TÜRKMENISTANYŇ BILIM MINISTRLIGI
MAGTYMGULY ADYNDAKY TÜRKMEN
DÖWLET UNIWERSITETI

G.Orazow, G.Annamuhammedow

KWANT MEHANIKASY

Yokary okuw mekdepleriniň talyplary üçin okuw gollanmasy

Türkmenistanyň Bilim ministrligi tarapyndan hödürlenildi

Aşgabat - 2010

G.Orazow, G.Annamuhammedow

KWANT MEHANIKASY

Yokary okuw mekdepleriniň talyplary üçin okuw gollanmasy

Sözbaşy

Hormatly Prezidentimiz Gurbanguly Berdimuhammedow ýurt başyna geçen ilkinji günlerinden başlap ylymy we bilimi düýbünden özgertmek, onuň dünýä ülňülerine laýyk bolmagyny gazanmak baradaky başlangyçlary öňe sürmek bilen türkmen döwletiniň ösüş ýoluny kesgitledi. Hormatly Prezidentimiziň belleýşi ýaly, "Güýçli döwletde ylym esasy orny eýeleýär, diýmek, biz ylmyň iň täze gazananlary bilen aýakdaş gitmelidiris".

Şu ýerde Watanymyzda her ýyl iýun aýynyň 12-de "Ylymlar güni" baýramçylygynyň uly dabara bilen bellenilýändiginiň tötänden däldigini bellemelidiris. Şu jähtden ugur alynsa, onda ýokary mekdepler üçin taýýarlanylýan gollanmalar ylmyň hem häzirki zaman soraglaryny we üstünliklerini öz içine almalydyr. Şu talaba, "kwant mehanikasy" dersi boýunça ýerine ýetirlen okuw gollanamasy käbir derejede laýyk gelýär diýip hasap etseň bolar.

Okuw gollanamasynda beýan edilen soraglar esasan şertli sekiz bölümlere bölünip biliner.

Birinji bölümde, fizika "kwant" düşünjäniň girizilişi, M.Plankyň formulasy, kwantyň we elektronyň dualizm häsiýeti, kwant mehanikasynyň esasy düşünjeleri we Şrýodingeriň deňlemesi beýan edilýär.

Ikinji bölümde, kwant mehanikasyndan klassyky mehanikasyna geçirişi seredilýär. Kwant mehanikasynyň klassyky mehanikasyny düýpgöter inkär etmeýänligini we ony özüniň hususy ýagdaýy ýaly garaýandygy aýdyň görkezilýär.

Üçünji bölümde, kwant mehanikasy bilen bir wagtda matrisaly mehanikasynyň döredilmeginiň zerurlygy we, kwant mehanikasynyň esasy düşünjeleriniň matrisaly mehanikasynda aňladylyşlary berilýär.

Dördünji bölümde, Şrýodingeriň deňlemesiniň käbir ýönekeý sistemalara ulanylyşy aýdyň görnüşde beýan edilýär. Bölejigiň käbir daşky meýdanda hereketi derňelinýär we onuň stasionar ýagdaýlary tapylýar.

Bäşinji bölümde, elektronyň spini bilen bagly soraglar barlanylýar we Pauliniň deňlemesine garalýar.

Altynjy bölümde, kwant nazaryýetiniň ýakynlaşma usuly, tolgundyrma nazarýetiniň esaslary berilýär we onuň ýönekeý ulanylyşyna mysal edip angarmoniki ossilýatoryň hususy energiýasy hasaplanylýar.

Ýedinji bölümde, köp bölejikleriň nazarýetiniň esaslary, fermionlar we bozonlar baradaky käbir maglumatlar, Pauliniň prinsipiniň kwant mehanikasynda aňladylyşy we Mendeleýewiň elementler üçin periodiki kanunynyň fiziki taýdan esaslandyryşy berilýär.

Sekizinji bölümde, relýatiwistik däl kwant mehanikasynyň ulanylyşynyň çäkleri we onuň mundan beýläk ösdürilmeginiň zerurlygy esaslandyrylýar. Elektronyň spin we relýatiwistik effektlerini hasaba alýan Diragyň deňlemesi getirilip çykarylýar we ol deňlemeden položitel žarýadly elektronyň - pozitronyň barlygy baradaky gipotezanyň ýüze çykyşy görkezilýär.

Gollanma, Magtymguly adyndaky Türkmen döwlet uniwersitetiniň fizika fakultetiniň "fizika" we "radiofizika we elektronika", matematika fakultetiniň "matematika" we "amaly matematika we informatika" hünärlerine köp ýyllaryň dowamynda umumy we amaly okuwlarynda okadylýan materiallar girizildi.

Okuw gollanmasy diňe ýokary okuw mekdepleriniň talyplaryna däl-de, kwant mehanikasy bilen gyzyklanýanlara hem peýdalydyr.

Giriş

Kwant nazarýeti – has umumy we köp zady öz içine alýan häzirki zaman fiziki nazarýetdir. Ol fizikada matematiki usulyň giden ulanmagynyň netijesinde döredi. Şeýlelikde, nazary fizikasy özüniň usuly boýunça matematiki, mazmuny boýunça bolsa fiziki ylymdyr. Kwant nazarýeti kwant mehanikasyny, kwant statistikasyny we meýdanyň kwant nazarýetini (şol sanda kwantelektrodinamikasyny) birleşdirýär.

Kwant statistikasy – köp sanly bölejiklerden duran kwant ulgamlarynyň statistiki fizikasydyr. Ol bitin spinli bölejikler üçin Bozeniň-Eýnşteýniň statistikasy, ýarym bitinli spinli bölejikler üçin bolsa Ferminiň-Diragyň statistikasy.

Meýdanyň kwant nazarýeti – kwant prinsiplerine esaslanyp fiziki meýdanlaryň özaratäsirleşmesini we özaraöwrülmeklerini suratlandyrýan we derňeýän fiziki nazarýetiň umumy adydyr. Şu nazarýet ilki bilen ýokary energiýadaky hadysalary suratlandyrmaga niýetlenendir we şonuň üçin ol otnasitelligiň nazarýetiniň talaplary bilen ylalaşmalydyr.

Kwant nazarýetiniň bölümleriniň arasynda kwant mehanikasy has ýerlikli orny eýeleýär.

Kwant mehanikasy (tolkun mehanikasy) – mikrobölejikleri (elementar bölejikleri, atomlary, molekulalary, atom ýadrolary) we olaryň ulgamlaryny (mysal üçin: kristallary) beýan etmek usulyny kadalaşdyrýan, olaryň hereketleriniň kanunlaryny, hem-de bölejikleri we ulgamlary häsiýetlendirýän fiziki ululyklar bilen tejribede gös-göni ölçelinýän fiziki ululyklaryň arasyndaky baglanyşygy suratlandyrýan nazarýetdir.

Kwant mehanikasynyň kanunlary jisimleriň düzümini öwrenmekligiň esasyny düzýärler. Olar atomlaryň düzümlerini aýdyňlaşdyrmaklyga, himiki baglanyşyklaryň tebigatyny kesgitlemeklige, elementleriň periodiki ulgamyny fiziki taýdan esaslandyrmaklyga, atom ýadrolarynyň düzümlerine düşünmeklige we elementar bölejikleriň häsiýetlerini öwrenmeklige ýol açdylar. Makraskopiki jisimleriň häsiýetleri öz düzümini emele getirýän bölejikleriň hereketleri we özaratäsirleşmeleri bilen kesgitlenýändikleri sebäpli, kwant mehanikasynyň kanunlary makraskopiki hadysalaryň köpüsiniň düşünmekliginiň esasynda hem ýerleşýärler. Şeýlelikde, kwant mehanikasy mikrodünýäde bölejikleriň hereketlerini öwrenýär. Muňa atomda, molekulada, gaty jisimde, elektromagnit meýdanda elektronyň hereketi mysal bolup biler. Şol bir babatda ol şol hereketleri tejribe arkaly we nazary usul bilen öwrenýär.

Özüniň manysy boýunça kwant mehanikasy, klassiki mehanikanyň, elektrodinamikanyň, materiýanyň kinetiki nazarýetiniň we nazary fizikanyň başga-da bölümleriniň, mundan beýläk ösdürilmegidir.

XIX asyryň ikinji ýarymynda klassiki düşünjeleriň üsti bilen esaslandyryp we düşündirip bolmaýan bir näçe tejribede alnan maglumatlar açyldylar. Meselem, deňagramly şöhlelenmäniň nazarýetini dikeltmeklik, fotoeffekt hadysasyny we Komptonyň effektini düşündirmeklik üçin ýagtylygyň tolkun häsiýeti bilen bir hatarda onuň korpuskula (bölejik) häsiýetiniň hem bardygyny girizmeklik zerurlygy ýüze çykdy. Şu tassyklama ilki bilen Plankyň-Eýnşteýniň kwant nazarýetinde ulanyldy. Ýagtylygyň diskret strukturasy Plankyň „$\hbar$“ hemişeliginiň üsti bilen aňladylýar. Mehaniki hereket üçin absolýut ölçeg bolup hyzmat edýän „$\hbar$“ hemişeligi (kwant täsiri) uly oblastdan kiçi oblasta kanunalaýyklyklaryň mehaniki geçirilip bolmaýanlygy baradaky birinji çynlakaý öňünden duýduryşdyr. Kwant nazarýeti atomyň birinji kwant nazarýetini döretmeklikde N.Bor tarapyndan üstünlikli ulanyldy.

Beýleki tarapdan, köp sanly tejribe maglumatlary (meselem, elektron dessesiniň difraksiýasy we interferensiýasy) elektronyň korpuskula häsiýeti bilen bir hatarda onuň tolkun häsiýetiniň hem bardygy baradaky çaklamanyň ýüze çykmagyna getirdi. Lui-de-Broýl tarapyndan girizilen elektronyň tolkun uzynlygynyň formulasy hem „$\hbar$“ ululygy saklaýar. Belli bolşy ýaly difraksiýa hadysasy traýektoriýa düşünjesi bilen ylalaşmaýar, diýmek, kwant nazarýetinde traýektoriýa diýen düşünje ýok.

Ýagtylygyň kwant tebigatyny we elektronyň tolkun häsiýetini tassyklaýan ähli tejribe maglumatlary we bir näçe aýry-aýry nazarýetleri (Plankyň, Eýnşteýniň, Boruň, de Broýlyň) dykgatly barlamagyň birinji jemleýji netijesi Şrýodingeriň deňlemesidir (1926ý.)

Şu deňleme, ýagtylygyň kwant tebigatyny hasaba alyp elektronlaryň we başga atom bölejikleriniň hereketleriniň kanunlaryny açmaklyga we şöhlelenmäniň deňeşdirilen yzygiderli nazarýetini gurmaklyga mümkinçilik döretdi. Ýöne soňky döwürde belli bolşy ýaly, Şrýodingeriň nazarýeti atomlaryň ähli häsiýetlerini beýan edip bilmeýär. Mysal üçin, onuň kömegi bilen atomyň we magnit meýdanyň arasyndaky täsiri (meselem, Zeýemanyň anomal effekti) dogry düşündirmeýär; mundan başga-da, çylşyrymly atomlaryň hem nazarýeti gurulyp bilinmeýär. Bu kynçylyklar, Şrýodingeriň nazarýetinde elektronyň spin bilen bagly häsiýetiniň hasaba alynylmaýanlygynyň netijesidir. Şrýodingeriň relýatiwistik däl nazarýetiniň ösdürilmegi. Diragyň relýatiwistik nazarýetidir. Şu nazarýetde elektronlaryň relýatiwistik we spin effektleri hasaba alynýar. Elektronyň spin bilen bagly bolan häsiýetleri kabul edilenden soň, atomlarda elektron gabyklarynyň doldurylyş düzgünine düşünmeklik we Mendeleýewiň periodik kanunyna dogry fiziki interpretasiýa bermeklik başartdy.

Häzirki döwürde ylymda köp sanly tejribede alynan maglumatlar toplandy we elementar bölejikleriň umumy nazarýetini gurmaklykda käbir üstünlikler gazanyldy. Şu nazarýetiň özboluşly birinji etaby bolup kwant mehanikasynyň mundan beýläk umumylaşdyrylmagydyr. Oňa meýdanyň kwant nazarýeti diýilýär we ol elementar bölejikleriň özara öwrülmeklerini suratlandyrýar. Diragyň nazarýetinden

γ-kwantlaryň „$e^{-}-e^{+}$“ jübütine we tersine öwrülip biljekdikleri gelip çykýar:

$$\gamma \Leftrightarrow e^{-} - e^{+} .$$

Şu çaklama soňra tejribe arkaly doly tassyklanyldy. Klassiki nazaryýetde ýagtylyk bilen elektronyň arasynda iki tapawut bar: birinjiden ýagtylyk – tolkun, elektron-bölejik; ikinjiden, ýagtylyk goýberilip we siňdirilip bilinýär, elektronlaryň sany bolsa üýtgemeýär. Korpuskula – tolkun dualizmi mahsus bolan kwant mehanikasynda ýagtylyk bilen elektronyň arasyndaky birinji tapawut aýrylýar, ýöne onda, Lorensiň nazaryýetindäki ýaly elektronlaryň sany üýtgemän galýar. Diňe meýdanyň kwant nazaryýeti dikeldilenden soňra ikinji tapawut hem aýryldy.

Umuman nazary fizikanyň, aýratyn hem kwant nazaryýetiniň ösmegi matematika bilen ysnyşykly baglydyr. Bu has aýdyň we giň, kwant mehanikasynyň meselelerini, soraglaryny we düzgünnamalaryny derňelende ýüze çykýar. Şol sebäpli, kwant mehanikasy – atom hadysalarynyň fiziki taýdan ölçelinip bilinjek mümkinçiligi bolan häsiýetlerini hasaplamaga ýol berýän matematiki shemadyr diýip tassyklap bolýar. Has takygy, kwant mehanikasy kwant hadysalarynyň häzirki zaman matematiki nazaryýetidir.

Nazary fizikanyň meselesi real dünýäni öwrenmekden ybaratdyr. Mysal üçin, onuň kanunlary mikrodünýä akyl ýetirmek bilen gös-göni baglydyr. Kwant mehanikasy mikrobölejikleriň hereketlerini we ýagdaýlaryny statistiki usul bilen öwrenýär, ýagny onuň nazaryýeti statistiki nazaryýetdir. Şoňa görä onuň esasyny ähtimallyk nazaryýeti, düzýär. Meselem, kwant mehanikasynyň kömegi bilen kristaldan serpikdirilen elektronlaryň fotoplastinkada ortaça nähili paýlanjakdyklaryny öňünden aýdyp bolýan bolsa, olaryň her biriniň ýerleşip biljek ýerleri barada diňe ähtimally pikiri aýdyp bolýar, ýagny „şeýle ähtimallyk bilen haýsy hem bolsa bir ýerde bolup biler“. Jemläp aýdylanda kwant mehanikasy XX-asyrda atom fizikasynyň ösmeginde ägirt uly ädimdir.

I BAP. Kwant mehanikasynyň ekasprimental we nazary esaslary

Umumy bellikler. Nýutonyň mehanikasy, maỳyşgaklyk nazaryỳeti, elektrodinamika, termodinamika we aerodinamika "klassykyy fizikanyň" mazmunyny düzỳärler. Ol makroskopik ölçegli köp mukdardaky atomlary saklaỳan jisimler bilen bolup geçỳän hadysalary öwrenỳär.

Şu fizika bilen tejribede alnan maglumatlaryň arasyndaky birinji gapma-garşylyklar 1900-nji ỳylda elektromagnit meỳdany bilen bagly bolan deňagramly şöhlelenme üçin M.Plank özüniň belli formulasyny hödürländen soň ỳüze çykyp başlady.

Jisimiň goỳberỳän we içki energiỳanyň hasabyna döreỳän elektromagnit şöhlelenmesine ỳylylyk, ỳa-da temperaturaly şöhlelenme diỳilỳär. Diňe ỳylylyk şöhlelenmesi jisim bilen termodinamiki deňagramlylykda bolup bilỳär. Deňagramlylykda ỳylylyk şöhlelenmesine jisimiň sarp edỳän energiỳasy, oňa düşỳän şöhlelenmäniň edil şonuň ỳaly mukdaryny siňdirilmeginiň netijesinde dolỳar. Deňagramly şöhlelenme adiabatik ỳapyk sistemada alynỳar. Şeỳle sistema bolup absolỳut gara jisim (a.g.j) mysal bolup biler. Absolỳut gara jisim diỳip, käbir hemişelik T temperatura gyzdyrylan we ähli tarapdan kiçijik yşly ỳylylyk syzdyrmaýan diwar bilen gurşalan boşluga aỳdylỳar. Şeỳle jisimi tehniki taỳdan ilkinji gezek Win we Lummer 1895-nji ỳylda amala alypdyrlar. Deňagramly şöhlelenmäni a.g.j-nyň şöhlelenmesi ỳaly seretmeli (oňa gara şöhlelenme hem diỳilỳär).

Kwant nazaryỳetiniň döremeginde deňagramly şöhlelenmäniň derňewi diỳseň wajyp rol oỳnapdyr.

§1 Ỳagtylygyň klassyky nazaryỳeti.

Absolỳut gara jisimiň deňagramly şöhlelenmesiniň, klassyky düşünjeleriniň esasynda, tejribä garşy bolmadyk nazaryỳetini döretmek üçin köp sanly synanyşyklar üstünlige getirmediler. Diňe Plankyň kwantynyň täze düşünjesi girizilenden soň gara şöhlelenmäniň yzygiderli nazaryỳeti gurulỳar. Bu atomyň ilkinji kwant nazaryỳetini, soňra bolsa, kwant mehanikasyny döretmeklige getirdi. Ilki bilen deňagramly şöhlelenmäniň nazaryỳetini klassiki fizikanyň esasy prinsipiniň esasynda seredeliň. Şol prinsipe görä ähli hadysalar üznüksiz halda bolup geçỳärler. Şöhlelenmäni ρ_ω spektral dykyzlyk bilen häsiỳetlendireris. Oňa T temperaturada jisim bilen deňagramlykda bolan şöhlelenmäniň dykyzlygy, ỳagny gara şöhlelenmäniň dykyzlygy hem diỳilỳär. Ol ululyk elektromagnit energiỳanyň adaty

$$u = \frac{1}{8\pi}(E^2 + H^2), \qquad (1.1)$$

dykyzlygy bilen

$$\rho_\omega = \frac{du}{d\omega}, \qquad (1.2)$$

gatnaşyk ýaly baglanyşykdadyr. (1.1) we (1.2) gatnaşyklarda E we H -degişlilikde elektrik we magnit meỳdanlaryň güỳjenmeleri, du bolsa – ω-dan $\omega + d\omega$ çenli ỳygylyklar interwalynda şöhlelenmäniň energiỳasynyň dykyzlygy.

(1.2)-den

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega \qquad (1.3)$$

boljakdygy düşnüklidir.

Kirhgof termodinamikanyň ikinji başlangyjynyň (gutarnykly tizlik bilen bolup geçỳän makroskopik proşesleriň tersine özgermeỳänligini kesgitleỳän prinsip) esasynda ρ_ω dykyzlygyň diňe ỳapyk boşlugyň diwarlarynyň temperaturasy bilen kesgitlenilỳändigini we diwarlaryň materialyna düỳbinden bagly däldigini görkezipdir:

$$\rho_\omega = f(\omega \mathrm{T}).$$

Boşlugyň diwarlaryny käbir ossilỳatorlaryň toplumy ỳaly seredip bolar, olaryň ortaça energiỳasy deňagramly şöhlelenmäniň spektral dykyzlygy bilen doly berilip biliner. Kinetik energiỳanyň orta bahasy (ossilỳatoryň orta energiỳasy) şeỳle formula bilen kesgitlenỳär:

$$\overline{E} = \frac{3\pi}{2} \cdot \frac{n_0 c^3}{\omega^3} \left| E_{xn_0} \right|^2 \qquad (1.4)$$

Bu ỳerde $n_0 = \dfrac{\omega}{\omega_0}$, E_{xn_0} bolsa - ω we $\omega + d\omega$ interwaldaky ỳygylykly meỳdanyň yrgyldysynyň aỳratyn amplitudasy.

Beỳleki tarapdan energiỳanyň "u" dykyzlygy hem $\left| E_{xn_0} \right|^2$ ululyk arkaly aňladylyp bilner. Dogrudanam şöhlelenmäniň uzotropdygyny (ỳagny ol polỳarlanmadyk we onuň ähli ugurlary deňähtimally) göz önünde tutup (1.1)-iň esasynda alỳarys:

$$u = \frac{1}{8\pi} \overline{(E^2 + H^2)} = \frac{1}{4\pi} \overline{(E_x{}^2 + E_y{}^2 + E_z{}^2)}$$

(1.5)

we gara şöhlelenmäniň elektrik meỳdanynyň x-düzüjisiniň Furỳeniň hatary görnüşinde

$$E_x = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E_{xn} e^{in\omega_0 t}$$

alynỳandygyny hasaba alyp, alỳarys.

$$u = \frac{3}{4\pi} \overline{E}_x^2 = \frac{3}{4\pi} \sum_{n \to -\infty}^{\infty} \left| E_{xn} \right|^2 = \frac{3}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| E_{xn} \right|^2 dn = \frac{3}{2\pi} \int_0^{\infty} \left| E_{xn} \right|^2 dn \qquad (1.6)$$

(1.3)-i we

$$dn = \frac{d\omega_n}{\omega_0} = n_0 \frac{d\omega_n}{\omega}$$ gatnaşygy hasaba alyp

$$\omega_n = \omega(n = n_0)$$ bolanda taparys:

$$\int_0^\infty \rho_\omega = \frac{3}{2\pi} \int_0^\infty \left|E_{xn_0}\right|^2 \cdot n_0 \frac{d\omega}{\omega}, \quad \text{ỳa-da} \quad \int_0^\infty \left\{ \rho_\omega - \frac{3n_0}{2\pi} \frac{\left|E_{xn_0}\right|}{\omega} \right\} d\omega = 0,$$

ỳa-da

$$\rho_\omega - \frac{3n_0}{2\pi} \frac{\left|E_{xn_0}\right|^2}{\omega} = 0.$$

Şeỳlelikde

$$\rho_\omega = \frac{3n_0}{2\pi} \frac{\left|E_{xn_0}\right|}{\omega} \qquad (1.7)$$

(1.4) we (1.7) formulalary deňeşdirip tapỳarys:

$$\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \overline{E} \qquad (1.8)$$

Şu formula deňagramly şöhlelenmäniň nazaryỳetiniň esasy düzýär.

Klassyky statistiki fizikasynda bölejikleriň energiỳa boỳunça paỳlanmagy aşakdaky funksiỳa bilen berilỳär

$$N(E) = Ae^{-\alpha E}, \qquad (1.9)$$

bu ỳerde $\alpha = \frac{1}{kT}$; $k = 1.38 \cdot 10^{-23} J / grad$ - Bolsmanyň hemişeligi, T-sredanyň temperaturasy. Şonuň üçın orta energıỳa

$$\overline{E}=\frac{A\int_0^{\infty} Ee^{-\alpha E}dE}{A\int_0^{\infty} e^{-\lambda E}dE}=-\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\int_0^{\infty} e^{-\alpha E}dE=-\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\left(-\frac{1}{\alpha}e^{-\alpha E}\right)^{\infty}=-\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\frac{1}{\alpha}=-\frac{\left(\frac{1}{\alpha}\right)'}{\frac{1}{\alpha}}=-\alpha\left(-\frac{1}{\alpha^2}\right)=\frac{1}{\alpha}=kT$$

Şu bahany $(1.8)-$njı gatnaşyga goỳup Releỳıň-Jınsıň formulasyny alỳarys

$$\rho_{\omega}=\frac{\omega^2}{\pi^2c^3}kt \qquad (1.10)$$

(1.10)-dan görnüşı ỳaly, şöhlelenmänıň dykyzlygy gyzdyrylan jısımıň absolỳut temperaturasyna gönı proporsıonaldyr.

(1.10)-y tolkun uzynlygynyň üstı bılen aňladalyň: Bellı bolşy ỳaly

$$\omega=\frac{2\pi c}{\lambda},$$

onda

$$\rho_{\lambda}=\frac{4k}{c}\frac{T}{\lambda^2}.$$

Indı şu ỳerden görnüşı ỳaly gyzdyrylan jısımıň goỳberỳän şöhlelenmesınıň ıntensıwlıgı, ỳagny ỳagtylygyň akymynyň dykyzlygy, onuň absolỳut temperaturasyna gönı proporsıonal we onuň goỳberỳän ỳagtylygynyň tolkun uzynlygynyň kwadratyna bolsa ters proporsıonaldyr. Releỳıň-Jınsıň kanunyndan gelıp çykyşy ỳaly tolkun uzynlygy näçe gysga bolsa, ỳylylyk şöhlelenmesınıň ıntensıwlıgı şonça uly bolmaly. Şeỳle netije tejrıbede subut edilmeỳär. Has beteri, şöhlelenmäniň şu intensiwligi, has gysga tolkun uzynlygyna geçildigiçe çäksiz artmaly ỳaly netijä gelinỳär. Eger Releỳiň-Jinsiň formulasy şöhlelenmäniň energiỳasynyň „u'' dygyzlygyny hasaplamak üçin ulanylsa, onda degişli integralyň tükeniksizlige ymtylỳandygyna gelỳäris, ỳagny anyk manysyz netije alynỳar:

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3}\int_0^\infty \omega^2 d\omega = \infty .$$

Eger haỳsy hem bolsa bir fiziki kanun çäksiz netijä getirỳän bolsa, onda bu onuň manysyzdygyny aňladýar. Şeỳle netijäni Erenfest "ultramelewşe weỳrançylygy" diỳip atlandyrypdyr.

§2 Ỳagtylygyň kwant nazaryỳeti.

M. Plank klassyky fizikasynyň esasy düzgünnamalarynyň hataryny düỳbünden üỳtgedỳän, wajyp gipotezany öňe sürỳär. 1900-nji ỳylyň 14-nji dekabrynda, nemes fiziki jemgyỳetiniň zalynda täze ylym - kwantlar baradaky taglymat döreỳär. Onda M.Plank normal spektrde energiỳanyň paỳlanmak kanunynyň nazaryỳeti barada maglumat beripir. Ol, mikroskopik sistemalaryň (atomlaryň, molekulalaryň we başy.) energiỳasy islendik üznüksiz däl-de, diňe kesgitli diskret (üznükli) bahalary alyp bilỳär diỳip, tassyklapdyr. Meselem, şu çaklama görä ossilỳatoryň energiỳasy haỳsy hem bolsa ε minimal baha kratnyỳ bolmalydyr

$$E = n\varepsilon,$$ bu ỳerde n=0,1,2… (2.1)

Şunuň bilen baglylykda orta baha hasaplanylanda E üçin integral jem bilen çalşyrylýar.

$$\overline{E} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\sum_{n=0}^{\infty}\varepsilon e^{-\alpha n\varepsilon} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\ln\frac{\varepsilon}{1-e^{-\alpha\varepsilon}} = -\frac{\left(\frac{\varepsilon}{1-e^{-\alpha\varepsilon}}\right)'}{\frac{\varepsilon}{1-e^{-\alpha\varepsilon}}} =$$

$$= -\left(1-e^{-\alpha\varepsilon}\right)\cdot\left(\frac{1}{1-e^{-\alpha\varepsilon}}\right)' = \left(1-e^{-\alpha\varepsilon}\right)\cdot\frac{\varepsilon e^{-\alpha\varepsilon}}{\left(1-e^{-\alpha\varepsilon}\right)^2} = \frac{\varepsilon}{e^{\alpha\varepsilon}-1}$$

(2.2)

$\overline{E}$ - niň bu bahasyny (1.8)-e goỳup şeỳle formulany alarys:

$$\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\cdot\frac{\varepsilon}{e^{\alpha\varepsilon}-1} \qquad (2.3)$$

Şu formulany Winiň termodinamiki kanuny bilen sazlaşyklyga getirmek üçin ε-ni ω ỳygylyga proporsional diỳip hasap etmeklik ỳeterlikdir.

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad (2.4)$$

bu ỳerde $\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}\ j \cdot sek$ – Plankyň hemişeligi we ony fizika kwant mehanikasyny dikeldijileriň biri bolan iňlis alymy P. Dirak girizipdir.
(2.4)-i (2.3)-e goỳup Plankyň formulasyny alỳarys.

$$\rho_\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (2.5)$$

Şu formula kwant nazaryỳetiniň ajaỳyp üstünligidir, Plankyň gipotezasy bir gije-gündüziň dowamynda tejribede subut edilipdir.
Şu formulanyň käbir taraplaryna seredeliň.

Uly bolmadyk ỳygylyklar $\left(\dfrac{\hbar\omega}{kT} << 1\right)$ üçin $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}$ ululygy $\left(\dfrac{\hbar\omega}{kT}\right)$ boỳunça hatara dargadylan görnüşde alyp bolar:

$$e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}$$

Plankyň formulasy,şeỳle halda Releỳin-Jinsiň formulasyna geçỳär.
Uly ỳygylyklar $\left(\dfrac{\hbar\omega}{kT} >> 1\right)$ üçin bolsa şeỳle şert ỳüze çykyp biler

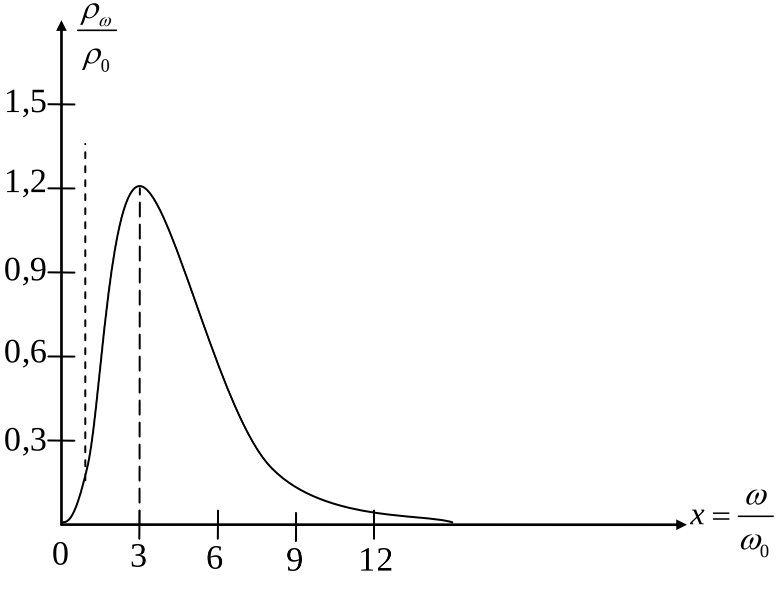
$$e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} >> 1.$$

Onda (2.5)-nyň maỳdalowjysyndaky birligi inkär edip bolỳar. Şeỳle halda ol formula aşakdaky görnüşe geçỳär

$$\rho_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \qquad (2.6)$$

Görnüşi ỳaly intensiwlik eksponensial kanuny boỳunça üỳtgeỳär. Ỳylylyk şöhlelenmesiniň spektral dykyzlygynyň ω ỳygylyga baglylygyny suratlandyrỳan Plankyň formulasy tejribe bilen doly ylalaşykdadyr.

Absolỳut gara jisimiň şohlelenmesiniň spektri 1-nji çyzgyda berilỳär.



1-nji çyzgy

Çyzgyda ştrihli çyzyk – Releỳiň – Linsiň egrisi: $\rho_\omega = \rho_0 x^2$; tejribe bilen gabat gelỳän tutuşlaỳyn çyzyk-Plankyň egrisi: $\rho_\omega = \dfrac{x^3}{e^x - 1}$.

Bu ỳerde, $\rho_0 = \dfrac{(kT)^3}{\hbar^2 \pi^2 c^3}$, $\omega = \omega_0 x$, $\omega_0 = \dfrac{kT}{\hbar}$.

(2.5)-nji formulanyň we (1.3)-nji gatnaşygyň esasynda şöhlelenmäniň integrally dykyzlygyny tapyp bolỳar:

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} . \qquad (2.7)$$

Üỳtgeỳän ululygy $\xi = \dfrac{\hbar\omega}{kT}$ girizeliň.

Şu ỳerden $\omega = \dfrac{kT}{\hbar}\xi$ we $d\omega = \dfrac{\mathrm{kT}}{\hbar} d\xi$.

Onda (2.7) şeỳle görnüşe geçỳär

$$u = \frac{k^4 T^4}{\hbar^3 \pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\xi^3}{e^\xi - 1} d\xi . \qquad (2.8)$$

Integralyň $\displaystyle\int_0^\infty \frac{\xi^3}{e^\xi - 1} d\xi = \frac{\pi^4}{15}$ ululykdygyny hasaba alyp Stefanyň –Bolsmanyň belli kanununyny alỳarys:

$$u = aT^4 . \qquad (2.9)$$

Bu ỳerde: $$a = \frac{\hbar^2 k^4}{15 c^3 \hbar^3} = 7{,}56 \cdot 10^{-28} J \cdot m^{-3} \cdot grad^{-4}$$ (2.10)

Plankyň formulasyndan görnüşi ỳaly , ω-nyň käbir bahasynda orny temperatura bagly bolan ρ_ω (Winiň süỳşme kanuny) maksimuma eỳe bolmalydyr. Ýöne indi Winiň süỳşme kanuny adaty tolkun uzynlygy boỳunça ρ_λ spectral paỳlanma üçin ỳazylỳar , ỳagny ρ_λ ulülugy kesgitlemek üçin "u"-nyň aňlatmasyny ulanyp, ỳazyp bileris

$$u = \int_0^\infty \rho_\lambda d\lambda$$

Belli bolşy ỳaly, $\omega = \dfrac{2\pi c}{\lambda}$ we şu ỳerden

$$d\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda.$$

Onda:

$$\int_0^\infty \rho_\lambda = u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega = -2\pi c \int_\infty^0 \rho_\omega \frac{d\lambda}{\lambda^2} = 2\pi c \int_0^\infty \rho_\omega \frac{d\lambda}{\lambda^2}.$$

ỳa-da
$$\int_0^\infty \left\{ \rho_\lambda - \frac{2\pi c}{\lambda^2} \rho_\omega \right\} d\lambda = 0,$$

ỳa-da
$$\rho_x - \frac{2\pi c}{\lambda^2} \rho_\omega = 0.$$

Şu ỳerden
$$\rho_\omega = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \rho_\omega,$$

ỳa-da (2.5)-nyň esasynda $\rho_\lambda = \dfrac{16\pi^2 c\hbar}{\lambda^5\left(e^{\frac{2\pi c\hbar}{kT\lambda}} - 1\right)}$.

ρ_λ ululygyň maksimum bahany alỳan λ_{max}-y kesgitlemek üçin ýokarky aňlatmadan $\dfrac{\partial\rho_\lambda}{\partial\lambda}$ önümi nola deňlemeli:

$$\left[-5 + \frac{\dfrac{2\pi c\hbar}{kT\lambda_{max}} \cdot e^{\frac{2\pi c\hbar}{kT\lambda_{max}}}}{e^{\frac{2\pi c\hbar}{kT\lambda_{max}}} - 1}\right] = 0$$

Belgileỳäris:

$$\frac{2\pi c\hbar}{kT\lambda_{max}} = y$$

Onda şeỳle deňlemä gelỳäris,

$$y = 5(1 - e^{-y})$$

Şu deňlemäniň çözgüdi uly takyklyk bilen aşakdaky görnüşde alnyp bilner:

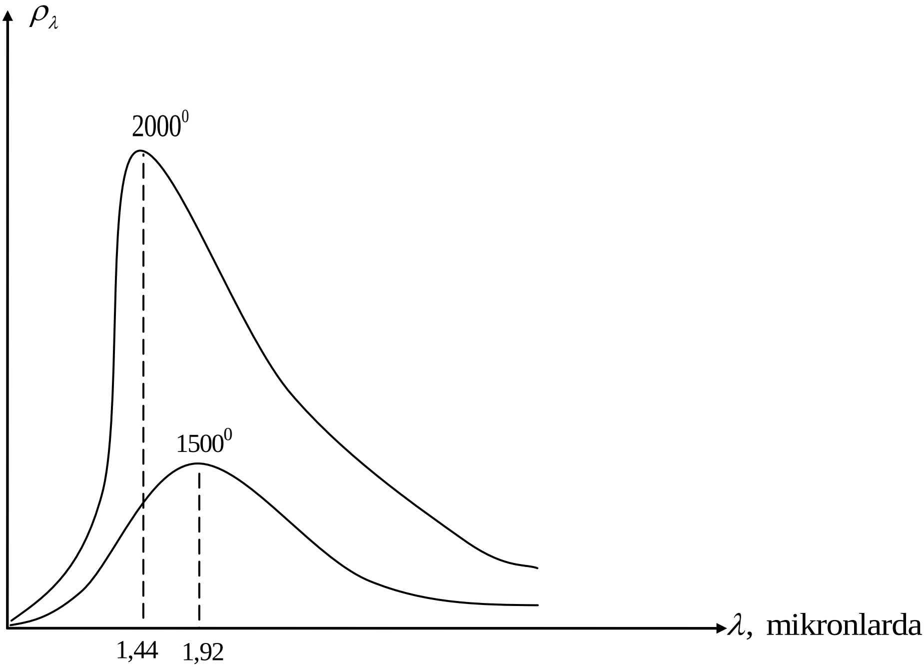
$$y = 5(1 - e^{-5}) = 4,965.$$

Şeỳlelikde temperature bilen λ_{max} aşakdaky gatnaşyk arkaly baglydyr

$\lambda_{max} \cdot T = b$ -Winiň süỳşme kanuny.

Bu ỳerde $b = \dfrac{2\pi c\hbar}{4,965k} = 0,29 sm \cdot grad$ - Winiň hemişeligi (2.11)

Winiň süỳşme kanunyna laỳyklykda obsalỳut gara jisimiň temperaturasynyň artmagynda şöhlelenmäniň intensiwliginiň maksimumy has gysga tolkun uzynlyklara tarap süỳşỳär. Bu 2-nji çyzgyda görkezilýär.



2-nji çyzgy

Ỳokarda beỳan edilen maglumatlardan aşakdaky wajyp tassyklamalar gelip çykỳar:

1.Plankyň gipotezasyna laỳyklykda şöhlelenme we siňdirilme ỳaly prosesler kwant häsiỳete eỳe bolmalydyrlar , ỳagny şu proseslerde bölejikleriň energiỳasynyň üỳtgemegi saldamly däl-de, böküş görnüşde amala aşyrylmalydyr.

2.(2.10) we (2.11) deňlemeler "$\hbar$" we "k" ululyklary "a" we "b" hemişelikleri bilen baglaşdyrỳar. “a” we

”b” ululyklary bilip "$\hbar$" we "k" ululuklary kesgistläp bolỳar. Şeỳle ýol bilen ilkinji gezek "$\hbar$"-yň san bahasy tapylypdyr we “k”-nyň bahasy bolsa anyklanypdyr.
3.Gerekli ỳerde Plankyň formulasy Winiň we Releỳin-Jinsiň kanunlaryna geçỳär, ol Winiň süỳşme kanuny bilen ylalaşỳar we iň çensiz täsinligi, şu kanunlara girỳän hemişelikleri Plankyň hemişeligi we Bolsmanyň hemişeligi arkaly aňladyp, olaryň san bahalaryny berỳär. Diỳmek, jisimiň atom nazaryỳetiniň we ỳagtylygyň kwant tebigatynyň bütewiligi gelip çykỳar.
4. Ỳagtylygyň bölejiginiň-fotonyň barlygyna esas döredi.

§3. Ỳagtylyk kwantlarynyň tebigaty.

M.Plank özüniň formulasyny getirip çykaranda ỳagtylygyň jisim tarapyndan goỳberilmegi we siňdirilmegi üznükli hasiỳete eỳedir diỳip hasap edipdir, ỳagny şeỳle proses ahyrky (diskret) bölekler-ỳagtylyk kwantlary arkaly bolup geçỳär. Şeỳle kwantyň energiỳasy ỳagtylygyň yrgyldysynyň ỳygylygyna proporsional we aşakdaky deňlik bilen aňladylỳar

$$\varepsilon = \hbar\omega, \qquad (3.1)$$

<< Kwant >> nazaryỳetiniň ösmeginde A.Eỳnşteỳn ikinji ägirt uly ädim edipdir. Plankyň pikirini ösdürip,

A.Eỳnşteỳn ỳagtylygyň ỳaỳramagy hem kwantlar arkaly bolup geçỳär diỳip tassyklapdyr, ỳagny diskretnilik ỳagtylygyň özüne mahsusdyr : ỳagtylyk aỳratyn böleklerden-ỳagtylyk kwantlaryndan durỳar.Olara soňra fotonlar diỳilip at berilipdir.
Mundan başga-da, ol ỳagtylyk kwantyna impulsyň hem ỳazylmagyny görkezipdir:

$$p = \frac{\varepsilon}{c}, \qquad (3.2)$$

üstesine-de, onuň ugry ỳagtylygyň ỳaỳraỳan ugry bilen gabat gelỳär. (3.2)-ni wektor görnüşde ỳazalyň:

$$\vec{p} = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{\hbar}{c}\cdot\frac{2\pi}{T} = 2\pi\hbar\cdot\frac{\upsilon}{c} = \hbar\cdot\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar\vec{k}.,$$

şeỳlelikde,

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad (3.3)$$

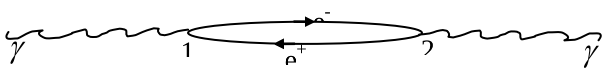
bu ỳerde, $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$ -tolkun wektory. Onuň düzüjileri:

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

ỳagtylyk tolkunyna normalyň ugrukdyryjy kosinuslary.

Eger $|k| = \frac{2\pi}{\lambda}$ diỳip alynsa, onda oňa tolkun sany diỳilỳär we 2π aralykda tolkunyň näçe sanynyň ỳerleşỳändigini görkezỳär.
(3.1) we (3.3) formulalar ỳagtylygyň kwant nazaryỳetiniň esasy deňlemeleri bolup, ỳagtylyk

kwantynyn ε energiỳasyny we $\vec{p}$ impulsyny, ỳaỳramak ugry $\vec{k}$ wektory bilen kesgitlenỳän tekiz monohromatik tolkunyň ω ỳygylygy we λ tolkun uzynlygy bilen baglaşdyrỳar. Başgaça aỳdylanda, ỳagtylyga dualizm häsiỳetiň mahsusdygyny aňladỳar. Bu nazary fizikanyň özboluşly garaşylmadyk wakasydyr. Şol deňlemelere girỳän $\hbar$ ululygy, kwant mehanikasynda iki esasy roly ỳerine ỳetirỳär, ỳagny diskretniligiň ölçegi bolup hyzmat edỳär we materiỳanyň hereketiniň korpuskula we tolkun taraplaryny bir ỳerde baglaşdyrỳar.
(3.1) we (3.3) formulalar görnüşi boỳunça örän ỳönekeỳdir, mazmuny boỳunça bolsa, örän baỳdyr, ỳagny olar kwant mehanikasynyň soraglarynyň giň temalar toparyny öz içine alỳar.Ỳagtylygyň kwant nazaryỳetiniň manysy, mikrosistemalaryň we ỳagtylygyň arasyndaky energiỳanyň we impulsyň çalyşmagy, ỳagtylyk kwantlarynyň biriniň döremegi we başgasynyň ỳogalmagy ỳaly bolup geçỳändigini görkezmekden durỳar. Muny 3-nji çyzgydaky ýaly görkezip bolar:



3-nji çyzgy

Şeỳle pikiriň özüniň takyk aňladylmasyna göz ỳetirmek maksady bilen, energiỳanyň we impulsyň saklanmak kanunlaryny ỳagtylyk bilen özaratäsirleşỳän haỳsyda hem bolsa bir sistema ulanalyň.

