Электронная структура молекул: «Мир», 1965, 3-боб.) Қуйида эса ҳисоблаш натижаларидан келиб чиқадиган муҳим физик хулосаларни баён қиламиз. 83.2-расмда симметрик ва антисимметрик ҳолатлардаги икки водород атомининг (83.31) ва (83.31′) формулалар асосида ҳисобланган ўзаро таъсир энергияларининг ядролар орасидаги масофага боғланиш графиклари келтирилган. Расмдан кўринадики, антисимметрик ҳолатда атомлар бир-бирини итаради ($U^a(R) > 0$), демак, улар молекула ҳосил қила олмайдилар. Симметрик (ψ_e^c ҳолатда эса $U^c(R)$ функция $R = R_0 = 1{,}518\ a_0 = 0{,}80 Å$) нуқтада минимумга ($U^c_{min} = -3{,}14$ эВ) эга, яъни бу ҳолатдаги икки водород атоми бир-биридан R_0 масофада туришга, турғун H_2 молекуласига бирикишга интилади. (83.31) ва (83.31′) ларга биноан водород атомларининг итаришиш U^a ва тортишиш U^c потенциал энергияларига классик аналоги бўлмаган алмашинув энергияси A ва қопланиш интегралининг квадрати S^2 турли хил ишора билан киради. Демак, турғун гомеополяр H_2 молекуласи фақатгина квант табиатли алмашинув кучлари туфайли ҳосил бўлади.

Қатъий олиб қараганда Гайтлер — Лондон назариясидан олинган натижалар тажрибадан аниқланадиган маълумотлардан ($R_0 = 0{,}74$ Å, $U^c_{min} = 4{,}5$ эВ) фарқ қилади (расмга қаранг). Назария ва тажриба натижаларининг бундай фарқланиши худди He атомидаги каби қўзғалиш энергиясининг ($\widehat{W}_{12}$ ёки $\widehat{W}_{21}$) нолинчи яқинлашиши энергиясидан ($2E_0$) жуда кичик эмаслигидир. Масалани Хиллерааснинг вариациялар методи билан ечиш тажрибага янада яқин натижаларни берди: $R_0 = 0{,}76$ Å, $U_c^{min} = -3{,}76$ эВ.

Водород молекуласида электронлар фазовий тақсимланиш эҳтимоллигининг зичлигини (83.29) ва (83.29′) ларга биноан симметрик ҳолатда

$$\rho_0^c = (\psi_e^c)^2 = \frac{1}{2(1+S^2)}(\psi_{e1}^0 + \psi_{e2}^0)^2$$

ва антисимметрик ҳолатда

$$\rho_0^a = (\psi_e^a)^2 = \frac{1}{2(1-S^2)}(\psi_{e1}^0 - \psi_{e2}^0)^2$$

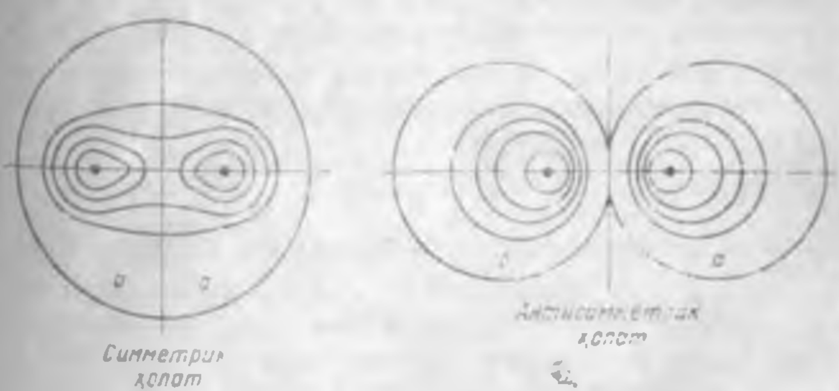
формулалар ёрдамида ҳисоблаш мумкин. Бу ифодаларга (83.14), (83.15) ва (83.32′) ларни қўйиб, $R = R_0$ ва $r_2 \to \infty$, яъни H_2 молекуласи бир электронини йўқотиб мусбат H_2^+ ионга айланган деб фараз қиламиз. Агар H_2^+ иони электронининг фазовий зичлиги доимий бўлган чизиқларни (аниқроғи $\rho_0^c = \text{const}$ ва $\rho_0^a = \text{const}$ сиртларнинг ядроларни туташтирувчи ўқ ётган текислик билан кесимини) график тасвирласак, 83.3-расмда келтирилган манзаралар келиб чиқади. Бу расмдан ҳам кўринадики, икки водород атоми фақат (83.29) симметрик ечимга мос келган квант ҳолатдагина молекулага бирлашишлари мумкин. Антисимметрик ҳолатда водород атомларининг электрон булутлари бир-биридан итарилади.

Энди фазовий координата бўйича симметрик ψ^c_e ва антисимметник ψ^a_e ҳолатларни электронларнинг спин йўналишлари, яъни спин функцияси $C_e\ (s_{z1},\ s_{z2})$ симметрияси билан боғлайлик. Агар электронларнинг спинлари бўйича ўзаро таъсири кучли бўлмаса, у ҳолда икки водород атоми учун электронларнинг умумий тўлқин функциясини (ψ_e) координата $\psi_e\ (\vec{r}_1,\ \vec{r}_2)$ ва спин $C_e\ (s_{z1},\ s_{z2})$ функцияларнинг кўпайтмаси шаклида ифодалаш мумкин. Электронлар Паули принципига бўйсунадиган Фермионлар бўлганлигидан ψ_e функция $\vec{r}_1$ ва $\vec{r}_2$ ҳамда s_{z1} ва s_{z2} ўзгарувчиларни алмаштиришга нисбатан антисимметрик функциядир. Бу ҳолда табиийки ψ_e функцияни ψ^c_e, ψ^a_e, C^c_e ва C^a_e функциялардан икки хил комбинациялаш йўли билан тузиш мумкин:

$$\psi^a_{e1} = C^a_e\ (s_{z1},\ s_{z2})\ \psi^c_e\ (\vec{r}_1,\ \vec{r}_2), \qquad (83.37)$$

$$\psi^a_{e2} = C^c_e\ (s_{z1},\ s_{z2})\ \psi^a_e\ (\vec{r}_1,\ \vec{r}_2). \qquad (83.38)$$

Бу ерда C^a_e ва C^c_e икки электрон системаси учун антисимметрик ва симметрик спин функциялари. Худди Не атоми-



83.3-расм. Водород молекуласининг ионида (H_2^+) электронлар зичлигининг фазовий тақсимланиши: а) симметрик ҳолат; б) антисимметрик ҳолат.

даги сингари C^a_e ва C^c_e функциялар икки электроннинг спинлари мос ҳолда ўзаро антипараллел ва параллел бўлган ҳолатларини ифодалайди. Шундай қилиб, (83.37) ва (83.38) формулаларни 83.2- расмдаги U^c ва U^a чизиқлар билан таққослаб электронларининг спинлари ўзаро антипараллел икки водород атоми тортилади ва турғун H_2 молекуласини ҳосил қиладилар, электрон спинлари параллел бўлган икки водород атоми эса бир-биридан итарилади деган хулосага келамиз.

84-§. ИККИ АТОМЛИ МОЛЕКУЛАЛАРНИНГ СПЕКТРИ

Молекуланинг тўла энергетик спектри квантлашган электрон энергетик сатҳлари ва ядролар ҳаракати билан боғлиқ энергетик сатҳлар (кўпинча айни мана шу кейинги сатҳлар молекуляр спектр деб юритилади) қўшилишидан ҳосил бўлади. Биз бу параграфда икки атомли молекуланинг адиабатик яқинлашишдаги молекуляр спектри назариясини умумий тарзда қуришга ҳаракат қиламиз.

Молекуладаги атом ядроларидан бирининг массасини M_1, иккинчисининг массасини эса M_2 билан белгилаб, ядро ҳаракати учун Шредингер тенгламаси (82.9) ни

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\nabla^2_{\vec{R}_1}}{M_1}+\frac{\nabla^2_{\vec{R}_2}}{M_2}\right)+U(\vec{R}_1-\vec{R}_2)\right]\psi_N(\vec{R}_1,\vec{R}_2)=$$

$$=E_N\psi_N(\vec{R}_1\ \vec{R}_2) \qquad (84.1)$$

кўринишда ёзиш мумкин. Бунда биз (82.9) даги $E_e(R)$ ва E энергияларда электронларнинг атомлардаги боғланиш энергиясига тенг ва $\vec{R}_1$, $\vec{R}_2$ ларга боғлиқ бўлмаган бир хил аддитив қўшилувчи ҳадни (масалан, водород молекуласи учун (83.30) да $2E_0$) ажратиб олдик:

$$E_e(\vec{R})=2E_{e0}+U(\vec{R}_1-\vec{R}_2),\ E=2E_{e0}+E_N.$$

Демак, E_N — молекуланинг фақат ядролар ҳаракатидан вужудга келадиган энергияси, $U(\vec{R}_1-\vec{R}_2)$ — молекуладаги иккала атомнинг ядролар нисбий вазияти билан аниқланадиган ўзаро таъсир энергиясидир. Координаталар бошланишини молекула масса марказида олиб, нисбий радиус вектор

$$\vec{r}=\vec{R}_1-\vec{R}_2 \qquad (84.2)$$

ва келтирилган масса $M_{кел}$

$$\frac{1}{M_{кел}} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \quad (84.3)$$

тушунчаларини киритамиз. Функциянинг мураккаб аргумент бўйича ҳосиласи таърифидан фойдалансак (84.2) га кўра

$$\nabla_{\vec{R}_1} \psi_N (\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \nabla_{\vec{r}} \psi_N (\vec{r}) \frac{d\vec{r}}{d\vec{R}_1} = \nabla_{\vec{r}} \psi_N (\vec{r}),$$

$$\nabla_{\vec{R}_2} \psi_N (\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \nabla_{\vec{r}} \psi_N (\vec{r}) \frac{d\vec{r}}{d\vec{R}_2} = -\nabla_{\vec{r}} \psi_N (\vec{r}).$$

У ҳолда (84.1) икки заррачали Шредингер тенгламаси бир ўзгарувчили

$$\nabla^2_{\vec{r}} \psi_N (\vec{r}) + \frac{2M_{кел}}{\hbar^2} (E_N - U(\vec{r})) \psi_N (\vec{r}) = 0 \quad (84.4)$$

тенгламага ўтади.

Биз ўтган параграфда водород молекуласи учун $U(\vec{r}) = U(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) = U^c(R)$ потенциал энергиянинг физик табиати ҳақида етарлича кенг сўз юритдик. Бироқ ихтиёрий икки атомли молекуланинг потенциал энергиясини аналитик аниқлаш жуда қийин масаладир. Шунга қарамасдан турғун молекула учун $U(\vec{r})$ 83.2-расмдаги $U^c(R)$ каби характерли минимумга эга бўлган функция деб ҳисоблаб, (84.4) тенгламадан молекуляр энергетик спектр учун ярим феноменологик бўлса-да, аммо ҳақиқатга яқин сифатли натижалар олиш мумкин. Бунинг учун энг аввало ўрганилаётган молекула иккита бир хил атомдан ташкил топган ва унинг потенциал энергияси марказий (сферик) симметрияга эга, яъни $U(\vec{r}) \equiv U(r)$ деб фараз қиламиз ($r = |\vec{r}|$). Атомларнинг мувозанат вазиятига нисбий радиуснинг $r = r_0$ қиймати мос келсин. Потенциал функция $U(r)$ $r = r_0$ нуқтада минимумга эришади. Атом ядроларининг тебраниши туфайли мувозанат ҳолатдан четлашишлари $x = r - r_0$ кичик ($x \ll r_0$) бўлган ҳолларда $U(r)$ функцияни $r = r_0$ нуқта яқинида қаторга ёямиз:

$$U(r) = U(r_0) + U'(r_0)x + \frac{U''(r_0)}{2!}x^2 + \ldots \quad (84.5)$$

Минимум нуқта $r = r_0$ да $U'(r_0) = \left.\frac{dU}{dr}\right|_{r=r_0} = 0$ ва $U''(r_0) > 0$. Агар

$$U(r_0) = U_{\min}(r) = -D',$$
$$U''(r_0) = K = M_{\text{кел}}\,\omega_0^2 \qquad (84.6)$$

феноменологик белгилашлар киритиб, (84.5) қаторда x^2 га пропорционал ҳад билан чегаралансак, молекула потенциал энергияси учун

$$U(r) = -D' + \frac{1}{2} M_{\text{кел}}\,\omega_0^2 x^2 \qquad (84.7)$$

ифодага келамиз. Бу ерда иккинчи ҳад $\left(\frac{1}{2} M_{\text{кел}}\,\omega_0^2 x^2\right)$ формал жиҳатдан массаси $M_{\text{кел}} = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ га тенг чизиқли гармоник осциляторнинг потенциал энергиясидир ва шунинг учун уни (84.5) да гармоник ҳад деб юритадилар, ω_0 — механик тебранишнинг доиравий частотаси, D' молекуланинг нолинчи тебраниш энергиясига қадар аниқликда *диссоциация энергияси*. (84.5) қаторнинг $kx^2/2$ дан кейинги ташлаб юборилган ҳадлари молекуланинг ангармоник хоссаларини аниқлайди.