<< Çaknyşykdan >> öňki sistemanyň energiỳasyny we impulsyny degişlilikde E we $\vec{p}$,soňkysyny bolsa, E\` we p\` bilen belgiläliň. Sistema bilen << çaknyşykdan >> öňki ỳagtylyk kwantynyň energiỳasyny we impulsyny degişlilikde $\hbar\omega$ we $\hbar\vec{k}$, ondan soň bolsa $\hbar\omega'$ we $\hbar\vec{k}'$ arkaly belgiläliň.

Şu ỳerde << çaknyşyk >> sözüniň dogry manysy özaratäsiriň netijesinde ω ỳygylykly we $\vec{k}$ ugurly elektromagnit tolkunyň energiỳasy we impulsy degişlilikde $\hbar\omega$ we $\hbar\vec{k}$ ululyklara kiçelỳärler (ỳagtylyk kwanty ỳok bolỳar), başga ω' ỳygylykly we $\vec{k}'$ ugurly elektromagnit yrgyldynyň energiỳasy we impulsy bolsa $\hbar\omega'$ we $\hbar\vec{k}'$ ululyklara ulalỳar (ỳagtylyk kwanty döreỳär) diỳen tassyklamany berỳär.

Kabul edilen belgilenmeler arkaly energiỳanyň we impulsyň saklanmak kanunlary şeỳle aňladylỳar:

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + E', \qquad (3.4)$$

$$\hbar\vec{k} + \vec{p} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}'. \qquad (3.5)$$

Şu deňlemeler ähli üç esasy prosesleri (siňdirmek, goỳbermek we dargamak) gurşaỳarlar. Dogrudanam, eger $\omega' = 0$ (onda $\vec{k}' = 0$) bolan ỳagdaỳda (3.4) we (5.5) ỳagtylyk kwantynyň $\hbar\omega$ siňdirilmegine degişlidir; eger $\omega = 0$ (onda $\vec{k} = 0$) bolan ỳagdaỳda

(3.4) we (3.5) $\hbar\omega$`kwantyň goýberilmegini kesgitleýär; eger-de ω we $\omega^{|}$ noldan tapawutly bolsalar, onda ol deňlemeler ýagtylygyň dargamasyna degişlidirler, ýagny $\hbar\omega$ we $\hbar k$ kwanty başga $\hbar\omega^{|}$ energiýaly we $\hbar\vec{k}^{|}$ impulsly kwanta öwrülýär.
(3.4) we (3.5) saklanmak kanunlary ýagtylygyň aýratynlykda tolkun ýa-da korpuskula ýaly seredilmegine garşydyrlar we umuman klassyky fizikanyň düşünjeleriniň ramkasynyň çäklerinde derňelip we düşündirip bolmaýar. Tolkun nazaryýetine laýyklykda tolkunly meýdanyň energiýasy tolkunyň ω ýygylygy bilen däl-de, şu meýdanyň emele getirýän tolkunyň amplitudasy arkaly kesgitlenýär. Başga tarapdan, tolkunyň amplitudasynyň we yrgyldynyň ýygylygynyň arasynda hiç hili umumy baglylygyň ýoklugy sebäpli aýratyn kwantyň energiýasyny tolkunyň amplitudasy bilen baglaşdyryp bolmaýar. Ýagtylyk kwantyny bölejik diýip hasap edilmek hem ýerlikli däl. Ýagtylyk kwanty özüniň (3.1) we (3.3) kesgitlemesi boýunça arassa periodiki proses bolup, giňişlikde hem-de wagta görä tükeniksizdir. Şeýlelikde, (3.4) we (3.5) deňlemeleri kabul edip, atom dünýäsiniň hadysalaryny aňlatmak üçin klassyky fizikanyň ýeterlikli däldigi bilen ylalaşmalydyrys.

§4. Fotoeffekt.

Kwant mehanikasynyň döremegine getiren tejribelere seretmeklige geçeliň. Başgaça aỳdylanda, (3.4) we (3.5) saklanmak kanunlary barlaỳan tejribeli faktlara geçeliň.

Ỳagtylygyň kwantlary baradaky gipoteza hadysalaryň bitin toparyny düşündirmekde diỳseň önümli boldy. Eỳnşteỳniň hödürlän daşky foteffektiň kwantly düşündirilmegi örän wajypdygy bellenilmäge mynasypdyr. Eger fotoeffekti ỳagtylygyň (elektromagnit meỳdanyň) täsiri bilen metaldan elektronyň goỳberilmegi (goparylmagy) diỳip çaklenilse, onda onuň fiziki tarapy gyrada galỳar. Fotoeffekt diỳip, ỳagtylyk kwantynyň atom bilen bagly elektrona täsiri esasynda oňa kwantyň ähli energiỳasynyň berilmek hadysasyna aỳdylỳar.

Klassyky fizikasyna laỳykda metaldan uçup çykỳan elektronlaryň tizligi düşỳän tolkunyň intensiwligine proporsional bolmalydyr. Tejribäniň (Milliken) görkezişi ỳaly, fotoelektronlaryň tizligi intensiwlige düỳbünden bagly bolman, diňe ỳagtylygyň ỳygylygyna bagly. Intensiwlik metalyň goỳberỳän elektronlaryň sanyny kesgitleỳär. Fotoeffekt gowşak intensiwlikde hem ỳüze çykỳar. Şu netijäniň şübhesizligi (3.4) energiỳanyň saklanmak kanunyny fotoeffekt hadysasyna ulanylanda aỳdyň bolỳar.

Goỳ, metalyň üstüne ω ỳygylykly monohromatik ỳagtylyk düşỳär diỳeliň. Metaldan elektronlary goparmak üçin käbir işi ỳerine ỳetirmeli, ony A (çykyş işi) bilen belgiläliň, onda elektronyň metaldaky başdaky energiỳasyny $E=-A$ diỳip hasap etmeli.

Fotoeffektde, kesgitlemeden görnüşi ỳaly, ỳagtylyk kwanty doly siňdirilỳär, ỳagny $\hbar\omega^{|}$=0. Ỳagtylygyň kwantyny siňdiren elektronyň $E^{|}$ energiỳasy bolsa $\frac{m_0 v^2}{2}$ bolỳar.

Diỳmek, seredilỳän ỳagdaỳ üçin (3.4) deňleme şeỳle görnüşi alỳar:

$$\hbar\omega - A = \frac{m_0 v^2}{2},$$

ỳa-da
$$\frac{m_0 v^2}{2} = \hbar\omega - A.$$

Bu fotoeffekt üçin A.Eỳnşteỳniň belli deňlemesi. Ondan görnüşi ỳaly, uçup çykỳan elektronlaryň energiỳasy (tizligi) diňe düşỳän ỳagtylygyň ỳygylygyna bagly.

Eger $\hbar\omega < A$ bolsa (fotoeffektiň gyzyl araçägi) onda elektronlar metaldan çykyp bilmeỳärler we fotoeffekt hadysasy amala aşyrylmaỳar. Diňe düşỳän fotonlaryň energiỳasy A-dan artsa fotoeffekt ỳüze çykỳar.

§5. Komptonyň effekti.

1922-nji ỳylda amerikan fizigi A. Kompton ỳagtylygyň korpuskula häsiỳetini ynanarly tejribäniň üsti bilen subut edipdir. Ol rentgen şöhlesiniň erkin elektronlar tarapyndan dargadylmasyny barlapdyr we (3.4) we (3.5) gatnaşyklaryň dogrudygy

esaslandyrylypdyr. Şeỳlelikde ol ỳagtylygyň erkin elektrolnlarda dargamasy iki bölejigiň – fotonyň we elektronyň maỳyşgak çaknyşma kanuny boỳunça bolup geçỳändigine göz ỳetiripdir.
Ol dargan rentgen şöhlesiniň ỳygylygynyň dargama burçuna baglylygyny öwrenipdir. Elektron erkin diỳilip hasaplanylsa onda onuň başdaky E energiỳasy we $\vec{p}$ impulsy nola deň diỳip alynmalydyr (elektron dynçlyk ỳagdaỳda). Rentgen şöhlesiniň kwanty bilen çaknyşandan soň elektronyň $E^{|}$ energiỳasy örän uly bolup biler, şol sebäpli jisimiň massasynyň tizlige baglylygyny aňladaỳan otnositelligiň nazaryỳetiniň formulasy ulanylmalydyr. Şu nazaryỳete laỳyklykda $\vec{v}$ tizlik bilen hereket edỳän bölejigiň (elektronyň) kinetik energiỳasy deňdir:

$$E^{|} = m_0 c^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right],$$

we impulsy

$$\vec{p}^{\,|} = \frac{m_0 c \beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad .$$

Onda (3.4) we (3.5) deňlemeler şeỳle görnüşe geçỳärler:

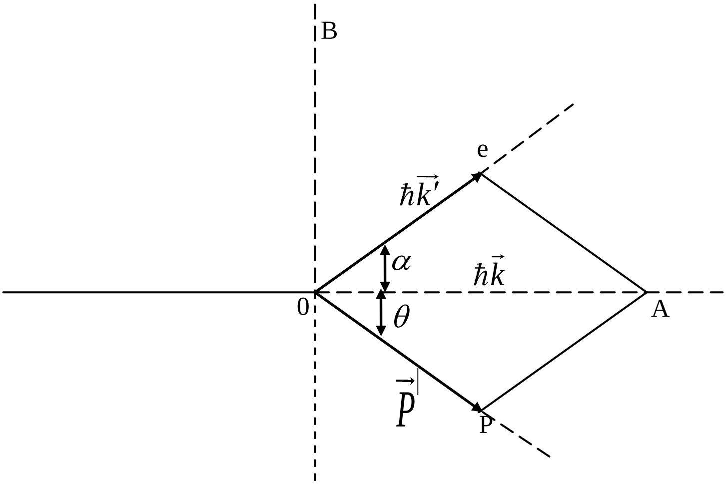
$$\hbar\omega = \hbar\omega^{|} + m_0 c^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right], \qquad (5.1)$$

we

$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}^{|} + \frac{m_0 c \beta}{\sqrt{1-\beta^2}}. \qquad (5.2)$$

(5.1)-den görnüşi ỳaly $\omega > \omega^{|}$, ỳagny dargan şöhläniň tolkun uzynlygy düşỳäniňkiden uly bolmaly, muňa Kompton (ỳa-da kwant) dargama diỳilỳär. Klassyky nazaryỳetde ỳagtylygyň erkin elektronlarda dargamasynda ỳygylyk üỳtgemeỳär $(\omega = \omega^{|})$. Kwant nazaryỳeti boỳunça bolsa fotonyň $\varepsilon = \hbar\omega$ energiỳasynyň bölegi elektrona berilỳär (çyz. ser) we şonuň üçin dargan fotonyň $\varepsilon^{|} = \hbar\omega^{|}$ energiỳasy , şonuň bilen birlikde onuň ỳygylygy umuman aỳdylanda birneme kiçi bolmaly $(\varepsilon^{|} < \varepsilon, \ \ \omega^{|} < \omega)$.

Ỳygylygyň dargama burçuna baglydygyny tapmak üçin (5.2)-nji aňlatmany OA we OB iki özara perpendikulỳar ugurlara proektirläliň (4-nji çyzgy)



4-nji çyzgy

Ýenede

$$\left|\vec{k}\right| = \frac{p}{\hbar} = \frac{\varepsilon}{\hbar c} = \frac{\hbar\omega}{\hbar c} = \frac{\omega}{c} \quad \text{we} \quad \left|\vec{\mathrm{k}}^{|}\right| = \frac{\omega^{|}}{c}$$

ańlatmalary hasaba alyp, alỳarys:

$$\frac{\hbar\omega}{c} = \frac{\hbar\omega^{|}}{c}\cos\theta + \frac{m_0 c\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}\cos\alpha,$$

we

$$0 = \frac{\hbar\omega^{`}}{c}\sin\theta - \frac{m_0 c\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}\sin\alpha\,.$$

Şu iki deňlemelerden , käbir özgertmeleriň netijesinde tapỳarys

$$\beta^2 = \frac{\hbar^2(\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' \cos\theta)}{\hbar^2(\omega^2 + \omega'^2 - 2\omega\omega' \cos\theta) + m_0^2 c^4}.$$

(5.3)

Indi (5.1)-i şeỳle görnüşe geçireliň

$$\hbar(\omega - \omega') + m_0 c^2 = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}},$$

Deňlemäniň iki tarapyny kwadrata götereliň:

$$\hbar^2(\omega - \omega')^2 + m_0^2 c^4 + 2\hbar m_0 c^2(\omega - \omega') = \frac{m_0^2 c^4}{1-\beta^2}.$$

(5.4)

(5.3)-I (5.4)-e goỳup we degişli özgertmelerden soň, alỳarys:

$$\omega - \omega' = \frac{\hbar}{m_0 c^2}\ \omega\omega'(1 - \cos\theta).$$

Belli boluşy ỳaly,

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda} \quad \text{we} \quad \omega' = \frac{2\pi c}{\lambda'},$$

onda,

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_0 c}\sin^2\frac{\theta}{2},$$

ỳa-da

$$\Delta\lambda = 2\lambda_0 \sin^2\frac{\theta}{2}. \qquad (5.5)$$

Bu ỳerde, $\lambda_0 = \dfrac{2\pi\hbar}{m_0 c} = 2.4 \cdot 10^{-10} m$ -elektronyň Kompton tolkun uzynlygy.

(5.5)-nji formulany ilkinji bolup Kompton alypdyr.

Dargan şöhläniň seredilỳän burçuny üỳtgedip we tolkun uzynlygynyň $\Delta\lambda$ üỳtgemesini ölçäp, Kompton we Wu özleriniň tejribelerinde alan netijelerini (3.5) formula boỳunça nazaryỳetiň aỳdanlary bilen deňeşdiripdirler we doly sazlaşygy alypdyrlar.

Şeỳlelikde, Komptonyň tejribeleri, ululygy (3.3)-nji formula bilen kesgitlenilỳän, ỳagtylygyň kwantynyň impulsynyň bardygynyň gös-göni tassyklamasydyr.

(5.5)-nji formuladaky λ_0 elektronyň relỳatiwistik nazaryỳetinde fundamental baha eỳedir we mikrodünỳä mahsus bolan masştablaryň biridir.

Plankyň $\hbar$ hemişeliginiň ỳerlikli rol oỳnaỳan hadysalaryna kwantly diỳilỳär.

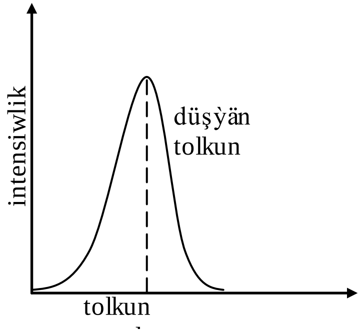
Elektron üçin Komptonyň tolkun uzynlygy λ_0 deňeşdirme kiçi ululyk, diỳmek şu effekti deňeşdirme kiçi tolkun uzynlyklarda seredip bolỳar. Dogrydanam, görünỳän ỳagtylyk üçin $\lambda = 10^{-7} m$, onda

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\lambda_0}{\lambda} = 10^{-5} = 10^{-3}\%.$$

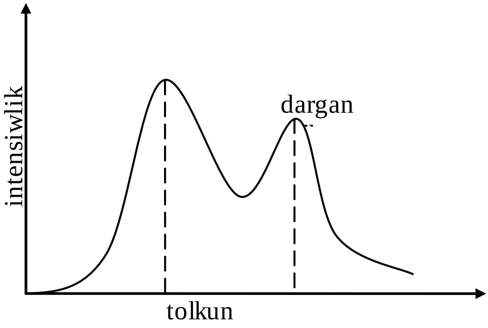
Rentgen şöhlesi üçin $\lambda = \left(10^{-10} \div 10^{-11}\right) m,$ onda

$$\frac{\lambda_0}{\lambda} = 10^{-1} = 10\% .$$

Şonuň üçin diňe ikinji ỳagdaỳda komptonly süỳşmesi tejribede seredilỳär. Aşakdaky 5-nji we 6-nji çyzgylarda düşỳän we dargan tolkunlaryň spektral paỳlanmagy suratlandyrylỳar.



5-nji çyzgy



6-njy çyzgy

Düşỳän tolkunda bir max bar bolsa, dargan tolkunda şu maksimum bilen bir hatarda, uzyn tolkunlara tarap süỳşen goşmaça max döreỳär. Şüỳşen max elektronlardaky dargama degişlidir.

(5.5)-nji formula boỳunça $\Delta\lambda$ ululygy bilip, $\hbar - y$ kesgitläp bolỳar, ỳagny Komptonyň effekti $\hbar - y$ tapmaklygyň ỳene-de bir usulyny berỳär.

II. BAP. Atomyň kwant nazaryýeti.

Atomly sistemanyň üznükli häsiýetlerini beýan etmek üçin, hereketiň kanunlaryna Plankyň hemişeligini $\hbar$ girizip, klassyky fizikanyň görnüşini üýtgetmekligi N.Bor teklip edipdir. Şu ugurdaky birinji ädimi onuň özi ýerine ýetiripdir. Ol 1913-nji ýylda üç fiziki pikirler - atom, şöhlelenme we elektron – özara kwant düşünjesi arkaly baglydyrlar diýip, tassyklapdyr. Ol klassyky kanunlary aşakdaky postulatlar bilen doldurypdyr.

Birinji - ***stasionar ýagdaýlaryň postulaty.*** Boruň tassyklamagyna görä, her bir atom diskret stasionar ýagdaýlaryň hataryna eýedir we elektron olarda tizlenmeli hereket edýän hem bolsa, atom energiýany şöhlelendirmeýär.

Boruň nazaryýetine razylykda stasionar ýagdaýlary adiabatiki inwariantlary kwantlandyrma ýoly bilen kesgitläp bolýar:

$$\oint P_i dq_i = n\hbar, \qquad (1)$$

bu ýerde: n-kwant sany diýip atlandyrýar we diňe bitinsanly bahalary alyp bilýär: $n = 0,1,2,....$

Klassyky mehanikasyna laýykda, adiabatiki inwariantlaryň islendik hemişelik bahalary alyp bilýändiklerini ýada salmak hem ýerliklidir.

Ikinji – ***ýygylyklar postulaty.*** Elektron E_n energiýaly bir başlangyç stasionar ýagdaýdan, E_m energiýaly başga – ahyrky stasionar ýagdaýa geçende (bökende) atom $h\upsilon \equiv \hbar\omega$ energiýaly kwanty şöhlelenmelidir, diýip Bor çaklapdyr.

Şeýle ýagdaýdaky şöhlelenmäniň aýlanma ω ýygylygyny tapmak üçin aşakdaky görnüşde ýazylan energiýanyň saklanmak kanunyna ýüzleneliň:

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + E'.$$

Göýbermek, ýagny şöhlelenmek hadysasy üçin:

$$\omega = 0,\ \ E = E_n,\ \ E' = E_m,\ \ \omega' = \omega_{nm}.$$

Onda $E_n = \hbar\omega_{mn} + E_m$, ýa-da

$$\hbar\omega_{mn} = E_n - E_m.$$

Şu deňlemäniň iki tarapyny Plankyň hemişeligine bölüp, kwant sistemalaryň siňdirýän ýa-da göýberýän ýygylyklaryny, iki ýygylyklaryň tapawudy görnüşde alynyp bilinjekdigine, gelýäris.

$$\omega_{mn} = \omega_n - \omega_m,\ \ \omega_n = \frac{E_n}{\hbar},\ \ \omega_m = \frac{E_m}{\hbar}, \qquad (2)$$

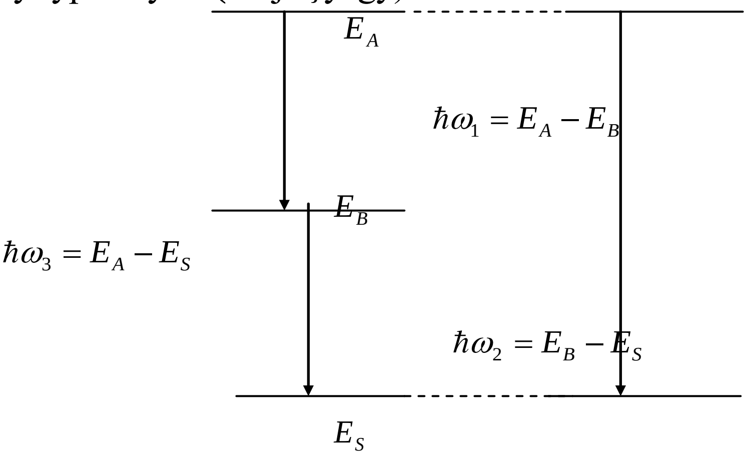
ω_n we ω_m ululyklara spektral termleri diýilýär.
(2)-ni aşakdaky ýaly göçüreliň:

$$\omega_{mn} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \qquad (3)$$

Bu Boruň belli ýygylyklar düzgünini aňladýar.

Boruň nazaryýetinden has öňräk, atomlaryň gözegçilik edilýän ýygylyklary, termleriň tapawudy ýaly şekillendirilip bilinjekdiklerini Rits arassa empiriki ýol bilen dikeldipdir. Oňa Ritsiň **„kombinasion prinsipi“** diýilýär. Şu prinsipe laýykda: eger şol bir seriýa degişli iki dürli ýygylyklar bar bolsa, onda olaryň tapawudy (ýa-da jemi) hem ýygylygy berýär, ýöne soňky başga seriýa degişli bolmaly.

Şeýlelikde, tejribäniň görkezişi ýaly, eger ω_1 we ω_2 ýygylykly iki şöhle bar bolsa, onda $\omega_1 + \omega_2$ ýa-da $\omega_1 - \omega_2$ şöhleleri hem bardyr, ýagny spektral termleri kombinirläp dürli ýygylyklary öňünden aýdyp bolýar. (7-nji çyzgy)

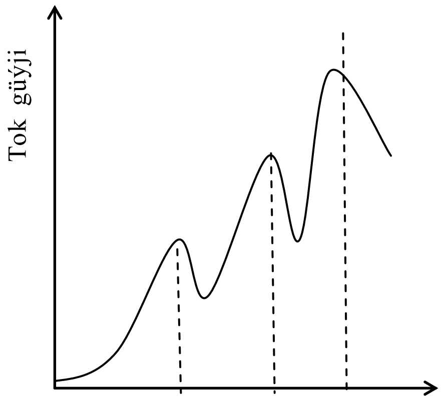


7-nji çyzgy

Şol sebäpli, (2)-ni Ritsiň empiriki düzgüniniň matematiki aňladylyşy ýaly seredip bolýar.

Getirilen üstünliklere garamazdan, Boruň nazaryýetine birnäçe wajyp kemçilikler mahsusdyr, öz gezeginde şular nazaryýetiň mundan beýläk ösmeginde uly päsgelçilikleri döretdiler. Ol kemçilikler:

birinjiden – Boruň nazaryýeti özi boýunça ýarymklassyky häsiýetlidir;
ikinjiden – Boruň nazaryýeti spektral çyzyklaryň intensiwligini däl-de, diňe ýygylyklaryny hasaplamaga mümkinçilik berýär, olaryň intensiwligini tapmak üçin „laýyklyk prinsipiniň“ esasynda klassyky elektrodinamika ýüz urmaly bolýar;
üçünjiden – Boruň postulatlarynyň kömegi bilen köp elektronly atomlaryň nazaryýetini gurmak başa barmady, oňa şol sanda iki elektronly geliýniň atomy hem girýär.
Boruň nazaryýeti klassyky nazaryýetden kwantla geçmekde geçiş etap bolup hyzmat etdi, öz gezeginde soňky atomlaryň intensiwliklerini hem kesgitlemäge ýardam edýär. Bellenilen kemçiliklere garamazdan, Boruň nazaryýeti şu wagta çenli uly usuly bahasyny saklaýar. Mysal üçin: kwantlanma prosesleri bilen bagly bolan köp netijeleri derňemekde Boruň nazaryýeti ugur alynýan punkt bolup hyzmat edýär. Bor tarapyndan postulirlenen atomlaryň durnukly energetiki ýagdaýlarynyň diskretnilikleri, 1913-nji ýylda Frankyň we Gersiň goýan tejribelerinde özüniň tassyklamasyny tapdy (8-nji çyzgy).



8-nji çyzgy

Elektronlaryň dessesini (togy) simabyň bugunyň içinden göýberip,haçan-da elektronlaryň energiýasy 4,9 eW-den kiçi bolan ýagdaýda elektronlaryň simabyň atomlary bilen çaknyşygy toguň ululygyna täsir etmeýändigini olar görkezipdirler.

Haçanda elektronlaryň energiýasy 4,9 eW ýetende, tok birden aşak düşýär. Elektronlaryň energiýasynyň mundan beýläk ösdürilmegi periodiki gaýtalanýan toguň ýiti kemelmegi alynýar.

Şu hadysany Boruň nazaryýetiniň nukdaýnazaryndan örän ýönekeý esaslandyrylýar.

Dogrudanam, „oýandyrylmadyk“ simabyň atomynyň energiýasyny (ýagny atomyň çaknyşyga çenli) E_0 deň diýip alynsa we Boruň birinji postulatyna degişlilikde energiýanyň indiki mümkin bahasy $E_1 = E_0 + 4{,}9$ ew diýip çaklanylsa, onda aňsat görnüşi ýaly, dessedäki $E < 4{,}9$ ew bolsa, onda dessede elektronlar atomlary „oýandyrylan“ ýagdaýa geçirip bilmeýärler; şonuň üçin urgular maýyşgak bolýar, ýagny tok üýtgemeýär. Eger-de $E \geq 4{,}9$ ew bolsa, onda dessede elektronlar energiýanyň bölegini (4,9 ew deň) atomlara berip bilýärler; onuň bilen bilelikde tok hem üýtgeýär. Eger-de $14{,}7ew > E > 9{,}8ew$ interwalda energiýa bahany alsa, onda elektronlar atomlara energiýany iki gezek berip bilýärler: birinji urgynyň netijesinde 4,9ew we ikinji urgynyň netijesinde hem 4,9ew.

Indi Boruň birinji we ikinji postulatlaryny wodorodameňzeş atomyň nazaryýetini dikeltmek üçin ulanalyň.

Orbitanyň radiusy r we energiýa E üçin aňlatmalaryna

$$r = \frac{I^2}{4\pi^2 m_0 z e_0^2}, \qquad \text{we}$$

$$E = -2\pi^2 \frac{m_0 z^2 e_0^4}{I^2}$$

(1)-e laýykda adiabatik inwariantyň I kwant bahasyny $I = 2\pi n\hbar$ goýup, alýarys:

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{m_0 z e_0^2}, \quad (4)$$

$$E_n = -\frac{m_0 z^2 e_0^4}{2n^2\hbar^2} \qquad (5)$$

n=1 bahada atomyň aşaky (esasy) ýagdaýynyň energiýasyny:

$$E_1 = -\frac{m_0 z^2 e_0^4}{2\hbar^2} \qquad (6)$$

we degişli radiusy

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{m_0 z e_0^2} = \frac{1}{z} a_0, \qquad (7)$$

alýarys.

(7)-de a_0 - birinji Bor orbitanyň radiusy

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2} \approx 0,529 \cdot 10^{-10} m.$$

Boruň ikinji postulatynyň esasynda, (5)-e degişlilikde ω_{mn} ýygylyklar üçin aňlatmany tapýarys:

$$\omega_{mn} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{m_0 z^2 e_0^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad (8)$$

ýagny, z=1 –de Balmeriň formulasyny alýarys:

$$\omega = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right),$$

Boruň nazaryýeti, Ridbergiň hemişeligi üçin empiriki dikeldilen bahany Plankyň $\hbar$ hemişeligi bilen baglaşdyrmaga ýardam etdi:

$$R = \frac{m_0 e_0^4}{2\hbar^3},$$

Tejribe bilen gabat gelýän, Ridbergiň hemişeligi üçin bahaly Balmeriň formulasynyň alynmagy, Boruň nazaryýetiniň has uly üstünlikleriniň biridir.

III BAP. Mikrobölejikleriň korpuskula – tolkun häsiýeti.

§.1.Lui de Broýlyň çaklamasy. Tolkun funksiýa.

1923-nji ýylda fransuz fizigi Lui de Broýl atomda elektronyň hereketiniň haçan durnukly boljakdygyny esaslandyrypdyr. Onuň tassyklamagyna laýyklykda, haçan-da atomyň orbitasynyň uzynlygynyň üstünde «n» bitin sana barabar «elektron tolkunlary» ýerleşse, şonda we diňe şonda, elektronyň hereketi durnuklydyr. Şundan aşakdaky ýönekeý şert gelip çykýar:

$$2\pi r = n\lambda$$

Şu aňlatmany Boruň birinji postulaty bilen birleşdirip, «elektron tolkunynyň uzynlygyny» tapýarys: $mvr = n\hbar$

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}$$ ýa-da $$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{P}$$ (1.1) $$\varepsilon = \hbar\omega$$

Görnüşi ýaly, de Broýluň (1.1) formulasy Plankyň formulasy ýaly diýseň ýönekeýdir. Şunuň bilen birlikde, de Broýl «stasionar orbita» düşünjesine täze kesgitleme bermegi başarypdyr: ol, üstünde bitin sana barabar $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$ “elektron tolkunlary» ýerleşýän orbitadyr.

Häzirki zaman kwant nazaryýetiniň ösmegi, λ tolkun uzynlygy we ω ýygylygy bilen suratlandyrýan ýagtylygyň tolkun häsiýeti bilen bir hatarda onuň korpuskula häsiýetiniň hem açylmagy bilen başlanýar. Ýagtylyk kwantynyň energiýasy we impulsy, degişlilikde deňdir:

$$\varepsilon = \hbar\omega \qquad (1.2)$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad (1.3)$$

Ýagtylygyň kwant nazaryýetiniň (1.2) we (1.3) esasy kanunlaryny derňäp, de Broýl olaryň adaty bölejikleriň hereketine hem utgaşdyryp boljakdygynyň mümkinçiligi baradaky gipotezany öňe sürýär. Başgaça aýdylanda, tolkun – korpuskula dualizmi diňe ýagtylyga däl-de, ähli bölejiklere (ilki bilen elektrona) hem mahsusdyr.

Lui de Broýluň pikirine sazlaşykda,

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \qquad \text{we} \qquad \vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

gatnaşyklar arkaly tizlik bilen bagly bolan relýatiwistik E energiýaly we P impulsy erkin elektronlaryň akymy, tolkun häsiýete hem eýedir. Oňa degişli ýygylyk we tolkun sany aşakdaky gatnaşyklaryň üsti bilen kesgitlenilýärler.

$$E = \hbar\omega$$

$$\vec{P} = \hbar\vec{k} \qquad (1.4.)$$

Şeýlelikde, fotonlaryň nazaryýetiniň dikeldilmeginde Eýnşteýnyň alan (1.3.) gatnaşygy, de Broýluň hödürlän gipotezasy netijesinde, uniwersal häsiýete eýe boldy we ýagtylygyň korpuskula häsiýetlerini deňlemek üçin hem-de hereketli elektronlaryň tolkun häsiýetlerini barlamakda, şol bir deň derejede ulanylyp başlandy. Eger Plankyň hemişeligi nola ymtylýar diýip hasap edilse, onda bölejikleriň we ýagtylygyň özlerini alyp barmaklaryndaky iki taraplylyk doly ýok bolýar. Kwant mehanikasynda atom obýektleriň häsiýetleri kömekçi ululygyň – tolkun funksiýanyň (ýagdaýyň wektorynyň) kömegi bilen suratlandyrylýar. Eger bölejigiň ýagdaýyny tolkun funksiýa bilen suratlandyryp bolmasa, onda şeýle halda, ýagdaý dykyzlygyň matrisasynyň üsti bilen berilýär.

Bölejigiň hereketiniň ýagdaýyny suratlandyrýan tolkun funksiýa, umuman aýdylanda, $\vec{r}$ radius-wektoryň we t wagtyň kompleks, birbahaly we üznüksiz funksiýasy bolmalydyr. Lui de Broýlyň teklibine laýykda, erkin bölejikleriň hereketi, ýagtylyga meňzeşlikde, tekiz tolkuny aňladýan tekiz tolkun funksiýa bilen suratlandyrylýar:

$$\psi(\vec{r},t) = Ae^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \tag{1.5.}$$

bu ýerde A – tolkunyň amplitudasy.

(1.4.)-iň esasynda (1.5.)-i şeýle görnüşde göçürilýär.

$$\psi(\vec{r},t) = Ae^{i(\frac{E}{\hbar}t - \frac{\vec{P}}{\hbar}\vec{r})}$$

şeýle funksiýa bilen aňladylýan tolkuna de Broýlyň tolkuny diýilýär.

(1.5.)-iň käbir häsiýetlerine seredeliň. Meseläni sadalaşdyrmak üçin birölçegli (meselem, tolkun OX okuň ugruna ýaýraýar) herekete seredeliň, onda (1.5.)-iň ýerine alarys.

$$\psi(x,t) = Ae^{i(\omega t - kx)}$$

$$(\omega t - kx)$$

bu ýerde – ululyk tolkunyň fazasyny berýär. Goý, haýsy hem bolsa bir x nokatda faza kesgitli “a” baha eýe bolýar diýeliň. Şu nokadyň koordinaty

$$a = \omega t - kx$$

deňlemeden tapylýar. Ony wagt boýunça differensirläp, alarys:

$$u = \frac{\omega}{k} \qquad (1.7.)$$

(1.7.)-i ululyga faza tizligi diýilýär we görnüşi ýaly, giňişlikde fazanyň “a” bahasy “u” tizlik bilen ýerini üýtgedýär. Şu tizlik “k” ululyga, diýmek, tolkun uzynlyga bagly, bu bolsa, tolkunlaryň dispersiýasynyň bardygyny aňladýar. Elektromagnit tolkunyndan tapawutlylykda, (1.4.)-den gelip çykyşy ýaly, de Broýlyň tolkunlarynyň dispersiýasy boş giňişlikde bolýar. Şeýle ýagdaý de Broýlyň (1.4.) deňlemelerinden gelip çykýar. Dogrudanam, E energiýanyň we p impulsyň arasynda kesgitli gatnaşyk bar, ýagny otnositelligiň nazaryýetine laýykda bölejikleriň υ<<c tizliginde (Nýutonyň mehanikasynyň ulanylýan oblasty), erkin hereket edýän bölejigiň energiýasy deňdir:

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + P^2 c^2} = m_0 c^2 + \frac{P^2}{2m_0} + \ldots$$

$$P^2 = \hbar^2 k^2$$

Şuny (1.4.)-iň birinjisine goýup we hasaba alyp, alarys:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m_0} + \ldots \qquad (1.9.)$$

we, diýmek, $u = \frac{\omega}{k}$ tizlik k -nyň funksiýasydyr. Indi, tolkunyň we bölejigiň hereketleriniň arasyndaky baglylygy dikeltmeklige geçeliň. Onuň üçin, bir kemsiz kesgitli ω ýygylygy we λ tolkun uzynlygy bolan (1.6.) berk däl monohromatik tolkuna seredeliň. Oňa tolkun topary hem diýilýär. Tolkun topary (paketi) diýip, tolkun uzynlyklary we ýaýraýan ugurlary boýunça biri-birinden az tapawutlanýan tolkunlaryň superpozisiýasyna aýdylýar. Tolkun topary OX okuň ugruna ýaýraýar diýeliň, onda (1.6.)-ny aşakdaky aňlatma ýaly ýazyp bileris.

$$\psi(x,t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{i(\omega t - kx)} dk \qquad (1.10.)$$

bu ýerde $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$ – tolkun sany we ol onuň golaýynda topary emele getirýän tolkunlaryň tolkun sany ýerleşýär.

Δk -nyň kiçi diýip hasap edilýändigini göz öňünde tutup, ω $(k{-}k_0)$

$$\omega=\omega_0+\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0(k-k_0)+\ldots$$

we $k=k_0+(k-k_0)-$ diýip ýazyp bileris.

Onda (6.10.) şeýle göçürilýär:

$$\psi(x,t)=A(k_0)\int\limits_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{i\left[\omega_0+(\frac{d\omega}{dk})_0(k-k_0)\right]t-i\left[k_0+(k-k_0)\right]}dk=$$

$$=A(k_0)e^{i(\omega_0 t-k_0 x)}\int\limits_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{i\left[(\frac{d\omega}{dk})_0 t-x\right](k-k_0)}dk$$

Täze üýtgeýäni girizeliň, ýagny $\xi=k-k_0$ we

$$d\xi=dk$$

onda

$$\psi(x,t)=A(k_0)e^{i(\omega_0 t-k_0 x)}\int\limits_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i\left[(\frac{d\omega}{dk})_0 t-x\right]\xi}d\xi=B(x,t)e^{i(\omega_0 t-k_0 x)}$$

Tolkun paketiniň $B(x,t)$ amplitudasy deňdir:

$$B(x,t)=A(k_0)\int\limits_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i\left[(\frac{d\omega}{dk})_0 t-x\right]\xi}d\xi=A(k_0)\frac{e^{i\left[(\frac{d\omega}{dk})_0 t-x\right]\xi}}{i\left[(\frac{d\omega}{dk})_0 t-x\right]}\Bigg|^{+\Delta k}=$$

,

(1.11.)

şu tolkun paketi, bölejigiň çäklendirilen giňişligiň uly bolmadyk oblastynda praktiki taýdan noldan tapawutlanýar.

Haçan , $x = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 t$ (1.12.)

diýip hasap edilse, onda (1.11.)-iň droby bire deň we paket maksimum baha eýe bolýar. Oňa tolkun toparynyň merkezi diýilýär.

(1.12.)-ni wagt boýunça differensirläp, taparys

(1.13.) $$\upsilon = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_0 ,$$

şu ululyga topar tizligi diýilýär, ýagny paketiň merkezi bölejik ýaly hereket edýär.

Eger, seredilýän tolkun dispersiýa eýe bolmadyk bolsa, onda netijä gelinerdi.

Dispersiýa zerarly de Broýlyň tolkunynda (1.9.)-y peýdalanyp topar tizligi hasaplalyň.

$$\upsilon = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m_0} = \frac{P}{m_0} = \frac{m_0 v}{m_0} = v$$

Şu taýdan görnüşi ýaly de Broýlyň tolkunynyň topar tizligi bölejigiň mehaniki tizligine deň.

Iki ýagdaý üçin de Broýlyň tolkun uzynlygyny hasaplalyň.

(1.4.)-iň ikinjisinden gelip çykýar.

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{P} \qquad (1.14.)$$

Kiçi tizlik υ<<c bilen çäklenip we $E = \frac{P^2}{2m_0}$ deňligi peýdalanyp, alarys:

(1.15.)

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E}}$$

Şu formula bölejigiň massasyny we energiýasyny bilip, onuň tolkun uzynlygyny hasaplamaga ýol berýär. Ony elektrona ulanalyň. Beýle ýagdaýda Energiýany birlikde aňlatmak üçin eW diýeliň, bu ýerde, e – elektronyň zarýady, V – woltda ölçenilen elektrony tizlendirýän potensiallaryň tapawudy, tapýarys:

$$\mathrm{E} = \mathrm{eV} \quad \mathrm{m}_0 = 9 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}. \qquad \lambda = \sqrt{\frac{150}{V}}\,\mathring{A}$$

V = 1 eW üçin alýarys: $\lambda = 12{,}2\,\mathring{A}$, V = 10000 eW üçin bolsa.
Wodorodyň molekulasy üçin tolkun uzynlygy hasaplalyň. 300° temperaturada wodorodyň molekulasynyň ortaça energiýasy 6 · 10^{-14} eW, molekulanyň massasy 2·1,66 · 10^{-27} kg. Şu bahalary (1.15)-e goýup, tapýarys. Görnüşi ýaly de Broýlyň tolkun uzynlygy örän kiçi; energiýa we massa näçe uly bolsa, ol şonça-da kiçidir.

Häzirki zaman tizlendirijilerde örän ýokary energiýaly bölejikler alynýar. Diýmek, olary juda gysga tolkun uzynlygyň çeşmesi ýaly seredip bolýar. Eger bölejigiň energiýasy dynçlyk energiýadan köp uly bolsa E >> m_0c^2, onda (1.8.)-den alýarys. E ≈ P·c, diýmek şeýle ýagdaýda tolkun uzynlygy, (1.1.)-iň esasynda, deňdir:

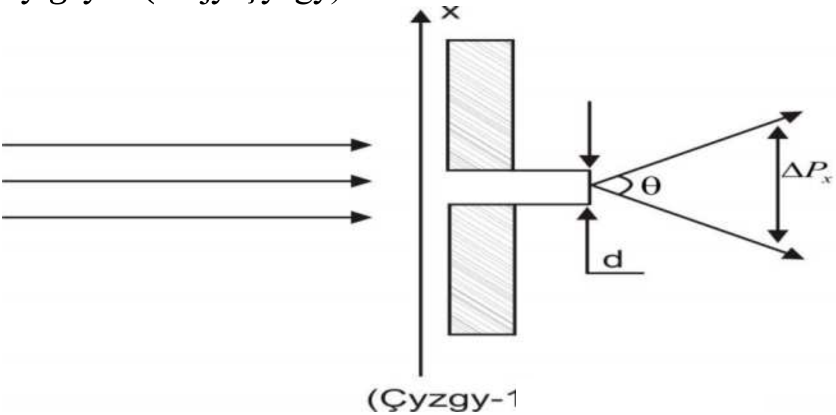
$$\lambda = \frac{2\pi\hbar c}{E} \qquad \lambda = (1{,}26\cdot 10^{-17} \div 6{,}3\cdot 10^{-18}) .$$

$E = (10 \div 20)\,GeW$ energiýada, protonlar ýa-da mezonlar üçin, m. Şeýle gysga tolkunlaryň kömegi bilen elementar bölejikleriň içki strukturasyny öwrenip bolýar.