Гармоник яқинлашишда молекуляр энергетик спектрни аниқлаш учун $U(\vec{r}) \equiv U(r)$ ни эътиборга олиб (84.4) ни сферик координаталар системасида ёзамиз ((43.7) га қаранг).

$$\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\vartheta,\varphi}^2\right)\psi_N(r, \vartheta, \varphi) +$$
$$+ \frac{2M_{\text{кел}}}{\hbar^2}\left(E_N - U(r)\right)\psi_N(r, \vartheta, \varphi) = 0. \qquad (84.8)$$

Сферик симметрияли потенциал $U(r)$ учун бундай Шредингер тенгламасининг ечимини 43-§ га биноан

$$\psi_N(r, \vartheta, \varphi) = R_N(r)\, Y(\vartheta, \varphi) \qquad (84.9)$$

кўринишда ифодалаш мумкин. Шар функцияси $Y(\vartheta, \varphi)$ потенциалнинг кўринишига боғлиқ эмас ва барча марказий симметрик майдонлар учун бир хилда (45.1) га асосан орбитал l ва магнит m квант сонларининг хусусий қийматлари билан тўла аниқланади:

$$Y(\vartheta, \varphi) = Y_l^m(\vartheta, \varphi).$$

Радиал функция $R_N(r)$ учун (84.8) дан (84.7) ни ҳисобга олиб

$$\nabla_r^2 R_N(r) + \frac{2M_{\text{кел}}}{\hbar^2}\left[E_N + D' - \frac{1}{2} M_{\text{кел}}\,\omega_0^2 x^2 - \right.$$

$$- \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M_{кел} r^2} \Big] R_M(r) = 0 \qquad (84.10)$$

тенгламани ёзса бўлади. Агар бу ерда янги

$$U_N(r) = R_N(r) \cdot r \qquad (84.11)$$

функцияга ўтиб, $x \ll r_0$ шартга кўра $r^2 = (r_0 + x)^2 \approx r_0^2$ десак ва

$$E_N' = E_N + D' - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2M_{кел} r_0^2} \qquad (84.12)$$

белгилаш киритсак $\left(dr = dx,\ \nabla_r^2 R_N(r) = \frac{1}{r}\frac{d^2U}{dx^2}\right)$,

$$\frac{d^2U}{dx^2} + \frac{2M_{кел}}{\hbar^2}\left(E_N' - \frac{1}{2} M_{кел}\omega_0^2 x^2\right) U = 0 \qquad (84.13)$$

математик жиҳатдан чизиқли гармоник осциллятор учун Шредингер тенгламасига келамиз. Шунинг учун 40-§ га мувофиқ (84.13) нинг физик маъно англатадиган ечимлари

$$U_{N,n}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\, x_0}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2},\ H_n(\xi), \qquad (84.14)$$

$$\left(\xi = \frac{x}{x_0},\ x_0 = \frac{\hbar}{M_{кел}\,\omega_0}\right)$$

тенглама параметри E_N' нинг

$$E_{N,n}' = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0,\ n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (84.15)$$

квантлашган хусусий қийматларидагина мавжуддир (фақат n бош квант сони эмаслигига диққат қилинг). Шундай қилиб, (84.15) ни (84.12) га қўйиб, молекуланинг ядролар ҳаракати билан боғлиқ энергетик спектри учун

$$E_{N,nl} = -D + n\hbar\omega_0 + l(l+1)\ \hbar B_0 \qquad (84.16)$$

натижани ҳосил қиламиз. Бу ифодада 1-ҳад

$$D = -U(r_0) + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \qquad (84.17)$$

нормал ҳолатдаги ($n = l = 0$) молекулани атомларга ажратиб юбориш учун зарур бўлган энергия — диссоциация энергияси, 2- ва 3-ҳадлар молекуланинг чизиқли тебраниши ва масса маркази атрофида айланиши билан боғлиқ энергиялардир, $B_0 = \hbar/2I_0$ — ротация коэффициенти, $I_0 = M_{кел}\, r_0^2$ — молекуланинг атомларни туташтирувчи чизиққа перпендикуляр ўққа нисбатан олинган инерция моменти. Энергиянинг (84.16) хусусий қийматларига мос келган молекуланинг хусусий тўлқин функциялари (84.9), (84.11) ва (84.14) ларга биноан

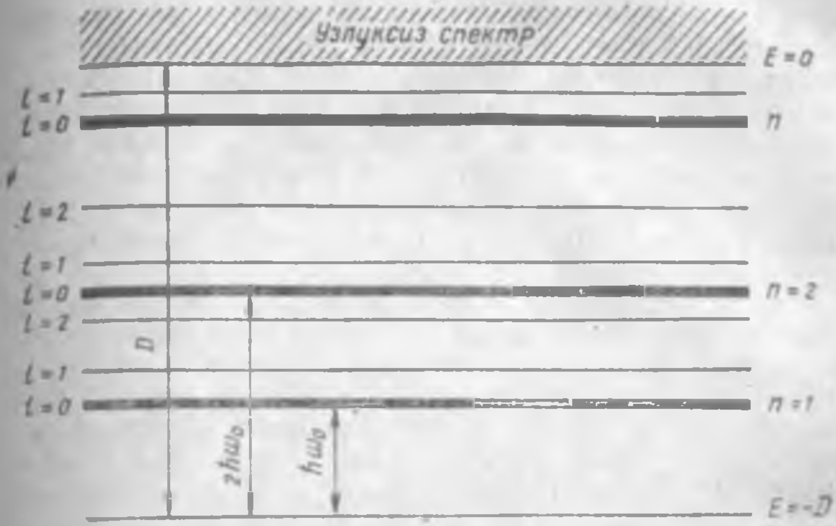
$$\psi_{N,\, nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r}\, U_{N,\, n}(r)\, Y_l^m(\theta, \varphi) \qquad (84.18)$$

кўринишда бўлади.

Биз олган (84.16) ва (84.18) натижалар, албатта, тақрибийдир: 1) молекуланинг ангармоник тебранишларини ҳисобга олмадик; 2) айланма ҳаракат бўйича уйғонган ҳолатларда $U(r)$ функциянинг минимум нуқтаси (r_0) ўзгариб, орбитал квант сони l га боғлиқ бўлиб қолади (r_l) ва ω_0, I_0, B_0 ларни мос ҳолда ω_l, I_l, B_l лар билан алмаштириш зарур; 3) тебраниш n ва орбитал l квант сонларнинг катта қийматларида молекуланинг тебранма ва айланма ҳаракатлари бир-бирига кучли таъсир қилади, демак, (84.8) ни (84.9) каби ўзгарувчиларни ажратиш йўли билан ечиш ярамайди. Бироқ n ва l ларнинг кичик қийматларида (84.16) ва (84.18) лардан шубҳасиз фойдаланиш мумкин.

(84.16) формуладан кўринадики, n ва l квант сонларнинг турли қийматлари билан аниқланадиган молекуляр энергетик спектр тебранма ($n \cdot \hbar\omega_0$, $n = 0, 1, 2, \ldots$) ва айланма ($l(l+1)\,\hbar B_0$, $l = 0, 1, 2, \ldots$) энергетик сатҳларнинг системасидан иборат. Водород молекуласи учун $\hbar\omega_0 = 0{,}547$ эВ, $\hbar B_0 = 0{,}007$ эВ, яъни тебраниш энергиясининг «кванти» $\hbar\omega_0$ айланиш энергиясининг «кванти» $\hbar B_0$ дан анча каттадир. Бундай ҳол деярли барча икки атомли молекулалар учун ўринли. Демак, тебранма сатҳлар бир-биридан бир хилда, етарли катта оралиқда ётса, айланма сатҳлар эса жуда зич жойлашган ва l ортиши билан сийраклашиб боради (84.1-расм). Молекулада атомлар (ядролар) ҳгракатининг квантлашиши молекулаларнинг нурланиш (ютилиш) спектрида яққол намоён бўлади. Бундай спектрни тушунтириш учун молекуланинг тўла ички энергияси (84.16) ва оптик квант ўтишда қатнашадиган электроннинг молекуладаги энергияси $E_{e\vec{n}}$ ($\vec{n}$ электрон учун бош n, орбитал l, магнит m квант сонларининг тўплами деб қаралади) биргаликда олиб қаралиши керак. Молекуланинг тўла энергиясини қўпол ҳолда оптик электрон ва ядролар ҳаракати энергияларининг йиғиндиси

$$E_M = E_{e\vec{n}} + n\hbar\omega_0 + l(l+1)\,\hbar B_0 - D \qquad (84.19)$$



84.1-расм. Икки атомли молекуланинг тебранма ва айланма энергетик сатхларининг схематик тасвири.

шаклида тасвирлаймиз. Агар молекула бирор $\hbar\omega$ ёруғлик квантини ютса, (84.19) га кўра бу энергиянинг бир қисми оптик электронни қўзғатишга, қолган қисми эса атомларнинг тебранма ва айланма ҳаракатларини уйғотишга сарф бўлади. Молекула бирор $E'_{\text{м}}$ энергетик сатҳдан қўшни $E_{\text{м}}$ сатҳга тушса Бор шартига кўра у

$$\omega = \Omega_0 + \omega_0 (n' - n) + B_0 [l' (l' + 1) - l (l + 1)] \qquad (84.20)$$

частотали квантни нурлатади. Бу ерда $\Omega_0 = (E_{e\vec{n}'} - E_{e\vec{n}})/\hbar$ — электроннинг квант ўтишига мос келган частота. Демак, молекуланинг ёруғлик нурлатиш жараёнида электрон билан бир қаторда атомларнинг тебранма ва айланма ҳаракатлари ҳам қатнашади. Қатъий олиб қараганда, электрон квант ўтишининг бошланғич ва охирги энергетик ҳолатларига молекуланинг турлича ω_l ва B_l параметрлари мос келади.

Тажрибада молекулаларнинг нурланиш спектри атомларнинг оптик (чизикли спектр) ва қиздирилган жисмларнинг (туташ спектр) нурланиш спектрларидан фарқ қилиб, бир қатор ёруғ спектрал йўллар шаклида (йўл-йўл спектр) кўринади. Агар ажрата олиш қобилияти кучлироқ бўлган спектрометр билан кузатилса, ҳар бир йўл бир-бирига жуда яқин турувчи алоҳида спектрал чизиқлардан ташкил топганлигини ва унинг кичик частоталар томондаги чегараси кескин, частотанинг катта қийматлар томондан чегараси эса суваштан (чапланган) лигини пайқаш мумкин. (84.20) формулага асосан спектрнинг электрон частотага яқин соҳасидаги спектрал йўллар молекуланинг тебранма энергетик спектридаги тайинли квант ўтишларга ($\omega_0 (n' - n)$), ҳар бир йўлдаги турли спектрал чизиқлар эса айни $n' \rightarrow n$ ўтиш билан бирга содир бўлаётган атомларнинг айланма энергетик спектридаги турли квант ўтишларга ($B_0 [l' (l' + 1) - l (l + 1)]$) мос келади деб тушунтириш мумкин.

Ушбу параграфнинг охирида молекуляр спектрда ядролар спинларининг ролига қисқача тўхтайлик. Атом ядролари спинга (ядрони ташкил этган нуклонлар спинлари ва орбитал импульс моментларининг йиғиндиси) ва магнит моментга (нуклонлар спин ва орбитал магнит моментлар йиғиндиси) эга. Шунинг учун молекула ядроларининг умумий тўлқин функцияси ψ_N фазовий координаталардан (r, θ, φ) ташқари ядролар спинларига ҳам (s_{z1}, s_{z2}) боғлиқ бўлади. Ядроларнинг спин магнит моменти уларнинг молекуладаги орбитал магнит моментлари билан кучсиз таъсирлашади деб ҳисоблаб, икки атомли молекула учун худди (83.37) каби

$$\psi_N (r, \theta, \varphi; s_{z1}, s_{z2}) = \psi_{N, nlm} (r, \theta, \varphi) C_N (s_{z1}, s_{z2}) \quad (84.21)$$

ёзиш мумкин. Агар молекула бир хил ядролардан ташкил топган бўлса, заррачаларнинг айнан ўхшашлик принципига кўра ядроларнинг спинлари $\hbar$ бирлигида ярим бутун ёки бутун сонга тенг бўлишига қараб ψ_N функция мос ҳолда антисимметрик ёки симметрик бўлади. Демак, фермион ядролар учун

$$\psi_N^a = \psi_N^c C_N^a, \quad (84.22)$$

$$\psi_N^a = \psi_N^a C_N^c \quad (84.22')$$

ва бозон ядролар учун

$$\psi_N^c = \psi_N^c C_N^c, \quad (84.23)$$

$$\psi_N^c = \psi_N^a C_N^a \quad (84.23')$$

тўлқин функцияларни тузиш мумкин.