§2. Kesgitsizlik gatnaşygy we onuň matematiki aňladylyşy

Kwant mehanikasynyň fundamental aýratynlygyny aňladýan kesgitsizlik gatnaşygyna getiryän iki hyýaly tejribä seredeliň. Kwant nazaryýeti, bir wagtda bölejigiň ornuny we impulsyny takyk bilmeklige mümkinçilik berýän şol bir tejribäni oýlap tapyp bolmaýar diýip tassyklaýar. Ideal mikroskopyň kömegi bilen elektronyň ornuny kesgitlemäge synanşylýar diýeliň. Belli bolşy ýaly, mikroskopda nämedir bir zada seretmek üçin ony ýagtylandyrmaly, üstesine-de , şol seredilýän zat özüni ölçegi boýunça ýagtylygyň tolkun uzynlygyndan kiçi bolmaly däldir. Elektronyň ornuny has takyk kesgitlemek üçin, ýagtylygyň tolkun uzynlygy şonça kiçi bolmaly. Ýagtylygyň tebigaty onuň kwantydyr. Eger elektrona ýagtylygyň kwanty düşse, onda ol oňa nähili-de bolsa bir impuls berýär. Diýmek, elektronyň ornuny takyk kesgitlemekde, ony has kiçi tolkun uzynlykly ýagtylyk bilen ýagtylandyrmaly. Bu öz gezeginde has uly energiýaly kwantyň ulanylýandygyny aňladýar. Netijede, elektronyň başdaky impulsynyň ýerlikli üýtgemegine gelinyär. Eger elektronyň impulsy mikroskoply tejribeden öň belli bolsa, onda tejribeden soň onuň impulsy doly näbellidir.

Elektronyň ornuny yşyň kömegi bilen hem kesgitläp bolýar. Elektronyň uçup geçýän yşyň ini näçe kiçi bolsa, şol wagtyň pursatynda onuň orny şonça takyk bellenilyär. Şu ýerde “ýakymsyzlyk” elektronyň tolkun tebigatyndan gelýär. Özüniň tolkun häsiýetiniň esasynda, elektron yşy geçip ugruny üýtgedýär. Diýmek, impulsyň ugry hem oňa degişlilikde üýtgeýär. Yş näçe insiz bolsa, bölejigiň orny şonça takyk kesgitlenilýär, difraksion gyşarma şonça ulalýar we ilki başdaky impuls şonça-da üýtgeýär (9-njy çyzgy).



9-njy çyzgy

Şeýlelikde, nazaryýetli ya-da pikiriňde getirilen tejribeleri barlap, şeýle netijä gelinýär: bölejigiň koordinaty anyk belli däl, ýöne ol, nähili-de bolsa bir araçäkde ýerleşýär, bölejigiň impulsyny dogry görkezip bolmaýar, ýöne ol "pylan" impulsa garanyňda uly däl.

Başgaça aýdylanda, tejribe bölejigiň koordinatyny <<şeýle bir>> ýalňyşlyk, <<şeýle bir>> nätakyklyk bilen berýär; şu nätakyklygy sanly aňladyp bolýar. Eger, impulsdaky ýalňyşlyk hem sanly aňladylsa, onda bölejige bir wagtda seredilende şol iki nätakyklygyň köpeltmek hasyly hiç wagt kwant tasiriň ýaryndan kiçi bolmaýar. Diňe şertiň oňaýly ýagdaýynda şol köpeltmek hasyly kwant täsiriň ýaryna deň bolup biler. Bu kwant nazaryýetiniň belli **<<nätakyklyk gatnaşygydyr>>**. Ol uniwersal hasiýete eýedir we köplenç ony fizikada prinsip derejesine galdyrýarlar.Şu prinsip kwant nazaryýetiniň netijesidir we bir wagtda koordinatyň we impulsyň ölçenilmekleri diňe şeýle bir nätakyklyk bilen mümkindigini düşündirýär. Kwant mehanikasynda seýle ýagdaýyň ýüze çykýandygy de Broýlyň

$$P = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \qquad (2.1)$$

formulasyndan hem görünýär.Dogrydan hem, λ – ny hut tolkun uzynlygy diýip hasap edilse, onda tolkunyň tebigatyna garamazdan şu ululuk x koordinatyň funksiýasy bolup bilmez, ýagny <<tolkun uzynlygy x nokatda λ deň>> tassyklamanyň fiziki manysy ýok. Onda (2.1)-iň çep tarapy hem x koordinatanyň funksiýasy bolup bilmeýär we <<bölejigiň impulsy x nokatda P deň>> tassyklama hem ýerlikli däl.

Jemläp aýdylanda, kwant oblastda bir wagtda gutarnykly kesgitli bahaly impulsly we koordinataly bölejik ýok. Şu tassyklamanyň matematiki aňladylşyna geçeliň.

Şu bölümiň 1-nji paragrafynda görkezilişi ýaly:

$$\Psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} A(k)\, e^{-i(wt-kx)}\, dk \qquad (2.2)$$

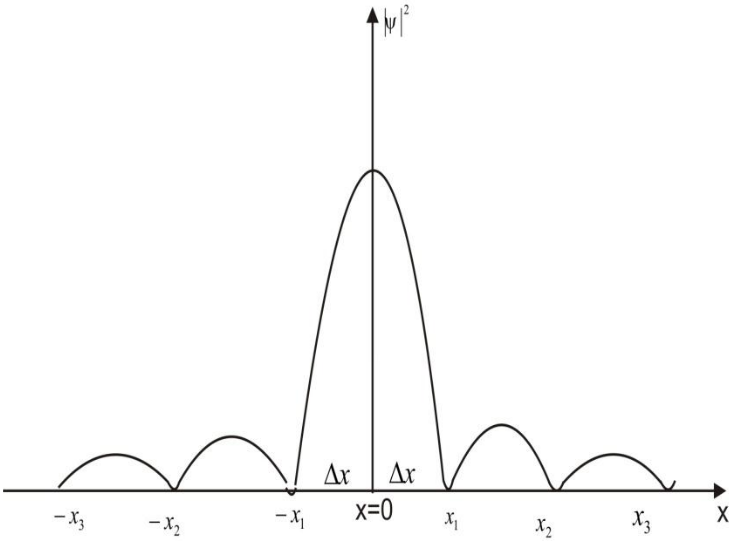
tolkunlaryň topary

$$\Psi(x,t) = 2A(k_0)\frac{\sin\left[\left(\frac{dw}{dk}t - x\right)\Delta k\right]}{\frac{dw}{dk}t - x} e^{-i(w_0 t - k_0 x)}$$

(2.3)

görnüşe getirildi.

Tolkunlaryň seýle toparynda $|\Psi|^2$ intensiwlik t wagtyň käbir pursaty üçin, aşakdaky 10-njy çyzgyda getirilýär.



Çyzgy-2

10-njy çyzgy

Çyzgydan görnüşi ýaly, amplitudanyň maksimum bahasy $x = 0$ baha degişli. $x = x_n = \frac{\pi}{\Delta k} n,$

$n = \pm 1, \pm 2, \ldots\ldots$ ýagdaýlarda amplituda nola öwrülýär. $\Delta x = 2x_1 = \dfrac{2\pi}{\Delta k}$ bahany tolkun paketiniň giňişlik dowamlygy ýaly hasap edip bolýar. Δk (impulslaryň bahasynyň pytraňlygy) näçe kiçi bolsa, paketiň giňişlik dowamlylygy şonça uly. Şeýlelikde:

$$\Delta x \cdot \Delta k = 2\pi \qquad (2.4)$$

Bu arassa tolkunly gatnaşyk, islendik tolkunlar üçin hakdyr we ol tolkun toparynyň çyzykly Δx ölçeginiň tolkun sanlaryň Δk interwalyna köpeldilmegi hemişelik ululuk we 2π –e deňdigini görkezýär.

Eger k ululuk Δk çäkde üýtgeýän bolsa, onda P impuls hem $\Delta P_x = \hbar \Delta k$ çäkde üýtgeýär we (2.4)-i aşakdaky görnüşde göçürip bileris.

$$\Delta P_x \cdot \Delta x = 2\pi\hbar \qquad (2.5)$$

Bu formuladaky ΔP_x we Δx ululyklaryň manysy aşakdakydan gelip çykýar: eger (2.2) de Broýlyň tolkun topary bilen suratlandyrýan ýagdaýda yerleşen bölejigiň koordinatyny ölçemeklik ýerine ýetirilse, onda t wagt pursatynda koordinaty ölçemekleriň netijeleriniň orta bahasy $\bar{x} = \dfrac{d\omega}{dk} t$ bolar. Aýratyn ölçemekleriň netijeleri bolsa, $\pm \Delta x$ interwalda esasan $\bar{x}$-yň ýakynynda ýaýradyşdyrylandyr. Δx ululuk x koordinatda kesgitsizlikdir. Eger şol seredilýän ýagdaýda bölejigiň P_x impulsy ölçenilse, onda onuň orta bahasy $\overline{P_x} = P_0 = \hbar k$ bolar we aýratyn bahalary bolsa $\Delta P_x = \pm\hbar \cdot \Delta k_x$ interwalda p_0-yň ýakynynda toplanandyr. ΔP_x ululyk P_x impulsda kesgitsizlikdir. Şol sebäpli (2.5) gatnaşyga P_x impuls we oňa çatrymly x koordinat üçin kesgitsizlik gatnaşygy diýilýär. Ony ilkinji gezek Geýzenberg dikeldipdir. Ol häzirki zaman kwant mehanikasynyň esasy fundamental netijesidir we topar näçe insiz bolsa, ýagny bölejigiň koordinatynyň bahasy has kesgitlenen bolsa (Δx kiçi), onda bölejigiň impulsynyň bahasy şonça azrak kesgitlenilýär (ΔP_x ulurak) we tersine.

§3. Mikrobölejikleriň ýerleşmekleriniň ähtimallygy.

Kwant mehanikasynda atom obýektleri tolkun funksiýa (ýa-da ψ funksiýa) arkaly suratlandyrylýar. Tekiz tolkun diýip hasap edilýän de Broýluň tolkunynyň fiziki manysy tiz wagtda belli bolmandyr. Başgaça aýdylanda, ψ-funksiýa bölejigiň düzümini berýärmi, ýa-da onuň hereketini suratlandyrýarmy diýen meseleler örän çekeleşikli bolupdyr. Bu ugurda dürli garaýyşlar ýüze çykypdyr. Korpuskula bilen tolkunyň arasyndaky baglylygyň birinji interpretasiýasyny Şrýodinger hödürläpdir. Onuň çaklamasyna laýyklykda, bölejik tolkunlardan emele getirilmeli, üstesine-de onuň dykyzlygynyň giňişlik boýunça “çyrşalmasy “ $\psi^*\psi$ deň. Nazary nukdaýnazardan, tolkunlaryň toparynyň kömegi bilen, bölejigiň radiusy tertipdäki möçberli tolkun paketini emele getirip bolýar. Tolkun paketiniň pytramak (ýa-da ýaýramak) wagty

$$\Delta t \approx \frac{m_0}{\hbar}(\Delta x)^2$$

aňlatmadan alynýar. Massasy $m_0 = 10^{-3} kg$ we $\Delta x = 0,7 \cdot 10^{-2} m$ möçberli mikrobölejik üçin pytramak wagty $\Delta t \approx 10^{25} s$, ýagny tolkun paketi praktiki taýdan pytramaýar. Elektronlar üçin bolsa $m_0 = 10^{-31} kg$, $\Delta x \approx 10^{-15} m$ we şeýle halatda $\Delta t \approx 10^{-26} s$ wagtdan soň, ýagny mgnowen, tolkun paketi ýaýrap başlaýar. Şeýlelikde, Şrýodingeriň elektronyň çyrşama nazaryýeti boýunça, elektrony durnukly emele gelen diýip bolmaýar.

Häzirki döwürde M.Born tarapyndan hödürlenen tolkun funksiýasynyň başga, ýagny statistik interpretasiýasy kabul edilipdir. Şu interpretasiýa laýyklykda, tolkun funksiýanyň modulynyň kwadraty, ýagny $|\psi|^2 = \psi^* \cdot \psi$, giňişligiň dürli nokatlarynda elektrony tapmaklygyň ähtimallygynyň dykyzlygyny häsiýetlendirýär. Elektron atomda bölejik ýaly däl-de, haýsydyr bir bulut ýaly ýaýraýar we şu buludyň dykyzlygy $\psi(x)$ tolkun funksiýa bilen kesgitlenýär, üstesine-de ýadrodan x uzaklykda elektron buludynyň dykyzlygy şu funksiýanyň kwadratyna deň:

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x) \cdot \psi(x),$$

bu ýerde $\psi^*(x)$–kompleks çatrymly funksiýa.

Bornuň statistik interpretasiýasy elektronyň struktursyna degmeýär. Elektron bütewiligini saklap bilýär. Wagta görä ψ tolkun funksiýasynyň üýtgemeginde, giňişligiň dürli nokatlarynda elektrony tapmaklygyň ähtimallygy üýtgeýär. M.Bornuň beren tolkun funksiýasynyň interpretasiýasynda uly kynçylyk, ony bir elektronyň hereketine ulanylanda ýüze çykdy. Rus alymlary L.Biberman, N.Suşkin we W.Fabrikant, S.Wawilowyň fotonlaryň kwantly fluktuasiýasy baradaky tejribesini ösdürip, elkronlaryň dessesiniň intensiwliginiň peselmeginde difraksion suradyň açyklygynyň gitdigiçe kemräk bolup başlanýandygyny we ahyrsoňy, haçanda desse aýratyn uçýan elktronlardan ybarat bolsa, elektronda difraksion surat däl-de, aýratyn nokatlaryň şekilleriniň ýüze çykýandygyny görkezýär. Emma, wagtyň ýeterlikli dowamlygynda bir elektrondan soň başgalaryny goýberseň, ekranda ýekelikdäki nokatlar kem-kemden goşulyp difraksion suraty döredýärler. Diýmek, elektronyň tolkun häsiýetini elektronlaryň kollektiw effekti ýaly seredip bolmaýar; tolkun häsiýete, her bir aýratyn alynan elektron eýedir.

Indi de Broýlyň tolkununyň statistiki interpretasiýasynyň matematiki aňladylşyna geçeliň. Bölejikleriň koordinatasyny x, y, z arkaly belläliň. Şu ululyklar, giňişlikde bölejigiň lokalizlenen nokadynyň koordinatyny kesgitleýärler. Tolkun funksiýany $\Psi(x, y, z, t)$ diýip alýarys. Tükeniksiz kiçi $x_1 x + dx$; $y_1 y + dy$; $z_1 z + dz$ oblasta seredip we onuň içinde $\Psi -$ni hemişelik diýip hasap edip bolýandygyndan ugur alyp, bölejigi tapmaklygyň ähtimallygy şu oblastyň $dv = dx \cdot dy \cdot dz$ göwrümine proporsionaldygyna gelýäris. Wagtyň t pursatynda dv göwrüm elementde x, y, z nokadyň golaýynda bölejigi tapmaklygyň ähtimallygy $dw \cdot (x, y, z, t)$ bilen belgiläp, de Broýlyň tolkunynyň statistik interpretasiýasyny aşakdaky deňlik görnüşde ýazyp bileris.

$$dw \cdot (x, y, z, t) = |\Psi(x, y, z, t)|^2 dv.$$
(3.1)

Şu deňleme, belli tolkun funksiýa boýunça bölejikleriň ýerleşmekleriniň ähtimallygyny hasaplamaga mümkinçilik berýär.

$$w \cdot (x, y, z, t) = \frac{dw}{dv} = = |\Psi(x, y, z, t)|^2 , \qquad (3.2)$$

ululyga ähtimallygyň dykyzkygy diýilýär. (8.1)-i v göwrüm boýunça integrirläp, taparys:

$$W(v, t) \quad = \int_v |\Psi(x, y, z, t)|^2 dv \qquad (3.3)$$

Eger integrirlemek ähli göwrüm boýunça amala aşyrylsa, onda t wagt pursatynda bölejik göwrümiň içiniň haýsy hem bolsa bir ýerinde ýerleşendigini taparys. Bu hakykylyk hadysanyň ähtimallygydyr. Ähtimallyk nazaryýetinde ol 1-e deň. Eger şu ylalaşyk kabul edilse, onda ähli göwrüm boýunça $|\Psi|^2$ alynan integraly 1-e deňlemeli.

$$\int_v |\Psi(x,y,z,t)|^2 dv = 1 \qquad (3.4)$$

(3.4)-şerte normirlemek diýilýär. Şu şerti kanagatlandyrýan funksiýa bolsa, normirlenen diýilýär. (3.4)-iň kömegi bilen Ψ funksiýa girýän köpeldişi tapylýar**.** (3.6)-dan görnüşi ýaly $|\Psi|^2 = A^2 = const.$ Bu islendik ýerde bölejigi tapmaklygyň ähtimallygynyň bir meňzeşdigini aňladýar.

§4. Ýagdaýyň superpozisiýa prinsipi.

Kwant mehanikasynyň esasyny birnäçe wajyp düzgünnamalar düzýärler. Olaryň birine **superpozisiýa** (üstünden goýma) **prinsip**i diýilýär. Berlen fiziki şertlerde bölejik dürli ýagdaýlarda ýerleşip biler. Ol ýagdaýlaryň her biri özbaşyna amala aşyrylyp biliner. Ýöne has çylşyrymly ýagdaý hem bolup biler. Muňa Dewissonyň we Jermeriň difraksion tejribesi mysal bolup biler. Onda kristala düşen desse difragirlenen desseleriň sistemasyna bölünýär. Kristal bilen özara täsirden soň hereket ýene-de boş giňişlikde bolýar, ýöne indi ýaýramak ugurlary bilen tapawutlanýan de Broýlyň tolkunlarynyň bitin toplumy bilen suratlandyrylýar. Kristalyň üstünde bölejikleriň difraksiýasynda ýüze çykýan ýagdaý, de Broýlyň ýönekeý tolkunlary bilen suratlandyrýan erkin hereketleriň ýagdýlaryň superpozisiýasydyr. Şu prinsip şeýle formulirlenip biliner: eger haýsy hem bolsa bir sistema (bölejik ýa-da olaryň toplumy) Ψ_1 we Ψ_2 tolkun funksiýalary bilen suratlandyrýan ýagdaýlarda ýerleşmeklige ukyply bolsa, onda ol Ψ funksiýa bilen suratlandyrylýan ýagdaýda hem bolup biler, ýagny,

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 ,$$

bu ýerde C_1 we C_2 - Ψ_1 we Ψ_2 hususy ýagdaýlaryň amplitudasyny we fazasyny kesgitleýän hemişelik, umuman aýdylanda, kompleks sanlar.

Şu ýerden gelip çykyşy ýaly, eger biri-birinden haýsy hem bolsa bir ululyklaryň (impulsyň, energiýanyň,impulsyň momentiniň we ş.m) bahasy bilen tapawutlanýan we Ψ_1, Ψ_2..., tolkun funksiýalary arkaly suratlandyrylýan, sistemanyň mümkin bolan ýagdaýlary bar bolsa, onda çylşyrymly ýagdaý hem bardyr.

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + ... + C_n\Psi_n + ..., \tag{4.1}$$

nirede $C_1, C_2, ..., C_n ... -$erkin, kompleks sanlar.

Eger, superpozisiýa girýän ýagdaýlar biri-birinden tükeniksiz az tapawutlansalar, onda (4.1)-jemiň deregine integral alynýar. Aýdyň halatda (4.1)-e şeýle düşünmeli: eger $t = 0$ wagt pursatynda elektronyň ýagdaýy diňe $\Psi_1, \Psi_2, ...,$ ähtimallyklary bilen berilýär, ýagny elektron haýsy-da bolsa olaryň birinde ýerleşýär, şol sebäpli umumy funksiýa olaryň jemine deňdir.

IVBap. Kwant mehanikasynda dinamiki üýtgeýänler.

§.1.Fiziki ululuklaryň orta bahalary.

Normirlenen Ψ tolkun funksiýa belli bolsa, onda onuň suratlandyrýan ýagdaýynda koordinatyň, impulsyň we başga fiziki ululyklaryň orta bahalaryny hasaplap bolýar. *Meselem:* kesgitlemä laýyklykda $F(x, y, z)$ we $F(P_x, P_y, P_z)$ funksiýalaryň orta bahalary şeýle tapylýar:

$$\overline{F(x, y, z)} = \int F(x, y, z) \cdot |\Psi(x, y, z)|^2 dx \cdot dy \cdot dz =$$

$$= \int \Psi^*(x, y, z) F(x, y, z) \cdot \Psi(x, y, z) dx \cdot dy \cdot dz,$$

bu ýerde $\int |\Psi(x,y,z)|^2 dx\cdot dy\cdot dz = 1$ şert ýerine ýetmeli, we

$\overline{F(P_x,P_y,P_z)} = \int F(P_x,P_y,P_z)|C(P_x,P_y,P_z)|^2 dP_x\cdot dp_y\cdot dp_z =$

$= \int C^*(P_x,P_y,P_z)\, F(P_x,P_y,P_z)\, C(P_x,P_y,P_z)\, dP_x\cdot dp_y\cdot dp_z,$ bu ýerde bolsa

$\int |C(P_x,P_y,P_z)|^2\, dP_x\cdot dp_y\cdot dp_z = 1.$ şert ýerine ýetmeli.

Mudan beýläk x,y,z we P_x,P_y,P_z üýtgeýänleriň deregine degişlilikde x we P ýazarys, ýagny

$$F(x) = \int \Psi^*(x)F(x)\cdot\Psi(x)dx,$$

we

$$F(P) = \int C^*(P)\, F(P)\, C(P)\, dP.$$

Mysal üçin : x we P_x ulyluklaryň orta bahalary şeýle tapylýar:

$$\overline{x} = \int \Psi^* x\Psi dx, \qquad (1.1)$$

we

$$\overline{P_x} = \int \Psi^* P_x \Psi dx. \qquad (1.2)$$

Eger (1.2)-de P_x-iň deregine $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ alsak, onda dogry netijä gelinýär. Dogrydanam, eger $\Psi = \ell^{-i(wt-kx)}$ diýip hasap edilse, onda

$$\overline{P_x} = \int \Psi^* P_x \Psi dx$$

$$= \int \Psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi dx = -i\hbar\int \Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\ell^{-i(wt-kx)}dx = -i\hbar\int \Psi^*(ik)$$

$$\Psi dx = = \hbar k\int \Psi^*\Psi dx = \hbar k.$$

Edil şunuň ýaly

$$\overline{P^2} = \int \Psi^* P_x{}^2 \Psi dx = \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi dx = -\hbar^2 \int \Psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi dx.$$

Şeýlelikde, kwant mehanikasynda impulsyň proýeksiýalary aşakdaky ýaly alynýarlar:
Şu ululyklara ***operatorlar*** diýiýär we $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ ýaly belgilenilýär.

§2. Operatorlar we olaryň ýstündäki algebraik amallar

1926-njy ýylda M.Born we N.Wigner kwant mehanikanyň esasy düşünjesini-fiziki ululyklaryň operatory diýen düşünjäni girizýärler. Umuman kwant nazaryýetinde ähli fiziki ululyklar operator görnüşde alynýarlar. ***Meselem*:** L mehaniki ululyga $\hat{L}$ operator degişlidir.

<u>Kesgitleme:</u> $\hat{L}$ operator diýip, nähili usul bilen seredilýän $u(x)$ funksiýadan başga $\vartheta(x)$ funksiýany almak üçin ulanylýan matematiki şekile aýdylýar.
Bu simwoliki $\hat{L}$-iň "u" funksiýa köpeltmek hasyly görnüşinde ýazylýar:

$$\vartheta = \hat{L} \cdot u ,$$

(2.1)

bu deňlikde $\hat{L}$ diýip, *meselem* : $x\left(\hat{L} = x\right)$, x boýuça differensirlemek $\left(\hat{L} = \frac{\partial}{\partial x}\right)$, kök $\left(\hat{L} = \sqrt{\ }\right)$, integral $\left(\hat{L} = \int\ \right)$ we başgalar düşünilýär. Eger operator

differensirlemäni saklaýan bolsa, onda ***differensial operatory*** diýilýär. Integral, integro-differensial operatorlaryň bolup biljekdikleri düşnüklidir. Integral operatorlaryň aýratyn mümkinçiligi funksionalyň bolmagydyr. Funksionalyň, funksiýalaryň köplüginiň islendik funksiýasyna täsiri netijesinde käbir hemişelik alynýar.
Kwant mehanikasynda operatorlaryň diňe bir görnüşi ulanylýar. Oňa ***çyzykly özüneçatrymly*** (ermitli) ***operator*** diýilýär. Eger $\hat{L}$ operatory $\hat{L}(c_1u_1 + c_2u_2) = c_1\hat{L}u_1 + c_2\hat{L}u_2$ şerti kanagatlandyrsa, onda oňa ***çyzykly*** diýiýär. Şu şerte x, $\frac{\partial}{\partial x}$, $\int$ boýun egýärler, ýagny

$$x\ (c_1u_1 + c_2u_2) = c_1xu_1 + c_2xu_2,$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(c_1u_1 + c_2u_2) = c_1\frac{\partial u_1}{\partial x} + c_2\frac{\partial u_2}{\partial x},$$

$$\int(c_1u_1 + c_2u_2)dx = c_1\int u_1dx + c_2\int u_2dx.$$

Diýmek, olar çyzykly operatorlardyr.
Kök çyzyk däl, sebäbi $\sqrt{c_1u_1 + c_2u_2} \neq \sqrt{c_1u_1} + \sqrt{c_2u_2}$.

Çyzykly $\hat{L}$ operatoryň özüneçatrymly (ermitli) bolmagy üçin aşakdaky deňlik ýerine ýetmeli:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_1^*\hat{L}u_2dx = \int_{-\infty}^{+\infty} c_2\hat{L}^*u_1^*dx.$$

(2.2)
Bu ýerde u_1 we u_2- integrirlenýän funksiýalar we integrirlenýän oblastyň gyrasynda önümleri nola deň bolmaly.

Indi haýsy çyzykly operatoryň özüneçatrymlydygyny ýa-da däldigini anyklalyň. Ilki bilen çyzykly $\frac{\partial}{\partial x}$ operatora seredeliň. (2.2)-niň çep tarapyny emele getireliň:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_1^* \frac{\partial}{\partial x} u_2 dx = u_2\, u_1^* \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} u_2 \frac{\partial}{\partial x} u_1^* dx \neq + \int u_2 \frac{\partial}{\partial x} u_1^* dx.$$

Sebäbi, $u_1^*(\pm\infty) = u_2\ (\pm\infty) = 0.$

Görnüşi ýaly, $\frac{\partial}{\partial x}$ çyzykly, ýöne özüneçatrymly däl.

Indi $\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ çyzykly operatora garalyň. (2.2)-niň çep tarapyny emele getirýäris.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_1^* \hat{P}_x u_2 dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} u_1^* \frac{\partial}{\partial x} u_2 dx = -i\hbar u_1^* u_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

$$+ i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} u_2\ \frac{\partial}{\partial x} u_1^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} u_2\ P_x^* u_1^* dx\,.$$

Şeýlelikde, çyzykly $\hat{P}_x$ operatoryń özüneçatrymlydygyna göz ýetirýäris.

Indi operatorlaryň üstündäki algebraik amallara seredeliň.

Goşmak. Eger käbir operatorlar belli bolsalar, onda olardan has çylşyrymly operatorlary emele getirip bilinerler.Çyzykly özüneçatrymly $\hat{A}$ we $\hat{B}$ operatorlara seredeliň. Şu iki operatorlaryň jemi diýip şeýle $\hat{C}$ operatora düşünilýär,ýagny

$$\hat{C}\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \; . \qquad (2.3)$$

Şuny simwoliki şeýle görnüşde göçüreliň

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B} \, .$$

Meselem: Eger $\hat{A} = i\dfrac{\partial}{\partial x}$, $\hat{B} = x$, onda (2.3)-den gelip çykýar.

$$\hat{C} = i\frac{\partial}{\partial x} + x \, .$$

Köpeltmek. Operatorlaryň köpeltmesi biraz çylşyrymlydyr.
Iki $\hat{A}$ we $\hat{B}$ operatorlaryň köpeltmek hasyly diýip şeýle $\hat{C}$ operatora düşünilýär, ýagny

$$\hat{C}\Psi = \hat{A}\left(\hat{B}\Psi\right) \qquad (2.4)$$

Ýagny ilki Ψ funksiýa $\hat{B}$ bilen täsir etmeli, soňra alynan netije $\hat{A}$ bilen täsir etmeli. Eger gutarnykly netije $\hat{C}$ operator bilen alynsa, onda ol $\hat{A}$ we $\hat{B}$ operatorlaryň köpeltmek hasylyny aňladýar. Bu simwoliki şeýle ýazylýar:

$$\hat{C} = \hat{A}\ \hat{B}\,.$$

Mysal: $\hat{A} = i\dfrac{\partial}{\partial x}$, $\hat{B} = x$, onda

$$\hat{C}\Psi = i\frac{\partial}{\partial x}\,(x, y) = i\Psi + ix\frac{\partial \Psi}{\partial x}\,,$$

şu ýerden $\hat{C} = i + ix\dfrac{\partial}{\partial x}$.

Operatorlaryň köpeldilmesi köpeldijileriň tertibine ýerlikli baglydyr. Dogrudanam,

$$\hat{C}'\Psi = \hat{B}\left(\hat{A}\Psi\right) = ix\frac{\partial \Psi}{\partial x}\,,\ \text{ýagny}\ \ \hat{C}' = ix\frac{\partial}{\partial x}\,.$$

Diýmek, eger $\hat{A}$ we $\hat{B}$ operatorlar bar bolsalar, onda olardan $\hat{C}$ başga $\hat{C}'$ köpeltmek hasyly hem emele getirip biliner.

$$\hat{C}' = \hat{B}\ \hat{A}\,.$$

Dikeldilen düzgün adaty algebradaky ýaly operatorlar bilen goşmak, aýyrmak we köpeltmek hasyllary ýerine ýetirip bolýar, ýöne bir zat düzgüne gabat gelmeýär: Köpeldijileriň orunlaryny çalşyryp bolmaýar.

Meselem: $\hat{C} = \left(\hat{A} - \hat{B}\right)\left(\hat{A} + \hat{B}\right) = \hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2$,

ýöne $\hat{A}^2 - \hat{B}^2$ däl.
Köpeldijileri çalşyryp bolmaýan şeýle algebra ***kommutatiw däl ululyklaryň algebrasy***, ululyklaryň özlerine bolsa ***kommutatiw däl*** (çalşyrylmaýan) ýa-da ***kommutirleşmeýän*** diýilýär.
Eger $\hat{C}$ we $\hat{C}^{'}$ köpeltmek hasyllary deň bolsalar, ýagny

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \ ,$$

onda $\hat{A}$ we $\hat{B}$ operatorlara ***kommutirleşýän*** (çalşyrylýan) diýilýär.
$\hat{F} = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ operatora $\hat{A}$ we $\hat{B}$ ***operatorlaryň kommutatory*** diýilýär.
Islendik operator öz-özi bilen kommutirleşýär, ýagny $\hat{A}^n = \hat{A}\cdot\hat{A}...\hat{A}$**,** operator hem şol operatoryň jynsyna degişlidir.

§3. Fiziki ululyklar üçin kesgitsizlik gatnaşygy.

Kesgitsizlik gatnaşygyny has umumy we takyk görnüşde dikeldeliň. Başgaça aýdylanda erkin Ψ tolkun funksiýa bilen suratlandyrylan bölejigiň islendik ýagdaýy üçin kesgitsizlik gatnaşygyň subutnamasyna geçeliň. Meseläni sadalaşdyrmak üçin bir giňişlik ölçegi bilen çäkleneris. Goý $\Psi(x)$ funksiýa bilen suratlandyrylýan bölejigiň haýsy-da bolsa bir ýagdaýy berlipdir diýeliň. Tolkun funksiýasyny $-\infty$-den $+\infty$-ge çenli bire normirlenen diýip hasap ederis. Öňde goýulan maksada ýetmek üçin, ilki bilen P impulsyň we

x koordinatanyň ölçenmekleriniň aýry netijeleriniň, olaryň $\bar{x}$ we $\bar{P}$ orta bahalaryndan gyşarmasy üçin ölçeg saýlanyp alynmalydyr, başgaça aýdylanda ΔP_x we Δx <<kesgitsizler>> diýip nämä düşünilýändigini takyk kesgitlemeli. Şeýle ölçegler hökmünde statistikada ulanylýan $\overline{(\Delta P_x)^2}$ we $\overline{(\Delta x)^2}$ orta kwadratik gyşarmalary saýlap alalyň. Goý $\bar{x}$ ululyk x ululygyň orta bahasy diýeliň, onda $\Delta x = x - \bar{x}$ orta bahadan $\bar{x}$ ölçeýişleriň netijeleriniň gyşarmasy bolar. Şu gyşarmanyň orta bahasynyň nola deňdigi şübhesizdir, ýagny

$$\overline{\Delta x} = \overline{\left(x - \bar{x}\right)} = \bar{x} - \bar{\bar{x}} = \bar{x} - \bar{x} = 0 .$$

Şonuň üçin, orta bahadan özbaşdak ölçeýişleriň gyşarmasynyň ölçegi diýip $\overline{\Delta x}$ däl-de $\overline{(\Delta x)^2}$ - özbaşdak gyşarmanyň kwadratynyň ortaçasy alynýar.

Şeýle düşündirlişe esaslanyp, ýazyp bileris:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{\left(x - \bar{x}\right)^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \qquad (3.1)$$

$$\overline{(\Delta P_x)^2} = \overline{\left(P_x - \overline{P_2}\right)^2} = \overline{P_x^{\,2}} - \overline{P_x}^{\,2} \qquad (3.2)$$

Koordinatanyň başlangyjy diýip $\bar{x}$ nokady saýlalyň. Onda $\bar{x}=0$ we $\overline{P_x} = 0$. Şeýle koordinata sistemada (3.1) we (3.2) aňlatmalaryň ýerine, alarys:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2}\,, \tag{3.3}$$

$$\overline{(\Delta P_x)^2} = \overline{P_x{}^2}\,. \tag{3.4}$$

(3.1)we (3.2) aňlatmalara laýyklykda, ýazyp bileris:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) x^2 \Psi(x) dx\,, \tag{3.5}$$

$$\overline{(\Delta P_x)^2} = \overline{P_x{}^2} = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} dx\,. \tag{3.6}$$

Mesele, $\overline{(\Delta P_x)^2}$ we $\overline{(\Delta x)^2}$ ululyklaryň arasyndaky baglanşygy dikeltmekden durýar.
Şu maksat üçin kömekçi integrala seredeliň.

$$I(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \xi x \Psi + \frac{d\Psi}{dx} \right|^2 dx \ge 0\,. \tag{3.7}$$

Bu ýerde ξ – maddy kömekçi ululyk.
Modulyň kwadratyny özgerdeliň:

$$I(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\xi x \Psi^* + \frac{d\Psi^*}{dx} \right) \left(\xi x \Psi + \frac{d\Psi}{dx} \right) dx =$$

$$= \xi^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi|^2 dx + \xi \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{d}{dx} \left(\Psi^* \Psi \right) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Psi^*}{dx} \frac{d\Psi}{dx} dx\,.$$

Integrallary belgiläliň we aýratynlykda seredeliň.

$$A=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2|\Psi|^2dx=\overline{(\Delta x)^2}\,,$$

$$B=-\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{d}{dx}\left(\Psi^*\Psi\right)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\Psi dx=1,$$

$$C=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\Psi^*}{dx}\frac{d\Psi}{dx}dx=-\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\frac{d^2\Psi}{dx^2}dx=\frac{\overline{(\Delta P_x)^2}}{\hbar^2}\,.$$

Onda:

$$I(\xi)=A\xi^2-B\xi^2+C\geq 0$$
(3.8)

Bu şert A,B,C koeffisiýentlere kesgitli çäkliligi ýükleýär. Dogrudanam, eger şu gatnaşyk $I(\xi)$ funksiýanyň minimumyna jogap berýän $\xi=\xi_0$ bahada ýerine ýetýän bolsa, onda ol islendik ξ üçin dogrudyr. ξ_0 ululygyň bahasy $\frac{\partial I(\xi)}{\partial\xi}=0$ şertden tapylýar, ýagny

$$I'(\xi_0)=2A\xi_0-B=0\,.$$

Bu ýerden $\xi_0=\frac{B}{2A}$ we ony (3.8) goýup, alarys:

$$I_{\min}=I(\xi_0)=\frac{B^2}{4A}+C\geq 0\,.$$

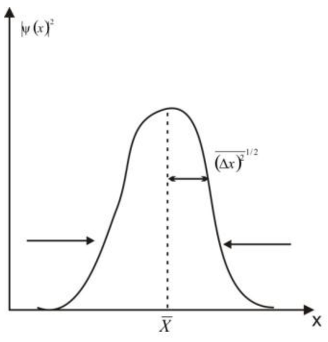
Bu ýerden gelip çykyşy ýaly, eger

$$B^2 \leq 4AC \qquad (3.9)$$

şert ýerine ýetse, onda (12.8) –deňsizlik ξ-niň islendik bahasy üçin ýerine ýetýär. (12.9) –a A, B, C ululyklaryň bahalaryny goýup, alarys:

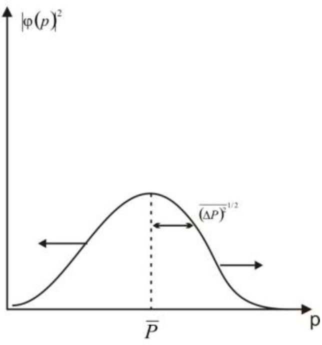
$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \qquad (3.10)$$

(3.10) ***kesgitsizlik gatnaşygyň has umumy we anyk görnüşi*** diýilýär.
Ondan görnüşi ýaly, bir wagtda $\overline{(\Delta x)^2}$ we $\overline{(\Delta P_x)^2}$ ululyklar nola deň bolup bilmeýärler. Kesgitsizlik gatnaşygyň manysy aşakdakydan durýar:
eger koordinata giňişliginde paýlanma gysylýan bolsa(11-nji çyzgy), onda paýlanma impuls giňişliginde ýaýraýar (12-nji çyzgy).



Çyzgy-3

11-nji çyzgy



12-nji çyzgy

Çäklilikde, haçan, meselem, x boýunça paýlanma, ýagny $|\Psi(x)|^2$, $\overline{(\Delta x)^2} = 0$ görnüşe eýe bolsa, onda P_x impuls boýunça ol, ýagny $|\varphi(P_x)|^2$ hemişelik bolýar, ýagny $\overline{(\Delta P_x)^2} = 0$.

§4. Operatorlaryň hususy funksiýalary we hususy bahalary.

Ilki bilen islendik L mehaniki ululyk üçin orta kwadratik gyşarmanyň diňe položitel, ýa-da nola deň bolýandygyny subut edeliň. Kwant mehanikasynda operatorlary ulanmagyň esasy meselesi, her $\hat{L}$ bir mehaniki ululyga onuň çyzykly özüneçatrymly operatory deňeşdirmek durýar, ýagny:

$$L \rightarrow \hat{L}$$

Şu ululygyň orta bahasy şeýle hasaplanylýar:

$$\overline{L} = \int \psi^* \hat{L} \psi dx \qquad (4.1)$$

Eger L -iň orta bahasyny $\overline{L}$ diýsek, onda orta bahadan gyşarma bolýar:

$$\Delta L = L - \overline{L} \quad .$$

Şu gyşarma operator degişli:

$$\Delta \hat{L} = \hat{L} - \overline{L}$$

Kwadratik gyşarma bolsa,

$$(\Delta L)^2 = (L - \overline{L})^2$$

operator şeýle ýazylýar:

$$(\Delta \hat{L})^2 = (\hat{L} - \overline{L})^2$$

(4.1.)-iň esasynda ýazyp bileris:

$$\overline{(\Delta L)^2} = \int \psi^* (\Delta \hat{L})^2 \psi dx \qquad (4.2.)$$

Şu ululygyň položitel bolmalydygyny subut etmek üçin, operatoryň özüne çatrymly bolmaklygynyň kesgitlemesini ulanýarys:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_1^* \hat{L} u_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} u_2 \hat{L}^* u_1^* dx$$

(4.2.)-de şeýle belgileri amala aşyralyň.

$$\psi^* = u_1^*, \qquad (\Delta \hat{L} \psi) = u_2$$

Onda $\overline{(\Delta L)^2} = \int \psi^* \Delta \hat{L} \cdot \Delta \hat{L} \psi dx = \int u_1^* \Delta \hat{L} \cdot u_2 dx = \int u_2 \cdot \Delta \hat{L}^* u_1^* dx =$

$$= \int (\Delta \hat{L} \psi) \cdot (\Delta \hat{L} \cdot u_1)^* dx = \int \left| \Delta \hat{L} \psi \right|^2 dx \geq 0 \qquad (4.3.)$$

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

Şeýlelikde,
(4.1.)-i aşakdaky ýaly göçüreliň:

$$\overline{(\Delta L)^2} = \overline{(L - \overline{L})^2} = \int \psi^* (\hat{L} - \overline{L})^2 \psi dx$$

Şu formuladan, her bir aýratyn ýagdaýda L -iň bahasynyň nähili boljakdygy gelip çykmaýar. Şonuň üçin, L ululygyň mümkin bolup biljek bahasyny tapmak maksady bilen onuň diňe bir bahasynyň bolup biljek ýagdaýyna seredeliň. Şeýle ýagdaýlarda orta kwadratik gyşarma:

$$\overline{(\Delta L)^2} = 0 \qquad .$$

Diýmek, şeýle ýagdaýlar üçin (4.3.)-iň esasynda, (4.4.)-i aşakdaky görnüşde göçürýäris

$$\int \psi_L^* (\hat{L} - \overline{L})^2 \psi_L dx = \int \left| (\hat{L} - \overline{L}) \psi_L \right|^2 dx \geq 0 \qquad ,$$

bu ýerden $\left| (\hat{L} - \overline{L}) \psi_L \right|^2 = 0$.

Kompleks sanyň modulunyň nola deň bolmagy üçin şol sanyň özi nola deň bolmaly, diýmek

$$(\hat{L} - \overline{L}) \psi_L = 0$$

$$\overline{L} = L$$

Seredilýän ýagdaýda , onda ahyrky netijä gelýäris

$$\hat{L}\psi = L\psi \qquad (4.5.)$$

(4.5.)-de $\hat{L}$ operator, onda tapylan deňleme, operator bilen L belilýän ululygyň $\hat{L}$ ýekeje bahasynyň bolup biljek ýagdaýynyň tolkun funksiýasyny tapmak üçin, çyzykly deňlemedir. Köplenç halatlarda operator differensial operatory we (4.5.) bolsa çyzykly birjynsly differensial deňleme bolýar.

Umuman bellenip aýdylanda (4.5.)-iň triwial däl (noldan tapawutly) çözgüdi parametriň ähli bahalarynda däl-de, diňe käbir saýlananlarda alynýar, ýagny

$$L = L_1, L_2, \ldots, L_n, \ldots \quad L$$

Şulara degişli çözgütlere

$$\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n, \ldots$$

hususy funksiýalar diýilýär, şu çözgütleriň alynýan parametriň bahalaryna bolsa, hususy (häsiýetlendiriji) bahalar diýilýär. Hususy bahalary we hususy funksiýalary kesgitleýän „n” bitin sanlara kwant sanlary diýilýär.