Масалан, оддий водород молекуласидаги икки ядро спинлари $\frac{1}{2}\hbar$ бўлган бир хил протонлардан иборат. Шунинг учун ядролар квант ҳолатини ифодаловчи умумий тўлқин функция антисимметрик функция бўлиши шарт. (84.18) функциянинг жуфтлиги фақат орбитал квант сони l билан аниқлалади холос. Молекуляр спектроскопияда молекуланинг жуфт l га мос келган энергетик сатҳлари жуфт термлар ва тоқ l ли сатҳлар тоқ термлар деб номланади. H_2 молекуласи учун молекуляр термларнинг жуфтлиги протонлар спинларининг ўзаро ориентацияси билан узвий боғланган бўлиб, қуйидаги квант ҳолатларини вужудга келтиради:

а) ортоводород — ядроларининг спинлари параллел бўлган H_2 молекуласи. Бу ҳолда спин функция симметрик ва координатавий функция антисимметрик, яъни (84.22') га мос келади. Шунинг учун ортоводород орбитал квант сони l тоқ термларда мавжуд бўла олади холос. Унинг энг қуйи энергетик ҳолатига $l = 1$ мос келади;

б) параводород — ядроларининг спинлари антипараллел H_2 молекуласи. Бу молекуланинг тўлқин функцияси (84.22) кўринишда бўлиб, l жуфт бўлган квант ҳолатлардагина учрайди. Параводороднинг энг қуйи энергетик ҳолатида $l = 0$, яъни ядроларнинг орбитал ҳаракати «музлаб» қолади.

85-§. ВАН-ДЕР-ВААЛЬС КУЧЛАРИ

Ван-дер-Ваальс кучлари ёки адабиётларда учрайдиган бошқача ном билан айтганда, молекулалараро ўзаро таъсир кучлари нейтраль атомлар ёки молекулалар ўртасида юзага келадиган тортишиш ва итаришиш кучларидир. 83-§ да кўрилган ковалент боғланиш кучлари ва Ван-дер Ваальс тортишиш кучлари квант характерли электр табиатга эга бўлганлиги билан бир-бирига ўхшаса-да, бироқ уларни тубдан фарқлаш зарур. Жумладан:

а) ковалент кучлар таъсирлашувчи атомлар электронларининг спинлари йўналишига боғлиқ махсус кулон кучларидир ва кўпчилик ҳолларда тўйиниш хусусиятига эга. Бу кучлар жуфт боғ ҳосил қилувчи электронлар тўлқин функцияларининг фазовий қопланиш даражаси билан аниқланиб, атомлар орасидаги масофа ортиши билан экспоненциал равишда камайиб боради;

б) Ван-дер-Ваальс тортишиш кучлари диполь ўзаро таъсир кучлари бўлиб, атомлар ёки молекулалар ўртасидаги масофага қараб $F \sim R^{-7}$ (потенциал энергия эса $U \sim R^{-6}$) қонуният билан ўзгаради. Демак, улар R нинг катта қийматларида ковалент кучлардан ($F_{\text{ков}} \sim \exp(-2R/a_0)$ ортиб кетади ва молекулаларнинг ўзаро таъсирлашувида ҳал қилувчи роль ўйнайди. Механизмига кўра бу кучларни одатда 3 турга ажратиб ўрганадилар. Уларга қисқача тўхталиб ўтайлик.

1. **Молекулалараро дисперсион кучлар.** 81- § да бундай кучларнинг юзага келиш механизми ҳақида сўз юритганмиз. Улар соф ҳолда доимий диполь моментига эга бўлмаган (ноқутбий) нейтраль атом ёки молекулалар ўртасида таъсир этади. Молекуланинг вақт бўйича ўртача диполь моменти нолга тенг бўлса-да, бироқ унинг оний қиймати нолдан фарқли бўлиши мумкин. Оний диполь қўшни молекулани қутбловчи оний электр майдон ҳосил қилади ва натижада ноқутбий молекулаларнинг ўзаро таъсири вужудга келади. Биз қуйида фақат квант табиатли ана шундай типдаги Ван-дер-Ваальс кучлари назариясини баён этамиз.

2. **Ориентацион кучлар.** Бу кучлар қутбий молекулалар ўртасида таъсир этади. Иккита қутбий атом ёки молекуланинг ўзаро тортишиш кучи улар диполь моменти векторларининг ($\vec{d}_1$ ва $\vec{d}_2$) бир-бирига нисбатан фазовий ориентациясига (йўналишига) боғлиқ ва $\vec{d}_1$, $\vec{d}_2$ лар бир тўғри чизиқ бўйлаб бир томонга йўналганида максимум қийматга эришади. Ориентацион кучларнинг потенциал энергияси ўзаро таъсирлашувчи қутбий молекулалар диполь моментлари кўпайтмасига пропорционал: $U_{\text{ор}}(R) \sim d_1 d_2 R^{-6}$.

3. **Индукцион (қутбланиш) кучлар** қутбий молекулалар ёки қутбий ва ноқутбий молекулалар ўртасида таъсир этади. Қутбий молекула бошқа молекулани қутблайдиган, яъни унда қўшимча доимий электр диполь момент индукциялайдиган доимий электр майдон ҳосил қилади. Шу тариқа ҳосил бўладиган индукцион тортишиш кучларининг потенциал энергияси қутбий молекула диполь моменти d_1 ва иккинчи молекула қутбланиш коэффициенти α_2 кўпайтмасига пропорционал:

$$U_{\text{инд}}(R) \sim d_1 \alpha_2 R^{-6}.$$

Булардан ташқари молекулалар ўртасида жуда кичик масофаларда *Ван-дер-Ваальс итаришиш кучлари* таъсир этади. Бу кучлар молекулалар таркибига кирувчи атомлар тўлган электрон қобиқларининг қопланиш даражасигача яқинлашганида Паули принципига кўра бир-бирини итаришишидан вужудга келади ва шу сабабдан молекулаларнинг индивидуал хусусиятларига боғлиқ бўлади. Текширишлар кўрсатадики, кўпгина тажриба натижаларини молекулалараро итаришиш кучларининг потенциал энергияси масофа камайишига қараб

$U_{\text{ит}} \sim R^{-12}$ ($F \sim R^{13}$) қонуният билан ортиб боради деб тушунтириш мумкин. Ван-дер-Ваальс кучлари ҳақида экспериментал маълумотлар газлар ва суюқликларда диффузия, иссиқлик ўтказувчанлик қовушоқлик каби физик ҳодисаларни ҳамда молекуляр кристалларнинг хоссаларини ўрганишдан олинади.

Уч турдаги Ван-дер-Ваальс тортишиш кучлари ичида энг универсали дисперсион кучлар бўлиб, улар атом ва молекулаларнинг доимий диполь моментга эга бўлишларига боғлиқ эмас ҳамда қиймат бўйича ориентацион ва индукцион кучлардан ортиқдир. Фақат H_2O каби катта диполь моментли қутбий молекулалар учун $F_{\text{ор}} > F_{\text{дисп}}$. Дисперсион кучларнинг потенциал энергиясини принципиал жиҳатдан 83-§ да баён этилган Гайтлер — Лондон қўзғалишлар назариясининг иккинчи яқинлашишида ҳисоблаш мумкин. Бироқ бу ҳолда мураккаб математик шакл алмаштиришларни бажаришга тўғри келади. Қуйида дисперсион кучлар квант назариясининг асосий ғояларини аниқ ечиладиган, содда (моделлаштирилган) масалада намойиш қиламиз.

Реал атомлар ўрнига айни бир тўғри чизиқ бўйлаб йўналган ва диполь моментлари $d_1 = e_0x_1$, $d_2 = e_0x_2$ бўлган хусусий частотали иккита бир ўлчовли осцилляторларни қараймиз. Агар диполларнинг ўлчамлари x_1, x_2 улар орасидаги масофа R га нисбатан жуда кичик бўлса, осцилляторлар ўзаро таъсир потенциал энергиясини

$$W \cong \frac{2e_0^2}{R^3}\, x_1x_2 \tag{85.1}$$

кўринишда ёзиш мумкин. Классик нуқтаи назардан осцилляторлар тинч ҳолатда бўлганларида ($x_1 = x_2 = 0$) диполь моментлари нолга тенг ва (85.1) га асосан ўзаро таъсирлашмайди. Квант механикаси бўйича эса ҳатто абсолют ноль температурада ҳам осцилляторнинг нолинчи тебранишлари мавжуд. Демак, атомларнинг модели сифатида қаралаётган икки осциллятор ўзаро таъсир энергияси ҳамма вақт нолдан фарқлидир.

Потенциал энергияси (85.1) га тенг бўлган иккита боғланган чизиқли гармоник осциллятор системаси учун Шредингернинг стационар тенгламасини ёзамиз:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{m_0\omega_0^2}{2}x_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{m_0\omega_0^2}{2}x_2^2 + \right.$$

$$+\frac{2e_0^2}{R^3}x_1x_2\Big)\psi(x_1,x_2)=E\psi(x_1,x_2). \qquad (85.2)$$

Соддалик учун осцилляторлар бир хил m_0 массага эга деб олдик. (85.2) ни ечиш учун x_1 ва x_2 ўзгарувчилардан

$$x_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(y_1+y_2),\quad x_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(y_1-y_2).$$

формулалар бўйича y_1 ва y_2 «нормал координаталар» га ўтамиз. Қуйидагиларни эътиборга оламиз:

$$\frac{\partial\psi}{\partial y_1}=\frac{\partial\psi}{\partial x_1}\cdot\frac{\partial x_1}{\partial y_1}+\frac{\partial\psi}{\partial x_2}\cdot\frac{\partial x_2}{\partial y_1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x_1}+\frac{\partial\psi}{\partial x_2}\right),$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y_1^2}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}+2\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1\,\partial x_2}\right),$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y_2^2}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}-2\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1\,\partial x_2}\right),$$

демак,

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y_2^2}=\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2}$$

ва

$$\frac{m_0\omega_0^2}{2}(x_1^2+x_2^2)+\frac{2e_0^2}{R^3}x_1x_2=$$

$$=\frac{m_0\omega_0^2}{2}(y_1^2+y_2^2)+\frac{e_0^2}{R^3}(y_1^2-y_2^2).$$

Булар асосида (85.2) ни ўзгартириб ёзамиз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\left(\frac{m_0\omega_0^2}{2}+\frac{e_0^2}{R^3}\right)y_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}+\right.$$

$$\left.+\left(\frac{m_0\omega_0^2}{2}-\frac{e_0^2}{R^3}\right)y_2^2\right]\psi(y_1,y_2)=E\psi(y_1,y_2). \qquad (85.2')$$

Олинган тенгламани ўзгарувчиларни ажратиш усули билан осон ечиш мумкин. Ҳақиқатан, (85.2') га

$$\psi(y_1,y_2)=\psi_1(y_1)\,\psi_2(y_2), \qquad (85.3)$$

$$E=E_1+E_2 \qquad (85.4)$$

ифодаларни қўйиб,

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial y_1^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E_1 - \left(\frac{m_0\omega_0^2}{2} + \frac{e_0^2}{R^3}\right) y_1^2\right]\psi_1 = 0, \quad (85.5)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y_2^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E_2 - \left(\frac{m_0\omega_0^2}{2} - \frac{e_0^2}{R^3}\right) y_2^2\right]\psi_2 = 0 \quad (85.6)$$

тенгламаларга келамиз. Бу ердан кўринадики, (85.5) хусусий частотаси

$$\omega_1 = \omega_0 \sqrt{1 + \frac{2e_0^2}{m_0\omega_0^2 R^3}}, \qquad (85.7)$$

(85.6) эса хусусий частотаси

$$\omega_2 = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{2e_0^2}{m_0\omega_0^2 R^3}} \qquad (85.8)$$

бўлган чизиқли гармоник осцилляторлар учун Шредингер тенгламаларидир. Шунинг учун

$$E_{n_1} = \hbar\omega_1\left(n_1 + \frac{1}{2}\right), \; E_{n_2} = \hbar\,\omega_2\left(n_2 + \frac{1}{2}\right) \qquad (85.9)$$

ва

$$E = E_{n_1 n_2} = \hbar\,\omega_1 n_1 + \hbar\,\omega_2 n_2 + \frac{1}{2}\,\hbar\,(\omega_1 + \omega_2) \qquad (85.4')$$

деб ёзишимиз мумкин. Демак, қўзғатилмаган ҳолатда ($n_1 = n_2 = 0$) осцилляторлар системасининг нолинчи (минимал) энергияси (85.7) — (85.9) ларга мувофиқ

$$E_0(R) = \frac{1}{2}\hbar\,\omega_0\left(\sqrt{1 - \frac{2e_0^2}{m_0\omega_0^2 R^3}} + \sqrt{1 - \frac{2e_0^2}{m_0\omega_0^2 R^3}}\right) \; (85.10)$$

формула билан аниқланади. Охирги ифодани $\omega_0^2 \gg \frac{2e_0^2}{m_0 R^3}$ деб ҳисоблаб, кичик параметр бўйича қаторга ёямиз

$$E_0(R) = \hbar\,\omega_0 - \frac{\hbar}{2}\,\frac{e_0^4}{m_0^2\omega_0^4}\cdot\frac{1}{R^6} + \ldots \qquad (85.11)$$

Бу формуладан осцилляторларнинг диполь ўзаро таъсири улар нолинчи энергиясини ($\hbar\,\omega_0$) камайтиради ва улар орасидаги масофага боғлиқ қилиб қўяди деган хулосага келамиз. (85.11) да аддитив доимий $\hbar\,\omega_0$ ҳадни ташлаб, тақрибий равишда

$$U\ (R) = -\frac{\hbar^2}{2}\ \frac{e_0^4}{m_0^2\omega_0^4}\ \frac{1}{R^6} \qquad (85.12)$$

ифодани бир-биридан R масофада турган икки боғланган осциллятор (атом) нинг потенциал энергияси деб олса бўлади.

Бу энергия тортишиш кучларини ҳосил қилади. Ана шу кучларни бизнинг холимизда идеаллаштирилган икки атом ўртасидаги Ван-дер-Ваальс (дисперсион) кучлари деб қараш мумкин. Бу кучлар фақат квант табиатига эгалиги (85.12) дан равшан кўриниб турибди, $\hbar \to 0$ классик механикага ўтилса $U \to 0$. Ван-дер-Ваальс кучларининг потенциали (85.12) ёруғлик дисперсияси назариясида муҳим роль ўйнайдиган атомларнинг статик қутбланувчанлик коэффициенти $\beta_0 = e_0^2/m_0\omega_0^2$ нинг квадратига пропорционал. Шу сабабдан бундай типдаги Ван-дер-Ваальс кучлари дисперсион кучлар номини олган.

XV бобга доир масалалар

1. Айланиш энергияси $2{,}16\cdot10^{-3}$ эВ бўлган кислород молекуласининг импульс моментини топинг.

Жавоби: $3{,}46\,\hbar$.

2. H_2 ва N_2 молекулаларининг илгариланма ва $l = 1$ квант ҳолатдаги айланма ҳаракат энергиялари бир хил бўладиган температурани ҳисобланг.

Жавоби: 117 ва 3,8 К.

3. Икки атомли молекулада атомларнинг ўзаро таъсирини тақрибан

$$U\ (\rho) = U_0\ (1 - e^{-\alpha\rho})^2,\ \ \rho = \frac{r - a_0}{a_0}$$

формула билан ифодалаш мумкин (a_0 — ядролар орасидаги масофа, U_0 — потенциал ўранинг чуқурлиги, α — молекула учун доимий параметр). Водород молекуласи учун U_0 ва α ларни аниқланг.

Жавоби: $U_0 = 4{,}75$ эВ, $\alpha = 1{,}43$.

4. H_2 ва CO молекулалари учун квазиэластик куч коэффициентини топинг.

Жавоби: $5{,}7\cdot10^5$ ва $1{,}9\cdot10^6$ дин/см.

5. Cl_2 молекуласини асосий ҳолатдан $n = 1$ тебранма сатҳига қўзғатиш учун зарур бўлган энергия унинг илгариланма ҳаракати ўртача энергиясига тенг бўладиган температурани хисобланг.

Жавоби: 534 К.

6. HF молекуласи учун асосий ва биринчи қўзғалган тебранма сатҳлари ўртасида жойлашган айланма энергетик сатҳлар сонини топинг.

Жавоби: 13 та сатҳ.

XVI БОБ

РЕЛЯТИВИСТИК КВАНТ МЕХАНИКАСИНИНГ ЭЛЕМЕНТЛАРИ

Норелятивистик квант механикасининг асосини ташкил этувчи (биз юқоридаги бобларда кўп марта мурожаат қилган) Шредингер тенгламаси тезлиги ёруғлик тезлигига қараганда жуда кичик ($v/c<<1$) бўлган микрозаррачаларнинг ҳаракатини ўрганиш учунгина яроқлидир. Релятивистик жараёнлар учун эса бу тенглама махсус нисбийлик назариясининг Лоренц алмаштиришларига нисбатан инвариант тенглама кўринишида умумлаштирилиши керак. Бунда ўзига хос характерли томонлардан бири шуки, микрозаррача ўзлигини ифодаловчи муҳим параметр ҳисобланган спин назарияга дастлабки ҳолатлардан бошлаб киритилади. Шу сабабдан релятивистик квант механикаси ёруғлик тезлигига яқин тезликда ҳаракатланаётган маълум спинли микрозаррачаларнинг вакуумда, ташқи электр ва магнит майдонларида ҳаракат ва ўзаро таъсир қонуниятларини ўрганади дейиш мумкин. Биз қуйида спини 0 га тенг зарралар, масалан, π мезонлар учун ўринли бўлган Шредингернинг релятивистик тенгламаси ҳамда спини 1/2 бўлган зарралар, масалан, электрон ҳаракатини ифодаловчи Дирак тенгламалари устида тўхталамиз. Асосий эътиборимизни бу тенгламалардан келиб чиқадиган физик хулосаларга қаратамиз ва шунинг учун махсус нисбийлик назариясининг қатъий 4-ўлчовли белгилашлари ўрнига уч ўлчовли вектор белгилашларидан фойдаланамиз.

86-§. ШРЕДИНГЕРНИНГ РЕЛЯТИВИСТИК ТЕНГЛАМАСИ

Шредингернинг релятивистик тенгламасига координата $\vec{r}$ бўйича 2-тартибли, вақт t бўйича эса 1-тартибли ҳосилалар киради. Шунинг учун бу тенглама $\vec{r}$ ва t ўзгарувчилар бўйича Лоренц алмаштиришларига нисбатан инвариант эмас. Бироқ Шредингер ўз вақтида махсус нисбийлик назариясининг талабларини қаноатлантирувчи умумлашган тўлқин тенгламасини ҳам берган (1926 йил).

Дастлаб эркин микрозаррача учун Шредингернинг релятивистик тенгламасини қараб чиқайлик Бунинг учун классик механика ифодаларидан квант механикаси ифодаларига ўтишнинг умумий қоидаларидан фойдаланамиз. Маълумки, нисбийлик назариясида эркин заррача энергияси ва импульси орасидаги боғланиш

$$E = \sqrt{c^2\vec{p}^2 + m_0^2c^4} \qquad (86.1)$$

кўринишга эга. Бунда m_0 ва $\vec{p}$— тинчликдаги масса ва релятивистик импульс (классик механикада (86.1) ўрнига $E = \vec{p}^2/2m_0$ ифодани эсга олинг) бўлиб, тўла энергия E кинетик ва тинчликдаги энергияларнинг чизиқли бўлмаган комбинациясидан иборат. Юқоридаги (86.1) ифодада E ва $\vec{p}$ физик катталикларни уларга мос келган

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar\frac{d}{d\vec{r}} \qquad (86.2)$$

операторлар билан алмаштирамиз. Ҳосил бўлган оператор билан тўлқин функцияси $\Psi(\vec{r}, t)$ га таъсир этсак Шредингернинг эркин микрозаррача учун релятивистик тўлқин тенгламасига келамиз:

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -\hbar^2c^2\nabla^2\Psi + m_0^2c^4\Psi. \qquad (86.3)$$

Бу тенглама ясси монохроматик тўлқинни ифодаловчи

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \qquad (86.4)$$

кўринишдаги хусусий ечимга эга. Охирги функция (86.2) ифодалар билан аниқловчи энергия $\hat{E}$ ва импульс $\hat{\vec{p}}$ операторларининг хусусий функцияси бўлиб,

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad (86.5)$$

хусусий қийматларга мос келади. (86.4) ни (86.3) га қўйиб (86.5) хусусий қийматлар ўртасидаги

$$\hbar\omega = \pm\sqrt{c^2\hbar^2k^2 + m_0^2c^4} \qquad (86.6)$$

боғланишга дуч келамиз. Квадрат илдиз олдидаги мусбат ва манфий ишоралар энергия қиймати ишорасидаги ноаниқликка мос келиб, у классик механикада ҳам мавжуд. ((86.1) га қаранг). Ҳозирча биз қуйида илдизнинг мусбат қиймати билан иш кўрамиз.

Электр заряди ва токи зичликлари учун Шредингер назариясидаги релятивистик ифодаларни худди 17-§ даги каби ҳосил қила оламиз. (86.3) тенгламани чап томондан Ψ^*, унга комплекс қўшма бўлган тенгламани эса чапдан Ψ га кўпайтириб, ҳосил бўлган иккинчи тенгламани биринчисидан ҳадлаб айирамиз. Сўнгра

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{ie\hbar}{2m_0c}\left(\Psi^* \frac{\partial\Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right), \tag{86.7}$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{ie\hbar}{2m_0}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) \tag{86.7'}$$

кўринишдаги ҳақиқий катталикларни киритсак,

$$\frac{\partial\rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \tag{86.8}$$

узлуксизлик тенгламасига келамиз. Маълумки, охирги тенглама Лоренц алмаштиришларига нисбатан инвариант. Ток зичлиги учун квантомеханик ифода (86.7') норелятивистик формула (17.7) билан тўла мос келади ($e = -e_0$ электрон заряди). Электр заряди зичлигини ифодаловчи релятивистик формула (86.7) норелятивистик яқинлашишда ($v/c \ll 1$) мос ҳолда (17.6) га ўтишини исботлаш мумкин, бироқ $\frac{\rho}{e}$ аниқ мусбат катталик эмас ва шу сабабдан у норелятивистик квант механикасидаги каби эҳтимоллик зичлиги маъносига эга бўлолмайди.

Энди *ташқи электромагнит майдон* билан таъсирлашувчи микрозаррача учун Шредингер норелятивистик тенгламасини релятивистик ҳол учун умумлаштиришга ҳаракат қилиб кўрайлик. Айтайлик, заряди e бўлган заррача φ скаляр потенциал ва $\vec{A}$ вектор потенциал билан характерланувчи электромагнит майдонда ҳаракатланаётган бўлсин. Маълумки бу ҳолда заррача тўла энергияси ролини $E - e\varphi$, импульси ролини эса $\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ катталиклар ўйнайди. Буни эътиборга олиб (86.1) ни қуйидагича ёзамиз:

$$(E - e\varphi)^2 = c^2\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + m_0^2c^4. \tag{86.9}$$

Агар бу ифодага (86.2) ни қўйиб, сўнгра ҳосил бўлган оператор билан тўлқин функцияси $\Psi(\vec{r}, t)$ га таъсир этсак, электромагнит майдонда ҳаракатланаётган зарядли заррача учун Шредингернинг релятивистик тўлқин тенгламасини ҳосил қиламиз:

$$[(\hat{E} - e\varphi)^2 - (c\,\vec{\hat{p}} - e\vec{A})^2 - m_0^2c^4]\,\Psi(\vec{r}, t) = 0 \tag{86.10}$$

$$\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}-ie\hbar\varphi\frac{\partial}{\partial t}-ie\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}+e^2\varphi^2\right)\Psi(\vec{r},t)=(-\hbar^2c^2\nabla^2+$$
$$+ie\hbar c\vec{A}\vec{\nabla}+ie\hbar c\vec{\nabla}\vec{A}+e^2\vec{A}^2+m_0^2c^4)\Psi(\vec{r},t). \quad (86.10')$$

Ушбу тенглама устида ўтказилган текширишлар шуни кўрсатадики, Лоренц алмаштиришларига нисбатан (86.10) нинг инвариантлигини бузмасдан унга Паулининг (61.2) спин матрицаларини киритиш мумкин эмас. Шу сабабдан Шредингернинг релятивистик тенгламаси спини 0 га тенг микрозаррачаларни (масалан, π- ва K- мезонлар) ифодалайди.

Агар $\vec{A}$ ва φ потенциаллар вақтга боғлиқ бўлмаса (доимий электромагнит майдон), у ҳолда (86.10) тенгламани ўзгарувчиларни ажратиш усули билан ечиш мумкин. Ҳақиқатан, умумий тўлқин функцияни

$$\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (86.11)$$

кўринишда ифодалаб, уни (86.10) га қўйсак,

$$(E-e\varphi)^2\psi(\vec{r})=[-\hbar^2c^2\nabla^2+ie\hbar c(\vec{A}\vec{\nabla}+\vec{\nabla}\vec{A})+c^2A+$$
$$+m_0^2c^4]\psi(\vec{r}). \quad (86.12)$$

Шредингернинг стационар релятивистик тенгламасига келамиз: Айтайлик, соддалик учун $\vec{A}=0$ ва $\varphi(\vec{r})=\varphi(r)$, яъни микрозаррача скаляр сферик симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган бўлсин. У ҳолда (86.12) ни

$$(-\hbar^2c^2\nabla^2+m_0^2c^4)\psi(\vec{r})=[E-e\varphi(\vec{r})]\psi(\vec{r}) \quad (86.13)$$

шаклда қайта ёзиш мумкин. Бу тенгламада 42- § да ўтказилган шакл алмаштиришлардан фойдаланиб сферик координаталар системасида ўзгарувчиларни ажратамиз: (86.11) даги $\psi(\vec{r})$ тўлқин функциясини радиал $R(r)$ ва шар $Y(\upsilon,\varphi)$ функцияларнинг кўпайтмаси шаклида тасвирлаймиз:

$$\psi(\vec{r})=R(r)\cdot Y(\theta,\varphi). \quad (86.14)$$

Буни (86.13) га қўйиб, ўзгарувчиларни ажратиш доимийсини λ билан белгиласак, шар функцияси учун (42.13) тенгламага келамиз, яъни ҳар қандай сферик симметрик скаляр майдон учун шар функция иккита эркинлик даражасига эга ва орбитал l, магнит m квант сонларини бериш билан (45.1) формуладан тўла аниқланади. (86.14) даги радиал функция учун (86.13) дан

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=\frac{(E-e\varphi)^2-m_0^2c^4}{\hbar^2c^2}R(r) \tag{86.15}$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Агар (86.15) да $E=m_0c^2+\mathscr{E}$ белгилаш киритиб, $\mathscr{E}$, $e\varphi \ll m_0c^2$ деб фараз қилсак,

$$\frac{(E-e\varphi)^2-m_0^2c^4}{\hbar^2c^2}\approx\frac{2m_0}{\hbar^2}(\mathscr{E}-e\varphi)$$

бўлиб, (86.15) норелятивистик радиал тенглама (42.13) га ўтади. Юқорида $\mathscr{E}$ — микрозаррачанинг тинчлик энергиясини ҳисобга олмагандаги тўла энергиясидир.