Şeýle mesele mysal edip uçlary berkidilen kirişiň yrgyldysyny getirmek bolar. Onuň üçin hereketiň differensial deňlemesi şeýle ýazylýar:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + k^2u = 0$$

(4.5.) we (4.6.) deňlemeleri deňeşdirip, görýäris

$$\hat{L} = \frac{d^2}{dx^2} \qquad \text{we} \qquad L = -k^2 .$$

Klassykyy mehanikada „u” funksiýa käbir gyra şertleri ýüklenilýär, ýagny $x = 0$ we $x = l$ -de „u“ nola öwrülmeli. Şeýle şerti kwant mehanikasynda ψ funksiýa talap edip bolmaýar, sebäbi ol argumentleri bolup hyzmat edýän üýtgeýänleri ähli oblastda kesgitleýär:

$$-\infty \prec x \prec +\infty, \ -\infty \prec y \prec +\infty, \ -\infty \prec z \prec +\infty.$$

Ýöne kwant mehanikasynda hem, gyra şertlere ekwiwalent bolan talaplar ψ-ä ýüklenilýär. Olar:

1. gutarnykly;
2. üznüksiz;
3. birbahaly;

Şu şertlere standart şertleri diýilýär.
Haýsy hem bolsa bir ululygyň hususy bahalarynyň toplumyna şol ululygyň spektri diýilýär. Spektr esasan üç görnüşde bolup biler. Birinjiden, eger bölejigiň hereketi giňişlikde çäklendirilen bolsa,

onda $L_1, L_2, \ldots, L_n, \ldots$

aýry-aýry bahalar alynýar we olara diskret spektr diýilýär. Ikinjiden, eger L bölejigiň hereketi giňişlikde çäklendirilmedik bolsa, onda L -iň ähli bahalary ýüze çykýar we olara üznüksiz spektr diýilýär. Üçünjiden, L -iň bahalary $L_1 \le L \le L_2$ $L_3 \le L \le L_4$, umuman $L_n \le L \le L_{n+1}$ interwalda ýerleşip biler. Şeýle ýagdaýda spektr aýry-aýry gatlaklardan durýar diýilýär. Eger mümkin bolan bahalar diskret bolsa, onda ululyk kwantlanan bahalary alýar diýip aýdylýar.

§5. Hususy funksiýalaryň esasy häsiýetleri.

Meseläni aýdyňlaşdyrmak maksady bilen, diňe diskret spektre ýüz urarys we ähli üýtgeýänli bir harp „*x*” bilen belgiläris. Goý, nähili-de bolsa iki u_1 we u_2 funksiýalary bar diýeliň.

Eger

$$\int u_1^* u_2 dx = 0 \qquad (5.1.)$$

şert ýerine ýetse, onda olara ortogonal diýilýär. Şu ýerde integral, üýtgeýänleriň üýtgemekleriniň ähli oslasty boýunça alynýar.

Teorema. Dürli L_n we L_m hususy bahalara degişli, özüneçatrymly $\hat{L}$ operatoryň ψ_n we ψ_m hususy funksiýalary özara ortogonaldyr.

Subudy. ψ_n we ψ_m ululyklaryň hususy funksiýalar bolýandyklary üçin, ýazyp bileris.

$$\hat{L}\psi_m = L_m \psi_m \qquad (5.2.)$$

$$\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n \qquad (5.3.)$$

(5.2.)-den kompleks çatrymly deňlemäni alalyň

$$\hat{L}^*\psi_m^* = L_m^*\psi_m^* \qquad (5.4.)$$

$\hat{L}$ operatoryň özüneçatrymlygyndan gelip çykyşy ýaly, L-iň seredilýän bahalary maddydyr, ýagny

$L_n = L_n^*$ ýa-da $L = L^*$

Diýmek, (5.4.)-de $L_m = L_m^*$

(5.3.)-i ψ_m^* -e, (5.4.)-i bolsa ψ_n-e köpeldip, ikinjini birinjiden aýryp, alarys:

$$\psi_m^*\hat{L}\psi_n - \psi_n\hat{L}^*\psi_m^* = (L_n - L_m)\psi_m^*\psi_n$$

Bu deňligi integrirleýäris:

$$\int\psi_m^*\hat{L}\psi_n dx - \int\psi_n\hat{L}^*\psi_m^* dx = (L_n - L_m)\int\psi_m^*\psi_n dx$$

Şu aňlatmanyň çep tarapy, $\hat{L}$ operatoryň özüneçatrymlydygy zerarly, nola deň, onda

$$(L_n - L_m)\int\psi_m^*\psi_n dx = 0$$

Teoremanyň şerti boýunça $L_n \neq L_m$, diýmek, onda

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = 0 \qquad (5.5.)$$

Subut tamam boldy.
Şu ýerde funksiýanyň normirlenmek şertini ýazalyň

$$\int \psi_n^* \psi_n dx = 1 \qquad (5.6.)$$

(5.5.) we (5.6.) aňlatmalary bir deňlikde birleşdireliň

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \qquad (5.7.)$$

bu ýerde δ_{mn} şekil şeýle kesgitlenilýär

$$\delta_{mn} = 1 \qquad \text{eger } n = m,$$

$$\delta_{mn} = 0 \qquad \text{eger } n \neq m.$$

(5.7.)-ni kanagatlandyrýan funkiýalaryň sistemasyna, ortogonal we normirlenen funksiýalaryň sistemasy diýilýär. Şeýlelikde, $L_1, L_2, \ldots$ hususy bahalara degişli $\psi_1, \psi_2, \cdots$ hususy funksiýalar dogrydanam ortonormirlenen häsiýete eýedirler, bu öz gezeginde hususy funksiýalaryň wajyp häsiýetleriniň biridir.

Kwant mehanikasynda, köp ýagdaýlarda operatoryň ψ_n hususy bahasyna diňe bir funksiýa däl-de, bir näçe çyzykly baglysyz

$$\psi_{n1}, \psi_{n2}, \ldots, \psi_{nk}, \ldots, \psi_{nf}$$

hususy funksiýalaryň degişlidiklerine duş gelinýär. Berilen hususy baha degişli hususy funksiýalaryň şu sanlaryna hususy bahanyň döremekliginiň kratnyýlygy diýilýär. Döremeklik düşünjäni şeýle düşündireliň. Berilen sistemany (atom, molekula we ş.m.) häsiýetlendirýän käbir *L* fiziki ululyk, sistemanyň dürli ýagdaýlary üçin bir meňzeş bahalary alýar. Şol bir baha degişli şeýle dürli ýagdaýlaryň sanyna seredilýän ululygyň döremekligiň kratnyýlygy diýilýär.

Hususy funksiýalaryň sanyna degişlilikde iki, üç we ş.m. kratnyýly döremeklik bolup biler.

Matematika-da subut edilişi ýaly, operatoryň hususy funksiýalarynyň örän giň klasynyň sistemasy, diňe ortogonal funksiýalaryň sistemasy däl-de, doly sistema hem bolmalydyr. Şuňa laýyklykda, islendik $\psi(x)$ funksiýa hususy funksiýalaryň superpozisiýasy görnüşinde alynyp biliner.

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \qquad (5.8)$$

c_n amplitudany tapmak üçin, (5.8.)-i ψ_m^* -e köpeldeliň we ähli giňişlik boýunça integrirläliň:

$$\int \psi_m^* \psi^* dx = \sum_n c_n \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum c_n \delta_{mn} = c_m$$

Şu aňlatmada m-i n-e çalyşyp, alarys:

$$c_n = \int \psi_n^* \psi dx$$

Diýmek, eger ψ we ortogonal funksiýalaryň sistemasy belli bolsa, onda (5.8.)-de duş gelýän ähli amplitudalary tapyp bileris.

§6. Dürli mehaniki ululyklary birwagtda ölçemek mümkinçiliginiň şerti.

Kwant oblastlarda şol bir bölejik üçin birwagtda koordinat we impuls üçin kesgitli bir baha alyp bolmaýar. Şeýle biri-birini inkär edýän gatnaşykda başga-da köp ululyklar bar. Dogrydanam, birwagtda L we M ululyklaryň bolmaklarynyň ýagdaýyň bolup biljekdigi, ýagny

$$\overline{(\Delta L)^2} = 0 \qquad \overline{(\Delta M)^2} = 0$$ üçin,,

şeýle ýagdaýyň tolkun funksiýasy $\hat{L}$ we $\hat{M}$ operatorlaryň umumy hususy funksiýasy bolmaly. Ýöne $\hat{L}$ we $\hat{M}$ operatorlaryň hususy funksiýalary üçin deňlemeleriň

$$\hat{L}\psi_L = L\psi_L \qquad \hat{M}\psi_M = M\psi_M$$

umuman aýdylanda, dürli çözgütleri $\psi_L \neq \psi_M$ bar, şol sebäpli, L kesgitli bahaly ψ_L ýagdaýda, M ululyk kesgitli baha almaýar, we tersine. Diňe ýörite ýagdaýlarda L we M kesgitli bahalara eýe bolup bilerler (onuň üçin $\psi_M = \psi_L$ bolmaly). Birwagtda L we M ululyklaryň elmydama kesgitli bahany alyp biljekdikleriniň şerti, olaryň $\hat{L}$ we $\hat{M}$ operatorlarynyň kommutatiw bolmalydyklaryny görkezip bolýar. Başgaça aýdylanda, şeýle operator deňlemesi ýerine ýetmeli:

$$\hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L} \qquad (6.2.)$$

Şunuň şeýledigine göz ýetirmek maksady bilen şeýle ***teorema*** seredeliň: eger $\hat{L}$ we $\hat{M}$ iki operatorlar hususy funksiýalaryň umumy doly sistemasyna eýe bolýan bolsalar, onda olar kommutirleşýärler.

Subudy. Umumy hususy funksiýalary $\psi_n(x)$ arkaly belgiläliň, onda ýazyp bileris:

$$\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n$$

we

$$\hat{M}\psi_n = M_n\psi_n$$

Birinji deňleme $\hat{M}$, ikinjä bolsa $\hat{L}$ operator bilen täsir edip we ikinjini birinjiden aýyryp, alarys:

$$\hat{M}\hat{L}\psi_n - \hat{L}\hat{M}\psi_n = \hat{M}L_n\psi_n - \hat{L}M_n\psi_n = L_nM_n\psi_n - M_nL_n\psi_n = 0$$

ýa-da

$$(\hat{M}\hat{L} - \hat{L}\hat{M})\psi_n = 0$$

Islendik ψ funksiýany ψ_n hususy funksiýalary boýunça hatara dargadyp bolýar,

onda $$(\hat{M}\hat{L}-\hat{L}\hat{M})\psi=\sum_n C_n(\hat{M}\hat{L}-\hat{L}M)\psi_n=0$$

ýagny $(\hat{M}\hat{L}-\hat{L}M)$ operator islendik funksiýa ulanyp, nol alýarys. Operatorlaryň nazaryýetinde bu olaryň kommutatiwdiklerini aňladýar, ýagny, (6.2.)-ni alýarys.

Tersine, eger

$$\hat{M}\hat{L}\neq\hat{L}\hat{M}$$

bolsa, onda olar birwagtda kesgitli bahalary alyp bilmeýärler.

Şeýlelikde: kommutirleşýän operatorlar bilen suratlandyrylýan iki ululyk, hiç bolmanda prinsipde birwagtda ölçelinip bilinerler; kommutirleşmeýän operatorlar bilen suratlandyrylýan iki ululyk, birwagtda ölçelinip bilinmeýärler.

Indi, şeýle ***teorema*** seredeliň: eger we $\hat{L}$ $\hat{M}$ operatorlar kommutirleşýän bolsalar, onda olar umumy hususy funksiýa eýedirler.

Subudy. $\hat{L}$ operatoryň hususy funksiýasy üçin deňleme şeýledir:

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

Şu deňleme $\hat{M}$ operator bilen täsir edeliň:

$$\hat{M}\,\hat{L}\psi = \hat{M}\,L\psi$$

Teoremanyň şertine görä $\hat{M}\,\hat{L} = \hat{L}\,M$

onda $$\hat{L}(\hat{M}\,\psi) = L(\hat{M}\,\psi)$$

Şu ýerden görnüşi ýaly, $\psi^{I} = \hat{M}\,\psi$ funksiýa hem $\hat{L}$ operatoryň hususy funksiýasydyr, L-iň bahasyna diňe bir funksiýa degişli (döremeklik ýok), onda ψ' funksiýa ψ - den diňe hemişelik köpeldiji arkaly tapawutlanyp biler, ýagny

$$\psi^{I} = M\psi$$

onda

$$\hat{M}\,\psi = M\psi$$

Diýmek, ψ funksiýa $\hat{M}$ operatoryň hem hususy funksiýasydyr.

V. Bap. Kwant mehanikasynyň ýönekeý operatorlary.

Kwant mehanikasynyň ýönekeý operatorlaryna koordinat we impuls operatorlary, impulsyň momentiniň operatory we umumy energiýanyň operatory girýär.Olaryň tebigatyna, häsiýetlerine we funksiýalaryna aýratynlykda seredeliň.

Koordinatanyň we impulsyň operatory. Meseläni ýönekeýleşdireliň, ýagny ox okuň ugruna bir ölçegli herekete serederis.Alynan netije üç ölçegli ýagdaýa ýeňil umumylaşdyrylýar.

Özüniň hususy aňladylmasynda (ýagny koordinat aňladylmada) koordinatyň operatory şol koordinatyň özi bilen gabat gelýär.

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

Şu netije islendik koordinat funksiýa ösdürilip bilner.

$$\hat{U}(x) = U(x).$$

Impulsyň operatorynyň proýeksiýalary.

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

ýa-da wektor görnüşde

$$\hat{\vec{P}} = -i\hbar\nabla,$$

bu ýerde ∇ (nablo)-gradiýentiň operatory.

Koordinat we impuls operatorlarynyň proýeksiýalary orun üýtgemeginiň kesgitli düzgünine boýun egýärler, bu bolsa öz gezeginde olar bilen hasaplamany amala aşyrmagy has ýeňilleşdirýär.

Tolkun funksiýany $\psi(x, y, z)$ diýip, aşakdaky köpeltmek hasyllary emele getireliň

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

$$\hat{P}_x(x\psi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\cdot\psi) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} - i\hbar\psi.$$

Ikinji setiri birinjiden aýyryp, taparys

$$(x\hat{P}_x - \hat{P}_x x)\psi = i\hbar\psi.$$

Şu ýerden, tolkun funksiýany goýberip, ahyrky netije gelýäris

$$x\hat{P}_x - \hat{P}_x x = i\hbar \qquad (1.1)$$

we edil şunuň ýaly

$$y\hat{P}_y - \hat{P}_y y = i\hbar,$$
$$z\hat{P}_z - \hat{P}_z z = i\hbar.$$

Şeýle orun üýtgeme düzgünine Geýzenbergin ýerini çalşyrma gatnaşygy diýilýär.

Aşakdaky gatnaşyklaryň ýerine ýetýändikleri aýdyňdyr:

$$x\hat{P}_x - \hat{P}_x x = 0,$$
$$y\hat{P}_y - \hat{P}_y y = 0,$$
$$z\hat{P}_z - \hat{P}_z z = 0, \quad \text{we başgalar.}$$

Edil şu ýol bilen, islendik $F(x, y, z)$ funksiýa we impulsyň operatorlary üçin has umumy çalşyrma gatnaşyklaryny dikeldip bolýar, ýagny

$$FP_x - P_x F = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial x}$$

$$FP_y - P_yF = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial y}$$

$$FP_z - P_zF = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial z} \qquad (1.2)$$

(1.1) we (1.2) gatnaşyklardan, impulsyň we çatrymly koordinatyň birwagtda kesgitli bahany alýan ýagdaýyň ýoklugy gelip çykýar.

§2. Impulsyñ momentiniñ operatory.

Klassyky mehanikada bölejigiñ impulsynyñ moment diýip, $\vec{r}$ radius-wektoryñ $\vec{P}$ impulsa wektor köpeltmegine aýdylýar.

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

Kwant mehanikasynda impulsyñ momenti operator bilen suratlandyrylýar.

$$\hat{M} = [\hat{r}\hat{P}]$$

Şu ýerden $\hat{M}$ operatorynyñ proýeksiýalaryny tapýarys:

$$\hat{M}_x = y\,\hat{P}_z - z\hat{P}_y = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y}, - y\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

$$\hat{M}_y = z\,\hat{P}_x - x\hat{P}_z = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right), \qquad (2.1)$$

$$\hat{M}_z = x\,\hat{P}_y - y\hat{P}_x = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

Impulsyñ momentiniñ kwadratynyñ operatory üçin şeýle añlatmany alýarys:

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 = -\hbar^2 \left\{ \left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \right\}. \qquad (2.2)$$

Impulsyñ momentiniñ operatorynyñ komponentleri üçin orny çalyşma düzgünini tapalyñ. Şol sebäpli $\hat{M}_x$ we $\hat{M}_y$ operatorlaryñ kommutatoryny hasaplalyñ.

$$\hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x = \left(y\hat{P}_z - z\hat{P}_y\right)\left(z\hat{P}_x - x\hat{P}_z\right) - \left(z\hat{P}_x - x\hat{P}_z\right)\left(y\hat{P}_z - z\hat{P}_y\right)$$
$$= y\hat{P}_z z\hat{P}_x - y\hat{P}_z x\hat{P}_z - z\hat{P}_y z\hat{P}_x + z\hat{P}_y x\hat{P}_z - z\hat{P}_x y\hat{P}_z + z\hat{P}_x z\hat{P}_y + x\hat{P}_z y\hat{P}_z - x\hat{P}_z z\hat{P}_y$$
$$= y\hat{P}_x\left(\hat{P}_z z - z\hat{P}_z\right) + x\hat{P}_y\left(z\hat{P}_z - \hat{P}_z z\right) = y\hat{P}_x(-i\hbar) + x\hat{P}_y i\hbar = i\hbar\left(x\hat{P}_y - y\hat{P}_x\right)$$
$$= i\hbar\hat{M}_z$$

Şeýlelikde

$$\left.\begin{aligned} \hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x &= i\hbar\hat{M}_z, \\ \hat{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y &= i\hbar\hat{M}_x, \\ \hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z &= i\hbar\hat{M}_y, \end{aligned}\right\} \qquad (2.3)$$

Şu sistemany gysgaça şeýle añladyp bileris.

$$\left[\hat{M}\hat{M}\right] = i\hbar\hat{M}$$

(2.3)-den impulsyñ momentiniñ proýeksiýalarynyñ kommutirleşmeýändikleri görünýär. Tersine, impulsyñ momentiniñ her bir komponenti impulsyñ umumy momentiniñ kwadraty bilen kommutirleşýär:

$$\left.\begin{aligned} \hat{M}_x\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{M}_x &= 0,\\ \hat{M}_y\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{M}_y &= 0,\\ \hat{M}_z\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{M}_z &= 0. \end{aligned}\right\} \qquad (2.4)$$

Dogrydanam

$$\begin{aligned}
\hat{M}_x\hat{M}^2-\hat{M}^2\hat{M}_x &= \hat{M}_x\left(\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2+\hat{M}_z^2\right)-\left(\hat{M}_x^2+\hat{M}_y^2+\hat{M}_z^2\right)\hat{M}_x\\
&= \hat{M}_x\hat{M}_x^2+\hat{M}_x\hat{M}_y^2+\hat{M}_x\hat{M}_z^2-\hat{M}_x^2\hat{M}_x-\hat{M}_y^2\hat{M}_x-\hat{M}_z^2\hat{M}_x\\
&= \hat{M}_x\hat{M}_y^2+\hat{M}_x\hat{M}_z^2-\hat{M}_y\hat{M}_y\hat{M}_x-\hat{M}_z\hat{M}_z\hat{M}_x\\
&= \hat{M}_x\hat{M}_y^2+\hat{M}_x\hat{M}_z^2-\hat{M}_y(\hat{M}_x\hat{M}_y-i\hbar\hat{M}_z)-\hat{M}_z(\hat{M}_x\hat{M}_z+i\hbar\hat{M}_y)\\
&= \hat{M}_x\hat{M}_y^2+\hat{M}_x\hat{M}_z^2-\hat{M}_y\hat{M}_x\hat{M}_y+i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z-\hat{M}_z\hat{M}_x\hat{M}_z-i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y\\
&= \hat{M}_x\hat{M}_y^2+\hat{M}_x\hat{M}_z^2-(\hat{M}_x\hat{M}_y-i\hbar\hat{M}_z)\hat{M}_y+i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z-(\hat{M}_x\hat{M}_z+i\hbar\hat{M}_y)\hat{M}_z\\
&\quad -i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y\\
&= \hat{M}_x\hat{M}_y^2+\hat{M}_x\hat{M}_z^2-\hat{M}_x\hat{M}_y\hat{M}_y+i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y+i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z-\hat{M}_x\hat{M}_z\hat{M}_z-i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z\\
&\quad -i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y = 0
\end{aligned}$$

(2.3) we (2.4) düzgünlerden gelip çykyşy ýaly, impulsyñ momentiniñ $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ proýeksiýalary birwagtda ölçelinip bilinmeýärler. Haýsy hem bolsa bir ýagdaýda proýeksiýalaryñ biri kesgitli bahany alýan bolsa, ($\overline{(\Delta M_x)^2} = 0$), galan ikisi şeýle bahany alyp bilmeýärler. ($\overline{(\Delta M_y)^2} > 0 \ we \ \overline{(\Delta M_z)^2} > 0$). Tersine, proýeksiýalaryñ islendigi we umumy momentiñ kwadraty birwagtda ölçenilip bilinýärler.

Indi, haýsy hem bolsa bir erkin ugra $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ we $\hat{M}^2$ operatorlaryñ mümkin bolan bahalaryny kesgitläliñ. Şu meseläni çözmek üçin koordinatyñ sferiki sistemasyna geçmeklik oñaýlydyr. Şeýle koordinat sistemada

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \, , z = r\cos\theta, \, y = r\sin\theta\sin\varphi \qquad (2.5)$$

bu ýerde θ erkin ugur diýip saýlanyp alnan oz oky bilen radius-wektoryñ $\vec{r}$ arasyndaky burç; φ bolsa ox okdan xy tekizlikde hasaplanylýan burç.

(2.1) we (2.2) formulalary dekart koordinat sistemadan sferiki sistema özgerdeliñ. (2.5)-den tapýarys.

$$\tan\varphi = \frac{y}{x}, \quad \cos\theta = \frac{z}{r}, \qquad (2.6)$$

radius-wektoryñ kwadraty

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \qquad (2.7)$$

(2.1)-däki önümleri şeýle görnüşde göçüreliñ

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta}, \qquad (2.8)$$

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

(2.6) we (2.7) añlatmalaryndan (2.8)-daky önümleri hasaplap we olary, hem-de (2.5)-i (2.1)-e goýup, käbir özgertmelerden soñ, alýarys:

$$\widehat{M_x} = +i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$\widehat{M_y} = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \qquad (2.9)$$

$$\widehat{M_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

(2.9)-y (2.2)-ä goýup we uly özgertmelerden soñ, taparys:

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^{\,2} + \hat{M}_y^{\,2} + \hat{M}_z^{\,2} = \hat{M}_x\hat{M}_x + \hat{M}_y\hat{M}_y + \hat{M}_z\hat{M}_z = -\hbar^2\nabla_{\theta,\varphi}^{\,2} \tag{2.10}$$

bu ýerde $\nabla_{\theta,\varphi}^{\,2}$ - sfera üçin Laplasyñ operatory.

$$\nabla_{\theta,\varphi}^{\,2} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{2.11}$$

(2.9) we (2.10) operatorlary dine θ, φ burçlara täsir edýärler, şol sebäpli tolkun funksiýany şu burçlara bagly diýip alyp bileris, ýagny

$$\psi = \psi(\theta, \varphi)$$

$\hat{M}^2$ operatoryñ hususy bahasyny kesgitlemek üçin

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

deñlemede

$$\hat{L} = \hat{M}^2 \text{ we } L = M^2$$

diýip, şeyle deñlemäni alýarys:

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

ýa-da

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

ýa-da

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\lambda\psi=0, \qquad (2.12)$$

bu ýerde $\lambda=\frac{M^2}{\hbar^2}$.

Şu deňlemäni üýtgeýänleriň θ,φ ähli oblasty $(0\le\theta\le\pi, 0\le\varphi\le2\pi)$ üçin çözmeli, üstesine çözgüt gutarnykly, üznüksiz we birbahaly bolmaly. (2.12)-sferiki funksiýalar üçin deňleme. Goýulan şertleri kanagatlandyrýan çözgüt λ-nyň ähli bahasynda däl-de, diňe

$$\lambda=l(l+1) \qquad (2.13)$$

bahalarda alynýar, nirede l - bitin položitel san. Onda impulsyň momentiniň kwadratynyň hususy bahalary, deňdir

$$M^2=\hbar l(l+1), \quad l=0,1,2,...$$

$\hat{M}_z$ operatoryň hususy funksiýalary üçin deňlemäni ýazyp bileris,

$$\hat{M}_z\psi=M_z\psi,$$

M_z hususy bahalar bolsa şeýle kesgitlenilýär

$$M_z=\hbar m, \quad m=0,\pm1,\pm2,...,\pm l$$

"l" we "m" kwant sanlaryň bahalaryndan gelip çykyşy ýaly, M^2 hususy baha, "m" sanyň bahalary bilen tapawutlanýan, $(2l+1)$ hususy funksiýalar degişli, ýagny döremeklik bar.

Erkin oz oka, impulsyň momentiniň absolýut ululygynyň mümkin bahalary we impulsyň momentiniň proýeksiýasynyň mümkin bahalary, kwantly bahalary alýar.

§3. Doly energiýanyň operatory

Klassyky mehanikada doly energiýa kinetik we potensial energiýalaryñ jemine deñ we oña Gamiltonyñ funksiýasy diýilýär.

$$H = T + U(x, y, z)$$

Kwant mehanikasynda doly energiýa operatorlaryñ üsti bilen berilýär we ol kinetik we potensial energiýalaryñ operatorlaryñ jemine deñ.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(x, y, z) \qquad (3.1)$$

$\hat{H}$ ululyga Gamiltonyñ funksiýasynyñ operatory ýa-da gamiltonian diýilýär.

Impulsyñ operatory arkaly kinetik energiýanyñ operatory şeýle añladylýar:

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{P}_x{}^2 + \hat{P}_y{}^2 + \hat{P}_z{}^2\right) = \frac{1}{2\mu}\left\{(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^2 + (-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})^2 + (-i\hbar\frac{\partial}{\partial z})^2\right\}$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$$

bu ýerde $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - Laplasyñ operatory.

Kinetik energiýa impulslaryñ funksiýasy, potensial energiýa bolsa koordinatyň funksiýasy, diýmek, kwant mehanikasynda umumy energiýanyñ operatoryny kinetik we potensial energiýalaryñ operatorlarynyñ jemi ýaly alyp bolmaýar.

Erkin elektromagnit meýdandaky “e” zarýadly we “μ” massaly bölejigiñ gamiltonianyny aýdyñlaşdyralyñ. Ol şeýle görnüşde alynýar:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{P} - \frac{e}{c}\hat{A})^2 + eV$$

Eger elektromagnit güýçlerden başga, U güýç funksiýa bilen suratlandyrylýan, güýçler bar bolsa, onda

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{P} - \frac{e}{c}\hat{A})^2 + eV + U \qquad (3.2)$$

$(\hat{P} - \frac{e}{c}\hat{A})^2$ operatory özgerdeliň.

$$(\hat{P} - \frac{e}{c}\hat{A})^2 = (\hat{P}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x)^2 + (\hat{P}_y - \frac{e}{c}\hat{A}_y)^2 + (\hat{P}_z - \frac{e}{c}\hat{A}_z)^2 \qquad (3.3)$$

Operatorlary köpeltmek düzgüni boýunça

$$(\hat{P}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x)^2 = \left(\hat{P}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x\right)\left(\hat{P}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x\right) = \hat{P}_x{}^2 - \frac{e}{c}\hat{P}_x\hat{A}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x\hat{P}_x + \frac{e^2}{c^2}\hat{A}_x{}^2$$

(3.2)-niň esasynda ýazyp bileris.

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

şu ýerden

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

Onda

$$(\hat{P} - \frac{e}{c}\hat{A})^2 = \hat{P}_x{}^2 - \frac{2e}{c}\hat{A}_x\hat{P}_x - \frac{i\hbar e}{c}\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x} + \frac{e^2}{c^2}\hat{A}_x{}^2$$

Diýmek, (3.3) şeýle görnüşe geçýär:

$$(\hat{P}-\frac{e}{c}\hat{A})^2$$
$$=\hat{P}_x{}^2-\frac{2e}{c}\hat{A}_x\hat{P}_x-\frac{i\hbar e}{c}\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}+\frac{e^2}{c^2}\hat{A}_x{}^2+\hat{P}_y{}^2-\frac{2e}{c}\hat{A}_y\hat{P}_y-\frac{i\hbar e}{c}\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial y}+\frac{e^2}{c^2}\hat{A}_y{}^2+\hat{P}_z{}^2$$
$$-\frac{2e}{c}\hat{A}_z\hat{P}_z-\frac{i\hbar e}{c}\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial z}+\frac{e^2}{c^2}\hat{A}_z{}^2=\hat{P}^2-\frac{2e}{c}(\hat{A}\hat{P})-\frac{i\hbar e}{c}div\hat{A}+\frac{e^2}{c^2}\hat{A}^2$$

Şu añlatmany (3.2)-ä goýup, soñky netijäni alýarys.

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\hat{P}^2-\frac{e}{\mu c}(\hat{A}\hat{P})+\frac{i\hbar e}{2\mu c}div\hat{A}+\frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{A}^2+eV+U$$

Mehanika üçin şu operator esasydyr we iki ýagdaý bilen kesgitlenýär: bölejikleriñ tebigaty we bölejiklere täsir edýän meýdanyñ tebigaty.

§4. Gamiltonyñ deñlemesi.

Gamiltonyñ klassykyy deñlemeleri beýan ediler, sebäbi ondaky alynan maglumatlar özleriniñ formasy boýuça gabat gelýän düşünjelere kwant mehanikada hem duş gelinýär.

Umumylaşdyrylan koordinatlary $q_1,q_2,\ldots,q_s,\ldots,q_f$ arkaly belgiläliñ, olara çatyrymly umumylaşdyrylan impulslary bolsa degişlilikde $p_1,p_2,\ldots,p_s,\ldots p_f$ diýip alalyñ. Gamiltonyñ H funksiýasy şu koordinatlaryñ we umuman aýdylanda t wagtyñ funksiýasydyr.

Belli bolşy ýaly, Gamiltonyñ deñlemeleri şeýle ýazylýar:

$$\frac{dp_s}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q_s},\quad\frac{dq_s}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_s}\qquad(4.1)$$

Islendik $F = F(t, q_s, P_s)$ funksiýadan wagta görä önüm deñdir.

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{s=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial q_s}\frac{dq_s}{dt} + \sum_{s=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial P_s}\frac{dP_s}{dt}$$

ýa-da (4.1)-iň esasynda:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{s=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial q_s}\frac{\partial H}{\partial P_s} - \sum_{s=1}^{f} \frac{\partial F}{\partial P_s}\frac{\partial H}{\partial q_s} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{s=1}^{f}\left\{\frac{\partial F}{\partial q_s}\frac{\partial H}{\partial P_s} - \frac{\partial F}{\partial P_s}\frac{\partial H}{\partial q_s}\right\}$$

ýa-da

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [HF] \tag{4.2}$$

bu ýerde

$[HF] = \sum_{s=1}^{f}\left\{\frac{\partial F}{\partial q_s}\cdot\frac{\partial H}{\partial p_s} - \frac{\partial F}{\partial p_s}\cdot\frac{\partial H}{\partial q_s}\right\}$ – Puassonyñ skobkalary.

Gamiltonyñ (4.1) deñlemeleri şu skobbkalar arkaly şeýle ýazylýarlar:

$$\frac{dP_s}{dt} = [HP_s],$$
$$\frac{dq_s}{dt} = [Hq_s] \tag{4.3}$$

Eger Gamiltonyñ funksiýasyny

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2\mu} + U(x, y, z) \tag{4.4}$$

diýip alsak, onda (4.3), (4.1) we (4.4) aňlatmalardan alýarys:

$$\frac{dP_x}{dt} = [HP_x] = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial U}{\partial x} \ ,$$
$$\frac{dx}{dt} = [Hx] = \frac{\partial H}{\partial P_x} = \frac{P_x}{\mu}$$

Şeýlelikde, bölejigiň hereketini häsiýetlendirýän Gamiltonyň deňlemeleri ahyrky netijede şeýle ýazylýar:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{P_x}{\mu}, \quad \frac{dy}{dt} = \frac{P_y}{\mu}, \quad \frac{dz}{dt} = \frac{P_z}{\mu},$$
$$\frac{dP_x}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x}, \quad \frac{dP_y}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial y}, \quad \frac{dP_z}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial z} \qquad (4.5)$$

(4.5)-den alyp bolýar,

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{\mu}\frac{dP_x}{dt} = -\frac{1}{\mu}\frac{\partial U}{\partial x},$$

ýa-da

$$\mu\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

görnüşi ýaly, soňky Nýutonyň deňlemesidir.

VI BAP. RELÝATIWISTIK DÄL KWANT MEHANIKASYNYŇ ESASLARY.

§1. Şrýodengeriň deňlemesi.

M. Plankyň kwantlar nazaryýeti, Boruň postulatlary we we broýlyň gipotezasy has umumy nazaryýeti dikeltmek üçin diňe ilkinji etap bolup hyzmat etdiler. Mikrobölejikleriň şeýle nazaryýetine kwant ýa-da tolkun mehanikasy diýilýär. Şu ugurda fundamental ädimi Şrýodinger 1926-njy ýylda ýerine ýetiripdir. Ol mikrobölejigiň hereketini tolkun deňlemäniň kömegi bilen suratlandyrmagy teklip edýär. Özüniň manysy boýunça Şrýodingeriň deňlemesi relýatiwstik däl kwant mehanikasynyň postulatydyr. Ýagdaýyň wektorynyň wagta görä üýtgemegini kesgitleýän şu deňlemä giňişleýin seredeliň.

Wagtyň $t=0$ pursatynda bölejigiň ýagdaýyny suratlandyrýan $\psi(x,0)$ tolkun funksiýa berilipdir diýeliň. Wagtyň indiki pursatynda $(t>0)$ onuň ýagdaýyny kesgitlejek bolalyň. Şeýle wagt dowamynda bölejigiň ýagdaýy üýtgeýär we nähili-de bolsa bir $\psi(x,t)$ tolkun funksiýa bilen suratlandyrar. Şu iki, $\psi(x,0)$ we $\psi(x,t)$ funksiýalaryň özara nähili baglanyşykdadyklaryny dikeldeliň. Matematiki nukdaýnazardan, t=o üçin $\psi(x,0)$ tolkun funksiýadan wagtyň soňky pursatynda $\psi(x,t)$ tolkun funksiýasy birbahaly kesgitlenmelidir. t=o –a tükeniksiz ýakyn Δt-wagt pursatynda $\psi(x, \Delta t)$ funksiýa seredeliň. Ony aşakdaky ýaly hatar görnüşde alyp bileris:

$$\psi(\mathrm{x}, \Delta t) = \psi(x,0) + \left(\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}\right)_{t=0} \Delta t + \ldots$$

Aýdylana laýyklykda $\left(\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}\right)_{t=0}$ funksiýa $\psi(x,0)$ -dan kesgitlenilmeli. Operatoryň kesgitlemesiniň esasynda ýazyp bileris.

$$\left(\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}\right)_{t=0} = \hat{L}(x,0)\Psi(x,0),$$

bu ýerde $\hat{L}(x,0)$ - çyzykly özüneçatyrymly operator we onuň kömegi bilen $\Psi(x,0)$ - dan $\left(\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}\right)_{t=0}$ alynýar.

Wagtyň t=o pursaty düýbünden erkin alyndy, onda wagtyň islendik pursaty üçin ýazyp bileris:

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \hat{L}(x,t)\Psi(x,t). \qquad (1.1)$$

$\hat{L}(x,t)$ operatora wagta görä süýşürme operatory diýilýär. Ol kesgitlenilip bilinmeýär ýöne postulirlenip biliner. Supperpozisiýa prinsipine laýyklykda ol çyzykly bolmaly.

Impulsyň kesgitli bahaly erkin hereketi üçin de Broýlyň tolkun funksiýasy şeýle ýazylýar:

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

Şu funksiýanyň nähili deňlemäni kanagatlandyrýandygyny bilmek üçin ondan wagta görä bir we koordinata görä iki önümleri hasaplap hem-de olary utgaşdyryp şeýle deňlemäni alarys:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2\psi ,$$

we ol şeýle görnüşde göçürilip bilinear

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi$$

Bu ýerden görnüşi ýaly erkin hereket üçin süýşürme operatorynyň bahasyny alýarys:

$$\hat{L} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}. \qquad (1.2)$$

Şeýle postulate degişlilikde indi tolkun üçin (1.1) – nji deňleme aşakdaky görnüşde ýazylyp bilinear

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi . \qquad (1.3)$$

Şu deňleme Şrýodingeriň deňlemesi diýen ady göterýär. Ol kwant mehanikasynyň esaslarynyň birini emele getirýär we özüniň dogrydygyny diňe teoriýada däl-de, tejribede hem alýar. Eger bölejik daşky potensial meýdanda ýerleşen bolsa, onda (21.3) şeýle ýazylýar

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 \psi + U(x, y, z, t).$$

Şu deňlemäniň wajyp özboluşlygy, $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ öňünde "ï"-niň bolmagydyr. Klassykyy fizikasynda wagta görä bir tertipli differensial deňlemeler tersine özgerdilmeýän prosesleri suratlandyrýar (meselem, diffuziýa, ýylylyk geçirijilik). Şol hyýaly sanyň esasynda, wagt boýunça birinji tertipli Şrýodingeriň deňlemesi periodiki çözgüdi alyp biler we şol sebäpli tolkun funksiýa kompleks ululykdyr.

Şrýodingeriň deňlemesiniň çözgüdi bilen bagly bolan meseleleriň üç görnüşine seredeliň.

Brinji görnüşli mesele. Giňişligiň çäkli oblastynda, başgaça aýdylanda potensial çukurda, bölejigiň hereketi barlanylýar. Muňa mysal bolup elektronyň atomdaky hereketini görkezip bolar, şeýle herekete finitli diýilär we bölejik erkinsiz ýagdaýda ýerleşýär. Seredilýän mesele üçin wagta bagly bolmadyk Şrýodingeriň deňlemesi ulanylýar

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+[U(x)-E]\psi(x)=0$$

Kesgitli gyra şertlerinde şu deňlemäni çözüp, stasionar ýagdaý üçin energiýanyň bahasynyň spektri we olara degişli tolkun funksiýalar tapylýar.

Ikinji görnüşli mesele. Daşky meýdanda bölejigiň infinitli (giňişlikde çäklendirilmedik) hereket seredilýär, meselem bölejigiň potensial päsgelçiliklerden geçişi barlanylýar. Hereket infinitli, şol sebäpli bölejigiň energetik spektri üznüksizdir. Şeýle meselede hem Şrýodingeriň wagta bagly däl deňlemesi ulanylýar.

Üçünji görnüşli mesele. Bölejigiň ýagdaýynyň wagta görä üýtgemegine seredilýär we şonuň üçin wagta bagly Şrýodingeriň deňlemesi ulanylýar:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U(x)\psi$$

bu deňlemäni çözüp, berlen daşky täsiriň netijesinde nähili-de bolsa bir kwantly geçişiň ähtimallygy tapylýar.

§ 2. Üznüksizligiň deňlemesi.

Şrýodingeriň deňlemesinden bölejikleriň sanynyň saklanma kanunyny alyp bolýar, onuň üçin şol deňlemäni aşakdaky görnüşde alalyň

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi+U\psi. \qquad (2.1)$$

Kompleks çatyrymly funksiýasy üçin deňleme bolsa şeýle ýazylýar

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi^*+U^*\psi^*. \qquad (2.2)$$

(2.1)-i çepden ψ^* , (2.2) –ni bolsa sagdan ψ funksiýa bilen köpeldip we ikinjini birinjiden aýyryp, taparys

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\psi^*\nabla^2\psi-\nabla^2\psi^*\psi\right)+\psi^*U\psi-U^*\psi^*\psi.$$

$U=U^*$ şerti hasaba alyp şu aňlatmany özgerdeliň

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\psi^*\nabla\cdot\nabla\psi-\psi\nabla\cdot\nabla\psi^*\right)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\psi^*\,divgrad\psi-\psi\,digrad\psi^*\right)= \qquad (2.3)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}div\left(\psi^*grad\psi-\psi\,grad\psi^*\right)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}div\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)$$

Şu aňlatmanyň çep tarapy giňişligiň haýsy hem bolsa bir nokadynyň ýakynynda bölejigi tapmaklygynyň ähtimallygynyň wagta görä önümi we I wektor arkaly

$$I = \frac{i\hbar}{2\mu}\left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi\right)$$

belgiläp, (2.3) –i şeýle göçürip bileris:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + divI = 0. \qquad (2.4)$$

Bu ýerden, I wektoryň, togyň dykyzlygynyň ähtimallygynyň wektorydygy gelip çykýar.
Eger $W = \psi^*\psi$ ululyk bölejikleriň orta dykyzlygy ýaly hasap edilse, onda (2.4) deňleme has aýdyň düşündirişe eýe bolýar. Onda I-ni 1- sekuntda 1sm^2 meýdan arkaly bölejikleriň akymy ýaly seretmeli. Şuňa degişlilikde (2.4)-nji deňlemä, bölejikleriň sanynyň saklanma kanuny ýaly düşünmeli. Dogrydanam, (2.4) –i nähili-de bolsa br gutarnykly V göwrüm boýunça integrirläp we Gaussyň teoremasyny ulanyp, alarys

$$\frac{d}{dt}\int_V wdv = -\int_v divIdv = -\int_s I_n ds, \qquad (2.5)$$

bu ýerde soňky integral V göwrümi gurşaýan S üst boýunça alynýar. Ähli giňişlik boýunça (V→∞) integrirlemäni ýaýradyp we, tükeniksiz dşlaşmada ψ tolkun funksiýanyň, hem-de şonuň bilen birlikde I toguň dykyzlygynyň 0-a öwrülýäi hasaba alyp tapýarys

$$\frac{d}{dt}\int_\infty wdv = \frac{d}{dt}\int_\infty \psi^*\psi dv = 0, \qquad (2.6)$$

Ýgny giňişligiň haýsy-da bir ýerinde bölejigiň umumy ähtimallygy wagta bagly däldir, diýmek bölejikleriň sany üýtgemän galýar.
Indi, I we w ululyklary bölejigiň μ massasyna köpeldeliň:

$$\rho_\mu = \mu w = \mu|\psi|^2, \ I_\mu = \frac{i\hbar}{2}\left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi\right) \qquad (2.7)$$

Onda ρ_μ jisimiň (massanyň) orat dykyzlygynyň, I_μ bolsa jisimiň (massanyň) togunyň orta dykyzlygynyň manysyny aňladýandyklaryna göz ýetirýäris. (2.4) –den gelip çykyşyna görä şu ululyklar üçin aşakdaky üznüksiz deňleme ýerine ýetýär

$$\frac{\partial \rho_\mu}{\partial t} + div I_\mu = 0, \qquad (2.8)$$

ýagny, haýsy hem bolsa bir tükeniksiz kiçi oblastda massanyň üýtgemegi, şu oblasty gurşaýan üst arkaly şol massanyň guýulmagy ýa-da akmagy bilen şertlendirilýär. (2.8) –nji deňleme kwant mehanikasynda massanyň saklanmagyny aňladýar.
Edil şunuń ýaly w we I ululyklary bölejigiň “e” zarýadyna köpeldip, elektrik zarýadynyň orta dykyzlygyny we elektrik toguň orta dykyzlygyny alýarys:

$$\rho_e = ew = e|\psi|^2, \ I_e = \frac{i\hbar e}{2\mu}\left(\psi, \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi\right) \qquad (2.9)$$

şu ululyklar üçin hem üznüksizlik deňleme alynýar

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + divI_e = 0, \qquad (2.10)$$

we bu kwant mehanikasynda zarýadyň saklanma kanunyny aňladýar.

Magnit meýdanyň meýdanyň barlygynda toguň dykyzlygy I üçin formula üýtgeşik bolmalydyr. Dogrydanam, Şrýodingeriň deňlemesine gamiltoniýanyň

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{P}^2 - \frac{e}{\mu c}\hat{A}\hat{P} + \frac{i\hbar e}{2\mu c}div\hat{A} + \frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{A}^2 + eV + U$$

bahasyny goýup, degişli özgertmeleri amala aşyralyň:

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + \frac{i\hbar e}{\mu c}\hat{A}\nabla\psi + \frac{i\hbar e}{2\mu c}div\hat{A}\psi + \frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{A}^2\psi + (eV + U)\psi,$$

(2.11) we, çatyrymly funksiýa üçin

$$-i\hbar\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi^* - \frac{i\hbar e}{\mu c}\hat{A}\nabla\psi^* - \frac{i\hbar e}{2\mu c}div\hat{A}\psi^* + \frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{A}^2\psi^* + (eV + U)\psi^*,$$

(2.12)

Çepden (2.11)-i ψ^* we (2.12) – ni sagdan ψ funksiýalara köpeldp we ikinjini birinjiden aýyryp alýarys

$$i\hbar\frac{\partial w}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}div\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)+\frac{i\hbar e}{\mu c}\hat{A}\psi^*\nabla\psi+\hat{A}\nabla\psi^*\psi+\frac{i\hbar e}{\mu c}\left(div\hat{A}\cdot\psi^*\psi+div\hat{A}\cdot\psi^*\psi\right)=$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}div\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)+\frac{i\hbar e}{\mu c}\hat{A}div\left(\psi^*\psi\right)+\frac{i\hbar e}{\mu c}div\hat{A}\psi^*\psi.$$

Soňky iki çlene aýratyn seredeliň

$$\frac{i\hbar e}{\mu c}\left\{\hat{A}div\left(\psi^*\psi\right)+div\hat{A}\psi^*\psi\right\}=\frac{i\hbar e}{\mu c}div\left(\hat{A}\psi^*\psi\right)$$

Onda

$$\frac{\partial\left(\psi^*\psi\right)}{\partial t}+div\left\{\frac{i\hbar}{2\mu}\left[\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi\right]-\frac{e}{\mu c}\hat{A}\psi^*\psi\right\}=0.$$

Bu, wektor potensial $\hat{A}$ bilen suratlandyrylýan, magnit meýdanyň barlygyndaky üznüksizlik deňlemedir.

§3. Stasionar ýagdaýlar.

Şrýodingeriň deňlemesini aşakdaky görnüşde alalyň:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\hat{H}(x)\psi(x,t) \qquad (23.1)$$

(3.1) deňlemede, daşky meýdanyň ýoklugynda gamiltonian wagta bagly däl hal alynypdyr. Şol deňlemede üýtgeýän ululyklary bölüşdireliň, onuň üçin (3.1)-iň çözgüdini şeýle görnüşde alýarys:

$$\psi(x,t)=\psi(x)\varphi(t) \qquad (3.2)$$

(3.2)-ni (23.1)-e goýup we ony $\psi(x)\varphi(t)$ ululyga bölüp, alarys:

$$i\hbar\frac{\varphi'(t)}{\varphi(t)} = \frac{\hat{H}(x)\psi(x)}{\psi(x)} = E$$

Şu ýerden iki deňlemäni alarys:

$$i\hbar\frac{d\varphi(t)}{\varphi(t)} = Edt \qquad (23.3)$$

we

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \qquad (23.4)$$

(3.3)-i integrirläp we soňra potensirläp, tapýarys:

$$\varphi(t) = const\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad (23.5)$$

(3.4)-nji deňleme hususy funksiýalar üçin deňleme bilen gabat gelýär. Belli bolşy ýaly ol deňleme şeýle ýazylýar:

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

Eger energiýanyň diskret spektor üçin hususy funksiýalary $\psi_n(x)$, hususy bahalary bolsa E_n arkaly belgilense, onda (3.2) çözgüt ahyrky netijede şeýle görnüşde ýazylar:

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \qquad (23.6)$$

Şundan görnüşi ýaly, E_n energiýanyň kesgitli bahaly ýagdaýlary,

$$\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$$

ýygylyk bilen wagta garmoniki baglydyrlar. Şeýle netije, ilkinji sapar erkin herekete ulanylan

$$E = \hbar\omega$$

de Broýlyň gatnaşygyny islendik sistema ýaýradýar. Energiýanyň kesgitli bahaly (3.6) ýagdaýa stasionar, (3.4)-e bolsa stasionar ýagdaý üçin Şrýodingeriň deňlemesi diýilýär.

(3.1)-iň çyzyklydygyna laýykda onuň umumy çözgüdini aşakdaky görnüşde alyp bileris:
]

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n \psi_n(x,t)$$

ýa-da

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \qquad (23.7)$$

bu ýerde C_n - amplituda.

Indi bölejikleriň ýerleşmekleriniň $\omega_n(x,t)$ ähtimallygyny we toguň $I_n(x)$ dykyzlygyny "n" stasionar ýagdaýlarda hasaplalyň

Belli bolşy ýaly

$$\omega_n(x,t) = |\psi_n(x,t)|^2 = \psi_n^*(x,t) \cdot \psi_n(x,t),$$

we

$$I_n(x,t) = \frac{i\hbar}{2\mu}\left\{\psi_n(x,t)\nabla\psi_n^*(x,t) - \psi_n^*(x,t)\nabla\psi_n(x,t)\right\}$$

Şu aňlatmalara (3.6) –dan $\psi_n(x,t)$ funksiýanyň bahasyny goýup, taparys:

$$\omega_n(x,t) = \omega_n(x,0)$$

we

$$I_n(x,t) = I_n(x,0)$$

Soňky aňlatmalardan görnüşi ýaly, stasionar ýagdaýlarda bölejikleriň ýerleşmekleriniň ähtimallygy we toguň dykyzlygy wagta bagly däldir.

§4. Geýzenberg görnüşli esasy deňleme

Fiziki ululyklaryň orta bahalarynyň wagtyň geçmeginde nähili kanun boýunça häsiýetlendirýändiklerini aýdyňlaşdyralyň.

Goý, wagtyň t momentinde ýagdaý $\psi_n(x,t)$ tolkun funksiýasy bilen suratlandyrylýar we şu ýagdaýda käbir L ululyk ölçenilýär diýeliň. Netijede aýratyn ölçegleriň netijesi alynar:

$$L', L'', L''', \ldots$$

Köp sanly ölçeglerden orta baha $\bar{L}(t)$ bolar we belli bolşy ýaly ol şeýle formula boýunça hasaplanylýar:

$$\bar{L}(t) = \int \psi^*(x,t) \cdot \hat{L} \cdot \psi(x,y) dx \qquad (24.1)$$

$\bar{L}$ ululyk wagta bagly, onda "t" boýunça $\bar{L}$-iň önümleri hem bolmaly, ýagny (4.1)-i wagt boýunça differensirläp, alarys:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{L}\psi\, dx + \int \psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \psi dx + \int \psi^* \hat{L} \frac{\partial \psi}{\partial t}\, dx \qquad (24.2)$$

Ikinji çlen $\frac{d\bar{L}}{dt}$ we $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ $hem - de$ $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$ ululyklaryň bahalaryny Şrýodingeriň

deňlemesini ulanyp, ýazalyň:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{\mathrm{H}}\psi$$

we

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{\mathrm{H}}^* \psi^*$$

Onda (4.2) şeýle görnüşi alar:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \left(\hat{L}\hat{\mathrm{H}}\right) \psi\, dx - \frac{1}{i\hbar} \int \hat{\mathrm{H}}^* \psi^* \hat{L}\psi\, dx. \qquad (24.3)$$

$\hat{\mathrm{H}}$ operatoryň ermitlidigine esaslanyp, (4.3)-iň ikinji integralyny özgerdeliň.

Belgilemeleri girizip $u_1^* = \psi^*$, $u_2 = \hat{L}\psi$,

alýarys,

$$\int \hat{\mathrm{H}}^* \psi^* \hat{L}\psi dx = \int u_2 \hat{\mathrm{H}}^* u_1^*\, dx = \int u_1^* \hat{\mathrm{H}} u_2\, dx = \int \psi^* \hat{\mathrm{H}}\hat{L}\psi dx.$$

Onda (4.3) aşakdaky ýaly göçüriler:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial\bar{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\int \psi^* \hat{L}\hat{H}\psi\, dx - \frac{1}{i\hbar}\int \psi^* \hat{H}\hat{L}\psi dx = \frac{\partial\bar{L}}{\partial t} + \int \psi^* \frac{1}{i\hbar}(\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L})\psi dx,$$

ýa-da

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial\bar{L}}{\partial t} + \int \psi^* [\hat{H}\hat{L}]\, \psi dx,$$

ýa-da

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial\bar{L}}{\partial t} + [\overline{HL}]. \tag{24.4}$$

Bu ýerde

$$[\hat{H}\hat{L}] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L})$$ - Puassony kwant skobkasy.

Indi (4.4)-i özgerdeliň

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial\bar{L}}{\partial t} + [\overline{HL}] = \int \psi^* \left\{\frac{\partial\hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}\hat{L}]\right\} \psi dx,$$

ýa-da

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \psi^* \frac{\partial\hat{L}}{\partial t}\, \psi dx,$$

bu ýerde

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial\hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}\hat{L}] \tag{24.5}$$

(24.4)-den görnüşi ýaly, $\bar{L}$-iň orta bahasynyň wagt boýunça önümi

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + [\hat{\mathrm{H}}\hat{L}]$$

operator bilen berilýän käbir ululygyň orta bahasydyr. (4.5)-nji deňleme wagtyň geçmeginde fiziki ululyklaryň orta bahalarynyň üýtgemeginiň kanuny häsiýetlendirýär we oňa Geýzenberg görnüşdäki hereketiň deňlemesi diýilýär.
Eger L ululyk wagta aýdyň bagly bolmasa, onda (4.4) we (4.5) deňlemeler ýönekeýleşýär:

$$\frac{dL}{dt} = [\overline{HL}],$$

we

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{\mathrm{H}}\hat{L}]$$

Eger $\hat{L} = \hat{A} + \hat{B}$ bolsa, onda

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{\mathrm{H}} \cdot \hat{A} + \hat{B}] = [\hat{\mathrm{H}}\hat{A}] + [\hat{\mathrm{H}}\hat{B}] = \frac{d\hat{A}}{dt} + \frac{d\hat{B}}{dt} ,$$

we eger $\hat{L} = \hat{A}\hat{B}$ bolsa, onda

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{\mathrm{H}} \cdot \hat{A}\hat{B}] = [\hat{\mathrm{H}}\hat{A}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{\mathrm{H}}\hat{B}] = \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt},$$

ýagny Puassonyň kwant skobkalaryna adaty önüm ýaly seredip bolýar.

(4.5)-nji deňleme, bölejigiň kinetik we potensial energiýalarynyň arasyndaky has umumy baglylygy tapmaklyga mümkinçilik döredýär. Dogrydanam, giňişligiň çäklendirilen käbir oblastynda, $(\vec{r}\vec{p})$ skalýar köpeltmek hasylynyň orta bahasynyň wagt boýunça önümi nola deň bolmaly, ýagny

$$\frac{d}{dt} < (\vec{r}\vec{p}) >= 0 \qquad (24.6) \qquad (4.6)$$

Goý,

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \widehat{U}(\vec{r}) = \hat{T}(p) + \widehat{U}(\vec{r}),$$

onda (4.5)-e laýyklykda operatorly deňlemä eýe bolarys:

$$\frac{d}{dt}(\hat{r}\hat{p}) = [\hat{\mathrm{H}} \cdot (\hat{r}\hat{p})] = [\hat{\mathrm{H}}\hat{r}]\hat{p} + \hat{r}[\hat{\mathrm{H}}\hat{p}] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{r}\hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}\hat{r})\hat{p} + \frac{\hat{r}}{i\hbar}(\hat{p}\hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}\hat{p}) =$$
$$= \frac{1}{i\hbar \cdot 2\mu}(\hat{r}\hat{p}^2 - \hat{p}^2\hat{r})\hat{p} + \frac{\hat{r}}{i\hbar}(\hat{p}\widehat{U} - \widehat{U}\hat{p}) = \frac{1}{2\mu i\hbar} \cdot 2i\hbar\hat{p} \cdot \hat{p} + \frac{\hat{r}}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial\widehat{U}}{\partial r}\right) =$$
$$= \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \hat{r}\left(\frac{\partial\widehat{U}}{\partial r}\right) = 2\hat{T} - \hat{r}\nabla U = 2\hat{T} - (\hat{r}\,gradU)$$

alynan operatorly deňleme orta bahanyň deňlemesine degişlidir:

$$\frac{d}{dt} < (\vec{r}\vec{p}) >= 2 < T > - < (\hat{r}\,gradU) >.$$

(4.6)-ny hasaba alyp:

$$2 < T >=< (\hat{r}\,gradU) >. \qquad (24.7) \qquad (4.7)$$

Eger potensial energiýa r^n ululyga proporsional diýip hasap edilse, onda

$$< (\hat{r} gradU) > = < rnr^{n-1} > = n < r^n > = n < U >$$

we (4.7)-i ýönekeý görnüşi alýar

$$2 < T \geq n < U > \qquad (24.8)$$

(4.7) we (4.8) gatnaşyklar, klassyky mehanikasynda sistemanyň kinetik we potensial energiýalarynyň wagta görä orta bahalarynyň arasyndaky gatnaşygy kesgitleýän wirial teoremasy bilen görnüşi boýunça gabat gelýär we şol sebäpli olara kwant wirial teoremasy diýilýär. Şu teoremany atomyň düzümi baradaky birinji işinde N.Bor kesgitläpdir: "Ýadrolaryň dynçlykdaky islendik sistemada, aýlaw orbita arkaly ýagtylygyň tizligi bilen deňeşdirilende kiçi tizlik bilen aýlanýan elektronlaryň kinetik energiýasy alamata çenli dogry potensialyň ýarymyna deňdir."

§5. Kwant we klassykyy nazaryýetiniň gatnaşygy. Erenfestiň teoremasy.

Hereketiň Geýzenberg görnüşdäki deňlemäni alalyň:

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{H}\hat{L}] \qquad (5.1) \qquad .1)$$

Impulsy we koordinaty wagta bagly däl diýip hasap edip, (5.1)-e meňzeş aňlatmalary koordinatyň we impulsyň operatorlary üçin ýazalyň. Koordinatyň we impulsyň operatorlaryny degişlilikde $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ we $\hat{P}_x, \hat{P}_{y,} \hat{P}_z$ arkaly belgiläliň. Wagt boýunça tizligiń proýeksiýalarynyń operatorlary $\frac{d\hat{x}}{dt}, \frac{d\hat{y}}{dt}, \frac{d\hat{z}}{dt}$ bolar. Impulsyň proýeksiýalarynyň wagt boýunça önümleriniň operatorlaryny bolsa $\frac{d\hat{P}_x}{dt}, \frac{d\hat{P}_{y,}}{dt}, \frac{d\hat{P}_z}{dt}$ arkaly belgiläliň. Onda (5.1)-de $\hat{L}$ operatory yzygiderli $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{P}_x, \hat{P}_{y,} \hat{P}_z$ operatorlary bilen çalşyryp, alarys:

$$\left.\begin{array}{l} \frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{H}\hat{X}], \ \frac{d\hat{y}}{dt} = [\hat{H}\hat{Y}], \ \frac{d\hat{z}}{dt} = [\hat{H}\hat{Z}] \\ \frac{d\hat{P}_x}{dt} = [\hat{H}\hat{P}_x] \ \ \frac{d\hat{P}_{y,}}{dt} = [\hat{H}\hat{P}_{y,}] \ \ \frac{d\hat{P}_z}{dt} = [\hat{H}\hat{P}_z] \end{array}\right\} \qquad (25.2)$$

Şu operatorly deňlemeler klassyky fizikasyndaky Gamiltonyň deňlemeleri bilen gabat gelýär we olara hereket üçin Gamiltonyň kwant deňlemeleri diýilýär. Klassyky mehanikasynda (5.2)-niň birinji deňlemeleri tizlik bilen impulsyň arasyndaky baglylygy dikeldýär, ikinji deňlemeleri bolsa impulsyň wagta görä üýtgemeginiň kanunyny aňladýar. Kwant mehanikasynda hem olar şeýle bahalara eýedirler. Munuň şeýledigine göz ýetirmek üçin gamiltoniany şeýle görnüşde alalyň:

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{P}_x{}^2 + \hat{P}_{y,}{}^2 + \hat{P}_z{}^2\right) + \hat{U}(x, y.z) \qquad (25.3)$$

(5.3)-iň esasynda (5.2)-ni özgerdeliň:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{\mathrm{H}}\hat{X}] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{X}\hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}\hat{X}) = \frac{1}{2i\hbar\mu}\left(\hat{X}\hat{P}_x{}^2 - \hat{P}_x{}^2\hat{X}\right) = \frac{1}{2i\hbar\mu} \cdot 2i\hbar\hat{P}_x = \frac{\hat{P}_x}{\mu}$$

Şeýlelikde,

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{P}_x}{\mu}, \quad \frac{d\hat{y}}{dt} = \frac{\hat{P}_y}{\mu}, \quad \frac{d\hat{z}}{dt} = \frac{\hat{P}_z}{\mu} \qquad (25.6)$$

Indi $\frac{d\hat{P}_x}{dt}$ ululygy hasaplalyň:

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = [\hat{\mathrm{H}}\hat{P}_x] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{P}_x\hat{\mathrm{H}} - \hat{\mathrm{H}}\hat{P}_x) = \frac{1}{i\hbar}(\hat{P}_x\hat{U} - \hat{U}\hat{P}_x) = \frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial x}\right) = -\frac{\partial\hat{U}}{\partial x}$$

Şeýlelikde,

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = -\frac{\partial\hat{U}}{\partial x}, \quad \frac{d\hat{P}_y}{dt} = -\frac{\partial\hat{U}}{\partial y}, \quad \frac{d\hat{P}_z}{dt} = -\frac{\partial\hat{U}}{\partial z} \qquad (25.5)$$

Şu deňlemeleriň sag tarapy güýjüň proýeksiýalarynyň operatorlary, şonuň üçin

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = \hat{F}_x, \quad \frac{d\hat{P}_y}{dt} = \hat{F}_y, \quad \frac{d\hat{P}_z}{dt} = \hat{F}_z \qquad (25.6)$$

ýa-da wektor görnüşde

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = \hat{\vec{F}}_x$$

Diýmek, (5.2)-nji sistemanyň ikinji deňlemelerini operator görnüşde Nýutonyň deňlemeleri ýaly hasap edip bolýar. (5.4) we (5.5) operatorly deňlemeleri orta baha üçin ýazalyň:

$$\left.\begin{aligned} \frac{d}{dt}\bar{x} &= \frac{1}{\mu}\bar{P}_x, \\ \frac{d}{dt}\bar{P}_x &= -\frac{\partial\hat{U}}{\partial x} \end{aligned}\right\} \qquad (25.7) \qquad (5.7)$$

ýa-da

(5.8

$$\left.\begin{aligned} \frac{d}{dt}\cdot\int \psi^* \, x \, \psi dx &= \frac{1}{\mu}\int \psi^* \, \hat{P}_x \, \psi dx, \\ \frac{d}{dt}\int \psi^* \, \hat{P}_x \, \psi dx &= -\int \psi^* \frac{\partial \hat{U}}{\partial x} \psi dx \end{aligned}\right\} \qquad (25.8)$$

(5.8)-nji sistemanyň deňlemeleri Erenfestiň teoremasynyň mazmunyny aňladýar we oňa laýyklykda klassyky mehanikanyň esasy deňlemelerini kwant ýagdaýa ösdürip bolýar.

(5.7)-nji sistemadan tapyp bileris:

$$\frac{d^2}{dt^2}\bar{x} = \frac{1}{\mu}\cdot\frac{d}{dt}\bar{P}_x = -\frac{1}{\mu}\cdot\frac{\partial \hat{U}}{\partial x},$$

ýa-da

$$\mu\frac{d^2}{dt^2}\bar{x} = -\frac{\partial \hat{U}}{\partial x} \qquad (5.9)$$

(5.9)-a Nýutonyň kwant deňlemesi diýilýär. Şeýlelikde, kwant mehanikanyň sistemasyny klassykyy mehanikanyň sistemasyna ýakyn ösdürip bolýar. Başgaça aýdylanda, kwant we klassykyy mehanikasynda dinamiki üýtgeýänler şol bir deňlemeleri kanagatlandyrýar. Olaryň arasyndaky esasy tapawut, kwant mehanikasynda ol deňlemeler operatorlar we orta bahalar üçin ýazylýar.

§6. Hereketiň integrallary.

Hereketiň kwant deňlemeleriniň integrallary diýip hereketde üýtgemeýän ululyklara aýdylýar, ýagny wagta bagly däldirler.

Eger

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + [\hat{H}\hat{L}] \equiv 0 \qquad (6.1)$$

bolsa, onda $\hat{L}$ ululyga hereketiň integraly diýilýär. $\hat{L}$ aýdyň wagta bagly bolmasa

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{H}\hat{L}] \equiv 0 \qquad (6.2)$$

Şu ýerden gelip çykyşy ýaly herek llary
üçin Puassonyň skobkasy nola deň we
(6.2)-den hereketiň integrallarynyň o nyň
wagta bagly däldiklerine göz ýetirýäris.

$$\frac{d}{dt}(\bar{L}) = 0$$

Şeýle ululyk hereketiň kwant deňlemeleriniň integraly diýen ady göterýär.

Erkin hereket üçin

$$\widehat{U}(x, y, z) = 0$$

we

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{P}_x^{\ 2} + \hat{P}_{y,}^{\ 2} + \hat{P}_z^{\ 2}\right),$$

onda

$$[\hat{\mathrm{H}}\hat{P}_x] = 0, \quad [\hat{\mathrm{H}}\hat{P}_y] = 0, \quad [\hat{\mathrm{H}}\hat{P}_z] = 0,$$

ýa-da

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = 0, \quad \frac{d\hat{P}_y}{dt} = 0, \ \frac{d\hat{P}_z}{dt} = 0$$

ýagny klassykyy mehanikadaky ýaly impuls hereketiň integrallarydyr.

Merkezi güýç meýdanda impulsyň momentiniň operatorlarynyň kwadraty $\widehat{M}^2$ we $\widehat{M}_x, \widehat{M}_y, \widehat{M}_z$ proýeksiýalar $\hat{\mathrm{H}}$ operatory bilen kommutirleşýärler:

$$[\hat{\mathrm{H}}\widehat{M}^2] = 0, \quad [\hat{\mathrm{H}}\widehat{M}_x] = 0, \quad [\hat{\mathrm{H}}\widehat{M}_y] = 0, \quad [\hat{\mathrm{H}}\widehat{M}_z] = 0$$

ýa-da

$$\frac{d\widehat{M}^2}{dt} = 0, \quad \frac{d\widehat{M}_x}{dt} = 0, \ \frac{d\widehat{M}_y}{dt} = 0, \quad \frac{d\widehat{M}_z}{dt} = 0$$

ýagny impulsyň momenti merkezi güýç meýdanda hereketiň integrallarydyr.

Indi

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{H}\hat{L}]$$

deňlemede goý $\hat{L} = \hat{H}$ bolsun, onda

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = [\hat{H}\hat{H}] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\hat{H} - \hat{H}\hat{H}) = 0$$

şeýlelikde,

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = 0 \qquad (6.3)$$

Bu ýerde $\hat{H}$ doly energiýanyň operatory bilen gabat gelýär, şonuň üçin (6.3) doly energiýanyň operatorynyň hereketiň integralydygyny aňladýar. Başgaça aýdylanda, (6.3) kwant mehanikasynda doly energiýanyň saklanmak kanunyny berýär. (6.3)-den gelip çykyşy ýaly, eger wagtyň başlangyç momentinde energiýa kesgitli bahaly bolsa, onda ol şu bahany wagtyň indiki pursatlarynda hem saklaýar, ýagny wagtyň birjynslygy kwant mehanikasynda energiýanyň saklanmak kanunyna getirýär.

Şeýlelikde, hereketiň integrallarynyň we olara degişli saklanmak kanunlary kwantmehaniki sistemalaryň simmetrik häsiýetleri, ýagny koordinatalaryň özgertmelerine görälikde $\hat{H} - y\acute{n}$ inwariantlygy bilen ýakyndan baglydyr.

Wagtyň birjynslygy

$$[\hat{T}_\tau, \hat{H}] = 0 \qquad (6.4)$$

kommutasiýa şerti bilen matematiki aňladylýar.

(6.4)-de $\hat{T}_\tau$- wagta görä τ ululyga süýşme operatory diýilýär;
τ - $\hat{T}_\tau$ operatoryň parametri bolup hyzmat edýär.

Wagta görä süýşme operatorynyň deregine özgertmeleriň generatory, ýa-da infinitezimal wagta görä süýşme $\hat{I}(t)$ operatory ulanmaklyk oňaýlydyr. Şu operator, parametriň nolunjy bahasynda şu parametr boýunça operatoryň önümi ýaly kesgitlenilýär:

$$\hat{I}(t) = \frac{\partial}{\partial t}\hat{T}_\tau\Big|_{\tau=0}$$

Giňişligiň birjynslygy erkin aralyga ýapyk sistemanyň parallel süýşmesinde $\hat{H}$ operatoryň üýtgemeýänliginde (ýa-da inwariantlygynda) ýüze çykýar.

$$\hat{H}\hat{P} = \hat{P}\hat{H},$$

ýa-da

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = 0$$

Soňky deňleme, kwant mehanikasynda impulsyň saklanmak kanuny diýilýär.
Ýokarda getirilen maglumatlardan aşakdaky wajyp netijeler gelip çykýar:
–energiýanyň saklanmak kanuny wagtyň birjynslygyň (wagty hasaplamaga alynýan belli bir momentiň saýlanylyp alynmagyna fiziki prosesleriň akyşlarynyň bagly däldikleriniň) netijesidir;

– impulsyň saklanmak kanuny- giňişligiň birjynslygynyň (giňişligiň ähli nokatlarynyň fiziki taýdan deňhukuklydyklarynyň) netijesidir;

– impulsyň momentiniň saklanmak kanuny – giňişligiň izotroplygynyň (giňişlikde ähli ugurlaryň fiziki taýdan deňhukuklydyklarynyň) netijesidir.

VII bap. Kwant mehanikasyndan klassykyy mehanika geçilişi.

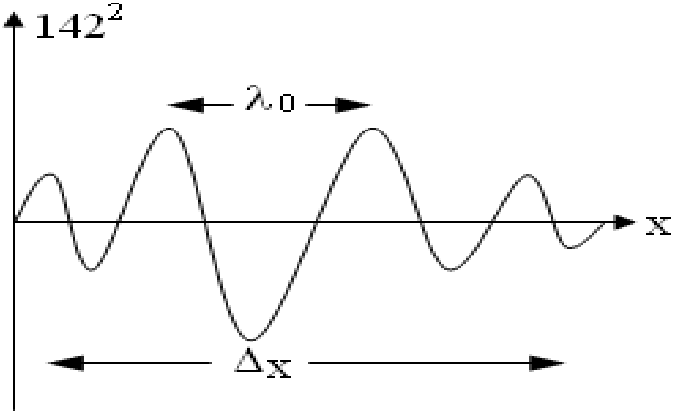
§1. Kwant deňlemeden Nýutonyň deňlemesine geçilişi.

Erenfestiň teoremasyndan Nýutonyň aşakdaky kwant deňlemesi alyndy:

(1.1)

$$\mu \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x} \quad (1).$$

Goý, örän kiçi giňişligiň Δx oblastynda ψ tolkun funksiýa aýdyň noldan tapawutlanýar diýeliň. Şeýle ýagdaýa tolkun pakedi diýilýär. Tolkun pakedi termininiň deregine “ tolkunlar topary ” termin hem ulanylýar, sebäbi tolkun pakedini, giňişligiň çäklendirlen oblastyny eýeleýän tolkunly emele gelme ýaly göz öňüne getirip bolýar. Tipli paket 13-nji çyzygyda getirýär, we onda *t* wagtyň berilen momenti üçin $\psi (x,t)$-niň *x*-e baglylygy berilýär.



13-ji çyzgy.

Onda tolkunyň ortaça uzynlygy λ_0 we Δx pakediň takmynan ölçegi görkezilendir.

Eger pakediň formasy (çägi) üýtgemese we *x*-iň orta bahasy Nýutonyň klassyky kanuny boýunça üýtgeýän bolsa, onda $|\psi|^2$ pakediň hereketini Nýutonyň mehanikasyna boýun egýän maddy nokadyň hereketi ýaly seredip bolardy. Umuman aýdylanda, kwant mehanikasy boýunça şeýle hereket alynmaýar, sebäbi, birinjiden, tolkun pakedi ýaýraýar, iknjiden bolsa, *U(x)* meýdanda pakediň $\bar{x}$ agyrlyk merkeziniň hereketi maddy nokadyň hereketi bilen gabat gelmegi üçin

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial x} = \frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}} , \qquad (1.2)$$

deňleme ýerine ýetmeli. Şu deňleme, umuman aýdylanda, alynmaýar.

Muňa garamazdan, nähili şertlerde pakediň herketi maddy nokadyň hereketi bilen takmynan gabat gelip biljekdigine seredeliň. *“x”* koordinatyň $\bar{x}$ orta bahasy, ýagny pakediň agyrlyk merkeziniň koordinaty,

$$\bar{x} = \int \Psi^* \hat{x} \Psi dx$$

formula bilen kesgitlenilýär.

Güýjüň orta bahasy şeýledir.

$$-\frac{\partial \bar{U}}{\partial x} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{U}}{\partial x} \Psi dx$$

Goý diýeliň $x = \bar{x} + \xi$, ξ-kömekçi üýtgeýän ululyk, onda

$$-\frac{\partial \bar{U}}{\partial x} = \int \Psi^*(\bar{x}+\xi) \frac{\partial \hat{U}(\bar{x}+\xi)}{\partial x} \Psi(\bar{x}+\xi) d\xi \qquad (1.3)$$

$|\psi|^2$ ulullygyň noldan aýdyň görnüşde tapawutlanýan oblastynda, $U|x|$ ululyk *“x”*-e bagly ýeterlikli haýal üýtgeýän funksiýasy diýeliň. Onda $\frac{\partial U(\bar{x}+\xi)}{\partial \bar{x}}$ ululygy ξ-niň derejesi boýunça hatara dargadyp bolýar.

$$\frac{\partial U(\bar{x}+\xi)}{\partial \bar{x}}=\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}+\frac{1}{1!}\frac{\partial^2 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2}(x-\bar{x})+\frac{1}{2!}\frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}(x-\bar{x})^2+\cdots$$

Şuňa laýyklykda, (1.3) şeýle ýazylýar;

$$-\frac{\partial \bar{U}}{\partial x}=-\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\int \psi^* \psi d\xi-\frac{1\partial^2 U(\bar{x})}{1!\partial \bar{x}^2}\int \psi^* \xi\psi d\xi-\frac{1}{2!}\frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\int \psi^* \xi^2\psi d\xi+\cdots \quad (4).$$

Ýöne

$$\int \psi^*\psi d\xi=\int \psi^*\psi dx=1,$$

$$\int \psi^*\xi\psi d\xi=\int \psi^*(x-\bar{x})\psi dx=0,$$

$$\int \psi^*\xi^2\psi d\xi=\int \psi^*(x-\bar{x})^2\psi dx=\int \psi^*(\Delta x)^2\psi dx=\overline{(\Delta x)^2}.$$

Şu aňlatmalaryň esasynda (1.4) aşaky görnüşi alýar

$$-\frac{\partial \bar{U}}{\partial x}=-\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}-\frac{1}{2}\frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\overline{(\Delta x)^2}-\cdots \quad (1.5).$$

Indi, (1.4)-i şeýle ýazyp bileris

$$\mu\frac{d^2\bar{x}}{dt^2}=-\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}-\frac{1}{2}\frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\overline{(\Delta x)^2}-\cdots \quad (1.6).$$

Eger güýç meýdany giňişlikde haýal üýtgese, onda $\overline{(\Delta x)^2}$ pakediň inini ýeterlikli kiçi saýlap alyp, (1.6)-da birinji çlenden başgalaryny inkär edip bileris. Netijede tolkun pakediň $\overline{(x)}$ agyrlyk merkezi üçin Nýutonyň deňlemesini alarys.

$$\mu\frac{d^2\bar{x}}{dt^2}=-\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}.$$

Şu deňlemäniň t wagt aralygynda dogry bolmaklygy üçin (1.6)-nyň taşlanylan çlenleri kiçi bolmaly, yagny bolmanda şeýle şert ýerine ýetmeli

$$\left|\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\right| \gg \frac{1}{2}\left|\frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\right| \overline{(\Delta x)^2}. \qquad (1.7).$$

Pakediň ölçegini kesgitleýän $\overline{(\Delta x)^2}$ ululyk wagtyň funksiýasy, ýagny umuman aýdylanda, wagt bilen artýar; paket ýaýraýar. Şonuň üçin, wagtyň başlangyç momentinde (1.7)-i deňsizlik ýerine ýetýän hem bolsa, onda wagtyň käbir pursatyndan başlap, ol bozulýar.

Ýöne (1.7) ýerine ýetýän hem bolsa, bölejigiň ýagdaýynyň klassyky bilen gabat gelýändigini aňlatmaýar. Dogrydanam, eger ýeterlikli örän insiz paket ($\overline{(\Delta x)^2}$ kiçi) alynsa, onda kwant mehanikasy boýunça bölejigiň potensial energiýasynyň orta bahasy, tolkun pakediniň merkezinde ýerleşen maddy nokadyň potensial energiýasyna deň.

$$\bar{U} = \int \psi^* U \psi dx \approx U(\bar{x}).$$

Ýöne şuny kinetik energiýa barada tassyklap bolmaýar. Dogrydanam

$$\bar{T} = \frac{\bar{p}^2}{2\mu} = \frac{1}{2\mu}\overline{(p - \bar{p} + \bar{p})^2} = \frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2\mu} + \frac{\bar{p}^2}{2\mu}. \qquad (1.8).$$

Geýzenbergiň

$$\overline{(\Delta p)}^2 \geq \frac{\hbar^2}{4\overline{(\Delta x)}^2},$$

gatnaşygyna laýyklykda (1.8)-iň birinji kwant çleni *"p"* impuls bilen hereket edýän bölejigiň klassyky energiýasyndan has uly bolup biler. (1.8)-yň kwant çlenini inkär etmek üçin aşakdaky şert ýerine ýetmeli.

$$\frac{\bar{p}^2}{2\mu} \gg \frac{\overline{(\Delta p)}^2}{2\mu}, \quad ýa-da \quad \bar{p}^2 \gg \frac{\hbar^2}{4\overline{(\Delta x)}^2}. \qquad (1.9).$$

Şeýlelikde *t* wagtyň dowamynda bölejigiň hereketini klassyky mehanikanyň kanuny boýunça bolup geçýär diýip hasap etmeklik üçin, şu wagtyň dowamlygynda birwagtda (1.9) we (1.10) deňsizlikleriň ýerine ýetmekleri zerurdyr.
Şu iki deňsizlikleriň birwagtda ýerine ýetmeklerine aşakdaky ýagdaý ýardam edýär;

1. bölejigiň $\bar{T}$ knetik energiasy ýokary;
2. *U(x)* meýdan *x* koordinadyň funksiýasynda haýal üýtgeýär.

Şeýlelikde, hereketiň kwant deňlemesinden Nýutonyň deňlemesine geçmeklik, bölejigiň ýokary kinetik energiýasyna geçilende we meýdan haýal üýtgeýän ýagdaýda ýerine ýetýär.

§2. Şrýodingeriň deňlemesinden Gamiltonyň-Ýakobiniň klassykyy deňlemesine geçilişi.

Öňki bölümde hereketiň kwant deňlemesi bilen Nyutonyň deňlemesiniň arasyndaky baglylyk we şonuň bilen birlikde kwant mehanihasynyň klassykyy bilen baglanşygy dikeldildi . Şeýle baglanşygy başga usul bilen hem görkezip bolar, ýagny Gamiltonyň-Ýakobiniň klassykyy deňlemesiniň Şrýodingeriň wagta bagly deňlemesiniň çäkli ýagdaýydygy alynyp biler.Ýönekeýlik üçin $S_0(x,y,z,t)$ potensial meýdanda μ massaly bir bölejigiň hereketine seretmeklik bilen çäkleneris .Gamiltonyň- Ýakobiniň deňlemesi $S_o\,(x,y,z,t)$ täsiriň funksiýasy üçin ýazylýar. $S_o(x,y,z,t)$ şeýle häsiýete eýedir

$$P_x = -\frac{\partial S_o}{\partial x}, \quad P_y = -\frac{\partial S_o}{\partial y}, \quad P_z = -\frac{\partial S_o}{\partial z}, \qquad (2.1).$$

Seredilýän ýagdaý üçin, Gamiltonyň-Ýakobiniň deňlemesi şeýle görnüşdedir

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left[\left(\frac{\partial S_o}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_o}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_o}{\partial z}\right)^2\right] + U(x,y,z,t).$$

Gamiltonyň funksiýasy deňdir

$$H(x,y,z,P_x,P_y,P_z,t) = \frac{1}{2\mu}\left(P_x + P_y + P_z\right) + U(x,y,z,t), \quad (2.3).$$

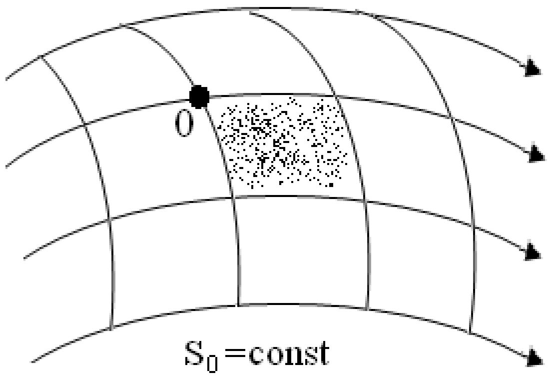
Onda, (2.1) we (2.2)-den , Gamiltonyň-Ýakobiniň deňlemesiniň şeýle ýazylyp bilinjekdigi gelip çykýar;

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = H\left(-\frac{\partial S_o}{\partial x}, -\frac{\partial S_o}{\partial y}, -\frac{\partial S_o}{\partial z}, x, y, z, t\right). \qquad (2.4).$$

Eger Gamiltonyň funksiýasy wagta aýdyň bagly bolmasa, onda ol bölejigiň *E* energiýasyna deň. Onda (2.4)-den gelip çykýar

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = E, \qquad S_0 = Et - S_0(x, y, z). \qquad (2.5).$$

Şu deňlemäniň görkezişi ýaly, traýektoriýalar $S_0 = const$ üste ortogonal çyzyklardyr. Eger *H* wagta aýdyň bagly bolmasa, onda şu üstüň görnüşi wagtyň geçmegi bilen üýtgemeýär.



14-nji çyzgy

14-nji çyzgyda şu üstler we bölejigiň mümkünli traýektoriýalary görkezilýär.
Wagtyň *t=0* pursatynda *"a"* nokatda ýerleşen bölejik mundan beýläk *"ab"* traýektoriýa boýunça hereket eder. Dürli başlangyç x_0, y_0, z_0 koordinatlary bolan bölejikleriň üýşmesini göz öňüne getireliň.
Goý, giňişligiň Δv elementinde $\Delta N=\rho\Delta v$ bölejikler bar diýeliň, nirede ρ-bölejikleriň dykyzlygy. Wagtyň *"t"* momentine bölejikler giňişligiň käbir başga oblastyna süýşerler, ýöne olaryň sany, elbetde, üýtgemez. Şonuň üçin, göwrümiň *"Δv"* elementiniň hereketine syn salsaň bölejikleriň sany onda üýtgemän galýar. Lokal önümi $\frac{D}{Dt}$ arkaly belgiläp alarys

$$\frac{D\Delta N}{Dt} = Dv\frac{D\rho}{Dt} + \rho\frac{D\Delta v}{Dt} = 0.$$

Ýöne belli bolşy ýaly, ρ we Δv ululuklaryň lokal önümleri deňdir.

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\rho v, \quad \frac{D\Delta v}{Dt} = div \cdot v \cdot \Delta v,$$

bu ýerde v bölejikleriň tizligi.
Şu aňlatmalary ýokardaky aňlatma bilen birleşdirip, üznüksizlik deňleme alynýar.

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div(\rho v) = 0. \qquad (2.6).$$

(2.1)-iň esasynda

$$v = \frac{p}{\mu} = -\frac{1}{\mu}\nabla S_0.$$

Şol sebäpli (2.6)-ny şeýle görnüşde ýazyp bolýar

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}-\frac{1}{\mu}div(\rho\nabla S_0)=0,$$

ýa-da

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{1}{\mu}\left(\nabla\rho\nabla S_0+\rho\nabla^2 S_0\right). \quad (2.7).$$

Şeýlelikde, bölejikleriň üýşmesi suwukluk ýaly hereket edýär. Olaryň eýeleýän göwrümi "ýaýramaýar", ýöne deformirlenýär. Indi kwant mehanikasyna ýüz uralyň.