Энди (86.15) дан фақат формал жиҳатдан аҳамият касб этувчи водородсимон атомларнинг энергетик сатҳларини аниқлаш масаласини қисқа қараб чиқайлик. Бу ҳолда электроннинг атом ядроси кулон майдонидаги энергияси $e\varphi=-ze_0^2/r$ эканлигини эътиборга олиб (86.15) ни қайта ёзиш мумкин:

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right)+\left[\frac{\beta}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)-\gamma^2}{\rho^2}\right]R=0. \tag{86.16}$$

Тенгламада қуйидаги белгилашлар киритилган:

$$\rho=\alpha r,\ \beta=\frac{2E\gamma}{\hbar c\alpha},\ \alpha=\frac{4(m_0^2c^4-E^2)}{\hbar^2c^2},\ \gamma=\frac{e_0^2}{\hbar c}Z. \tag{86.17}$$

Агар (86.16) да $l(l+1)-\gamma^2$ ифодани $l(l+1)$ билан алмаштирсак, у (47.7) тенглама билан формал жиҳатдан тўла мос келади. Шунинг учун 47-§ хулосаларидан фойдаланишга ҳақлимиз. (86.17) ифодаларнинг 2- ва 3-ларидан энергия E ни β ва γ параметрлар орқали ифодалаймиз:

$$E=m_0c^2/\sqrt{1+\gamma^2/\beta^2}. \tag{86.18}$$

Номаълум β катталикни R функцияга $\rho\to\infty$ ассимтотик яқинлашишда қўйиладиган чегаравий шартлардан топилади. Худди (47.7) даги каби (86.16) нинг $\rho=0$ ва $\rho=\infty$ чегаравий қийматларда чекли ечими фақат

$$\beta=n_r+S+1 \tag{86.19}$$

шарт бажарилгандагина мавжуддир. Бу ерда $n_r=0, 1, 2, \ldots$ — радиал квант сони, S эса

$$S(S+1)=l(l+1)-\gamma^2 \qquad (86.20)$$

тенгламанинг манфий бўлмаган ечимидир. Охиргидан иккита ечим топилади:

$$S=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{(2l+1)^2-4\gamma^2}. \qquad (86.21)$$

Заряд сони $Z=1$ бўлганда нозик структура доимийси $\gamma = e_0^2/\hbar c = 1/137$ кичик миқдордир. Шунинг учун (86.21) дан S квант сонининг энг кичик қиймати $l=0$ да юқоридаги ишора билан чегараланганимизда $S\approx 0$ дир. Z нинг физик жиҳатдан бизни қизиқтирадиган қийматларида ($Z=1$, 2, 3) ихтиёрий l учун (86.21) да «+» ишорани олсак $S>0$. У ҳолда (86.19)

$$\beta=n_r+\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-\gamma^2} \qquad (86.22)$$

кўринишни олади. Агар $\gamma=0$ деб олсак, (86.22) мос ҳолда (47.19) га ўтади. (86.18) ва (86.22) формулалар водородсимон атомларнинг (47.20) билан аниқланувчи норелятивистик энергетик сатҳларининг нозик структурасини ифодалайди. Ҳақиқатан, (86.18) ни γ^2 бўйича қаторга ёйсак

$$E=m_0c^2\left[1-\frac{\gamma^2}{2n^2}-\frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)-\ldots\right], \qquad (86.23)$$

бу ерда $n=n_r+l+1$ — бош квант сони. Ўнг томондаги 1- ҳад $E_0=m_0c^2$ — тинчликдаги энергия, 2- ҳад эса

$$\mathscr{E}=-\frac{m_0c^2\gamma^2}{2n^2}=-\frac{Z^2m_0e_0^4}{2\hbar^2n^2}. \qquad (86.24)$$

(47.20) энергияга мос келади. (86.23) даги 3- ҳад нозик структура энергиясини характерлайди ва норелятивистик назарияда кулон майдонига хос бўлган l орбитал квант сони бўйича айниш (турланиш) ни йўқотади. n нинг ҳар бир қийматига кўра (86.24) дан аниқланадиган энергетик сатҳ (86.23) га биноан қаторнинг γ^4 га пропорционал ҳади билан чегаралланганда l нинг турли қийматларига мос бир қатор сатҳларга ажраб кетади. Ана шу сатҳлар системасининг тўла «кенглиги» (86.23) дан

$$E_{n,\,l=0}-E_{n,\,l=n-1}=\frac{m_0c^2\gamma^4}{n^3}\cdot\frac{n-1}{n-\frac{1}{2}} \qquad (86.25)$$

га тенг бўлиб чиқади. Бироқ бу ифодадан топиладиган қиймат водород атоми спектридан экспериментал аниқланган қийматдан анча каттадир. Бунга сабаб шуки, Шредингернинг релятивистик тўлқин тенгламаси электрон $\left(\text{спини} \pm \frac{1}{2}\hbar\right)$ каби ферми заррачалар учун яроқсиздир.

Ушбу параграф охирида шуни қайд қилмоқ лозимки, (86.3) ва (86.10) кўрнишдаги квант механикасининг биринчи релятивистик тенгламасини Шредингердан мустақил равишда О. Клейн, В. Гордон, В. Фок ва бошқалар томонидан ҳам таклиф қилинган. Шу сабабдан адабиётларда Шредингернинг релятивистик тенгламаси кўпчилик ҳолларда Клейн-Гордон-Фок тенгламаси номи билан учрайди. Бу тенглама 1934 йилда В. Паули ва В. Вайскопфларнинг майдон квант назариясига оид ишларида ўзининг ҳақиқий талқинини топди.

87-§. ДИРАК ТЕНГЛАМАСИ

Диракнинг релятивистик тўлқин тенгламасини формал жиҳатдан бизга 16-§ дан маълум бўлган

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = \widehat{\mathscr{H}}\,\Psi(\vec{r}, t) \qquad (87.1)$$

тўлқин тенгламанинг Гамильтони шаклида ёзиш мумкин. Бу ерда асосий масала релятивистик гамильтониан $\widehat{\mathscr{H}}$ ни тўғри танлаб олишдадир. Агар (87.1) га эркин микрозаррача учун (86.1) нинг мусбат илдизи бўлган $\widehat{\mathscr{H}} = c\sqrt{\widehat{\vec{p}}^{\,2} + m_0c^2}$ —классик релятивистик гамильтонианни қўйсак, у ҳолда ҳосил бўлган тенглама Лоренц алмаштиришларига нисбатан инвариант бўлмайди (чунки тенгламада фазовий ва вақт бўйича ҳосилалар бир хил даражада иштирок этмайди). Диракнинг хизмати шундаки, у (87.1) да релятивистик инвариант ва фазовий ҳосилаларга нисбатан ҳам чизиқли бўлган гамильтонианни танлаш усулини қатъий равишда асослаб берди. Биз қуйида Дирак мулоҳазаларига тўхталамиз.

Эркин микрозаррача учун импульс ва массага нисбатан чизиқли бўлган Гамильтон операторини умумий ҳолда

$$\widehat{\mathscr{H}} = -c\vec{\alpha}\cdot\widehat{\vec{p}} - \beta m_0c^2 \qquad (87.1')$$

кўринишда ёзиш мумкин, $\vec{\alpha}$ ва β — ҳозирча номаълум катталиклар. Буни (87.1) га қўйиб

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - i\hbar c\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + \beta m_0 c^2\right)\Psi(\vec{r}, t) = 0 \qquad (87.2a)$$

ошкор кўринишдаги ёки

$$(\widehat{E} + c\vec{\alpha}\cdot\widehat{\vec{p}} + \beta m_0 c^2)\Psi(\vec{r}, t) = 0 \qquad (87.2б)$$

операторлар орқали ифодаланган Диракнинг релятивистик тўлқин тенгламасига келамиз. Агар (87.2 *а*) ни Ψ^* га ва унга комплекс қўшма бўлган тенгламани Ψ га кўпайтириб, бирйдан иккинчисини айирсак ва электр заряди ҳамда ток зичликлари учун

$$\rho(\vec{r}, t) = e\,\Psi^*\Psi, \qquad (87.3\text{ а})$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -e\,\Psi^* c\vec{\alpha}\,\Psi \qquad (87.3\text{ б})$$

ҳақиқий катталикларни киритсак, яна (86.8) узлуксизлик тенгламасига келамиз. (87.3а) мувофиқ, заряд зичлиги Дирак назариясида норелятивистик кўринишга эга ва шу сабабдан $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$ ифодани эҳтимоллик зичлиги деб талқин қилиш мумкин. Маълум бўлишича $-c\vec{\alpha}$ заррача тезлиги операторини ифодалар экан ва $v/c \ll 1$ яқинлашишда (87.3б) табиий ҳолда (17.1) га ўтади.

Дирак тенгламасида қатнашувчи 4 та катталик — α_x, α_y, α_z ва β ларнинг табиатини аниқлайлик. (87.2) тенгламалар эркин микрозаррача ҳаракатини ифодалаганлиги учун гамильтонианда координата $\vec{r}$ ва вақт t ларга боғлиқ бўлган ҳадлар иштирок этмаслиги зарур, акс ҳолда кучлар майдони, демак, эркин бўлмаган заррача билан иш кўришга тўғри келар эди. Бундан ташқари $\vec{\alpha}$ ва β параметрлар $\vec{r}$ ва t бўйича ҳосилаларини ҳам ўз ичига олмайди, чунки тўлқин тенглама чизиқли дифференциал тенглама бўлиб, суперпозиция шартини қаноатлантириши керак. Шундай қилиб, $\vec{\alpha}$ ва β катталиклар $\vec{r}$, t, $\widehat{\vec{p}}$ ва $\vec{E}$ ларга боғлиқ эмас деган хулосани чиқарамиз. Бироқ бу $\vec{\alpha}$ ва β ўзаро коммутациялашуви оддий сонлар бўлиши лозим деган фикрни англатмайди.

Энди (87.2б) тенгламани чап томондан $(\widehat{E} - c\vec{\alpha}\cdot\widehat{\vec{p}} - \beta m_0 c^2)$ ифодага кўпайтирайлик. У ҳолда

$$\left\{\widehat{E}^2 - c^2\left[\alpha_x^2 p_x^2 + \alpha_y^2 p_y^2 + \alpha_z^2 p_z^2 + (\alpha_x\alpha_y +\right.\right.$$

$$+\alpha_y\alpha_x)\widehat{p}_x\widehat{p}_y+(\alpha_y\alpha_z+\alpha_z\alpha_y)\widehat{p}_y\widehat{p}_z+$$
$$+(\alpha_z\alpha_x+\alpha_x\alpha_z)\widehat{p}_x\widehat{p}_z\Big]-m_0^2c^4\beta^2-m_0c^3\Big[(\alpha_x\beta+ \qquad (87.4)$$
$$+\beta\alpha_x)\widehat{p}_x+(\alpha_y\beta+\beta\alpha_y)\widehat{p}_y+(\alpha_z\beta+\beta\alpha_z)\widehat{p}_z\Big]\Big\}\Psi=0$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Эркин микрозаррача учун (87.4) ва (86.3) тенгламалар эквивалент бўлиши керак деган табиий талабни қўямиз. Чунки ташқи майдон таъсир этмаган ҳолларда (86.3) тенглама учун асос бўлган (86.2) классик релятивистик ифоданинг тўғрилигига шубҳа туғдира олмаймиз. Айтилган талабни қаноатлантириш учун $\vec{\alpha}$ ва β катталиклар учун

$$\alpha_x^2=\alpha_y^2=\alpha_z^2=\beta^2=1,$$
$$\alpha_x\alpha_y+\alpha_y\alpha_x=\alpha_y\alpha_z+\alpha_z\alpha_y=\alpha_z\alpha_x+\alpha_x\alpha_z=0, \qquad (87.5)$$
$$\alpha_x\beta+\beta\alpha_x=\alpha_y\beta+\beta\alpha_y=\alpha_z\beta+\beta\alpha_z=0$$

муносабатлар ўринли бўлиши кифоядир. Бу ҳолда (87.4) тенглама мос равишда (86.3) га ўтади. (87.5) дан кўринадики, юқорида қўйилган талаб бажарилиши натижасида бизни қизиқтираётган 4 та катталик α_x, α_y, α_z ва β жуфт-жуфт ҳолда антикоммутациялашиши ва уларнинг квадратлари бирга тенг бўлиши келиб чиқади. Худди ана шундай хусусиятга эга бўлган катталиклардан Паули матрицалари (σ_x, σ_y, σ_z) бизга 58-§ дан маълум. (87.5) муносабатларни оддий скаляр сонлар билан бажариб бўлмайди. Шу сабабдан α_x, α_y, α_z, β параметрларни фақат матрицалар кўринишида ифодалаш мумкин. Физик оператор бўлган (87.1) гамильтониан

эрмит операторлигидан $\widehat{\vec{\alpha}}$ ва $\widehat{\beta}$ тўртта матрицалардан бирортаси диагонал кўринишга эга бўлса, қолганлари диагонал матрицалар бўла олмайди. Бундан ташқари (87.5) га биноан тўрт матрицадан ҳар бирининг квадрати бирлик матрица бўлганлигидан, уларнинг хусусий қийматлари $+1$ ва -1 га

тенгдир. Юқорида кўрсатилган хоссаларга эга бўлган $\widehat{\vec{\alpha}}$ ва $\widehat{\beta}$ тўртта матрицанинг турли тасаввурларда турли хил кўринишларини топиш билан батафсил шуғулланмасдан, қисқалик учун матрицалар мумкин қадар энг кичик рангга эга бўлган тасаввурда уларнинг аниқ кўринишларидан бирини келтирамиз.

$$\widehat{\beta}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix},\quad \widehat{\alpha}_x=\begin{bmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{bmatrix}$$

$$\widehat{\alpha}_y=\begin{bmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{bmatrix},\quad \widehat{\alpha}_z=\begin{bmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{bmatrix} \qquad (87.6a)$$

ёки

$$\widehat{\beta}=\begin{bmatrix}\widehat{1}&0\\0&-\widehat{1}\end{bmatrix},\quad \widehat{\vec{\alpha}}=\begin{bmatrix}0&\widehat{\vec{\sigma}}\\\widehat{\vec{\sigma}}&0\end{bmatrix} \qquad (87.6б)$$

Бу ерда $\widehat{\vec{\sigma}}=(\widehat{\sigma}_x,\ \widehat{\sigma}_y,\ \widehat{\sigma}_z)$ — Паули матрицалари, $\widehat{1}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}$ 2×2 ўлчамдаги бирлик матрица. Аниқки, тўртала матрица ҳам эрмитдир, масалан, $\beta_{ij}=\beta^*_{ji}$.