Şrýodingeriň wagtly deňlemesiniň

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi, \quad \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\hat{U}(x,y,z,t), \qquad (2.8).$$

Gamiltonyň-Ýakobiniň sereden netijelerine takmynan getirýär. Onuň üçin ψ tolkun funksiýasyny şeýle görnüşde alalyň

$$\psi=e^{-\frac{i}{\hbar}S}, \qquad (2.9).$$

bu ýerde S-käbir gözlenilýän funksiýa. (2.9)-dan taparys.

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\psi,$$

ýa-da

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

we

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{\partial S}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial S}=-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\psi,$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\psi\right)=-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\psi-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}=$$

$$=-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\psi-\frac{1}{\hbar^2}(\frac{\partial S}{\partial x})^2\psi.$$

Onda (2.8)-i aşakdaky ýaly özgerdilýär;

$$\frac{\partial S}{\partial t}\psi=\frac{1}{2\mu}(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2+\hat{P}_z^2)\psi+\hat{U}(x,y,z,t)\psi=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+\hat{U}\psi=$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\psi-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\psi-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial y^2}\psi-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2\psi-\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial z^2}\psi-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\psi\right\}+$$

$$+\hat{U}\psi=\frac{1}{2\mu}\left\{\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\right\}\psi+\frac{i\hbar}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)S\psi+\hat{U}\psi,$$

ýa-da

$$\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{1}{2\mu}\left\{\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\right\}+\hat{U}+\frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2 S. \qquad (2.10).$$

Umuman ýagdaýda, (2.10)-njy çyzykly däl deňlemäniň çözgüdi Şrýodingeriň çyzykly deňlemesiniň çözgüdünden has çylşyrymly. Şol deňlemäni mundan beýläk barlamagyň ýoly bilen kwant nazarýetini ösdürmeklik üçin köpsanly synanşyklar üstünlige getirmediler. Muňa garamazdan, Wentsele, Kramerse we Brillýuene, ħ tertipli çlen bilen çäklenip, (2.10)-yň ýakynlaşan çözgüdini tapmaklyk başardypdyr. Bu kwant mehanikasynyň meseleleriniň hataryny barlamakda peýdalanypdyr. Çözgüdiň şeýle usuly WKB ýakynlaşma usuly diýilýär. Käwagtlar oňa kwaziklassyky ýakynlaşma usuly hem diýilýär. Şu usula seredeliň. Onuň üçin *S*-i *(iħ)*-yň derejesi boýunça hatara dargadalyň.

$$S = S_0 + (i\hbar)S_1 + (i\hbar)^2 S_2 + \cdots$$

Şu hataryň birinji iki çlenleri bilen çäklenip, (2.8)-i özgerdeliň;

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + i\hbar\frac{\partial S_1}{\partial t} =$$
$$= \frac{1}{2\mu}\left\{\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 + 2i\hbar\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right) + (i\hbar)^2\left(\frac{\partial S_1}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_0}{\partial y}\right)^2\right.$$
$$\left. + 2i\hbar\left(\frac{\partial S_0}{\partial y}\right)\left(\frac{\partial S_1}{\partial y}\right) + (i\hbar)^2\left(\frac{\partial S_1}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_0}{\partial z}\right)^2 + 2i\hbar\left(\frac{\partial S_0}{\partial z}\right)\left(\frac{\partial S_1}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial S_1}{\partial z}\right)^2\right\} +$$

$$+\widehat{U} + \frac{i\hbar}{2\mu}\left\{\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} + i\hbar\frac{\partial^2 S_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_0}{\partial y^2} + i\hbar\frac{\partial^2 S_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 S_0}{\partial z^2} + i\hbar\frac{\partial^2 S_1}{\partial z^2}\right\}$$

(iħ)-yň deň derejeleriniň koefisiýentlerini deňeşdirip iki deňlemäni alýarys.

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left\{\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_0}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_0}{\partial z}\right)^2\right\} + \widehat{U}(x,y,z,t). \qquad (2.11).$$

we

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left\{2\frac{\partial S_0}{\partial x}\frac{\partial S_1}{\partial x} + 2\frac{\partial S_0}{\partial y}\frac{\partial S_1}{\partial y} + 2\frac{\partial S_0}{\partial z}\frac{\partial S_1}{\partial z}\right\}$$
$$+\frac{1}{2\mu}\left\{\frac{\partial^2 S_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_0}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 S_0}{\partial z^2}\right\}, \qquad (2.12)$$

Görnüşi ýaly (2.11)-nji Gamiltonyň-Ýakobiniň deňlemesi, (2.12)-i bolsa üznüksizlik deňleme bilen gabat gelýär.

Indi şu usuluň ulanylýan oblastyny tapalyň. (2.10)-dan (2.11)-e geçilende $\frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2 S$ ululyk inkär edildi, bu

$$\frac{1}{2\mu}(\nabla S_0)^2 \gg \left|\frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2 S_0\right|$$

şertde ýerine ýetirilip biliner. Ony (2.1)-e esaslanyp, göçürip bileris

$$\frac{1}{2\mu}\hat{P}^2 \gg \frac{\hbar}{2\mu}\left|div\hat{P}\right|. \qquad (2.13).$$

Şundan görnüşi ýaly, Şrýodingeriň deňlemesinden Gamiltonyň-Ýakobiniň deňlemesine geçmeklik kinetik energiýany uly we impulsuň üýtgemegi bolsa ujypsyz bolanda, amala aşyrylýar.

(2.13)-nji şerti bir ölçegli ýagdaý üçin göçüreliň.

$$P^2 \gg \hbar\left|\frac{dP}{dx}\right|.$$

Lui de Broýlyň

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

formulasynyň esasynda, alynýar;

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \ll 2\pi,$$

Ýagny 2π aralykda tolkun uzynlygynyň üýtgemegi tolkunyň öz uzynlygyndan has kiçi bolmalydyr.

§3. Kwant mehanikasy we optika.

Kwant mehanikasnyň öwrenýän tekiz tolkunyň giňişligiň her bir nokadynda kesgitli amplituda we kesgitli ugra eýe bolan tolkundygy bellidir. Muny elektromagnit yolkunlary barada aýdyp bolmaýar. Ýöne, elektromagnit tolkunlary üçin hem, kesgitli amplituda we kesgitli ugra eýe bolan aýratyn nokatlary saýlap bolýar. Onda, her bir nokatda üste galtaşan we ugry tolkunlaryň ýaýraýan ugry bilen gabat gelýän şöhle-çyzyk düşünjesini girizip bolýar. Şeýle şöhleleriň kanunlaryny geometriki optika öwrenýär.

Tolkunlaryň ýaýramaklarynyň deňlemeleriniň we kwant mehanikasyndaky deňlemeleriň arasyndaky başga bir tapawut, ol hem, Şrýodingeriň deňlemesi 1-nji tertipli, tolkunlaryň ýaýramagy üçin deňleme bolsa wagta görä 2-nji tertiplidir.

Şu tapawutlara garamazdan, Şrýodingeriň deňlemesini tolkunly optikanyň esasy deňlemesi bilen deňeşdirmeklige synanşalyň.

Belli bolşy ýaly, käbir bir jynsly sredada tolkunlaryň ýaýramagynda f süýşme üçin deňleme şeýle görnüşe eýedir.

$$\nabla^2 f - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0, \qquad (3.1)$$

bu ýerde *v*-tizlik

Şu deňlemäniň çözgüdini şeýle görnüşde alýarys.

$$f = ue^{-i\omega t}, \qquad (3.2)$$

bu ýerde, ω-yrgyldynyň ýygylygy.

(3.2)-ni (3.1)-e goýup alarys

$$\nabla^2 u \cdot e^{-i\omega t} + \frac{u}{v^2}\omega^2 e^{-i\omega t} = 0,$$

ýa-da

$$\nabla^2 u + k^2 u = 0, \qquad k^2 = \frac{\omega^2}{v^2}. \qquad (3.3).$$

(3.3)-nji deňlemäni berk birjynsly sreda üçin ulanyp bolýar. Eger *v*-ni koordinatyň funksiýasy diýip hasap edilse, onda ol difraksiýa we interferensiýa hadysalary hem suratlandyrýar. Şeýle halda ony birjynsly däl

sreda üçin hem tolkunly deňleme ýaly seredip bolýar. Şeýle ýagdaýda k^2 koordinatyň funksiýasy bolar we k-a tolkun sany, $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ ululuga bolsa tolkun uzynlygy diýilýär.
Döwülme görkezijini girizeliň

$$n(x, y, z) = \frac{k}{k_0} = \frac{\lambda_0}{\lambda}, \qquad (3.4).$$

bu ýerde λ_0-boşlukdaky tolkunyň uzynlygy.
(3.4)-iň esasynda (3.3)-nji deňleme şeýle ýazylýar;

$$\nabla^2 u + k_0^2 n^2 u = 0.$$

Monohromatik meýdan ýagdaýda, eýkonal diýip atlandyrylýan, täze $\theta(r)$ funksiýany girizip bolýar, üstesinede, biz ony giňişligiň berilen oblastynda gutarnykly we üznüksiz diýip hasap ederis. Eýkonal (grekçe-suratlandyrmak) geometriki optikada, iki erkin nokatlaryň arasyndaky ýagtylyk şöhlesiniň ýolunyň optiki uzynlygyny kesgitleýän funksiýasydyr. Şeýlelikde, (3.5)-iň çözgüdini şeýle görnüşde ýazyp bileris.

$$u = ae^{ik_0\theta}, \qquad (3.6).$$

bu ýerde, a-amplituda, $k_0\theta$- tolkun fazasy.

Eger tolkun uzynlygy kiçi bolsa, onda k_0 ulydyr, diýmek a we θ ululyklary $\frac{1}{k_0}$ ululygyň derejesi boýunça hatara dargadyp bolýar.

$$a = a_0 + \frac{1}{k_0} a_1 + \frac{1}{k_0^2} a_2 + \cdots$$

we

$$\theta = \theta_0 + \frac{1}{k_0} \theta_1 + \frac{1}{k_0^2} \theta_2 + \cdots$$

Şu aňlatmalary (3.6)-a goýalyň;

$$u = \left(a_0 + \frac{1}{k_0} a_1 + \frac{1}{k_0^2} a_2 + \cdots \right) e^{ik_0\left(\theta_0 + \frac{1}{k_0}\theta_1 + \frac{1}{k_0^2}\theta_2 + \cdots\right)}, \qquad (3.7).$$

Mundan tapýarys

$$\nabla u = \left(a_0 + \frac{1}{k_0} a_1 + \frac{1}{k_0^2} a_2 + \cdots \right) \cdot$$
$$\cdot ik_0 \left(\nabla\theta_0 + \frac{1}{k_0} \nabla\theta_1 + \frac{1}{k_0^2} \nabla\theta_{2+\cdots} \right) e^{ik_0\left(\theta_0 + \frac{1}{k_0}\theta_1 + \frac{1}{k_0^2}\theta_2 + \cdots\right)},$$

we

$$\nabla^2 u = -k_0^2 \left(a_0 + \frac{1}{k_0} a_1 + \frac{1}{k_0^2} a_2 + \cdots \right) \left(\nabla\theta_0 + \frac{1}{k_0} \nabla\theta_1 + \frac{1}{k_0^2} \nabla\theta_{2+\cdots} \right)^2 \cdot$$
$$\cdot e^{ik_0\left(\theta_0 + \frac{1}{k_0}\theta_1 + \frac{1}{k_0^2}\theta_2 + \cdots\right)}$$
$$+ ik_0 \left(a_0 + \frac{1}{k_0} a_1 + \frac{1}{k_0^2} a_2 + \cdots \right) \left(\nabla^2\theta_0 + \frac{1}{k_0} \nabla^2\theta_1 + \frac{1}{k_0^2} \nabla^2\theta_{2+\cdots} \right) \cdot$$
$$\cdot e^{ik_0\left(\theta_0 + \frac{1}{k_0}\theta_1 + \frac{1}{k_0^2}\theta_2 + \cdots\right)}. \qquad (3.8).$$

(3.6) we (3.8) aňlatmalary (3.5)-e goýup, we k_0 -yň bir meňzeş derejelerini ýygnap, alarys

$$-k_0^2 a_0 (\nabla\theta_0)^2 + k_0^2 n^2 a_0 + O(k_0) = 0, \qquad (3.9),$$

bu ýerde $O(k_0)$ - k_0 tertipli we ondan kiçi çlenler. Olary inkär edip, (3.9)-dan tapýarys.

$$(\nabla\theta_0)^2 = n^2, \qquad (3.10).$$

(3.10)-na Eýkonalyň deňlemesi diýilýär, we ol hemişelik fazaly üsti kesgitleýän geometriki optikanyň esasy deňlemesidir;

$$\nabla\theta_0 = \pm n,$$

$$\theta_0 = const.$$

Şu ýerden gelip çykyşyna laýyklykda şöhleler çyzykdyrlar we şu üstlere ortoganaldyrlar, $\theta_0(x, y, z)$ funksiýa eýkonal diýilýär.
Gamiltonyň-Ýakobiniň

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left[\left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_0}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_0}{\partial z}\right)^2\right] + U(x, y, z, t).$$

deňlemesinden (3.10)-njy görnüşli deňleme alynyp biliner. Belli bolşy ýaly

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} = E,$$

şonuň üçin

$$E = \frac{1}{2\mu}(\nabla S_0)^2 + U,$$

ýa-da

$$(\nabla S_0)^2 = 2\mu(E - U). \qquad (3.11).$$

Görnüşi ýaly (3.10) we (3.11) biri-birine deň diýen ýaly, diňe (3.11)-de koefsiýentiniň roluny $\sqrt{2\mu(E-U)}$ ululyk, fazanyň roluny bolsa $S_0 = const$ ýerine ýetirýär. Şu (3.10) we (3.11) deňlemeleriň deňeşdirilmeginiň esasynda, *n(x,y,z)* döwülme görkeziji kiçi tolkun uzynlykly (k_0 uly) şöhläniň birjynsly sredada ýaýramak meselesini, *U* potensiýal energiýaly güýç meýdanyndaky maddy nokadyň hereketi baradaky mesele utgaşdyryp boljakdygyna göz ýetirýäris.

Şeýlelikde maddy nokadyň klassyky mehanikasynyň geometriki optika meňzeşligi baradaky netijä gelinýär.

Indi, Şrýodingeriň deňlemesiniň we tolkunly optikanyň (3.3)-nji deňlemesiniň arasyndaky meňzeşligi tapalyň.

Şrýodingeriň deňlemesini şeýle görnüşde alalyň;

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + U(x,y,z)\psi.$$

Eger $\psi - ni$

$$\psi = ue^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

görnüşde alsak, onda

$$i\hbar u\left(-i\frac{E}{\hbar}\right)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 u e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + Uue^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

ýa-da

$$uE = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 u + Uu,$$

ýa-da

$$\nabla^2 u + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(x,y,z)] = 0. \qquad (3.12).$$

Eger güýç meýdanyň daşynda bölejik erkin hereket edýän bolsa, onda *U=0* diýip hasap edip bolýar, sebäbi şeýle ýagdaýda bölejigiň ähli energiýasy kinetik energiýasyna eltilýär. Onda (12)-ni şeýle göçüreris,

$$\nabla^2 u + \frac{2\mu}{\hbar^2}Eu = 0. \qquad (3.13).$$

(3.13)-i (3.3)-nji deňleme bilen deňeşdirip, görýäris, ýagny

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}E = k^2 = k_0^2 n^2.$$

Şonuň üçin (3.13)-i netijede şeýle görnüşde ýazyp bileris

$$\nabla^2 u + k_0^2 n^2 u = 0,$$

bu (3.5) bilen gabat gelýär.

Diýmek, tolkun (kwant) mehanikasy hem geometriki optika meňzeşdir.

Indi, şu meselede ulanylan ýakynlaşmanyň dogrylygynyň şertini dikeldeliň.

(3.10)-njy deňleme (3.9)-dan alynanda $O(k_0)$ çlenler inkär edildi. Barlap, $k_0^2(\nabla\theta_0)^2$ çlen bilen deňeşdirilende $k_0\nabla^2\theta_0$ çleniň taşlalandygyna göz ýetirmek bolýar. Bu aşakdaky şertde amala aşyrlyp biliner.

$$k_0^2\left(\frac{\partial\theta_0}{\partial t}\right)^2 \gg k_0\left|\frac{\partial^2\theta_0}{\partial x^2}\right|.$$

(3.10)-yň esasynda ýazyp bileris.

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = k_0 n = k_0\frac{\partial\theta_0}{\partial x},$$

onda

$$\left|\frac{\partial\lambda}{\partial x}\right| \ll 2\pi,$$

bu Şrýodingeriň deňlemesinden Gamiltonyň-Ýakobiniň deňlemesine geçmeklik şerti bilen gabat gelýär.

VIII bap.Kwant mehanikasynyñ matrisaly görnüşi

§1.Matrisaly mehanikanyñ zerurlygy we onuñ dikeldilişi

Kwant mehanikasy boỳunça W.Geỳzenbergiñ birinji işi 1925-nji ỳyla degişlidir. Onuñ nazaryỳetiniñ matrisalaryñ nazaryỳeti bilen baglanyşygynyñ bardygyny tiz wagtdan soñ M.Born we P.Iordan beỳan edipdirler. W.Geỳzenberg tassyklapdyr: şeỳle traỳektoriỳa ỳok, *x(t)* üznüksiz egriniñ deregine, bahalary k we *n* sanly elektronyñ başlangyç we ahyrky ỳagdaỳyna degişli X_{nk} diskret sanlaryñ toplumy bar.

W.Geỳzenberg we M.Born matrisanyñ häsiỳetleri bilen atomdaky elektronlaryñ hereketleriniñ aỳratynlyklarynyñ arasynda laỳyklyklaryñ bardygyny tapỳarlar we şeỳlelikde täze, atom, kwant, matrisaly mehanikasy esaslandyrylỳar. M.Born hatda has uly zady dikeldỳär, ỳagny onuñ aỳdyñlaşdyrmagyna laỳyklykda,

X_{nk} koordinatyñ we P_{nk} impulsyñ kwantmehaniki matrisalary islendik matrisalar bolman, diñe ỳerini çalşyrma (ỳa-da, kommutirleşme) gatnaşygyna tabyn bolỳan matrisalardyr:

$$X_{nk}P_{nk} - P_{nk}X_{nk} = i\hbar ,$$

bu ỳerde $i = \sqrt{-1}$ – hyỳaly birlik.

W.Geỳzenbergiñ matrisaly mehanikasy, tolkun deñlemeleri ikinjiderejeli rol oỳnaỳan, esasy üns nazaryỳetiñ wektor nukdaỳnazaryna berilỳändigine mysal bolup biljek, kwant mehanikasynyñ täze bir añlatmasydyr. Bir bada seredilende, Geỳzenbergiñ nazaryỳeti bilen Şrỳodingeriñ tolkun mehanikasynyñ uly rol oỳnaỳan tolkun nazaryỳetiniñ arasynda ỳerlikli tapawut bar ỳaly bolup görünỳär. Hakykatdan bolsa ol nazaryỳetler düỳpgöter ekwiwalentdirler we şol bir fiziki netijelere getirỳärler. Olar umumy esasa eỳedirler we esasyñ nazaryỳeti bolup abstrakt wektor giñişligiñ nazaryỳeti hyzmat edỳär.

§2. Ýagdaỳyñ wektorynyñ dürli añladylyşy.

Belli bolşy ỳaly, kwant sistemalarynda bir wagtda *x* koordinata we *P* impuls bilen kesgitlenilỳän bölejik alynyp bilinmeỳär. Bölejikleriñ şol ululyklaryny kesgitlemek üçin dürli enjamlar (apparatlar) zerurdyr. Başgaça aỳdylanda, her bir kwant sistemasyna degişli ölçeỳän apparatlary toparlara bölünmelidir. Mysal üçin, eger agyrlyk merkezi *x,y,z* ululyklary bilen añladylỳan bölejik barlanylỳan bolsa, onda biz aşakdaky iki dürli enjamlaryñ toparyny saỳlap bileris: onuñ birinjisine, bölejigi *x,y,z* koordinatalary, we olara bagly islendik başga *F(x,y,z)* funksiỳa (meselem, *U(x,y,z)* potensial energiỳa) boỳunça kesgitleỳän, we ikinjisine, bölejigi $P_x P_y P_z$ impulslary, we olara bagly islendik başga $F(P_x P_y P_z)$ funksiỳa (meselem, $T(P_x P_y P_z)$ kinetik energiỳa) boỳunça kesgitleỳän, apparatlar girỳär.
Meseläni sadalaşdyrmak maksady bilen, *x,y,z* ululyklaryñ deregine diňe *X* we $P_x P_y P_z$ ululyklaryñ deregine bolsa diňe *P* diỳip ỳazarys.
Köplenç ỳagdaỳda tolkun funksiỳa (ỳagdaỳyñ wektory), *X*-iñ üsti bilen añladylỳar. Ýöne şol bir funksiỳany *P* impulsyñ üsti bilen hem kesgitlemek zerurlygy ỳüze çykỳar: $\Psi(x)$ we $\Psi(P)$.
Birinji halda (birinji “hasaplama sistemasy”) ỳagdaỳ bölejigiñ “*x*” koordinatasy boỳunça barlaỳan apparata, ikinji halda (ikinji “hasaplama sistemasy”) bolsa ỳagdaỳ bölejikleri “P” impulsy boỳunça barlaỳan apparata degişli diỳip alynỳar. Birinji halda, funksiỳa koordinat añladylmasynda ($\ll x \gg -$añaldylmada),

ikinjide bolsa funksiỳa impuls añladylmasynda ($\ll P \gg -$añladylmada) berilipdir diyip hasap ediľỳär.

Şu iki añladylmalaryñ biri-birine geçişleri şeỳle amala aşyrylỳar. Goỳ, bize $\Psi(x,t)$ funksiỳa ($\ll x \gg -$añladylma) berilipdir diỳeliñ. Şu funksiỳany impulsyñ operatorynyñ $\Psi_p(x)$ hususy funksiỳasy boỳunça Furỳeniñ integralyna dargadalyñ:

$$\Psi(x,t) = \int C(p,t)\Psi_p(x)dp\,, \qquad (2.1)$$

Şu añlatmadaky C(p,t) amplitudany tapmak maksady bilen, onuñ iki tarapyna $\Psi^*_{p'}(x)$ funksiỳa bilen täsir edeliñ we soňra "*x*" boỳunça integrirläliñ:

$$\int \Psi(x,t)\,\Psi^*_{p'}(x)dx = \int C(p,t)dp \cdot \int \Psi^*_{p'}(x)\Psi_p(x)dx = \int C(p,t)dp \cdot \delta_{p'p}$$

ỳa-da, $P' = P$ bolan halda tapỳarys:

$$C(p,t) = \int \Psi(x,t)\Psi^*_p(x)dx\,. \qquad (2.2)$$

Eger, $C(p,t)$ amplituda belli bolsa, onda (2.1)-iñ üsti bilen $\Psi(x,t)$-ni taparys, ỳagny $C(p,t)$-niñ berilmegi $\Psi(x,t)$-ni doly kesgitleỳär. Şonuñ üçin $C(p,t)$-niñ argumenti "P" impuls bolan funksiỳa diỳip hasap edip bileris. Şu funksiỳa fiziki taỳdan $\Psi(x,t)$-niñ añladỳan ỳagdaỳyna hem degişlidir. Diỳmek, (2.1)-nji formulany funksiỳany $\ll P \gg -$añaldylmadan $\ll x \gg -$añaldylma , (2.2)-

nji formulany bolsa $\ll x \gg$ −añaldylmadan $\ll P \gg$ −añaldylma özgertmek diỳip tassyklap bileris.

Şu iki añladylmalardan başga-da bolup biler. Eger baglysyz üỳtgeỳän ululyk diỳip bölejigiñ “E” energiỳasy hasap edilse, onda energiỳaly añladylmany ($\ll E \gg$ −añaldylma) alarys. Kesgitlilik üçin, “E” diskretli bahaly spektre eỳe diỳeliñ, ỳagny onuñ aỳry-aỳry $E_1, E_2, \ldots, E_n, \ldots$ bahalary bar diỳeliñ. Olara degişli hususy funksiỳalary $\Psi(x)_1, \Psi(x)_2, \ldots, \Psi(x)_n, \ldots$ arkaly belgiläliñ. Onda $\Psi(x,t)$ funksiỳany aşakdaky hatar ỳaly ỳazyp bileris:

$$\Psi(x,t) = \sum C_n(t)\Psi_n(x). \qquad (2.3)$$

Şundan $C_n(t)$ amplituda tapylỳar, ỳagny

$$C_n(t) = \int \Psi_n^*(x)\ \Psi(x,t)dx\ . \ (2.4).$$

Edil ỳokarda tassyk edilişi ỳaly, ähli $C_n(t)$ amplitudalaryñ berilmekleri $\Psi(x,t)$-ni doly kesgitleỳär. Tersine, $\Psi(x,t)$-niñ berilmegi bolsa $C_n(t)$ -ni kesgitleỳär. Onda, $C_n(t)$-ni argumenti energiỳa bolan we $\Psi(x,t)$-niñ ỳagdaỳyna degişli funksiỳa diỳip hasap edip bileris. Şu nukdaỳnazardan garalanda, (2.3)-nji tolkun funksiỳany $\ll E \gg$ −añaldylmadan $\ll x \gg$ −añaldylma, (2.4)-nji funksiỳany bolsa $\ll x \gg$ −añaldylmadan

$\ll E \gg$ −añaldylma özgertmeklik diỳen netijä gelinỳär.

§3. Operatorlaryñ dürli añladylyşlary.

Koordinat añladylmada operator koordinat funksiỳada we koordinat boỳunça önümde añladylỳar, ỳagny

$$\hat{L} = \hat{L}(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) .$$

Eger şeỳle operator bilen koordinat añladylmanyñ $\Psi_c(x)$ funksiỳasyna täsir edilse, onda şol añladylmada täze bir $\varphi_b(x)$ funksiỳa alynar:

$$\varphi_b(x) = \hat{L}(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\, \Psi_c(x) . \qquad (3.1)$$

Ýagdaỳyñ wektorynyñ koordinat añladylmasynda başga bir añladylma geçilende, operatoryñ özgerdilmegi hem zerurdyr.

(3.1)-nji formulada $\hat{L}$ operatory $\ll x \gg$ −añaldylmada görkezilipdir. Indi bolsa şol operatory energetik añlatmada tapalyñ. Goỳ, energiỳa diskretli spektr E_n bahalara eỳe bolsun diỳeliñ, olara degişli hususy funksiỳalary $\Psi_n(x)$ arkaly añladalyñ.

Onda, $\Psi_c(x)$ we $\varphi_b(x)$ funksiỳalary aşakdaky ỳaly ỳazyp bileris:

$$\Psi_c(x) = \sum_n C_n \Psi_n(x) , \qquad (3.2)$$

$$\varphi_b(x) = \sum_n b_n \Psi_n(x) . \qquad (3.3)$$

C_n toplumy $\ll E \gg -$añaldylmada Ψ-dir, b_n amplitudalaryñ toplumy bolsa şol añladylmada φ-dir. $\hat{L}$ operatory Ψ-ni täze φ funksiỳasyna geçirỳär. Şonuñ bilen birlikde C_n-i täze b_n amplituda öwürỳär. Eger biz C_n-niñ üsti bilen b_n-i gös-göni añladỳan operatory tapsak, onda şonuñ bilen birlikde $\hat{L}$ operatory $\ll E \gg -$añaldylmada taparys. Şu maksat bilen (3.2) we (3.3) añlatmalary (3.1)-e goỳalyñ:

$$\sum_n b_n \Psi_n(x) = \sum_n C_n \hat{L} \Psi_n(x).$$

Şu aňlatmanyñ iki tarapyna $\Psi_m^*(x)$ bilen täsir edip we x-iñ ähli giñişligi boỳunça integrirläliñ:

$$\sum_n b_n \int \Psi_m^*(x) \Psi_n(x) dx = \sum_n C_n \int \Psi_m^*(x)\ \hat{L} \Psi_n(x)\, dx\ ,$$

ỳa-da

$$\sum_n b_n \rho_{mn} = \sum_n C_n L_{mn},$$

ỳa-da

$$b_m = \sum_n L_{mn} C_n, \qquad (3.4)$$

bu ỳerde,

$$L_{mn} = \int \Psi_m^*(x) \hat{L} \Psi_n(x) dx\ . \qquad (3.5).$$

Ähli L_{mn} ululyklary bilip, (3.4) formula arkaly C_n berilenler boỳunça (ỳagny $\ll E \gg -$añaldylmada Ψ-

funksiỳa boỳunça) ähli b_n amplitudalary (ỳagny $\ll E \gg$ −añaldylmada φ-funksiỳany) tapyp bilỳäris. Şol sebäpli L_{mn} ähli ululyklaryñ toplumyny $\ll E \gg$ −añaldylmada $\hat{L}$ operatory ỳaly seredip bolỳar.

Şu toplumy tükeniksiz sanly setirli we sütünli kwadrat tablisa görnüşde ỳerleşdirip bolỳar, ỳagny

$$L = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{13} \dots L_{1n} \dots \\ L_{21} & L_{22} & L_{23} \dots L_{2n} \dots \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \dots L_{3n} \dots \\ \dots & \dots & \dots \dots \dots \dots \end{vmatrix}.$$

Şeỳle tablisa matrisa diỳilỳär. L_{mn}ululyklara bolsa $\hat{L}$ operatoryñ matrisasynyñ matrisaly elementleri diỳilỳär. Her bir matrisaly element iki indekse eỳedir. Birinjisi setiriñ, ikinjisi bolsa sütüniñ belligidir. Şeỳle matrisada setirleriñ we sütünleriñ nähili ỳerleşỳändikleriniñ parhy ỳok, ỳöne her bir hasaplamada belli bir kesgitli ỳerleşme saklanmalydyr. Biz hususy bahalaryñ artmaklarynyñ tertibi boỳunça, ỳagny $E_1 \le E_2 \le E_3 \le \cdots \le E_n \le \cdots$, setirleri we sütünleri bellemekligi şertlendireris.

§4. Matrisalar we olaryñ üstündäki amallar.

Kesgitleme: edil şol bir sanlaryñ tablisasy bilen kesgitli düzgün boỳunça goşulỳan ỳa-da köpeldilỳän kwadrat ỳa-da gönüburçly sanlaryñ tablisasyna matrisa diỳilỳär.

Özboluşly häsiỳetleri bolan käbir matrisalara garalyñ. Matrisada ähli elementleriñ arasynda dioganal elementleri tapawutlanỳarlar. Dioganal elementleri diỳip, setiriñ tertip belgisi sütüniñ tertip belgisine deñ bolan matrisaly elementlere, ỳagny L_{nn} görnüşli elementlere aỳdylỳar. Eger matrisanyñ dioganal elementlerinden başgalary nola deñ bolsa, onda oña diagonal matrisa diỳilỳär. Spektriñ diskret ỳagdaỳynda ol matrisa şeỳle ỳazylỳar

$$L = \begin{vmatrix} L_{11} & 0 & 0 \ldots 0 \ldots \\ 0 & L_{22} & 0 \ \ldots 0 \ldots \\ 0 & 0 & L_{33} \ldots 0 \ldots \\ \ldots \ldots \ldots & \ldots \ldots & \ldots \ldots \ldots . . \end{vmatrix}. \qquad (4.1)$$

Diagonal matrisanyñ wajyp halyna δ_{mn} elementli birlik matrisasy diỳilỳär:

$$\delta_{mn} = \int \Psi_m^* \Psi_n^* dx = \begin{cases} 1, & m = n; \\ o, & m \neq n. \end{cases} \qquad (4.2)$$

Şu matrisanyñ aỳdyñ görnüşi

$$I = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \ldots \\ 0 & 1 & 0 \ldots \\ 0 & 0 & 1 \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \ldots \end{vmatrix}$$

Muña birlik matrisa diỳilỳär.

Birlik matrisanyñ matrisaly elementleriniñ (4.2) kesgitlemesinden gelip çykyşy ỳaly, birlik matrisasy islendik añladylmalarda birlik halda galỳar, sebäbi $\Psi_n(x)$ ortogonal funksiỳalaryñ islrndik sistemasy üçin (4.2)-nji şert ỳerine ỳetỳär. Diagonal matrisanyñ elementleri elmydama şeỳle görnüşde ỳazylyp biliner

$$L_{mn} = L_n \delta_{mn} \ . \qquad (4.3)$$

L_{mn} elementli haỳsy hem bolsa L matrisa bilen bir hatarda, onuñ önümleri bolan matrisalar garalỳarlar. Olaryñ arasynda ilki bilen kompleks çatrymly L^* matrisany belläliñ. Şu matrisanyñ elementleri başdaky matrisanyñ elementlerine degişlilikde kompleks çatrymlydyr:

$$L^* = (L_{mn})^* = L^*_{mn}$$

Berilen L matrisadan transponirlenen L^+ matrisany emele getirip bolỳar. Şu matrisa başdakynyñ setirlerini we sütünlerini özara çalşyrmak ỳoly bilen alynỳar. Şu $\tilde{L}$ matrisanyñ elementleri aşakdaky formula arkaly kesgitlenilỳär:

$$\tilde{L} = \left(\widetilde{L_{mn}}\right) = L_{nm} \ .$$

Kompleks çatrymly hem-de transponirlenen, ỳagny $\tilde{L}^*$ matrisa başdaka görä çatrymly diỳilỳär we L^+ bilen belgilenỳär. Onuñ elementleri

$$L^+ = (\tilde{L}_{mn})^* = L^*_{nm},$$

formula arkaly tapylỳarlar.

Çatrymly matrisanyň başdaky matrisa deñ bolan ỳagdaỳynda, ỳagny

$$L^+ = L \; (\grave{y}a - da \; L_{mn} = L^*_{nm})$$

oña ermitli ỳa-da özüneçatrymly diỳilỳär. Şu kesgitleme ermitli ỳa-da özüneçatrymly operatoryñ öñki kegitlemesine garşy däldir. Dogrydanam, eger $\hat{L}$ operator ermitli bolsa, onda onuñ matrisaly elementleri üçin ỳazyp bileris:

$$L_{mn} = \int \Psi^*_m \hat{L} \Psi_n dx = \int \Psi_n \hat{L}^* \Psi^*_m dx = L^*_{nm} \; .$$

Matrisanyñ birnäçe häsiỳetlerini getireliñ.
Eger $L^* = L$ bolsa, onda oña hakyky, $L^* = -L$ - hyỳaly, $\tilde{L} = L$ −simmetrik, $\tilde{L} = -L$ −antisimmetrik, $L^+ = L$ -ermitli, $L^+ = -L$ -antiermitli we $L^+ = L^{-1}$-unitary, matrisa diỳilỳär.
Hakyky unitary matrisa ortogonal matrisa diỳilỳär. Şu matrisa üçin aşakdaky deñleme ỳerine ỳetỳär

$$L \cdot L^+ = 1.$$

Bu deñleme

$$L^* = L \text{ we } L^+ = L^{-1}$$

şertlerden gelip çykỳar.
Indi matrisalaryñ üstündäki algebraik amallara seretmeklige geçeliñ.

Goşmak. Ilki bilen matrisalaryñ nähili goşulỳandyklaryna garalyñ. Goỳ, iki $\hat{A}$ *we* $\hat{B}$ çyzykly özüneçatrymly operatorlaryñ jemini añladỳan $\hat{C}$ operatory berilipdir diỳeliñ. Onda, $\hat{A}$ *we* $\hat{B}$ operatorlaryñ matrisalarynyñ jemi $\hat{C}$ operatoryñ matrisasyna düşünilỳär. Şu matrisanyñ elementleri añsat tapylỳar:

$$C_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{C}\, \Psi_n dx = \int \Psi_m^* \left(\hat{A} + \hat{B}\right)\Psi_n dx = \int \Psi_m^* \hat{A}\, \Psi_n dx + \int \Psi_m^* \hat{B}\, \Psi_n dx$$

diỳmek,

$$C_{mn} = A_{mn} + B_{mn}\,. \qquad (4.4)$$

Şu taỳdan gelip çykyşy ỳaly, jemi añladỳan operatoryñ matrisasynyñ matrisaly elementleri şol jeme girỳän operatorlaryñ matrisalarynyñ degişlilikde matrisaly elementleriniñ jemine deñdir.

Mysal.

$$\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} \end{vmatrix}$$

Köpeltmek. Goşant manysynda has wajyp bolup, matrisalaryň köpeltmek düzgüni hyzmat edỳär. Şu düzgüni dikeltmek maksady bilen, $\hat{A}$ *we* $\hat{B}$ iki operatorlaryñ köpeltmek hasyly bolan $\hat{C}$ operatoryñ matrisasynyñ matrisaly elementlerini hasaplalyñ:

$$C_{mn} = \int \Psi_m^* \hat{C} \Psi_n dx = \int \Psi_m^* \hat{A}(\hat{B}\Psi_n) dx. \qquad (4.5)$$

Bu ỳerde $(\hat{B}\Psi_n)$ ululygyñ özi käbir $\Psi_k(x,t)$ funksiỳadyr we ol $\Psi_k(x)$ ortogonal funksiỳalar boỳunça hatara dargadylyp biliner:

$$\hat{B}\Psi_n = \Psi_k(x,t) = \sum_k b_k \Psi_k(x). \qquad (4.6)$$

Şu añlatmadan b_k-ny tapmak üçin onuñ iki tarapyna $\Psi_{k'}^*(x)$ funksiỳa bilen täsir etdireliñ we integrirläliñ:

$$\int \Psi_{k'}^*(x) \hat{B} \Psi_n dx = \sum_k b_k \int \Psi_{k'}^*(x) \Psi_{kx}(x) = \sum_k b_k \delta_{k'k}.$$

Şu ỳerden $k' = k$ bolanda, tapỳarys

$$b_k = \int \Psi_k^* \hat{B} \Psi_n dx = B_{kn}.$$

Onda (4.6) aşakdaky görnüşe geçỳär:

$$\hat{B}\Psi_n = \sum_k B_{kn} \Psi_k(x).$$

Şuny (4.5)-e goỳup, alarys

$$C_{mn} = \int \Psi_m^*(x) A \cdot \sum_k B_{kn} \Psi_k(x) = \sum_k \int \Psi_m^*(x) \hat{A} \Psi_k(x) dx \cdot B_{kn}$$

ýa-da

$$C_{mn} = \sum_k A_{mk} B_{kn}. \qquad (4.7)$$

Bu ýerde, $A_{mk} = \int \Psi_m^*(x)\hat{A}\Psi_k(x)dx$

(4.7) aňlatma matrisalaryň köpeltmek düzgünini añladỳar.
Ondan görnüşi ýaly, $\hat{A}$ *we* $\hat{B}$ operatorlaryñ matrisalarynyñ köpeltmek hasylynyñ matrisasynyñ C_{mn} matrisaly elementlerini almak üçin, $\hat{A}$ operatoryñ matrisasynyñ "m" setiriniñ elementlerini $\hat{B}$ operatoryñ matrisasynyñ "n"setiriniñ elementlerine degişlilikde köpeltmeli hem-de olary goşmaly. Mysal

$$\begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{12} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{vmatrix}$$

Matrisalaryň köpeltmek düzgüninden örän wajyp netije gelip çykỳar: matrisalaryñ kopeltmek hasylyndan alynan çatrymly matrisa, şol matrisalaryñ ters tertibinde alynan çatrymly matrisalaryñ köpeltmek hasylyna deñdir, ỳagny

$$C^+ = (AB)^+ = B^+A^+ .$$

Dogrydanam, C_{mn}^+ elementler çatrymly matrisanyñ kesgitlemesi boỳunça, C_{nm}^* deñdir, şol sebäpli (4.7)-niñ esasynda tapỳarys:

$$C_{mn}^+ = C_{nm}^* = \sum_k \tilde{A}_{nk}^* \tilde{B}_{km}^* = \sum_k (B^+)_{mk} (A^+)_{kn} = B^+A^+ .$$

Matrisalary goşmak we köpeltmek düzgünleri täze, matrisaly mehanikanyñ matematiki aparatynda uly orun tutỳarlar.

§5. Kwant mehanikasynyñ käbir düşünjeleriniñ matrisaly görnüşleri.

Kwant mehanikanyñ we matrisaly mehanikanyñ arasynda nähili gatnaşygyñ bardygyna aỳdyñ göz ỳetirmek maksady bilen, kwant mehanikasynyñ esasy düşünjeleriniñ we deñlemeleriniñ matrisaly mehanikasynda nähili formada añladylỳandyklaryny getirip çykaralyñ.

<u>Orta bahanyñ deñlemesi</u>. Belli bolşy ỳaly, kwant mehanikasynda Ψ(x,t) funksiỳasy bolan $\bar{L}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$ operatoryñ L mehaniki ululygynyñ orta bahasy integralyñ kömegi bilen tapylỳar.

$$\bar{L} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\ \bar{L}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)dx. \qquad (5.1)$$

Şu añlatmanyñ matrisaly mehanikasyndaky formasy añsat alynyp biliner. Goỳ, ululygyñ “n” hususy bahasyna degişli $\Psi_n(x)$ hususy funksiỳany baglysyz üỳtgeỳän diỳip hasap edilsin, onda $\Psi(x,t)$ *we* $\Psi^*(x,t)$ funksiỳalary hatar görnüşinde ỳazyp bileris:

$$\left.\begin{array}{l}\Psi(x,t) = \sum C_n \Psi_n(x) \\ \Psi^*(x,t) = \sum_m C_m^* \Psi_m^*(x)\ .\end{array}\right\} \qquad (5.2)$$

(5.2)-ni (5.1)-e goỳup, alỳarys:

$$\bar{L} = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_m C_m^* \Psi_m^*(x) \cdot \hat{L} \cdot \sum C_n \Psi_n(x)\, dx = \sum_m \sum_n C_m^* \int \Psi_m^*(x) \hat{L}\ \Psi_n(x) dx \cdot$$

ỳa-da

$$\bar{L} = \sum_m \sum_n C_m^* L_{mn} C_n\ , \qquad (5.3)$$

bu ỳerde,

$$L_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \hat{L} \Psi_n dx.$$

Eger, “L” ululygyñ $\hat{L}$ operatory matrisaly görnüşde diỳip hasap edilse, onda (5.3)-nji añlatma şol “L” ululygyñ orta bahasynyñ, ỳagny (5.1)-iñ matrisaly görnüşidir.
C_n toplumy bir sütünli Ψ matrisa, C_m^* toplumy bolsa bir setirli çatrymly Ψ^+ matrisa ỳaly sredilse, onda matrisalaryñ (4.7)-nji köpeltmek düzgüni esasynda (5.3)-i aşakdaky ỳaly göçürip bolar.

$$\bar{L} = \Psi^+ \hat{L} \Psi.$$

<u>Hususy baha we hususy funksiỳa üçin deñleme.</u> Kwant mehanikasynda hususy bahalar we hususy funksiỳalar aşakdaky deñlemäniñ üsti bilen tapylỳarlar:

$$\hat{L} = \Psi(x,t) = L\Psi(x,t). \qquad (5.4)$$

(5.4)-de $\Psi(x,t)$-niñ bahasyny (5.2)-de goỳup, alarys:

$$\hat{L}\sum_n C_n\Psi_n(x) = L\cdot\sum_n C_n\Psi_n(x).$$

Şu añlatmanyñ iki tarapyna çepden $\Psi_m^*(x)$ ululuk bilen täsir etdireliñ we integrirläliň:

$$\sum_n C_n \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \hat{L}\Psi_n dx = L\sum_n C_n \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \Psi_n dx. \quad (5.5)$$

Belli bolşy ỳaly

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \hat{L}\Psi_n dx = L_{mn},$$

we

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^* \Psi_n dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m = n; \\ 0, & m \neq n. \end{cases}$$

Onda (5.5) şeỳle görnüşe geçỳär

$$\sum_n L_{mn}C_n = LC_m. \qquad (5.6).$$

(5.6)-njy deñleme (5.4)-iñ matrisaly görnüşidir we kesgitlemek üçin çyzykly birjynsly algebraik deñlemeleriñ tükeniksiz sistemasydyr. Algebradan belli bolşy ỳaly, şeỳle sistemanyñ noldan üỳtgeşik çözgüdiniñ bolmaklygy üçin deñlemeleriñ koefisiỳentlerinden düzülen takyklaỳyjy nola deñ bolmalydyr, ỳagny

$$\begin{Vmatrix} L_{11}-L & L_{12} & L_{13} & \cdots & L_{1n} & \cdots \\ L_{21} & L_{22}-L & L_{23} & \vdots & L_{2n} & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & & \cdots & \\ L_{n1} & L_{n2} & L_{n3} & \cdots & L_{nn}-L & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{Vmatrix} = 0 \quad (5.7)$$

Şu deñleme L-iñ mümkin bahalaryna çäkliliigi ỳükleỳär. Ol L-iñ tükeniksiz ỳokary derejeli deñlemesidir we tükeniksiz köp sanly köki bardyr:

$$L = L_1, L_2, \ldots, L_\alpha, \ldots$$

Algebrada subut edilişi ỳaly şu kökler hakykydyrlar. (5.6)-njy sistemanyñ L_α toplum bahalaryndaky alnan çözgütleri $\hat{L}$ operatoryñ hususy bahalarydyrlar. (5.6)-njy deñleme, (5.7)-niñ haỳsy hem bilsa bir köküne, meselem L_α , goỳup, şol köke degişli çözgütleri alarys:

$$L = L_1, \qquad C_1 = C_1(L_\alpha), \quad C_2 = C_2(L_\alpha), \ldots, \quad C_n = C_n(L_\alpha), \ldots$$

Şeỳle ỳol bilen tapylan $C_1, C_2, \ldots, \quad C_n, \ldots$ ululyklar **α**-nyñ $L = L_\alpha$ hususy bahalaryna degişli $\hat{L}$ operatoryñ hususy funksiỳalarydyr. Şu tolkun funksiỳalary $\ll x \gg -$añladylmada şeỳle görnüşde ỳazylyp biliner:

$$\Psi_\alpha(x) = \sum_n C_n(L_\alpha)\Psi_n(x).$$

Şrỳodingeriñ deñlemesi.

Kwant mehanikasynyñ esasy deñlemesi bolan Şrỳodingeriñ deñlemesini şeỳle görnüşde alalyñ:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \widehat{H}\Psi(x,t). \qquad (5.8)$$

Şu deñlemäni matrisaly mehanikasyna özgertmek maksady bilen $\Psi(x,t)$ funksiỳany haỳsy hem bolsa bir operatoryñ $\Psi_n(x)$husus funksiỳasy boỳunça hatara dargadalyñ:

$$\Psi(x,t) = \sum_n C_n(t)\Psi_n(x). \qquad (5.9)$$

(5.9)-y (5.8)-e goỳup alarys:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n C_n(t)\Psi_n(x) = \widehat{H}\sum_n C_n(t)\Psi_n(x)..$$

Şu deñleme çepden $\Psi_m^*(x)$ funksiỳa bilen täsir etdireliñ we integrirläliñ:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n C_n\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_m^*(x)\Psi_n(x)dx = \sum_n C_n\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_m^*(x)\widehat{H}\Psi_n(x)dx$$

ỳa-da

$$i\hbar\frac{\partial C_m}{\partial t}\sum_n H_{mn}C_n\ , \qquad m=1,2,3,\ldots \qquad (5.10)$$

bu ỳerde

$$H_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_m^*(x)\widehat{H}\Psi_n dx\ , \qquad (5.11)$$

we ol $\hat{H}$ gamiltonianyñ matrisasynyñ matrisaly elementleri, (5.10) bolsa (5.8)-iñ matrisaly görnüşidir. (5.10)-njy deñleme, başlangyç $C_n(o)$berilenler boỳunça (ỳagny, $\Psi(x,0)$) $C_n(t)$-ni (ỳagny, $\Psi(x,t)$) kesgitleỳär. (5.10)-njy deñleme Şrýodingeriň deňlemesiniň matrisaly görnüşidir.

Goỳ, $\hat{H}$ ululyk doly energiỳanyñ operatoryny añladỳar diỳeliñ we $\Psi_n(x)$ funksiỳalaryñ deregine $\hat{H}$ operatoryñ hususy funsiỳalaryny alalyñ. Onda, $C_n(t)$stasionar ỳagdaỳyñ amplitudasy bolup hyzmat eder we şeỳle halda bolsa H_{mn}diagonal matrisasynyñ diagonal elementlerini berỳär:

$$H_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^*(x)\hat{H}\Psi_n(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^*(x)E_n\Psi_n(x)dx =$$

$$= E_n \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_m^*(x)\Psi_n(x)dx, \qquad (5.12)$$

ỳa-da

$$H_{mn} = E_n\delta_{mn}\,.$$

(5.12)-ni (5.10)-a goỳup, alarys

$$i\hbar\frac{\partial c_m}{\partial t} = \sum_n E_n\,\delta_{mn}\,C_n\,,$$

ỳa-da , n=m hal üçin

$$i\hbar\frac{\partial c_m}{\partial t} = E_m C_m\,, \qquad (5.13)$$

Şu deňlemäni ilki integrirläp we soňra potensirläp, taparys:

$$C_m(t) = C_m(0)e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t},$$

Ýagny stasionar ýagdaýyň amplitudasy wagta garmoniki baglydyr we bu kwant mehanikasynda alynan netije bilen doly gabat gelýär.

Wagt boýunça operatoryň önümi we Puassonyň kwant skobkasy.

Şrýodingeriň deňlemesiniň matrisaly görnüşini wagt boýunça operatoryň wagta görä önümini hasaplamaga ulanalyň. Şu maksat bilen (5.3)-I wagta görä differensirläliň:

$$\frac{d(\bar{L})}{dt} = \frac{d\bar{L}}{dt} = \sum_m \sum_n \frac{\partial C_m^*}{\partial t} L_{mn} C_n + \sum_m \sum_n C_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} C_n + \sum_m \sum_n C_m^* L_{mn} \frac{\partial C_n}{\partial t} \quad (5.14)$$

Şrýodingeriň (5.10)-njy deňlemesiniň esasynda ýazyp bileris:

$$i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} = \sum_k H_{nk} C_k$$

we $$-i\hbar \frac{\partial C_m^*}{\partial t} = \sum_k H_{mk}^* C_k^* \quad 5.15).$$

(5.15)-nji aňlatmalary (5.14)-e goýup alarys.

$$\frac{d\langle\bar{L}\rangle}{dt} = \sum_m \sum_n C_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} C_n + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \sum_n \sum_k C_m^* L_{mn} H_{nk} C_k -$$

$$-\frac{1}{i\hbar} \sum_m \sum_n \sum_k H_{mk}^* C_k^* L_{mn} C_n. \qquad (5.16)$$

$\hat{H}$ operatoryñ özüneçatrymlylydygy üçin

$$H_{mk}^* = H_{km},$$

Mundan başga-da, m,n,k indeksleriñ şol bir bahalary alỳandyklaryna esaslanyp,
(5.16)-nyñ ikinji çleninde “k”-ny “n”-e, üçünji-de bolsa “k”-ny “m”-e çalyşyp ony aşakdaky yaly özgerdip, bileris:

$$\frac{d\langle\hat{L}\rangle}{dt} = \sum_m \sum_n C_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} C_n + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \sum_n \sum_k C_m^* L_{mk} H_{kn} C_n -$$

$$-\frac{1}{i\hbar} \sum_m \sum_n \sum_k C_m^* H_{mk} L_{kn} C_n =$$

$$= \sum_m \sum_n C_m^* \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} C_n + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \sum_n C_m^* \left(\sum_k L_{mk} H_{kn} - \sum_k H_{mk} L_{kn}\right) C_n.$$

Matrisalary köpeltmek düzgünine esaslanyp ỳazyp bileris:

$$\sum_k L_{mk} H_{kn} = \left(\hat{L}\hat{H}\right)_{mn},$$

$$\sum_k H_{mk} L_{kn} = \left(\hat{H}\hat{L}\right)_{mn},$$

Onda

$$\frac{d\langle \bar{L} \rangle}{dt} = \sum_m \sum_n C_m^* \left\{ \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} \left(\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L} \right)_{mn} \right\} C_n =$$
$$= \sum_m \sum_n C_m^* \, C_m^* \left\{ \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + \left[\hat{H}\hat{L} \right]_{mn} \right\} C_n = \sum_m \sum_n C_m^* \left(\frac{d\hat{L}}{dt} \right)_{mn} C_n,$$

Bu ỳerde,

$$\left[\hat{H}\hat{L} \right]_{mn} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k (L_{mk} H_{kn} - H_{mk} L_{kn}) = \frac{1}{i\hbar} \left(\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L} \right)_{mn}$$

aňlatma Puassonyñ skobkalarynyñ matrisaly mehanikasynda añladylyşy;
we

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt} \right)_{mn} = \frac{\partial L_{mn}}{\partial t} + \left[\hat{H}\hat{L} \right]_{mn}$$

aňlatma bolsa Geỳzenberg görnüşdäki esasy deñlemäniñ matrisaly görnüşini berỳär.
Kwant mehanikasynyñ hasap usuly, ỳagny çyzykly ermit operatorlaryñ usuly, kwant mehanikasynda ulanylỳan ỳeke-täk hasaplaỳjy apparat däldir. Kwant mehanikasynda ähli mehaniki ululyklara, operatorlar bilen bir hatarda ermit mtrisalarynyñ hem degişlidigi dikeldildi. Umuman, kwant mehanikasynyñ matrisaly görnüşi käbir halatlarda onuñ operatorly görnüşinden amatlydyr. Kwant mehanikasynyñ matrisaly görnüşinde añladylyşy,

onuñ deñlemelerini klassykyy fizikanyñ deñlemeleriniñ görnüşleri boỳunça añlatmaklyga mümkünçilik berỳär. Olarda tolkun funksiỳasy ỳok. Deñlemeleriñ özleri görnüşleri boỳunça klassyky fizikanyň deňlemelri bilen gabat gelýär, ýöne olaryň arasyndaky ýerlikli tapawut – şol deňlemelerde klassyky ululyklar degişli matrisalar bilen çalşyrylýar.

IX bap. Kwant nazarýetiniñ käbir ulanylyşy.

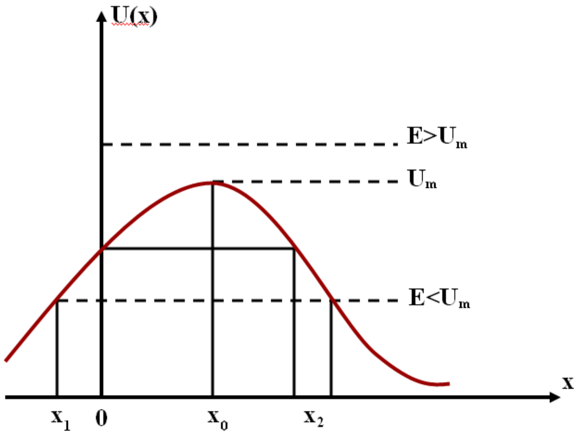
Umumy bellikler. Stasionar ýagdaýlary kesgitleýän, Şrýodingeriñ deñlemesiniñ anyk çözgüdini berip bolýan käbir ýönekeý sistemalara seredeliñ. Şeýle sistemalar tebigatda duş gelýän sistemalaryñ ideal görnüşleridir. Şeýle ýönekeý sistemalary barlamaklyk, kwant mehanikasynyñ usullaryna doly düşünmeklige ýardam edýär. Mundan başgada, alynan netijeler özbaşdak ähmiýete eýedirler, sebäbi olar käbir ýakynlaşmada real sistemalara degişli häsiýetleri suratlandyrýarlar.

Şu bölümde serediljek meseleleriñ hataryny, mikrobölejikleriñ potensial barýerden geçişlerine seretmeklikden başlaýarys.

§1. Potensial barýerden bölejikleriñ geçmegi.

Eger iki oblastyñ üstündäki energiýa, olary bölýän üste görä kiçi bolsa, onda şol oblastlar özara potensial barýer arkaly bölünendirler diýlip hasap edilýär.

Potensial barýere 15-nji çyzgyda getirilen barýer mysal bolup biler. Ordinat oky boýunça "x" koordinatyñ funksiýasynda potensial energiýa ýerleşdirilýär. Potensial energiýa "x_0" nokatda maksimum U_m baha eýedir. Şol nokatda ähli giñişlik iki oblasta bölünýar: $x < x_0$ we $x > x_0$, olarda $U < U_m$.



15-nji çyzgy

"Potensial barýer" termininiň ähmiýetini anyklamak maksady bilen, $U(x)$ meýdanda bölejikleriň hereketlerini klassiki mehanikasynyň esasynda seredeliň.

Bölejigiň umumy E energiýasy deňdir.

$$E = \frac{1}{2\mu}P^2(x) + U(x) \qquad (1.1)$$

şuny impulsa görä çözüp, alarys:

$$P(x) = \pm\sqrt{2\mu(E - U(x))}. \qquad (1.2)$$

Şu ýerde "$\pm$" alamatlary bölejigiň hereketiniň ugruna baglylykda saýlamaly.

Eger bölejikleriň "E" energiýasy barýeriň U_m "beýikliginden" uly bolsa, onda bölejik garşylyk görmän barýerden çepden saga geçer. Şeýle hal üçin başlangyç impuls $p > 0$, we eger başlangyç impuls $p < 0$ bolsa, onda ol ters ugur boýunça hereket eder.

Goý indi, bölejik $E < U_m$ energiýa bilen çepden düşýär diýeliñ. Onda haýsy hem bolsa bir x_1 nokatda potensial energiýa $U_{(x_1)} = E$, impuls $P_{(x_1)} = 0$ bolar, bölejik durar. Onuñ ähli energiýasy potensial energiýa öwrüler we hereket ters ugura başlanar; x_1 öwrülme nokady bolar. Şol sebäpli, $E < U_m$ ýagdaýda, çepden hereket edýän bölejik potensialyñ maksimuma barabar bolan oblasty $\left(x = x_0\right)$ arkaly geçmez we ikinji $x > x_0$ oblasta girmez. Edil şuña meñzeş bölejik $E < U_m$ energiýaly sagdan çepe hereket etse, onda oña öwrülme nokady bolup x_2 hyzmat eder we onda $U_{(x_2)} = E$ bolar.

Şeýlelikde, ähli bölejikler üçin $E < U_m$ halda potensial barýer "dury däl" päsgelçilik bolup hyzmat edýär, we $E > U_m$ bölejikler üçin ol "durudyr". Şunuñ bilen "potensial barýer" ady düşündirilýär.

Kwant mehanikasy nukdaýnazardan, $E < U_m$ energiýaly mikrobölejikleriñ bir bölegi barýer arkaly geçýär (sümülýär) we $E > U_m$ energiýaly bölejikleriñ bir bölegi barýerden serpikýär. Şeýle tassyklamany subut etmek üçin, iñ ýönekeý haly, ýagny haçanda barýer gönüburçly görnüşe eýe bolan ýagdaýy alalyñ.

Bölejikleriñ potensial energiýasyny $0 \le x \le l$ oblastdan başga ýerde nola deñ diýip hasap ederis we şol oblastda ol hemişelik U_m baha eýedir.

Şeýle barýeriñ meýdanynda hereket edýän bölejikleriñ stasionar ýagdaýlaryny tapalyñ. Stasionar ýagdaýlary kesgitlemegiñ meselesi, energiýanyñ operatorynyñ hususy bahalaryny gözlemäge eltilýär, ýagny mesele stasionar ýagdaý üçin Şrýodingeriñ

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

deñlemesini çözmekden durýar.

Şu deñlemäni aşakdaky görnüşde ýazyp bolýar:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi, \qquad (1.3)$$

ýa-da

$$\psi'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)\psi = 0,$$

ýa-da $\qquad \psi'' + k_0^2 \; n^2(x)\psi = 0, \qquad (1.4)$

bu ýerde, $k_0^2 = \dfrac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad k_0{}^2 n^2(x) = \dfrac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - U(x)\right)$ - (1.5)

optiki belgilenmeler;

we

$$n(x) = \frac{k}{k_0} = \frac{\lambda_0}{\lambda}$$

- döwülme görkezijisi.

Barýeriñ formasyna görä, 4-nji deñleme üç baglydäl birölçegli deñlemelere dargaýar.

$$\psi''+k_0^2\psi=0, \quad x<0, \quad U(x)=0;$$

$$\psi''+k_0^2 n_m^2(x)\psi=0, \quad 0\le x\le l, \quad U(x)=U_m;$$

$$\psi''+k_0^2\psi=0, \quad x>l, \quad U(x)=0.$$

Şu deñlemeler şeýle çözgütlere eýedirler:

$$\left.\begin{aligned}
\psi(x)&=\psi_{\text{I}}(x)=Ae^{ik_0 x}+Be^{-ik_0 x},\\
\psi(x)&=\psi_{\text{II}}(x)=\alpha e^{ik_0 n_m x}+\beta e^{-ik_0 n_m x},\\
\psi(x)&=\psi_{\text{III}}(x)=ae^{ik_0 x}+be^{-ik_0 x},
\end{aligned}\right\} \qquad (1.6)$$

bu ýerde, A, B, α, β, a we b - erkin hemişelikler.

Potensialyñ bölünýän üstünde tolkun funksiýasy, ähtimallygyñ dykyzlygynyñ üznüksiz bolmaklygy sebäpli, üznüksiz bolmalydyr. Şonuñ üçin gyra şertleri girizmeli we şu maksat bilen $U(x)$-i we, diýmek , $n(x)$-i x-iñ haýal üýtgeýän funksiýasy ýaly kabul edeliñ. Onda, (1.4)-nji deñlemäni $x=0$ nokadyñ golaýynda integrirläp, alýarys:

$$\int_{-\Delta}^{+\Delta} \psi'' dx + k_0^2 \int_{-\Delta}^{+\Delta} n^2(x)\psi dx = 0.$$

Şu ýerden

$$\psi'(+\Delta) - \psi'(-\Delta) = k_0^2 \int_{-\Delta}^{+\Delta} n^2(x)\psi dx;$$

Bu ýerden $\Delta \to 0$ çäge geçip gyra şerti alýarys.

$$\psi'(+0) = \psi'(-0).$$

Tolkun funksiýanyñ üznüksizliginiñ umumy talabyna laýykda, ikinji gyra şertini, alarys:

$$\psi(+0) = \psi(-0).$$

$x = 0$ nokat erkin we şol sebäpli şeýle gyra şertleri islendik, meselem, $x = l$ nokatda hem ýerine ýetmeli.

Şeýlelikde, (1.6)-nyñ üç deñlemeleriniñ çözgütlerini bir deñlemäniñ çözgüdiniñ çägi ýaly seredip bolmaklary üçin, şol çözgütler $x = 0$ we $x = l$ nokatlarda aşakdaky gyra şertleri kanagatlandyrmalydyrlar:

$$\left.\begin{aligned} \psi_{I}(0) &= \psi_{II}(0), \\ \psi_{I}'(0) &= \psi_{II}'(0), \\ \psi_{II}(l) &= \psi_{III}(l), \\ \psi_{II}'(l) &= \psi_{III}'(l). \end{aligned}\right\} \qquad (1.7)$$

Şu sistema funksiýanyñ (1.6)-dan bahasyny goýup, alýarys:

$$\left.\begin{aligned} &A+B=\alpha+\beta, \\ &ik_0(A-B)=ik_0n_m(\alpha-\beta), \\ &\alpha e^{ik_0n_ml}+\beta e^{-ik_0n_ml}=ae^{ik_0l}+be^{-ik_0l} \\ &ik_0n_m(\alpha e^{ik_0n_ml}-\beta e^{-ik_0n_ml})=ik_0(ae^{ik_0l}-be^{-ik_0l}) \end{aligned}\right\}(1.8)$$

Alty erkin hemişelikleri üçin dört deñlemeleri aldyk. Olaryñ erkinligi bölejikleriñ çepden ýa-da sagdan düşüp biljekdikleri bilen düşündirilýär.

Meselem, eger $A, B \neq 0$, $b=0$ bolsa, onda Ae^{ik_0x}-düşen, Be^{-ik_0x}-serpigen we ae^{ik_0x}-geçen tolkunlary ýaly garalyp bilinerler. Eger $b \neq 0$ bolan ýagdaýynda, onda bu barýere başga tarapdan düşýän tolkunyñ bardygyny añladýar.

Kesgitlilik üçin bölejikleriñ çepden düşýän halyna seredeliñ, onda b=0 diýip alynmaly. Mundan başga-da, hiç hili çäklendirmezden düşýän tolkunyñ amplitudasyny A=1 diýip alyp bileris, onda (1.8)-i aşakdaky ýaly göçüreris:

$$\left.\begin{aligned} &1+B=\alpha+\beta,\\ &1-B=n_m(\alpha-\beta),\\ &\alpha e^{ik_0n_ml}+\beta e^{-ik_0n_ml}=ae^{ik_0l},\\ &n_m(\alpha e^{ik_0n_ml}-\beta e^{-ik_0n_ml})=ae^{ik_0l}. \end{aligned}\right\} (1.9)$$

Şu algebraik deñlemelerden α, β, B we a ululyklary tapyp bileris.

(1.9)-yñ birinji we ikinji deñlemelerini çlenme-çlen goşýarys:

$$2=\alpha(1+n_m)+(1-n_m)\beta,$$

Şu ýerden

$$\beta=\frac{2-\alpha(1+n_m)}{(1-n_m)}. \qquad (1.10)$$

Indi (1.9)-yñ dördünjisini üçünjiden aýyralyñ:

$$\alpha(1-n_m)e^{ik_0n_ml}+\beta(1+n_m)e^{-ik_0n_ml}=0. (1.11)$$

(1.10)-ny (1.11)-e goýup, alýarys:

$$\alpha(1-n_m)^2 e^{ik_0 n_m l} + 2(1+n_m)e^{-ik_0 n_m l} - \alpha(1+n_m)^2 e^{-ik_0 n_m l} = 0,$$

Şundan

$$\alpha = \frac{2(1+n_m)e^{-ik_0 n_m l}}{(1+n_m)^2 e^{-ik_0 n_m l} - (1-n_m)^2 e^{ik_0 n_m l}},$$

$$\beta = \frac{2(n_m - 1)e^{ik_0 n_m l}}{(1+n_m)^2 e^{-ik_0 n_m l} - (1-n_m)^2 e^{ik_0 n_m l}},$$

$$B = \frac{\left(e^{-ik_0 n_m l} - e^{ik_0 n_m l}\right)\left(1-n_m^2\right)}{(1+n_m)^2 e^{-ik_0 n_m l} - (1-n_m)^2 e^{ik_0 n_m l}},$$

$$ae^{ik_0 l} = \frac{4n_m}{(1+n_m)^2 e^{-ik_0 n_m l} - (1-n_m)^2 e^{ik_0 n_m l}}. \qquad (1.12)$$

Eger bölejikleriñ energiýasy $E > U_m$ bolsa, onda döwülme görkezijisi hakykydyr. Şeýle halda, serpigen tolkunyñ $|B|^2$ intensiwligi deñdir:

$$|B|^2 = \frac{4(1+n_m^2)^2 \sin^2(k_0 n_m l)}{(1+n_m)^4 + (1-n_m)^4 - 2(1-n_m^2)^2 \cos(2k_0 n_m l)}, (1.13)$$

geçen tolkunyñ intensiwligi bolsa

$$|a|^2 = \frac{16 n_m^2}{(1+n_m)^4 + (1-n_m)^4 - 2(1-n_m^2)^2 \cos(2k_0 n_m l)}. (1.14)$$

Bölejikleriñ akymynyñ togunyñ dykyzlygy üçin formula boýunça, bölejikleriñ akymynyñ dykyzlygynyñ wektoryny düşen (I_0) , serpigen (I_r) we geçen (I_d) tolkunlarda hasaplalyñ. Belli bolşy ýaly bölejikleriń akymynyń dykyzlygynyń wektory deńdir

$$I = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi).$$

Munuń esasynda tapýarys:

$$I_0 = \frac{\hbar k_0}{\mu}|A|^2 = \frac{\hbar k_0}{\mu}, \quad I_r = -\frac{\hbar k_0}{\mu}|B|^2, \quad I_d = \frac{\hbar k_0}{\mu}|a|^2.$$

Serpigen bölejikleriñ akymynyñ düşeniñ akymyna bolan gatnaşygyna

$$\frac{|I_r|}{I_0} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = |B|^2 = R$$ – serpikme koeffisienti diýilýär.

Geçen bölejikleriñ akymynyñ düşeniñ akymyna bolan gatnaşygyna bolsa

$$\frac{I_d}{I_0} = \frac{|a|^2}{|A|^2} = |a|^2 = D$$ – barýeriñ durulyk koeffisienti

diýilýär.

Bölejikleriñ sanynyñ saklanmak kanunyndan gelip çykýar, ýagny

$$R + D = 1$$

Klassyky mehanikasy boýunça, eger $E > U_m$ bolsa, onda $R = 0$, $D = 1$ ýerine ýetmeli: barýer birkemsiz durydyr. (1.13)-den gelip çykyşy ýaly $|B|^2 \neq 0$, şonuñ üçin kwant mehanikasynda $R > 0, D < 1$: iki sredanyñ araçäginde ýagtylyk tolkunlarynyñ serpikdirilişi ýaly bölejikleriñ bölegi serpikýär.

Bölejikleriñ energiýasy $E < U_m$ bolsa, onda klassyky mehanikasy boýunça D=0, R=1, ýagny doly serpikme bolýar, üstesinede, şunlukda bölejikler düýbünden barýeriñ içine girmeýärler. Kwant mehanikasy bolsa şeýle netije getirýär: bölejikleriñ bir bölegi barýer arkaly geçýär. Dogrudanam, eger $E < U_m$ bolsa, onda döwülme görkezijisi "n_m" arassa hyýaly ululykdyr. Şonuñ üçin goý aýdaly

$$n_m = i|n_m| = i\sqrt{\frac{U_m - E}{E}} \qquad (1.15)$$

Şu añlatmany (1.12)-ä girizip, $|a|^2$ ululygy hasaplalyñ.

Onda

$$e^{ik_0 n_m l} >> 1, \left(e^{-ik_0 n_m l} << 1 \right),$$

şerti hasaba alyp, tapýarys:

$$D = |a|^2 = \frac{16|n_m|^2}{\left(1+|n_m|^2\right)^2} e^{-2k_0 n_m l}$$

Belgiläliñ

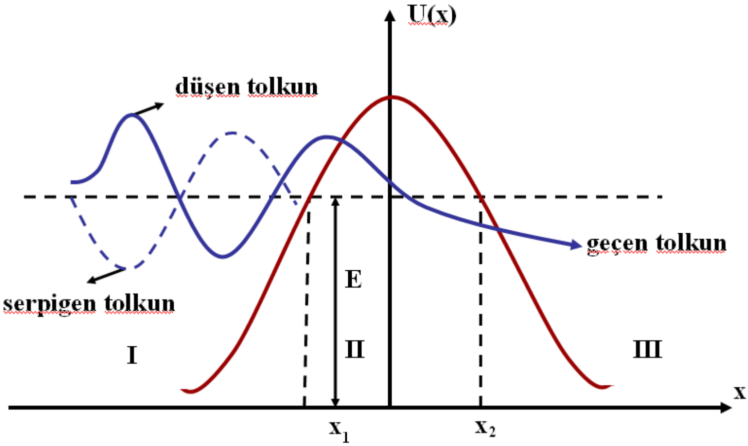
$$D_0 = \frac{16|n_m|^2}{\left(1+|n_m|^2\right)^2}$$

we k_0-yñ bahasyny göz öñüne tutup, alýarys:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2\mu(U_m - E)}l} \qquad (1.16)$$

Şeýlelikde, $E < U_m$ halda, klassyky mehanikasynyñ netijesiniñ tersine, bölejikler barýer arkaly geçýärler. Bölejikleriñ potensial barýer arkaly geçmeklik hadysasyna tunnel effekti diýilýär.

Ýeterlikli ýylmanak formaly erkin potensial barýeriñ shemasy 16-njy çyzgyda berilýär



16-nji çyzgy

Tunnel effektiniñ aýdyñ bahasy, dine D-niñ juda kiçi bolmadyk ýagdaýlarynda alynjakdygy şübhesizdir.

Başgaça aýdylanda

$$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2\mu(U_m - E)}\,l \approx 1,$$

bolmaly.

Tunnel effektine diñe mikroskopiki hadysalaryñ oblastynda duş gelinjekdigine göz ýetirmek kyn däldir.

Eger $U_m - E \sim 10^{-18} j$, $\mu \sim 10^{-3} kg$ we $l = 10^{-10} m$ diýip alynsa, onda (1.16)-dan $D \approx e^{-1}$ alynýar. Ýöne, eger $l = 0{,}01 m$ bolsa, onda şol formuladan $D \sim e^{-10^8}$ baha alynýar. Bölejikleriñ massasynyñ ulalmagy we U_m-iñ E-den artmagy D-ni ýene-de has köp kiçeldýärler.

Gönüburçly barýer üçin getirilip çykarylan durulyk koeffisiýenti üçin (1.16)-njy formulany, erkin formaly barýere umumylaşdyryp, şeýle ýazyp bolýar:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \cdot \int\limits_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu(U(x) - E)}\,dx}$$

Tunnel effektiniñ "paradoksy". Bölejikleriñ potensial barýerden geçmekleri bir-bada göräýmäge "paradoks" netije getirýän ýaly. Şeýle halyñ nähili ýagdaýda ýüze çykýanlygyny anyklalyñ. Barýeriñ içinde ýerleşen bölejikleriñ umumy E energiýasy barýeriň U_m beýikliginden kiçi, diýmek şeýle bölejikler otrisatel kinetik energiýa eýe bolmaly, sebäbi klassyky mehanikasynda doly energiýa kinetik we potensial energiýalaryň jemine deň:

$$\mathrm{E} = \frac{P^2}{2\mu} + U(x)$$

Şu ýerden görnüşi ýaly, $U(x) > E$ oblastda, $\frac{P^2}{2\mu} < 0$, bu manysyzdyr, sebäbi impuls hakyky ululykdyr.

Klassykyy mehanikasynda şu oblast bölejikler üçin ýapykdyr. Kwant mehanikasyna laýykda bolsa şu “ýapyk” oblastda hem bölejikleri tapyp bolýar. Onda kwant mehanikasy, bölejikleriň kinetik energiýasynyň otrisatel we impulsyň hyýaly bolup biljekdigi baradaky netije getirýän ýaly. Şeýle netije “tunnel effektiniň” paradoksy diýilýär.

Hakykatdan bu ýerde hiç hili paradoks ýok we ol netije nädogrydyr. Tunnel effekti – kwant hadysa, şonuň üçin ony esaslandyrmaga kwant mehanikasy nukdaýnazardan synanyşmaly. Umumy energiýany, kinetik we potensial energiýalaryñ jemi görnüşinde diñe klassyky mehanikasynda seredip bolýar. Diýmek, (1.17)-nji formula, bir wagtda kinetik we potensial energiýalary kesgitlenilýän ululyklary ýaly çaklaýar. Başgaça aýdylanda, bir wagtda $"x"$ koordinata we $"P"$ impulsa kesgitli bahalary ýükleýär, bu kwant mehanikasyna garşydyr. Kwant mehanikasynda doly energiýany kinetik we potensial energiýalary boýunça bölmekligiñ manysy ýok we şonuñ bilen birlikde hiç hili “paradoks” hem ýerlikli däldir.

§2 Çyzykly garmoniki ossilýator.

Umumy bellikler. Kwant mehanikasynyň esasynda potensial meýdanda ýerleşen mikrobölejikleriň anyk hereketlerine seretmeklige geçeliň. Klassyky mehanikasynyň has wajyp meseleleriniň biri bolup, käbir hereketsiz merkeziň golaýynda maddy nokadyň birölçegli hereketi baradaky mesele hyzmat edýär, üstesine-de, ony saklaýan güýç oňa çenli aralyga proporsionaldyr. Şeýle hereketi, formal taýdan garmoniki ossilýatorlaryň yrgyldylaryna ekwiwalent bolan, normal yrgyldylaryň toplumy ýaly seredip bolýar. Şeýle ýagdaýda, deňagramly ýerleşen ornunyň golaýynda, bölejik garmoniki yrgyldylara sezewar bolýar diýilýär, degişli sistemalara bolsa garmoniki ossilýatorlar diýlip at berilýär. Şeýle jynsly herekete, molekulalardaky we gaty jisimlerdäki atomlaryň yrgyldylaryny, sferiki atom ýadrolaryň üstüniň yrgyldylaryny we başgalary utgaşdyryp bolar.

Birölçegli garmoniki ossilýator baradaky mesele, nazary fizikasynyň wajyp meseleleriniň arasynda esasy orny eýeleýär. Garmoniki ossilýatoryň stasionar ýagdaýyny dikeltmeklige geçeliň.

Birölçegli kiçi yrgyldylara sezewar bolýan, μ-massaly bölejige seredeliň. Şeýle bölejigiň potensial energiýasy bellidir

$$U(x)=\frac{\mu\omega_0^2}{2}\cdot x^2$$ – bölejigi x aralyga gyşartmak üçin sarp edilen iş.

Bölejigiň P_x impulsa eýe bolýanlygy üçin ol kinetik energiýasyna eýedir.

$$T=\frac{P_x^2}{2\mu}$$

Şuňa degişlilikde ossilýatora Gamiltonyň funksiýasy ýazylýar

$$H = \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega_0^2}{2}x^2 \qquad (2.1)$$

Şundan görnüşi ýaly, garmoniki ossilýator idealizaşdyrylandyr, ýagny potensial energiýanyň bahasynyň görkezişine laýyklykda, deňagramly ýagdaýdan daşlaşdygyňça güýç çäksiz artýar.

Kwant mehanikasynda çyzykly ossilýator diýip, H operatory bilen beýan edilen sistema aýdylýar.

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega_0^2}{2}x^2 \qquad (2.2)$$

Çyzykly garmoniki ossilýatoryň stasionar ýagdaýlaryny tapmak maksady bilen, şu ýagdaýlar üçin Şrýodingeriň deňlemesini almalydyrys.

$$H\psi = E\psi \qquad (2.3)$$

Şu deňlemäni çözmeklik, ossilýatoryň E_n hususy energiýasyny we degişli hususy funksiýany tapmaklykdan ybaratdyr. (2.2)-ni (2.3)-e goýup, ossilýatoryň stasionar ýagdaýlary üçin, „x“-aňladylmada Şrýodingeriň deňlemesini alarys.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\mu\omega_0^2}{2}x^2\psi = E\psi\,,$$

ýa-da

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\cdot\left(E-\frac{\mu\omega_0^2}{2}x^2\right)\psi=0 \qquad (2.4)$$

Şu deňlemede ölçegsiz üýtgeýänlere geçeliň:

$$\xi=\frac{x}{x_0}; \qquad x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_0}}; \qquad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega_0}; \qquad (2.5)$$

Şu ýerden $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ ulylygy tapmaly. Onuň üçin $\frac{d\psi}{dx}$-i aşakdaky ýaly ýazalyň:

$$\frac{d\psi}{dx}=\frac{d\xi}{dx}\cdot\frac{d\psi}{d\xi}.$$

Onda $\xi=\sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}x$ ululykdan tapyp bolar.

$$\frac{d\psi}{dx}=\sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}\cdot\frac{d\psi}{d\xi},$$

we

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\frac{d}{dx}\cdot\frac{d\psi}{dx}=\frac{d}{dx}\cdot\left(\sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}\cdot\frac{d\psi}{d\xi}\right)=\sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}\cdot\frac{d}{d\xi}\cdot\frac{d\psi}{dx}=\sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}\cdot\frac{d}{d\xi}\left(\sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}\right)\cdot\frac{d\psi}{dx}=$$

$$=\frac{\mu\omega_0}{\hbar}\cdot\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \qquad (2.6)$$

(2.5) we (2.6) aňlatmalary (2.4)-e goýup alarys:

$$\psi''+(\lambda-\xi^2)\psi=0 \qquad (2.7)$$

(2.7) çyzykly garmoniki ossilýator üçin Şrýodingeriň deňlemesi we ol ikinji tertipli deňlemedir. Şu deňlemäniň $-\infty < \xi < +\infty$ interwalda gutarnykly, üznüksiz we birbahaly çözgüdini tapalyň. Şu deňlemäniň aşakdaky ýönekeý funksiýanyň kanagatlandyrýandygyna göz ýetirmek, kyn däldir:

$$\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Dogrydanam, şundan

$$\psi' = -\xi e^{-\xi^2/2},$$

we

$$\psi'' = -e^{-\xi^2/2} + \xi^2 e^{-\xi^2/2},$$

ýa-da

$$\psi'' = -\psi + \xi^2\psi,$$

ýa-da

$$\psi'' + \left(1-\xi^2\right)\cdot\psi = 0,$$

bu (2.7)-i bilen gabat gelýär, ýöne berlen ýagdaýda $\lambda = 1$.

Şeýlelikde, tükeniksizlikde boluşynyň aýratynlygyny hasaba alýan, (2.7)-iň umumy çözgüdini, şeýle görnüşde gözläp bileris:

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2}\,\vartheta(\xi) \qquad (2.8)$$

Şu ýerden

$$\psi'' = -e^{-\xi^2/2} \cdot \vartheta''(\xi) - 2\xi e^{-\xi^2/2} \cdot \vartheta'(\xi) - e^{-\xi^2/2} \cdot \vartheta(\xi) + \xi^2 e^{-\xi^2/2} \vartheta(\xi)$$

Onda (2.7) şeýle görnüşi alar:

$$\vartheta''(x) - 2\xi\vartheta' + (\lambda - 1)\vartheta = 0 \qquad (2.9)$$

Şu (2.9)-njy formulanyň çözgüdini derejeli hatar görnüşde gözläris:

$$\vartheta = \sum_k a_k \xi^k \qquad (2.10)$$

Şu ýerden aşakdaky önümleri tapalyň:

$$\vartheta' = \sum_k k a_k \xi^{k-1},$$

we

$$\vartheta'' = \sum_k k(k-1) a_k \xi^{k-2}$$

Onda, (2.9) aşakdaky görnüşi alar

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ k(k-1) a_k \xi^{k-2} - 2k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) a_k \xi^k \right\} = 0$$

Görnüşi ýaly, k-nyň bahasy 0-dan ∞-e çenli, şonuň üçin şu aňlatmanyň birinji çleninde k-ny (k+2)-ä çalyşyp bileris:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left\{(k+1)(k+2)a_{k+2}-2ka_k+(\lambda-1)a_k\right\}\xi^k=0,$$

ýa-da

$$(k+1)(k+2)a_{k+2}-2ka_k+(\lambda-1)a_k=0.$$

Şu ýerden a_k koefisiýentleri kesgitlemek üçin rekkurentli formulany alýarys

$$a_{k+2}=\frac{2k-(\lambda-1)}{(k+1)(k+2)}a_k \qquad (2.11)$$

Görnüşi ýaly, rekkurentli formula köpçleniň goňşy çlenlerini özara baglaşdyrýar.
(2.11)-dan gelip çykyşyna laýykda, (2.10) jem pytraýar, ýagny tükeniksiz artýar. Munuň ýerine ýetmezligi üçin haýsy hem bolsa bir çlende hataryň üzülmegi zerurdyr we ol λ-nyň aýratyn bahalarynda alnyp bilner, ýagny hut

$$\lambda=2n+1, \qquad n=0,1,2,... \qquad (2.12)$$

Başga tarapdan $\lambda = \dfrac{2E}{\hbar\omega_0}$

Soňky iki aňlatmalardan, çyzykly garmoniki ossilýatoryň mümkin bolan hususy energiýasynyň aşakdaky formula arkaly kesgitlenilýändigine, gelýäris

$$E_n = \hbar\omega_0\left(h + \frac{1}{2}\right), \qquad (2.13)$$

Şundan, ossilýatoryň energiýasynyň diňe diskret bahalara eýe bolup biljekdigi gelip çykýar. Kwant derejeleriniň tertibini kesgitleýän „n“-sana esasy kwant sany diýilýär.

Eger, n=0 bolsa, onda (2.13)-den alarys:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \qquad (2.14)$$

Bu esasy ýagdaýyň energiýasy we oňa nolunjy energiýa diýilýär. Nolunjy energiýa ossilýatoryň özi bilen aýrylmaz baglydyr. Başgaça aýdylanda, ol ossilýatordan bölünip bilinmeýär, ýagny ol ossilýatoryň eýe bolup biljek minimal energiýasydyr.

Nolunjy energiýanyň barlygy kesgitsizlik gatnaşygyndan hem gelip çykýar:

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \qquad (2.15)$$

Eger $\bar{x}=0$ (we p=0) bolsa, onda

$$\overline{x^2}\cdot\overline{p^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}. \qquad (2.16)$$

Ossilýatoryň energiýasynyň orta bahasy deňdir

$$\bar{E}=\frac{\overline{P}^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega_0^2}{2}\overline{x^2} \qquad (2.17)$$

(2.16) gatnaşykdan $\overline{p^2}$ üçin bahany (2.17)-e goýup alarys

$$\bar{E}\geq\frac{\hbar^2}{8\mu\overline{x^2}}+\frac{\mu\omega_0^2}{2}\overline{x^2} \qquad (2.18)$$

Şu taýdan eýýam aýdyň görnüşi ýaly, $\overline{x^2}$ ululygyň hiç bir bahasynda E energiýa nola öwrülip bilmeýär. Dogrydanam, $\overline{x^2}=0$ bahasynda ikinji çlen nola deň, birinjisi bolsa tükeniksize öwrülýär we tersine. Şeýlelikde, noldan üýtgeşik $E_{\min}$ gös-göni (2.16)-nji kesgitsizlik gatnaşygy bilen baglydyr.