Эркин микрозаррача учун Дирак тенгламаси (87.2а) маънога эга бўлиши учун (87.6а) матрицаларни эътиборга олсак, тўлқин функциясини

$$\widehat{\Psi}(\vec{r},t)=\begin{bmatrix}\Psi_1(\vec{r},\ t)\\\Psi_2(\vec{r},\ t)\\\Psi_3(\vec{r},\ t)\\\Psi_4(\vec{r},\ t)\end{bmatrix} \qquad (87.7)$$

шаклдаги матрица кўринишда олиш зарур. У ҳолда (87.2а) тенглама ҳақиқатда эса Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 ва Ψ_4 функциялар учун тўртта чизиқли, бир жинсли ва хусусий ҳосилали дифференциал тенгламалар системасидан иборат бўлади. Хусусий ечимларни

$$\Psi_j(\vec{r},\ t)=A_j e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)},\ j=1,\ 2,\ 3,\ 4 \qquad (87.8)$$

ясси тўлқинлар кўринишида ёзиш мумкин, A_j — доимий сонлар. Агар (87.6а), (87.7) ва (87.8) ларни (87.3 a) га қўйиб, (87.8) $\widehat{E}$ ва $\widehat{\vec{p}}$ операторларнинг $E=\hbar\omega$ ва $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ хусусий қийматларига мос келган хусусий функциялари эканлигини ҳисобга олсак, A_j коэффициентлар учун

$$(E + m_0c^2)A_1 + cp_zA_3 + c(p_x - ip_y)A_4 = 0,$$
$$(E + m_0c^2)A_2 + c(p_x + ip_y)A_3 - cp_zA_4 = 0,$$
$$(E - m_0c^2)A_3 + cp_zA_1 + c(p_x - ip_y)A_2 = 0, \quad (87.9)$$
$$(E - m_0c^2)A_4 + c(p_x + ip_y)A_1 - cp_zA_2 = 0$$

тўртта бир жинсли алгебраик тенгламалар системасини оламиз. Бу система A_j лар учун нолдан фарқли ечимга эга бўлиши учун уларнинг коэффициентларидан тузилган детерминант нолга тенг бўлиши керак. (87.9) дан айтилган детерминантни ҳисоблаб

$$(E^2 - m_0^2c^4 - c^2\vec{p}^2)^2 = 0 \quad (87.10)$$

натижага ёки бошқача айтганда қонуний равишда классик релятивистик механиканинг машҳур (86.1) ифодасига келамиз. Табиий равишда (87.10) дан энергия ва импульс орасидаги боғланиш учун

$$E = \pm c\sqrt{\vec{p}^{\,2} + m_0^2c^2} \quad (87.11)$$

иккита формула оламиз. Энергиянинг (87.11) дан мусбат $E_+ > > 0$ ва манфий $E_- < 0$ хусусий қийматлари учун (87.9) ва (87.8) ларга асосан икки группа Ψ_j^+, Ψ_j^- ($j = 1, 2, 3, 4$) ечимларни топиш мумкин. Текширишлардан маълум бўлишича, норелятивистик яқинлашишда $\Psi_1^+, \Psi_2^+ \ll \Psi_3^+, \Psi_4^+$ ва Ψ_1^- $\Psi_2^- \gg \Psi_3^-, \Psi_4^-$ яъни тўрт компоненталли тўлқин функцияни $E_+ > 0$ энергетик ҳолатлар учун $\begin{pmatrix}\Psi_3^+\\ \Psi_4^+\end{pmatrix}$ ва $E_- < 0$ да эса $\begin{pmatrix}\Psi_1^-\\ \Psi_2^-\end{pmatrix}$ икки компоненталли функциялар — спинорлар шаклида олиб ўрганса бўлади. Майдонларнинг квант назариясида заррачанинг манфий энергияли ҳолатини электр заряди қарама-қарши ва энергияси мусбат бўлган *антизаррача* ҳолати сифатида талқин қилинади. Шундай қилиб, Дирак тенгламаси тайинли бирор фазовий йўналишда (масалан, импульс вектори бўйлаб) иккита $\left(+\frac{1}{2}\hbar, -\frac{1}{2}\hbar\right)$ спин проекциясига эга бўлган заррача квант ҳолатларини биргаликда ифодалайди.

Энди *электромагнит майдон* билан таъсирлашаётган микрозаррача учун Дирак тенгламасини умумий ҳолда қисқача таҳлил қилайлик. Бундай тенгламани (87.2 *б*) дан релятивистик инвариантликни сақлаган ҳолда $\hat{E} \to \hat{E} - e\varphi$ ва $\hat{\vec{p}} \to \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}$ алмаштиришлар натижасида олиш мумкин:

$$\left[(\hat{E} - e\varphi)\cdot \hat{1} + \hat{\vec{\alpha}} \cdot \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \hat{\beta}\, m_0 c^2\right]\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = 0. \quad (87.12)$$

Бу ерда $\hat{1}$ — 4×4 ўлчамдаги бирлик матрица, $\hat{\vec{\alpha}}$, $\hat{\beta}$ ва $\hat{\Psi}$ лар юқорида (87.6 а) ва (87.7) формулалар билан аниқланган. Бир қатор шакл ўзгартиришлардан сўнг (87.12) ни

$$\left\{\left[\left(\hat{E} - e\varphi\right)^2 - \left(c\hat{\vec{p}} - e\vec{A}\right)^2 - m_0^2 c^4\right]\cdot \hat{1} + \right.$$

$$\left. + e\hbar c\, \hat{\vec{\sigma}}' \cdot \vec{H} + ie\hbar c\, \hat{\vec{\alpha}} \cdot \vec{\mathscr{E}}\right\}\hat{\Psi} = 0 \quad (87.13)$$

кўринишга келтирса бўлади. Мазкур тенгламада $\vec{\mathscr{E}}$ ва $\vec{H}$ ташқи электр ва магнит майдонларининг кучланганлик векторлари,

$$\hat{\vec{\sigma}}' = \begin{bmatrix} \hat{\vec{\sigma}} & 0 \\ 0 & \hat{\vec{\sigma}} \end{bmatrix} \quad (87.14)$$

— Паули матрицаларидан ташкил топган 4×4 вектор-матрица. (87.13) да биринчи учта ҳад (86.10) га мос келади ва ундан норелятивистик яқинлашишда $\hat{\Psi} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$ спинор учун

$$i\hbar\frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m_0}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\varphi - \frac{e\hbar}{2m_0 c}\hat{\vec{\sigma}}\vec{H}\right]\Psi \quad (87.15)$$

Паули тенгламаси хусусий ҳол сифатида келиб чиқади. Демак, Дирак тенгламаси ҳеч қандай гипотезага таянмасдан зарядли заррача $\hat{\vec{\mu}} = \frac{e\hbar}{2m_0 c}\hat{\vec{\sigma}}$ хусусий магнит диполь моментга эга бўлишини кўрсатади.

88-§. МАРКАЗИЙ СИММЕТРИК ПОТЕНЦИАЛ МАЙДОНДА ДИРАК ТЕНГЛАМАСИ

1. Бу параграфда дастлаб Дирак тенгламасидан электрон *хусусий импульс момент (спин)* га эга бўлиши ўз- ўзидан (аксиомасиз) келиб чиқишлини кўрсатамиз. Бунинг учун электроннинг марказий симметрик потенциал майдондаги ($\vec{A} = 0$, $\varphi(\vec{r}) = \varphi(r)$) ҳаракатини олиб қараймиз. Мос Дирак тенгламасини (87.12) га кўра

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\Psi}}{\partial t} = \widehat{\mathcal{H}\Psi}, \tag{88.1}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = -c\hat{\vec{\alpha}}\ \hat{\vec{p}} - \hat{\beta} m_0c^2 + V(r)\cdot \hat{1} \tag{88.2}$$

кўринишда ёзамиз. ($V(r) = e\varphi(r)$ — потенциал энергия, $\hat{1}$ — —4×4—матрица). Бундай симметрик майдонда орбитал импульс моменти $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p}$ ҳаракат интеграли, яъни сақланувчи катталик бўла оладими деган саволга жавоб излаймиз. Бунинг учун (18.6) ва (13.10) ларга асосан $\hat{\mathcal{H}}$ операторнинг юқоридаги ифодасидан фойдаланиб $d\hat{M}_z/dt$ операторнинг вақт бўйича ҳосиласини ҳисоблайлик. Агар $\vec{M} = -i\hbar(\vec{r} \times \vec{\nabla})$ оператор ҳар қандай марказий симметрик функция ёки оператор билан коммутациялашишини эътиборга олсак,

$$\frac{d\hat{M}_z}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\left(\hat{M}_z\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}} L_z\right) = \frac{i}{\hbar}c\hat{\vec{\alpha}}\left[\left(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\right)\cdot \hat{\vec{p}} - \right.$$

$$\left. - \hat{\vec{p}}\,(x\hat{p}_y - yp_x)\right] = c\,\left(\hat{\alpha}_y\,\hat{p}_x - \hat{\alpha}_x\,\hat{p}_y\right) \tag{88.3}$$

натижага келамиз. Бошқа $\hat{M}_x$, $\hat{M}_y$ ва ҳатто $\hat{\vec{M}}^2$ операторлар ҳам (88.2) гамильтониан билан коммутациялашмайди. Демак Дирак назарияси бўйича орбитал импульс моменти ва унинг барча проекциялари вақт ўтиши билан сақланмайдиган катталиклардир (бунинг сабаби спин-орбитал ўзаро таъсир мавжудлигида). Классик физикада ва Шредингер назариясида $\vec{M}^2$ ва M_z физик катталиклар ҳаракат интеграли бўлишини эсга олишимиз фойдалидир. Умумий физик мулоҳазаларга асосан марказий симметрик потенциал майдонда тўла импульс моменти сақланиши керак. Шу мақсадда худди (88.3) га ўхшаш $d\hat{\sigma}'_z/dt$ ҳосилани ҳисоблаб кўрайлик:

$$\frac{d\hat{\sigma}'_z}{dt} = -\frac{i}{\hbar}(\hat{\sigma}'_z\hat{\mathscr{H}} - \hat{\mathscr{H}}\hat{\sigma}'_z) = \frac{ic}{\hbar}(\hat{\sigma}'_z\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}} - \hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}}\hat{\sigma}'_z) =$$

$$= \frac{ic}{\hbar}\left[(\hat{\sigma}'_z\hat{\alpha}_x - \hat{\alpha}_x\hat{\sigma}'_z)\hat{p}_x + \left(\hat{\sigma}'_z\hat{\alpha}_y - \hat{\alpha}_y\hat{\sigma}'_z\right)\hat{p}_y\right] =$$

$$= -\frac{2}{\hbar}c\left(\hat{\alpha}_y\hat{p}_x - \hat{\alpha}_x\hat{p}_y\right) \qquad (88.4)$$

Биз бу ерда (87.6 *a*) ва (87.14) ларга биноан

$$\hat{\sigma}'_z\hat{\alpha}_x - \hat{\alpha}_x\hat{\sigma}'_z = 2i\hat{\alpha}_y$$

$$\hat{\sigma}'_z\hat{\alpha}_y - \hat{\alpha}_y\hat{\sigma}'_z = -2i\hat{\alpha}_x,$$

$$\hat{\sigma}'_z\hat{\alpha}_z - \hat{\alpha}_z\hat{\sigma}'_z = 0,$$

$$\hat{\sigma}'_z\hat{\beta} - \hat{\beta}\hat{\sigma}'_z = 0$$

коммутацион муносабатларни эътиборга олдик. Юқоридаги (88.3) ва (88.4) ифодаларни таққослаб жуда муҳим хулосага келамиз:

$$\frac{d}{dt}\left(\hat{\vec{M}}_z\cdot\hat{1} + \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}'_z\right) = \frac{d\hat{I}_z}{dt} = 0$$

ёки умумий ҳолда

$$\frac{d\hat{\vec{I}}}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\hat{\vec{M}}\cdot\hat{1} + \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}'\right) = 0,$$

яъни марказий симметрик майдонда микрозаррачанинг тўла импульс моменти оператори

$$\hat{\vec{I}} = \hat{\vec{M}}\cdot\hat{1} + \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}' \qquad (88.5)$$

гамильтониан $\hat{\mathscr{H}}$ билан коммутациялашади ва демак, ҳаракат интегралидир. Табиий равишда

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}' \qquad (88.6)$$

оператор микрозаррачанинг спин оператори деб номланади. У ҳолда хусусий қиймат ҳақидаги теоремага мувофиқ

$$\hat{\vec{I}^2}\hat{\Psi} = \vec{I}^2\,\Psi, \quad \vec{I}^2 = \hbar^2 \cdot j\,(j+1) \tag{88.7}$$

ни ёзиш мумкин. Квант сони $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ \ldots$ қийматларни қабул қилиб, тўла импульс моментининг квантлашган қийматларини аниқлайди ва ички квант сони деб номланади.

2. Энди худди шунингдек *спин- орбитал ўзаро таъсир* энергияси ҳам Дирак тенгламасидан ўз- ўзидан келиб чиқишини кўрсатайлик. Бунинг учун (88.1) га мос келган Диракнинг стационар тенгламасини ёзамиз:

$$E\,\hat{\psi}(\vec{r}) = \left[-c\,\hat{\vec{\alpha}}\,\hat{\vec{p}} - \beta_0 m_0 c^2 + V(r)\cdot\hat{1}\right]\hat{\psi}(\vec{r}). \tag{88.8}$$

Энергия E да микрозаррачанинг тинчликдаги энергиясини ажратиб олайлик: $E = E' + m_0c^2$ ва E', $V(r) \ll m_0c^2$ деб фараз қилайлик. У ҳолда (88.8) тўлқин тенгламасини (87.6б) асосида

$$[E' + 2m_0c^2 - V(r)]\,\hat{\psi}_{\rm I} + c\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}\,\hat{\psi}_{\rm II} = 0,$$

$$[E' - V(r)]\,\hat{\psi}_{\rm II} + c\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}\,\psi_{\rm I} = 0 \tag{88.9}$$

кўринишга келтириш мумкин. Бу тенгламаларда $\hat{\psi}_{\rm I} = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$, $\hat{\psi}_{\rm II} = \begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}$ ва $\hat{\psi} = \begin{pmatrix}\psi_{\rm I}\\ \psi_{\rm II}\end{pmatrix}$ белгилашлар киритилди. (88.9) дан кўринадики, $\hat{\psi}_{\rm I}$ функция $\left(\frac{v}{c}\,\hat{\psi}_{\rm II}\right)$ тартибидаги катталикдир ва шунинг учун $\hat{\psi}_{\rm II}$ функцияни текшириш муҳимроқдир. Юқоридаги тенгламалар системасидан $\hat{\psi}_{\rm I}$ ни йўқотиб $\hat{\psi}_{\rm II}$ спинор учун

$$E'\hat{\psi}_{\rm II} = \frac{1}{2m_0}\,(\hat{\vec{\sigma}}\,\hat{\vec{p}})\left[1 + \frac{E' - V(r)}{2m_0c^2}\right]^{-1}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\,\hat{\psi}_{\rm II} + V(r)\,\hat{\psi}_{\rm II} \tag{88.10}$$

тенгламага келамиз. Агар бу ерда

$$\left[1 + \frac{E' - V(r)}{2m_0c^2}\right]^{-1} \approx 1 - \frac{E' - V(r)}{2m_0c^2},$$

$$\hat{\vec{p}}V = V\cdot\hat{\vec{p}} - i\hbar\nabla V,$$

$$(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{\nabla}V)(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}) = \vec{\nabla}V\cdot\hat{\vec{p}} + i\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\vec{\nabla}V\times\hat{\vec{p}}),$$

$$\vec{\nabla}V(r) = \mathrm{grad}\,V(r) = \frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\cdot\vec{r},$$

$$\vec{\nabla}\vec{V}(r)\cdot\vec{\nabla} = \mathrm{grad}\,V(r)\cdot\mathrm{grad}\,V = \frac{dV(r)}{dr}\cdot\frac{\partial}{\partial r},$$

$$E' - V(r) \approx \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_0}$$

муносабатларни эътиборга олсак, (88.10) ни қуйидагича қайта ёзиш мумкин:

$$E'\hat{\psi}_{11} = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_0} - \frac{\hat{\vec{p}}^4}{8m_0^3c^2} + V(r) - \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r} + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}})\right]\psi_{11}. \qquad (88.11)$$

Тengламанинг чап томони ва ўнг томонидаги биринчи, учинчи ҳадлар биргаликда Шредингернинг норелятивистик тенгламасини беради. $\frac{\hat{\vec{p}}^4}{8m_0^3c^2}$ ҳад микрозаррача массаси оладиган биринчи яқинлашишдаги релятивистик тузатма билан боғлиқ:

$$E' = E - m_0c^2 = \sqrt{c^2\vec{p}^2 + m_0^2c^4} - m_0c^2 \approx \frac{\vec{p}^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2}$$

(88.11) нинг ўнг томонидаги 4-ҳад потенциал энергияга киритиладиган релятивистик тузатма, ниҳоят, охирги ҳад эса зарядли заррача хусусий ($\vec{S}$) ва орбитал ($\vec{M}$) моментларининг ўзаро таъсир (спин-орбитал) энергиясини ифодалайди.

3. Дирак тенгламаси (88.8) ни сферик координаталар системасида худди Шредингер тенгламаси каби ўзгарувчиларни ажратиш усули билан ечиб, марказий симметрик потенциал майдонда ҳаракатланаётган микрозаррачанинг *энергетик спектрини* аниқлаш мумкин.

Шу мақсадда

$$\hat{p}_r = r^{-1}(\vec{r}\cdot\hat{\vec{p}} - i\hbar) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right), \qquad (88.12)$$

$$\hat{\alpha}_r = r^{-1}(\hat{\vec{\alpha}} \cdot \vec{r}), \tag{88.13}$$

$$\hat{K} = \hat{\beta}(\hat{\vec{\sigma}}' \cdot \hat{\vec{L}} + \hbar \cdot \hat{1}) \tag{88.14}$$

операторларни киритамиз. Кўрсатиш мумкинки,

$$\hat{\vec{\alpha}} \cdot \hat{\vec{p}} = \hat{\alpha}_r \cdot \hat{p}_r + ir^{-1}\hat{\alpha}_r \hat{\beta} \hat{K}.$$

У ҳолда (88.8) тенгламани

$$E\hat{\psi}(r, v, \varphi) = \hat{\mathscr{H}}\hat{\psi}(r, v, \varphi). \tag{88.15}$$

$$\hat{\mathscr{H}} = -c\hat{\alpha}_r \hat{p}_r - \frac{ic}{r}\widehat{\alpha_r \beta}\hat{K} - \hat{\beta} m_0 c^2 + V(r) \cdot \hat{1} \tag{88.16}$$

кўринишда ёзиш мумкин. K оператор $\hat{p}_r$, $\hat{\alpha}_r$, $\hat{\beta}$ операторлар билан ва демак, гамильтониан (88.16) билан коммутациялашади, яъни унга мос келган катталик K вақт ўтиши билан ўзгармасдир. Агар (88.14) ни квадратга кўтарсак,

$$\hat{K} = (\hat{\vec{\sigma}}' \vec{M})^2 + 2\hbar(\hat{\vec{\sigma}}' \vec{M}) + \hbar^2 \cdot \hat{1} = (\hat{\vec{M}} \cdot \hat{1} + \hat{\vec{S}})^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 \cdot \hat{1}. \tag{88.17}$$

$\hat{K}$ ва $\hat{\vec{I}}$ операторларни боғловчи ифода ҳосил бўлади. Энди (88.7) ни эътиборга олсак,

$$\widehat{K^2}\hat{\psi} = K^2\psi, \; K^2 = j(j+1)\hbar^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 = \left(j + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2 = k^2\hbar^2 \tag{88.18}$$

бўлиб, K катталикнинг квантлашган қийматларини аниқловчи квант сони $k = +1, \pm 2, \pm 3, \ldots$ қийматлар қабул қилишини топамиз. Тўлқин функцияси $\hat{\psi}$ нинг бурчаклар θ, φ ва спинга боғлиқ бўлган қисмлари $\hat{\psi}$ функция $\hat{K}$ операторнинг хусусий функцияси бўлиши, яъни $\hat{K}\psi = \hbar k \cdot \hat{\psi}$ шартдан аниқланиши лозим. Энергетик сатҳларни ҳисоблаш учун эса тўлқин функциянинг радиал қисми зарур (47- § га қаранг). $\hat{\mathscr{H}}$ ва $\hat{K}$ операторлар мос ҳолда E ва $\hbar k$ хусусий қийматларга эга бўлган диагонал матрицалар кўринишида ифоданадиган тасаввурга ўтилса, $\hat{\alpha}_r$ ва $\hat{\beta}$ катталикларни $\hat{\alpha}_r^2 = \hat{\beta}^2 = \hat{1}$, $\hat{\alpha}_r \cdot \hat{\beta} + \hat{\beta} \cdot \hat{\alpha}_r = 0$ шартларни қаноатлантирадиган

$$\hat{\alpha}_r = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_y, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_z \tag{88.19}$$

2×2 — ўлчамли матрицалар сифатида танлаб олса бўлади. У ҳолда радиал тўлқин функция икки компонентага эга ва уни

$$\begin{pmatrix} r^{-1} F(r) \\ r^{-1} G(r) \end{pmatrix} \tag{88.20}$$

кўринишда оламиз. (88.15), (88.16), (88.19) ва (88.20) лардан

$$[E+m_0c^2 - V(r)]\, F(r) - \hbar c \frac{d\,G(r)}{dr} - \frac{\hbar ck}{r} G(r) = 0,$$

$$[E - m_0c^2 - V(r)]\, G(r) + \hbar c \frac{d\,F(r)}{dr} - \frac{\hbar ck}{r} F(r) = 0 \tag{88.21}$$

тенгламалар системасини ҳосил қилиш мумкин. Бу ерда $V(r) = -Ze_0^2/r$ деб ҳисоблаб водородсимон атомлар энергетик спектрини аниқлаймиз. Қулайлик учун (88.21) да

$$\alpha_1 = \frac{m_0c^2+E}{\hbar c}, \quad \alpha_2 = \frac{m_0c^2-E}{\hbar c}, \ \rho = \alpha r,$$

$$\alpha = +(\alpha_1\alpha_2)^{1/2} = \frac{\sqrt{m_0^2c^4-E^2}}{\hbar c}, \quad \gamma = Z^2\frac{e_0^2}{\hbar c} = Z^2\frac{1}{137} \tag{88.22}$$

белгилашлар киритамиз. У ҳолда (88.21)

$$\left(\frac{d}{d\rho} + \frac{k}{\rho}\right) G(r) - \left(\frac{\alpha_1}{\alpha} + \frac{\gamma}{\rho}\right) F(r) = 0,$$

$$\left(\frac{d}{d\rho} - \frac{k}{\rho}\right) F(r) - \left(\frac{\alpha_2}{\alpha} - \frac{\gamma}{\rho}\right) G(r) = 0 \tag{88.23}$$

кўринишни олади. Худди 47-§ даги сингари

$$F(\rho) = f(\rho)\cdot e^{-\rho}, \quad G(\rho) = g(\rho)\cdot e^{-\rho}$$

муносабатлар ёрдамида $f(\rho)$ ва $g(\rho)$ функцияларга ўтсак,

$$\frac{dg(\rho)}{d\rho} - g(\rho) + \frac{k}{\rho} g(\rho) - \left(\frac{\alpha_1}{\alpha} + \frac{\gamma}{\rho}\right) f(\rho) = 0, \tag{88.24}$$

$$\frac{df(\rho)}{d\rho}-f(\rho)-\frac{k}{\rho}f(\rho)-\left(\frac{\alpha_2}{\alpha}-\frac{\gamma}{\rho}\right)g(\rho)=0$$

биринчи тартибли чизиқли дифференциал тенгламалар системаси ҳосил бўлади. Уларнинг ечимларини

$$f(\rho)=\rho^s\cdot\sum_{\gamma=0}^{\infty}a_\gamma\rho^\gamma,\quad a_0\neq 0,$$

$$g(\rho)=\rho^s\cdot\sum_{\gamma=0}^{\infty}b_\gamma\rho^\gamma,\quad b_0\neq 0 \tag{88.25}$$

даражали қаторлар кўринишида излаймиз. Албатта (88.20) функциялар $r\to 0$ да чекли бўлиши учун $s>1$ шарт бажарилиши керак. (88.25) функцияларни (88.24) тенгламаларга қўйиб, ρ ўзгарувчининг бир хил даражали ҳадларини йиғиб ва нолга тенглаштириб a_γ, b_γ номаълум коэффициентларни аниқлаш учун

$$(s+\gamma+k)\,b_\gamma-b_{\gamma-1}-\gamma a_\gamma-\frac{\alpha_1}{\alpha}\,a_{\gamma-1}=0,$$

$$(s+\gamma-k)\,a_\gamma-a_{\gamma-1}+\gamma b_\gamma-\frac{\alpha_2}{\alpha}\,b_{\gamma-1}=0 \tag{88.26}$$

рекуррент ифодаларга келамиз. Агар $v=0$ бўлса, (88.26)

$$(s+k)\,b_0-\gamma a_0=0,$$
$$(s-k)\,a_0+\gamma b_0=0$$

системага ўтади. Изланаётган a_0 ва b_0 учун охирги система нолдан фарқли ечимга фақат унинг детерминанти нолга айлангандагина эга бўлади. Бу шартдан

$$s=\pm\sqrt{k^2-\gamma^2} \tag{88.27}$$

натижани ҳосил қиламиз. Ушбу ифодада $k=\pm 1,\ \pm 2, \ldots$ квант сони эканлигини эслатиб ўтамиз. Юқорида тилга олинган $\rho\to 0$ даги чегаравий шартга биноан (88.27) да «+» ишорани олиш керак.

Табиийки, тўлқин функциясининг физик маъносидан келиб чиқиб, (88.20) ечимлар $\rho\to 0$ да чекли бўлишини талаб қилиш керак. Бунинг учун эса (88.25) даги ҳар иккала қаторни бирор ҳадидан бошлаб узиш ва уларни чекли полиномга айлантириш зарур. Айтайлик, қаторларда нолдан фарқли охирги ҳаднинг тартиб номери $\nu = n_r$ бўлсин. У ҳолда $a_{n_r} \neq 0$, $b_{n_r} \neq 0$, $a_{n_r+1} = a_{n_r+2} = \ldots = b_{n_r+1} = b_{n_r+2} = \ldots = 0$ ва (88.26) дан

$$\alpha_1 a_{n_r} = -\alpha \cdot b_{n_r}, \quad n_r = 0, 1, 2, \ldots \tag{88.28}$$

муносабатни топамиз. Баъзи адабиётларда n_r радиал квант сони номи билан юритилади. Энди (88.26) тенгламалар системасининг биринчисини α га, иккинчисини эса α_1 га кўпайтириб, сўнгра бирини иккинчисидан ҳадлаб айирсак ва $\alpha = \sqrt{\alpha_1 \alpha_2}$ ни эътиборга олсак,

$$b_\nu [\alpha (s + \nu + k) - \alpha_1 \gamma] = a_\nu [\alpha_1 (s + \nu - k) + \alpha \gamma]$$

ифода келиб чиқади. Бу ерда $\nu = n_r$ ва (88.28) ни қўйиб, (88.22) белгилашларга биноан

$$2\alpha (s + n_r) = \gamma (\alpha_1 - \alpha_2)$$

ёки

$$\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2} \cdot (s + n_r) = E\gamma$$

ва ниҳоят, охиргидан

$$E = m_0 c^2 \left[1 + \frac{\gamma^2}{(s + n_r)^2}\right]^{-1/2} \tag{88.29}$$

энергетик спектрни ҳисоблаш учун формулага эга бўламиз. Водород атоми учун $\gamma = e_0^2/\hbar c \approx 1/137 \ll 1$ катталик нозик структура доимийси деб номланади. Формуладаги $s > 1$ (88.27) дан топилади. Агар (88.29) ни γ^2 кичик миқдор даражаси бўйича қаторга ёйиб, γ^4 га пропорционал ҳад билан чегаралансак

$$E_{nj} = m_0 c^2 \left[1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right] \tag{88.29'}$$

энергетик спектрнинг нозик структурага эга эканлиги ошкор ҳолда кўринади. Бу формулада $n = 1, 2, 3, \ldots$ — бош квант сони, $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$ — ички квант сондир. (88.29') дан берилган n учун нозик структурани ташкил этувчи сатҳлар системасининг «кенглиги» учун (86.25) га ўхшаш

$$\Delta E_n = E_{n,\, n-\frac{1}{2}} - E_{n,\, \frac{1}{2}} = m_0 c^2 \frac{\gamma^4}{n^3} \cdot \frac{n-1}{2n} \tag{88.30}$$

ифода келиб чиқади. Дирак тенгламалари асосида олинган (88.29) ёки (88.29′) ва (88.30) формулалар сатҳларнинг Лэмб силжишини эътиборга олмаганда тажрибага яхши мос келади.

XVI бобга доир масалалар

1. s- ҳолатдаги спинсиз заррачанинг

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & \text{агар } r \leqslant a, \\ 0, & \text{агар } r > a \end{cases}$$

сферик потенциал ўрадаги энергетик спектрини аниқловчи тенгламани Шредингернинг стационар релятивистик тенгламасидан келтириб чиқаринг.

Жавоби: $\operatorname{tg} \sqrt{\frac{2m_0 U_0 a_2}{\hbar^2} - k_n^2 a^2} = -\frac{1}{k_n a} \sqrt{\frac{2m_0 U_0 a^2}{\hbar^2} - k_n^2 a^2}$,

$$k_n = \sqrt{(m_0^2 c^4 - E)} \, / \hbar c > 0.$$

2. Доимий электромагнит майдондаги зарядланган спинсиз заррача учун Шредингернинг стационар релятивистик тенгламасидан чегаравий ҳолда норелятивистик тенгламани келтириб чиқаринг.

3. Қуйидаги операторлардан қайси бири спини $s = 1/2$ бўлган эркин релятивистик заррача гамильтонианн билан коммутациялашади:

а) $\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}$; б) $\hat{\vec{M}} = -i[\vec{r}, \vec{\nabla}]$.

4. He^+ иони учун $n = 2$ энергетик сатҳ нозик структурасининг қўшни компонентлари орасидаги интервални ($см^{-1}$ бирлигида) аниқланг.

Жавоби: 1,73 ва 0,58 $см^{-1}$ (учта сатҳ).

5. Атомар водороднинг Бальмер сериясидаги бош спектрал чизиқнинг нозик структурасини пайқаш учун спектрал асбобнинг ажрата олиш қобилияти қандай бўлиши керак?

Жавоби: $\lambda / \Delta\lambda \geqslant 4{,}2 \cdot 10^3$.

АДАБИЕТ

1. Д. И. Блохинцев Квантовая механика. М.: Наука, 1983 й.
2. А. С. Давидов. Квантовая механика. М.: Наука, 1973 й.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1987 й.
4. А. А. Соколов, И. М. Тернов. Квантовая механика и атомная физика М.: Просвещение, 1970 й.
5. Э. В. Шпольский. Атомная физика, т. 2. М.: Наука, 1984 й.
6. Л. Шифф Квантовая механика. М.: Иностранная литература, 1957 й.
7. Альберт Мессиа. Квантовая механика. М.: Наука, 1978 й. 1- ва 2- томлар.
8. П. А. Дирак. Принципы квантовой механики. М.: Наука, 1979 й.
9. А. А. Соколов, И. М. Тернов, В. Ч. Жуковский. Квантовая механика. М.: Наука, 1979 й.
10. А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов. Квантовая механика М.: Учпедгиз, 1962 й.
11. Д. Бом. Квантовая теория. М.: Наука, 1965 й.
12. А. В. Фок. Начало квантовой механики. М.: Наука, 1976 й.
13. И. В. Савельев. Основы теоретической физики, т. 2. М.: Наука, 1977 й.
14. Л. Л. Гольдин, Г. И. Новиков. Введение в квантовую физику. М.: Наука, 1988 й.
15. Э. Ферми. Квантовая механика. М.: Мир, 1968 й.
16. В. Паули. Общие принципы волновой механики. М.: Гостехиздат, 1947 й.
17. Г. Липкин. Квантовая механика. М.: Мир, 1977 й.
18. Г. Бете. Квантовая механика. М.: Мир, 1965 й.
19. Г. Бете, Е. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: Физматгиз, 1960 й.
20. М. И. Петрашень, Е. Д. Трифонов. Применение теории групп в квантовой механике. М.: Наука, 1977 й.
21. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1981 й.
22. З. Флюгге. Задачи по квантовой механике. М.: Мир, 1974 й. 1 ва 2 томлар.
23. Ф. Г. Серова, А. А. Янкина. Сборник задач по теоритической физике. М.: Просвещение, 1979 й.
24. Л. Г. Гречко, В. И. Сугаков, О. Ф. Томасевич, А. М. Федорченко. Сборник задач по теоретической физике. М.: Высшая школа, 1972 й.

Ҳарфий белгилашлар

h, $\hbar = h/2\pi$ — Планк доимийси
$\vec{v}$ — тезлик
c — ёруғликнинг вакуумдаги тезлиги
$\vec{p}$, $\vec{P}$ — импульс
m_0 — заррачанинг тинчликдаги массаси
t — вақт
T — абсолют температура, тебраниш даври, кинетик энергия
ν — частота
ω — доиравий частота
ω_0 — гармоник осцилляторнинг хусусий частотаси
λ — тўлқин узунлик
K — градус Кельвин
$k_Б$ — Больцман доимийси
$\vec{k}$, k — тўлқин вектори, тўлқин сони
$e = -e_0$ — электрон заряди
Z — ядронинг заряд сони
μ — магнит киритувчанлик (сингдирувчанлик), атомнинг магнит моменти
μ_l, μ_s — атомнинг орбитал ва спин магнит моментлари
$\vec{\mathscr{E}}$ — электр майдон кучланганлиги
$\vec{d}$ — электр диполь моменти
$\vec{H}$ — магнит майдон кучланганлиги
$\vec{B}$ — магнит майдон индукцияси
$\vec{A}$ — вектор потенциал
U — потенциаллар фарқи, потенциал энергия
V — ҳажм, потенциал энергия
A — электроннинг металлдан чиқиш иши
ρ — электр зарядининг зичлиги
$\vec{j}$ — электр токининг зичлиги
s — таъсир функцияси
a_0 — биринчи Бор радиуси
μ_0 — Бор магнетони

$i = \sqrt{-1}$ — мавҳум бирлик
x, y, z — Декарт координаталар
r, θ, φ — сферик координаталар
$\vec{R}, \vec{r}$ — радиус-вектор
ε — фотон энергияси, нурланиш энергиясининг оқим зичлиги, диэлектрик киритувчанлик (сингдирувчанлик)
ρ_ω — нурланиш энергиясининг спектрал зичлиги
ψ, Ψ — тўлқин функцияси
φ — тўлқин фазоси, тўлқин функцияси, азимутал бурчак
w — эҳтимоллик зичлиги
D — потенциал тўсиқнинг тиниқлиги
$\widehat{K}, \widehat{Л}, \widehat{G}$ — операторлар, матрицалар
$E, \widehat{E}, W, \widehat{W}$ — энергия, энергия оператори
$\widehat{\mathcal{H}}$ — Гамильтон оператори
$\widehat{\vec{M}}$ — импульс моменти оператори
n — квант сони, бош квант сони, ёруғликнинг синдириш кўрсаткичи
l, m, m_s — орбитал, магнит ва спин квант сонлари
$\exp \ldots = e^{\cdots}$ — экспоненциал функция
δ_{ik} — Кронекер — Вейерштрасс белгиси
$\delta(x - x_0)$ — Диракнинг дельта функцияси
θ_l^m — қутб тўлқин функцияси
Φ_m — азимутал тўлқин функция
R_{nl} — радиал тўлқин функция
y_l^m, Y_l^m — шар функция
H_m — Эрмит полиноми
P_l, P_l^m — Лежандр полиномлари
A_{mn}, B_{mn} — Эйнштейн коэффициентлари
C_n — n-тартибли симметрия ўқи
σ_v, σ_h — симметрия текисликлари
S_n — n-тартибли кўзгули буралиш ўқи
g_m — гиромагнит нисбатан
$\vec{I}$ — атомнинг тўлиқ механик моменти
$\widehat{\sigma}_x, \widehat{\sigma}_y, \widehat{\sigma}_z$ — Паули матрицалари
$\gamma = \dfrac{e_0^2}{c\hbar}$ — нозик структура доимийси
$\widehat{\alpha}_x, \widehat{\alpha}_y, \widehat{\alpha}_z, \widehat{\beta}$ — Дирак матрицалари

МУНДАРИЖА

Г. Ҳ. ҲОШИМОВ
Р. Я. РАСУЛОВ.
Н. Х. ЮЛДАШЕВ

ҚВАНТ МЕХАНИКАСИ

Педагогика институтлари
учун ўқув қўлланма

Тошкент «Ўқитувчи» 1995

Таҳририят мудири *М. Пўлатов*
Муҳаррир *М. Пўлатов*
Расмлар муҳаррири *Н. Сучкова*
Техн. муҳаррир *Т. Скиба*
Мусаҳҳиҳ: *М. Иброҳимова*

ИБ № 6430

Теришга берилди 16.05.95. Босишга рухсат этилди 21.09.95. Бичими 84×108/32. Литер. гарн. кегли 10 шпонсиз. Юқори босма усулида босилди. Шартли б. л 19.74. Шартли кр, от. т 19.95. Нашр. л 18.5. Нусхаси 5000. Буюртма № 2756.

«Ўқитувчи» нашриёти. 700129. Тошкент. Навоий кўчаси. 30.
Шартнома № 9—35—92.

Ўзбекистон Давлат матбуот қўмитасининг Тошполиграфкомбинати. Тошкент. Навоий кўчаси, 30, 1995.

Ҳ 71

Ҳошимов Ғ. Ҳ. ва бошқ.
Квант механикаси асослари: Педагогика олий ўқув юртлари учун ўқув қўлланма (Ғ. Ҳ. Ҳошимов, Р. Я. Расулов, Н. Х. Юлдашев. — Т.: Ўқитувчи, 1995. 376 б.

I. 1,2 Автордош.

22.314я73

Тираж 2000
Карт. тиражи 4000