Indi, $\overline{x^2}$ ululygyň nähili bahasynda (2.18)-nji aňlatmanyň minimal bolýandygyny tapalyň. Onuň üçin şu funksiýadan $\overline{x^2}$ boýunça alnan önümi nola deňleşdirip alýarys:

$$\frac{\partial \overline{E}}{\partial \overline{x^2}} = \frac{\mu\omega_0^2}{2} - \frac{\hbar^2}{8\mu} \cdot \frac{1}{\left(\overline{x^2}\right)^2} = 0,$$

şu ýerden $\quad \overline{x}^2 = \dfrac{\hbar}{2\mu\omega_0}$.

Şu bahany (2.18)-e goýup, alarys:

$$\overline{E}_{\min} = \frac{\hbar\omega_0}{2},$$

bu öz gezeginde doly suratda E_0 üçin baha bilen gabat gelýär. Diýmek, nolunjy energiýa kesgitsizlik gatnaşygy bilen ylalaşýan iň kiçi energiýadyr.

Kiçi yrgyldylara sezewar bolýan bölejiklere mysal bolup, molekulada ýa-da gaty jisimde atomlary görkezmek bolar. Atomlaryň nolunjy energiýasynyň we nolunjy yrgyldysynyň barlygyny, kristalda ýagtylygyň dargadylmasyna seretmek ýoly bilen, tejribede subut edilýär. Ýagtylygyň dargamagy atomlaryň yrgyldylary bilen şertlendirilýär. Temperaturanyň peselmeginde yrgyldynyň amplitudasy, klassiki nazaryýete laýykda, çäksiz azalmaly, şonuň bilen birlikde bolsa ýagtylygyň dargamasy-da ýitmeli. Şol bilr babatda tejribäniň

görkezişi ýaly, temperaturanyň peselmegi boýunça ýagtylygyň dargamasynyň intensiwligi käbir çäkli baha ymtylýar, bu öz gezeginde absolýut nolda atomlaryň yrgyldylarynyň gutarmaýandyklaryny aňladýar. Şu fakt nolunjy yrgyldynyň barlygyny subut edýär.
Indi, çyzykly garmoniki ossilýatoryň hususy funksiýasyny tapmaklyga geçeliň. $\lambda = 2n+1$ üçin (2.11)-nji koefisiýentli, (2.10)-njy köpçlen Çebyşewiň-Ermitiň köpçleni ady göterýär we $H_n(\xi)$ arkaly belgilenýär. Ol, $\lambda = 2n+1$ üçin (2.9)-njy deňlemäni kanagatlandyrýar, ýagny

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0. \qquad (2.19)$$

Şu deňlemäni aşakdaky köpçleniň kanagatlandyrýandygyny barlamak ýeňildir:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} \cdot e^{-\xi^2} \qquad (2.20)$$

(2.20)-niň hakykatdan hem (2.19)-yň çözgüdidigi aşakdaky tablisadan görünýär.

N	$H_n(\xi)$	$H_n'(\xi)$	$H_n''(\xi)$	$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0$

0	1	0	0	$0-2\xi\cdot 0+2\cdot 0\cdot 1=0$
1	2ξ	2	0	$0-2\xi\cdot 2+2\cdot 1\cdot 2\xi=0$
2	$4\xi^2-2$	8ξ	8	$8-2\xi\cdot 8\xi+2\cdot 2(4\xi^2-2)=0$
3	$8\xi^3-12\xi$	$24\xi^2-12$	48ξ	$48\xi-2\xi\left(24\xi^2-12\right)+2\cdot 3\cdot\left(8\xi^3-12\xi\right)=0$

Şeýlelikde, garmoniki ossilýator üçin Şrýodingeriň deňlemesiniň çözgüdini, (2.8) we (2.20) aňlatmalara laýyklykda, aşakdaky görnüşde alyp bileris:

$$\psi_n(\xi)=c_n e^{-\xi^2/2}\cdot H_n(\xi) \qquad (2.21)$$

bu ýerde c_n -normirleýji köpeldiji.

Şu c_n ululygy normirleme şertden kesgitläp bolýar,ol şeýle ýazylýar:

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

(2.5)-e görä $\xi=\dfrac{x}{x_0}$, şonuň üçin $dx=x_0 d\xi$.

Diýmek,

$$x_0\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(\xi)\psi_n(\xi)d\xi=1 \qquad (2.22)$$

(2.21)-i (2.22)-ä goýup, alarys:

$$x_0\cdot C_n^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}H_n(\xi)\cdot H_n(\xi)d\xi=1 \qquad (2.23)$$

(2.20)-ni aşakdaky ýaly göçüreliň

$$e^{-\xi^2} H_n(\xi) = (-1)^n \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

Onda (2.23) şeýle görnüşe geçer

$$\frac{1}{x_0 C_n^2} = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} H_n(\xi)\, d\xi \,,$$

şuny n-gezek integrirläp, alýarys

$$\frac{1}{x_0 C_n^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n}\,, \qquad (2.24)$$

ýöne,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$$

we

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n \cdot n!\,,$$

onda (2.24)-i aşakdaky görnűşi alar:

$$\frac{1}{x_0 C_n^2} = 2^n n! \sqrt{\pi}\,,$$

şu ýerden

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}}$$

Onda, çyzykly garmoniki ossilýatoryň hususy funksiýasy, ξ-aňladylmada şeýle görnüşde

$$\psi_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0\sqrt{\pi}}}\cdot e^{-\xi^2/2}\cdot\frac{d^n}{d\xi^n}\cdot H_n(\xi),$$

ýa-da

$$\psi_n(\xi)=\frac{(-1)^2}{\sqrt{2^n n! x_0\sqrt{\pi}}}\cdot e^{\xi^2/2}\cdot\frac{d^n}{d\xi^n}\cdot e^{-\xi^2} \qquad (2.25)$$

(2.25)-den birnäçe hususy funksiýalary göçüreliň:

$$\psi_0(\xi)=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\cdot e^{-\xi^2/2}, \qquad n=0;$$

$$\psi_1(\xi)=\frac{2}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\cdot e^{-\xi^2/2}\cdot\xi, \qquad n=1;$$

$$\psi_2(\xi)=\frac{1}{\sqrt{8x_0\sqrt{\pi}}}\cdot e^{-\xi^2/2}\cdot\left(4\xi^2-2\right), \quad n=2.$$

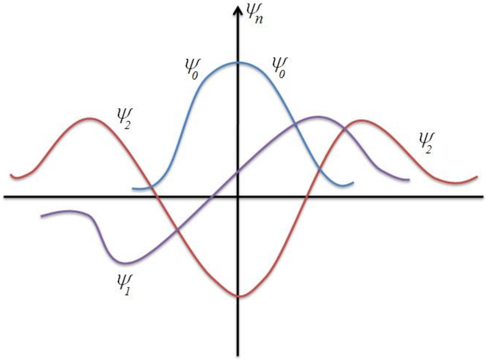
Şeýlelikde, çyzykly garmoniki ossilýatoryň üç stasionar ýagdaýlarynyň hususy funksiýalary degişlilikde „x”-aňladylmasynda ýazylýarlar:

$$\psi_0(x)=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\cdot e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \qquad n=0;$$

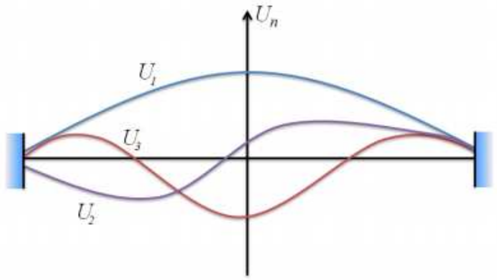
$$\psi_1(x)=\frac{2}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\cdot e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\cdot\frac{x}{x_0}, \qquad n=1;$$

$$\psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{8x_0\sqrt{\pi}}}\cdot e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}\left(4\frac{x^2}{x_0^2}-2\right), \quad n=2.$$

Hususy funksiýalaryň şu bahalaryndan gelip çykyşyna laýykda, $\psi_0(x)$ funksiýa, $x=\pm\infty$-den başga, hiç ýerde nola öwrülmeýär (n=0); $\psi_1(x)$ bolsa x=0 (n=1) bolanda nola öwrülýär. Tolkun funksiýanyň nola öwrülýän ýerine düwün diýilýär. $\psi_2(x)$ funksiýa $x = \pm \frac{x_0}{\sqrt{2}}$ bahalarda bola öwrülýär we iki düwüne eýedir (n=2). Görnüşi ýaly, düwünleriň sany funksiýalaryň „n“ tertibine deňdir. Şu häsiýet islendik „n“ üçin dogrydyr. Diýmek, esasy kwant sany hususy funksiýalaryň düwünleriniň sanyna deň. Şu funksiýalar 1-nji çyzgyda suratlandyrylýar. Hususy $\psi_n(x)$ funksiýalaryň görnüşleri, uçlary berkidilen kirişiň yrgyldysyny suratlandyrýan, $U_n(x)$ funksiýanyň görnüşine meňzeşdir (2-nji çyzgy).

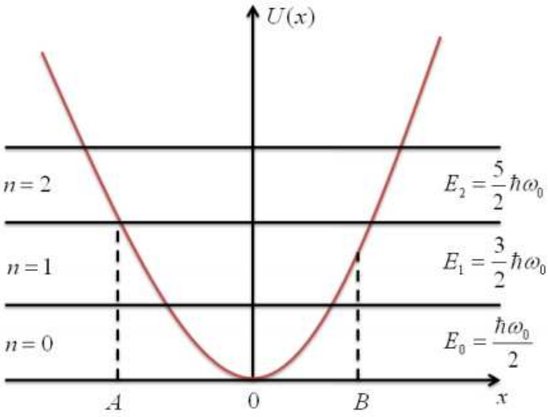


1-nji çyzgy



2-nji çyzgy

Deňeşdirmek üçin, 2-nji çyzgyda, $U_n(x)$ funksiýany esasy ton üçin (n=0), birinji oberton (n=1) we ikinji oberot (n=2) üçin getirilýär. Kirişiň yrgyldylarynyň we ossilýatoryň tolkun funksiýalarynyň arasyndaky tapylýan meňzeşlikler tötänden däldir. Ol iki ýagdaý bilen şertlendirilýär. Birinjiden, iki hallarda şol bir ölçeg bilen iş salyşylýar. Ikinjiden, kirişiň yrgyldysy – bu hususy yrgyldylar.



3-nji çyzgy

Ossilýatoryň kwant ýagdaýlary barada doly maglumat almak üçin, 3-nji çyzgyda, ossilýatoryň potensial funksiýasyny getireliň. Şeýle diagrammalar, hereketini klassiki suraty bilen ýönekeý deňeşdirmäni ýerine ýetirmeklige mümkinçilik berýär. Mysal üçin, E_1 derejä seredeliň. Klassiki mehanikasyna laýyklykda, E_1 energiýaly bölejik diňe AB oblastda tapylyp bilner. Dogrydanam, A we B nokatlarda potensial energiýa dola deň. Şol nokatlarda kinetik energiýa T nola deň, sebäbi

$$E=T+U, \quad T=E-U \qquad (2.26)$$

A we B nokatlary öwrülme nokatlarydyr. OA=OB ululygyň, E_1 energiýaly bölejigiň yrgyldysynyň amplitudasydygy şübhesizdir.

Bölejigi x, x+dx oblastda tapmaklygyň $\omega(x)dx$ ähtimallygyny klassykyy mehanikasy boýunça hasaplalyň. Şu ähtimallyk, ϑ tizlik bilen hereket edip, dx bölegi geçýän dt wagta proporsionaldyr. Eger, yrgyldynyň periody $T=\frac{2\pi}{\omega_0}$ bolsa, onda ýazyp bileris:

$$\omega_{kl}(x)\,dx=\frac{dt}{T}=\frac{\omega_0}{2\pi}\cdot\frac{dx}{\vartheta} \qquad (2.27)$$

Tizligi koordinatyň funksiýasy ýaly aňladyp, eýe bolarys

$$x=a\sin\omega_0 t\,, \qquad (2.28)$$

bu ýerde $a=\sqrt{\frac{2E}{\mu\omega_0^2}}$ -yrgyldynyň amplitudasy. (2.28)-den alýarys

$$\vartheta=a\omega_0\cos\omega_0 t=a\omega_0\sqrt{1-\sin^2\omega_0 t}=a\omega_0\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}$$

Diýmek,

$$\omega_{kl}(x)dx=\frac{1}{2\pi a}\cdot\frac{dx}{\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}}\quad,\quad -a\le x\le a \qquad (2.29)$$

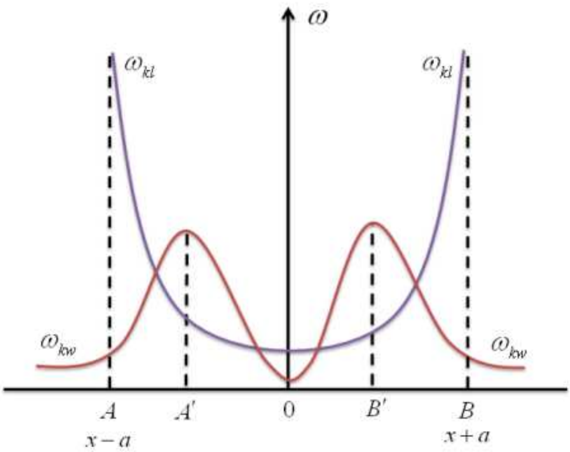
Kwant mehanikasy boýunça (n=1) $x, x+dx$ oblastda bölejigi tapmaklygyň ähtimallygy, deňdir:

$$\omega_{kw}(x)\,dx=\psi_1^2(x)\,dx$$

ýa-da

$$\omega_{kw}(x)dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} \frac{x^2}{x_0^2} \frac{dx}{x_0} \qquad (2.30)$$

(2.29) we (2.30) ähtimallyklar 4-nji çyzgyda suratlandyrylýar.



4-nji çyzgy

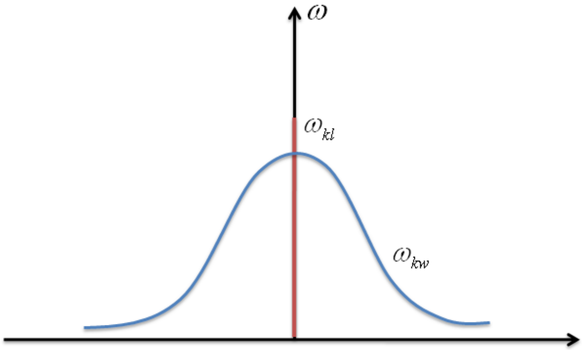
Eger, iň kiçi energiýaly ýagdaýa seredilse, onda kwant we klassykyy hallaryň arasyndaky aýratynlyk aýratyn güýçli bellenilýär. Klassykyy nazaryýeti boýunça ossilýatoryň iň kiçi energiýasy E=0. Şeýle halda bölejik deňagramly ýagdaýda ýerleşýär. Ähtimallyk ω_{kw} 5-nji çyzgyda görkezilişi ýalydyr. Ol x=0 nokatdan başga ýerde nola deň. Kwant mehanikasy boýunça ossilýatoryň iň kiçi energiýasy

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \neq 0$$

Şeýle halda ähtimallyk deňdir:

$$\omega_{kw}dx = \psi_0{}^2(x)dx = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{x^2}{x_0^2}}$$

Bu-da 5-nji çyzgyda getirilýär.



5-nji çyzgy

§3 Energetiki aňladylmadaky ossilýator.

Bagly däl üýtgeýän ululyk diýip, ossilýatoryň E energiýasy alnan aňladylma seredeliň. Şu aňladylmada doly energiýanyň operatory H diagonal matrisa bilen suratlandyrylýar we onuň matrisaly elementleri

$$H_{mn} = E_n \cdot \delta_{mn}, \qquad (3.1)$$

bu ýerde $E_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)$, n=0,1,2,... (3.1)-i aýdyň görnüşde ýazalyň

$$H = \begin{vmatrix} H_{00} & H_{01} & H_{02} & \dots \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} & \dots \\ H_{20} & H_{21} & H_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} E_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & E_1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & E_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3\hbar\omega_0}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega_0}{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

Ossilýatoryň islendik $\psi(x,t)$ ýagdaýyny stasionar ýagdaýlaryň superpozisiýasy ýaly alyp bolar:

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n(0)\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = \sum_n C_n(t)\psi_n(x)$$

Ähli C_n toplumy „E“-aňladylmasynda tolkun funksiýasydyr. $\psi(x,t)$ ýagdaýda E_n-iň bahasyny tapmaklygyň ähtimallygy deňdir:

$$\omega(E_n) = |C_n(t)|^2 = |C_n(0)|^2$$

Şu ähtimallyk wagta bagly bolmaýar, bu öz gezeginde, energiýanyň hereketiň integralydygyna degişlidir.

Garmoniki ossilýatoryň şöhlelenme problemasyny kwant mehanikasynyň esasynda seredeliň. Şol sebäpli, x koordinatyň operatoryny „E“-aňladylmada tapalyň. Umumy nazaryýet boýunça ol

$$x_{mn}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\cdot x\cdot\psi_n dx,\qquad (3.2)$$

Elementli matrisa bilen suratlandyrylmaly. Şu ýere

$$\psi_n(\xi)=e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi),\ \psi_m^*=e^{-\xi^2/2}H_m^*(\xi),\ \xi=\frac{x}{x_0},$$

funksiýalary goýup we $H_m^*(\xi)=H_m(\xi)$-digini göz öňünde tutup, alýarys:

$$x_{mn}=x_0\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2/2}H_m(\xi)\cdot\xi\cdot e^{-\xi^2/2}H_n d\xi=x_0\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}\cdot H_m(\xi)\cdot\xi\cdot H_n(\xi)d\xi$$

(3.3)

Integral hasaplanylyp bilner.

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}\cdot H_m(\xi)\cdot\xi\cdot H_n(\xi)d\xi=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{n}{2}}, & m=n-1;\\ \sqrt{\dfrac{n+1}{2}}, & m=n+1;\\ 0, & galan\ \ hallarda\end{cases}$$

Şu netijäni ulanyp, δ_{mn} şekiliň kömegi bilen (3.3)-i şeýle görnüşde ýazyp bolar:

$$x_{mn}=x_0\left\{\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right\}\qquad (3.4)$$

Şu aňlatmadan gelip çykyşy ýaly, şunlukda matrisaly elementleri, tükeniksiz diagonalyň golaýyndaky matrisany emele getirýär. Şuňa göz ýetirmek üçin, aýdyň görnüşde x-iň matrisasyny getireliň:

$$x = \begin{vmatrix} x_{00} & x_{01} & x_{02} & x_{03} & \dots \\ x_{10} & x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots \\ x_{30} & x_{31} & x_{32} & x_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = x_0 \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

Şeýlelikde, diňe m=n-1 ýa-da m=n+1 üçin elementleri noldan tapawutly bolup bilerler, ýagny „n“ kwant sany üçin „saýlama düzgüni“ aşakdaky formula arkaly kesgitlenilip bilner

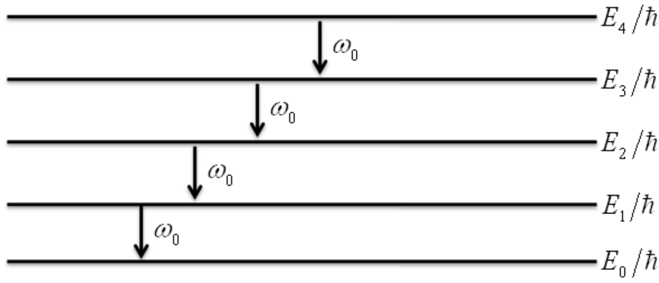
$$n - m = \Delta n = \pm 1,$$

bu, diňe goňşy derejeleriň arasyndaky geçişleriň bolup biljekdikleriniň şaýadydyr.

Şöhlelenme ýygylygy üçin, doly suratda klassiki bilen gabat gelýän aňlatmany tapýarys:

$$w_{n,n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} = \frac{\hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_0\left(n - 1 + \frac{1}{2}\right)}{\hbar} = \omega_0 .$$

Energetiki derejeler we rugsat edilen geçişler aşakda getirilýär.



Belli bolşy ýaly, spontanly şöhlelenme diňe ýokardan aşak ($E_n > E_{n-1}$) geçiş amala aşyrylanda mümkindir, şonuň üçin, diňe kwant sanynyň uly oblastynda ($n >> 1$), haçan-da $E_n >> E_0$, garmoniki ossilýatoryň şöhlelenmesi klassiki hem-de kwant nazaryýetlerde praktiki taýdan şol bir netijäni berer. Has ýokary energetiki derejelere $n \to n+1$, geçişler ýa-da mejbury ýa-da spontan geçişlerde mümkindir, ýagny haçan-da garmoniki ossilýatordaky energiýanyň ýitgisi birwagtda ýokary energiýanyň goýberilmegi, meselem, atomlarda elektronlaryň geçişlerinde, özeni doldurylýar.

§4. Merkezi güýç meýdanda bölejigiň hereketi

Merkezi güýç meýdan halda, potensial energiýa diňe käbir merkeze çenli „r“ aralyga bagly diýip düşünilýär we güýç radius boýunça ugrukdyrýar. Şeýle meýdanda ýerleşen sistemalaryň özlerini alyp baryşlarynyň kanunalaýyklary, bir bölejigiň kwant mehanikasynyň esasyny emele getirýär. Mysal üçin, atomda elektronyň hereketiniň aýratynlygy baradaky meseläni, merkezi güýç meýdanda bölejigiň hereketiniň meselesine eltip bolýar. Merkezi güýç meýdany, zarýadlaryň simmetrik paýlanmaklary bilen häsiýetlendirilýär, diýmek, mesele sferiki koordinatalarda seredilmelidir. Merkezi güýç meýdanda hereketiň mukdarynyň momenti uly rol oýnaýar we şol sebäpli deňlemede $\widehat{M^2}$-ly çlen bolar. Mundan başgada, $\widehat{M} = \left[\hat{\vec{r}}\hat{\vec{P}}\right] = 0$, sebäbi $\vec{r}$ we $\vec{P}$ bir çyzyk boýunça ugrukdyrylýar.

Ilki bilen şeýle mesele üçin gamiltonianyň görnüşini tapalyň. Belli bolşy ýaly, kinetik energiýanyň operatory

$$\hat{T} = \frac{\widehat{P^2}}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2. \tag{4.1}$$

Sferiki koordinat sistemasynda

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\cdot\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\nabla^2\theta,\varphi}{r^2}\right). \tag{4.2}$$

Bu ýerde

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

$$\widehat{M^2} = -\hbar^2\nabla^2_{\theta,\varphi}. \qquad (4.3)$$

(4.1), (4.2) we (4.3) aňlatmalardan eýe bolarys:

$$\hat{T} = \widehat{T_r} + \frac{\widehat{M^2}}{2\mu r^2} \ ,$$

bu ýerde

$$\widehat{T_r} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right).$$

Umumy energiýanyň operatory deňdir:

$$\widehat{H} = \hat{T} + \widehat{U}(r).$$

Şonuň üçin, seredilýän mesele üçin $\widehat{H}$ aşakdaky ýaly ýazylar:

$$\widehat{H} = \widehat{T_r} + \frac{\widehat{M^2}}{2\mu r^2} + \widehat{U}(r), \qquad (4.4)$$

Bu ýerde, $\widehat{T_r}$ operatory radius wektory boýunça herekete degişli kinetik energiýanyň operatory, $\frac{\widehat{M^2}}{2\mu r^2}$ operatory bolsa transwersal (ýa-da, merkezden gaçýan) herekete degişli kinetik energiýanyň operatory ýaly hasap edip bolar.

$U = U(r)$ meýdanda hereket edýän bölejikleriň stasionar ýagdaýlaryny tapalyň.

Şeýle halda Şrýodingeriň deňlemesini alýarys:

$$\widehat{T_r}\psi + \frac{\widehat{M^2}}{2\mu r^2}\psi + \widehat{U}(r)\psi = E\psi \quad (4.5)$$

Şu deňlemäniň çözgüdini, ýagny ψ funksiýany, r, θ, φ sferiki koordinatlarda gözläris. Tolkun funksiýanyň birbahaly, üznüksiz we gutarnykly çözgütlerini üýtgeýänleriň üýtgemeklerini ähli oblastynda, ýagny

$$0 \le r \le \infty, 0 \le \theta \le \pi,\ \ 0 \le \varphi \le 2\pi$$

oblastda tapmaklyk talap edilýär.

$\widehat{H}$ we $\widehat{M^2}$ operatorlary kommutirleşýärler, onda olaryň umumy hususy funksiýalary bolmaly, şol sebäpli ψ üçin ilkinji deňlemäni aşakdaky görnüşde ýazyp bolar:

$$\widehat{M^2}\psi = M^2\psi\ , \qquad (4.6)$$

Bu ýerde, M^2 ululyk $\widehat{M^2}$ operatoryň hususy bahalary we ol şeýle kesgitlenýär:

$$\left|\widehat{M^2}\right| = \hbar^2 l(l+1)\ ,$$

l=0,1,2,...., (n-1).

Onda (4.5) göçürilip biliner:

$$\widehat{T_r}(r)\psi + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\psi + \widehat{U}(r)\psi = E\psi \qquad (4.7)$$

Şu deňleme aýdyň diňe bir „r“ üýtgeýäni saklaýar. Şonuň üçin (4.7)-ni üýtgeýänleri bölmek usuly arkaly çözeris:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r) \quad Y_{l,m}(\theta,\varphi) \qquad (4.8),$$

Bu ýerde R(r) - radially bölek, $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$- burçly bölek we $\widehat{M^2}$ - yň hususy funksiýasy.

(4.8) - i (4.7)-ä goýup we $Y_{l,m}$-e bölüp alýarys:

$$\widehat{T_r}R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\cdot R + U(r)R = ER \qquad (4.9),$$

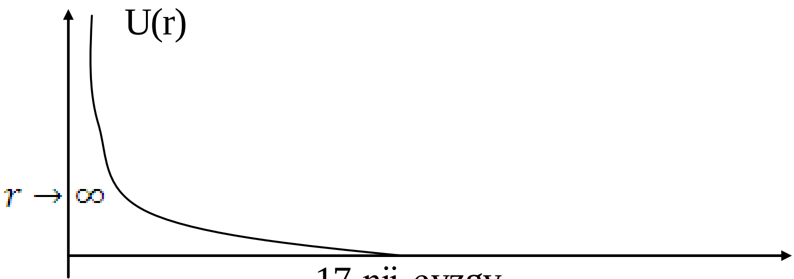
Bu radial funksiýasy üçin Şrýodingeriň deňlemesi.

$\widehat{M^2}$ we $\widehat{M_z}$ operatorlary özara kommutirleşýärler we şonuň üçin birwagtda ölçenilýän ululyklaryň hataryna girýärler. „E“ energiýanyň mümkinli bahalary (4.9)-dan kesgitlenilýär we U(r)-iň görnüşine baglydyr. Mundan başga-da, olar $\widehat{M^2}$ -a (l sany arkaly) bagly bolup bilerler, ýöne olar $\widehat{M_z}$ -e (we, diýmek, „m“ kwant sana) bagly bolup bilmeýärler, sebäbi $\widehat{M_z}$ operatory (4.9)-a girmeýär. Bu ähli ugurlar fiziki deňhukukly bolan meýdanyň merkezi simmetrikligi bilen düşündirilýär. Şeýlelikde, E energiýa U(r)-e bagly we şonuň üçin güýç meýdanyň görnüşini giňişleýin kesgitläliň.

Fiziki sistemalary üçin tükeniksiz uly aralykda özaratäsiri nola ymtylýar, bu bolsa $r \to \infty$ bolanda U(r) asimptotiki hemişelik baha eýe bolýandygyny aňladýar, ýagny

$$U(r) = const = c, \tag{4.10}$$

bu ýerde, c - erkin hemişeligi bolup, tükeniksizlikde potensiýal energiýanyň derejesini kesgitleýär (17-nji çyzgy).



17-nji çyzgy.

Şrýodingeriň (4.9)-njy deňlemesiniň çözgüdi doly energiýanyň U(x) - den ululygyna ýa-da kiçiligine bagly. „c“ erkin ululyk, şonuň üçin c=0 diýip hasap ederis we iki ýagdaýy, $E > 0$ we $E < 0$ tapawutlandyrýarys. Goý, mundan başga-da merkezi güýjüň golaýynda $(r \to 0)$, U(r)-iň görnüşi şeýle kesgitlenilýär diýeliň:

$$U(r)_{r\to\infty} = \frac{A}{r^{\alpha}}\ , \qquad \alpha = 2, \tag{4.11}$$

Ýagny, nolda U(r) tertibi ikiden kiçi bolan polýusa eýedir. Meselem, eger elektron atom ýadrosynyň meýdanynda hereket etse, onda kiçi aralyklarda şu elektronlaryň täsiri ujypsyzdyr, esasy meýdan kulonly meýdan bolar we şeýle meýdanda potensiýal energiýa $\frac{A}{r}$ görnüşdedir.

Şeýlelikde, (4.9)-yň çözgüdini aşakdaky görnüşde alyp bilýäris:

$$R(r) = \frac{U(r)}{r}. \tag{4.12}$$

Köpeltmek hasylyny tapalyň:

$$T_r R = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{U(r)}{r}\right)\right] = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{d^2U}{dr^2}. \tag{4.13}$$

(4.12)-nji we (4.13)-nji aňlatmalary (4.9)-a goýup alarys:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r}\frac{d^2U}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\frac{U(r)}{r} + U(r)\frac{u(r)}{r} = E\frac{u(r)}{r} \qquad ,$$

ýa-da

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}u + Uu = Eu, \tag{4.14}$$

$r \to \infty$ bolanda $\frac{1}{r^2}$ we U(r) çlenleri inkär edip (sebäbi, U(r)=c=0) bilýäris, onda

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{d^2u}{dr^2} = EU \quad (4.15)$$

Belgilenmeleri girizeliň:

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad E > 0 \text{ üçin,}$$

we

$$\lambda^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad E < 0 \text{ üçin.}$$

Onda (4.15)-den iki deňleme alynýar:

$$\left.\begin{aligned} \frac{d^2u}{dr^2} &= -k^2u, \\ \frac{d^2u}{dr^2} &= \lambda^2 u. \end{aligned}\right\} \quad (4.16)$$

Şu deňlemeleriň çözgütleri aşakdakylar bolup biler:

$$\left.\begin{aligned} u &= c_1 e^{ikr} + c_2 e^{-ikr}, \quad E > 0 \\ u &= c_1 e^{-\lambda r} + c_2 e^{\lambda r}, \quad E < 0 \end{aligned}\right\} \quad (4.17)$$

Onda (4.12)-nji çözgüdi aşakdaky ýaly ýazyp bileris:

$$\left.\begin{aligned} R &= c_1 \frac{e^{ikr}}{r} + c_2 \frac{e^{-ikr}}{r}, \quad E > 0 \\ R &= c_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r} + c_2 \frac{e^{\lambda r}}{r}, \quad E < 0 \end{aligned}\right\} \quad (4.18)$$

$E > 0$ halda, c_1 we c_2 hemişelikleriň islendik bahalarynda, çözgüt R gutarnykly we üznüksiz, şeýle halda, R-iň bahasyndan görnüşi ýaly, çözgüt duşuşýan we aýrylyşýan sferiki tolkunlaryň superpozisiýasydyr.

Bölejigiň r we r+dr interwalda boljakdygynyň ähtimallygyny tapalyň. Şu ähtimallyk $|R|^2$ we şarly gatlagyň göwrümine $4\pi r^2 dr$ proporsional bolar, ýagny

$$w(r)dr = |R|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi \left|c_1 e^{ikr} + c_2 e^{-ikr}\right|^2 dr.$$

Şeýle ýagdaýlar klassykyy mehanikasynda aperiodiki orbitalara degişlidirler, ýagny bölejik tükeniksizden güýç merkeze hereket edýär we ýene-de tükeniksize gidýär. Şeýlelikde, seredilýän ýagdaý stasionar, onda gelýän bölejikleriň akymy gidýän bölejikleriň akymyna deň bolmaly. Bu öz gezeginde, gelýän we gidýän tolkunlaryň c_1 we c_2 amplitudasynyň modul boýunça deň bolmalydyklaryny aňladýar.
Goý,

$$c_1 = \frac{1}{2i} A e^{i\alpha}, \qquad c_2 = -\frac{1}{2i} A e^{-i\alpha},$$

bu ýerde A we α hakyky ululyklar, onda $E > 0$ üçin çözgüdi göçürip bileris:

$$R = \frac{1}{2i} A e^{i\alpha} \cdot \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{1}{2i} A e^{-i\alpha} \frac{e^{-ikr}}{r} = \frac{A}{r} \cdot \frac{e^{+i(\alpha+kr)} - e^{-i(\alpha+kr)}}{2i} = A \frac{\sin(kr+\alpha)}{r}$$

ýagny durujy sferiki tolkunlary ýaly alyp bolýar.
$E < 0$ bolan halda, R üçin (4.18)-nji aňlatmada $c_2 = 0$ diýip hasap etmeli, ýagny (4.9)-njy çözgüt

gutarnykly we birbahaly bolmaly. Ters ýagdaýda $r \to \infty$ bolanda R çözgüt ∞ bolýar.

Şol sebäpli gerekli çözgüt bolýar:

$$R = c_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r},$$

Şeýle ýagdaý üçin ähtimallyk:

$$\omega(r)dr = 4\pi|c_1|^2 e^{-2\lambda r} dr$$

„r“-iň uly bahalarynda bölejigi tapmaklygyň ähtimallygy nola ymtylýar, ýagny bölejigi diňe güýç merkeziniň golaýynda tapyp bolýar. Şeýle ýagdaýlar klassyky mehanikasynda periodiki orbitalara degişlidirler, bölejik merkeziň golaýynda hereket edýär.

Umuman jemläp aýdylanda, $E > 0$ halda energiýa kwantlanmaýar, ýagny 0-dan $+\infty$-e çenli ähli bahalary alýar; $E < 0$ halda energiýanyň mümkin bahalarynyň diskret spektri alynýar. Şeýle ýagdaýda kwant derejeleriniň sistemasy alynýar.

§5. Kulon meýdanyndaky bölejigiň hereketi.

Merkezi-simmetrik meýdandaky hereketleriň wajyp ýagdaýyna kulon meýdanyndaky hereket girýär, onda potensial energiýa deňdir:

$$U = \pm \frac{\alpha}{r},$$

bu ýerde α-položitel hemişeligi.
Ýokardaky aňlatmada, „-“ -kulonly çekişme degişli, „+“-bolsa kulonly itişme degişli. Şeýle meýdanlarda elektronlaryň hereketlerine mysal edip, wodorodyň H atomynda , geliýniň He^+ ionynda, ikikratnyýly ionizirlenen Li^{++} litiýde we şuňa meňzeş, wodorodameňzeş diýip atlandyrylýan atomlardaky elektronyň hereketi seredilip biliner.

Ýadronyň zarýadyny „+eŽ“ arkaly belläp, bu ýerde „e“-elementar zarýad, ž bolsa Mendeleýewiň sistemasynda ýadronyň tertibi, şeýle ýadronyň meýdanynda Kulonyň kanuny boýunça elektronyň potensial energiýasy üçin, alarys:

$$U(r) = -\frac{\check{z}e^2}{r} \qquad (5.1)$$

Elektronyň seredilýän hereketi üçin kwant derejeleri tapalyň. Şu maksat üçin, radial funksiýasy R üçin Şrýodingeriň deňlemesi çözülmeli.
Eger

$$R = \frac{U}{r}$$

diýlip alynsa, onda aşakdaky deňleme alynýar:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}u + Uu = Eu \qquad (5.2)$$

ýa-da (5.1)-iň esasynda (5.2)-ni aşakdaky ýaly göçürip bileris:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}u-\frac{Že^2}{r}u=Eu \qquad (5.3)$$

Seredilýän ýagdaý çekişme degişli, onda elektron, $E>0$ bolanda üznüksiz spektre we $E<0$ bolanda diskret spektre eýe bolýar. Diskret spektri we degişli hususy funksiýany R tapalyň.

(5.3) - nji deňlemede aşaky ölçegsiz ululyklara geçeliň:

$$\rho=\frac{r}{a} \qquad we \qquad \varepsilon=\frac{E}{E_1}\ , \qquad (5.4)$$

bu ýerde, $a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}=0{,}529\cdot 10^{-10}$m - atomyň ölçegi, ýagny uzynlygyň atom birligi (boruň radiusy);

$$E_1=\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}=\frac{e^2}{2a}=13{,}55\ ew, \qquad E_a=2E_1=27{,}07\ ew$$

- energiýanyň atom birligi.

(5.4) - iň esasynda (5.3) - i özgerdeliň:

$$\frac{1}{a^2}\frac{d^2u}{d\rho^2}+\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{že^2}{\rho a}-\frac{l(l+1)}{\rho^2a^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\varepsilon E_1\right)u=0,$$

ýa-da

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(\frac{2ž}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 2\mu\frac{\hbar^4}{\mu^2 e^4}\frac{\varepsilon}{\hbar^2}\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\right)u = 0 \ ,$$

ýa-da

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(\varepsilon + \frac{2ž}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)u = 0. \qquad (5.5)$$

Şu deňlemäniň çözgüdini aşakdaky görnüşde gözleniler:

$$u(\rho) = e^{-\alpha\rho} \cdot \alpha(\rho), \quad bu\ \acute{y}erde \quad \alpha = \sqrt{-\varepsilon}\ , \qquad (5.6)$$

Bu ýerde, $\alpha(\rho)$- gözlenilýän täze funksiýa. (5.6) -njy çözgüt asimptotikidir, ýagny şu funksiýanyň bahasyny baglylyksyz üýtgeýäniň uly bahalarynda taparys.

(5.6)-dan alýarys:

$$\frac{du}{d\rho} = -\alpha e^{-\alpha\rho} f(\rho) + e^{-\alpha\rho}\frac{df}{d\rho} \qquad we$$

$$\frac{d^2u}{dr^2} = \alpha^2 e^{-\alpha\rho} f(\rho) - 2\alpha e^{-\alpha\rho}\frac{df}{d\rho} + e^{-\alpha\rho} \cdot \frac{d^2\rho}{d\rho^2}\ .$$

Şu aňlatmalary we (5.6) -ny (5.5) - e goýup alarys:

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{df}{d\rho} + \left(\frac{2ž}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) f = 0. \qquad (5.7)$$

Diskret spektri gözlenilýänligi sebäpli, (5.7) - niň çözgüdi derejeli hatar görnüşinde alynýar:

$$f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^\nu \quad , \qquad (5.8)$$

Bu ýerde, a_ν - kesgitlenilmegi talap edilýän, hataryň näbelli koefisiýentleri.
Çözgüdiň gutarnykly bolmaklygy üçin, (5.8) - nji hatar $\rho \to \infty$ bolanda ∞ - e çenli artmaly däldir. a_ν koefisiýentleri tapmaklyk üçin (5.8) - i (5.7) - ä goýmaly. Onuň üçin (5.8) - i şeýle göçüreliň:

$$f(\rho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^{\nu+l+1}. \qquad (5.9)$$

Şu ýerden alýarys:

$$\frac{df}{d\rho} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu + l + 1) a_\nu \rho^{\nu+l},$$

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (\nu + l)(\nu + l + 1) a_\nu \rho^{\nu+l-1}.$$

Şu aňlatmalary we (5.8) -i (5.7) - nji deňlemä goýup alarys:

$$\sum_\nu [(\nu + l)(\nu + l + 1) a_\nu \rho^{\nu+l-1} - 2\alpha(\nu + l + 1) a_\nu \rho^{\nu+l} + 2ž a_\nu \rho^{\nu+l} - l(l + 1) a_\nu \rho^{\nu+l-1}] = 0$$

ν ululyk 0-dan ∞- e çenli bahalary alýar, diýmek, birinji we dördünji çlenlerde ν - ni $(\nu+1)$ bilen çalyşyp bileris, onda ýokardaky aňlatma aşakdaky görnüşe geçýär.

$$\sum_{\nu}\{[(\nu+l+1)(\nu+l+r)\text{-}l(l+1)]a_{\nu+1}+[2\check{z}\text{-}2\alpha(\nu+l+1)]a_{\nu}\}\rho^{\nu+l}=0 \tag{5.10}$$

(5.8) - nji funksiýanyň (5.7) - iň çözgüdi bolmaklygy üçin (5.10) - njy aňlatma, ρ - nyň ähli bahalarynda (0 - dan ∞ - e çenli) nola deň bolmaly. Bu diňe ρ - nyň koefisiýentleriniň nola deň bolan ýagdaýynda mümkin, ýagny:

$$[(\nu+l+1)(\nu+l+r)\text{-}l(l+1)]a_{\nu+1}+[2\check{z}\text{-}2\alpha(\nu+l+1)]a_{\nu}=0$$

Şu ýerden, a_{ν} we $a_{\nu+1}$ koefisiýentleriň arasyndaky rekkurentli gatnaşygy alyp bileris:

$$a_{\nu+1}=\frac{2\alpha(\nu+l+1)\text{-}2\check{z}}{(\nu+l+1)(\nu+l+r)}a_{\nu}, \tag{5.11}$$

bu ýerde, ν=0,1,2...

Seredilýän deňleme birjynsly we şol sebäpli, birinji a_0 çlen erkin. Oňa haýsy-da bolsa bir bahany berip (5.11) - den a_1; a_1 boýunça a_2 we başg. tapylýarlar. Ähli a_{ν} ululyklary hasaplap, gözlenilýän çözgüdi ρ - yň derejeleri boýunça hatar görnüşde alýarys. ρ - nyň uly bahalarynda hatar güýçli ösýär we $\rho \to \infty$ ýagdaýda

$$R = \frac{e^{-\alpha\rho}}{\rho} f(\rho) \to \infty.$$

$\rho \to \infty$ bolanda R - iň gutarnykly çözgüt bolmaklygy üçin, $f(\rho)$ hatar haýsy - da bolsa bir çlende üzülmeli. Onda $f(\rho)$ köpçlene öwrülýär we $\rho \to \infty$ ýagdaýda R nola ymtylýar. Şeýle çözgüt deňlemäniň hususy funksiýasy bolar,ýagny ol ähli $\rho = 0$ - dan $\rho = \infty$ - e çenli interwalda gutarnykly we birbahaly.

Hataryň haýsy hem bolsa bir çleninde, meselem, $\nu = n_r$ tertip belgide üzülmekligi diňe deňligiň α parametriniň ýörite bahasynda ýerine ýetjekdigini ýeňil görünýär. Dogrudanam, a_{n_r} koefisiýent heniz nola deň däl diýeliň. Indiki, a_{n_r+1} koefisiýentiň nola deň bolmaklygy üçin aşakdaky şert zerurdyr:

$$2\alpha(n_r + l + 1)\text{-}2ž = 0,$$

şu ýerden,

$$\alpha = \frac{ž}{n_r + l + 1}. \qquad (5.12)$$

şeýle şertde diňe a_{n_r+1} däl-de, galan ähli koefisiýentler nola öwrülýärler, sebäbi olaryň ählisi

a_{n_r+1} ululyga proporsionaldyr. Diýmek, (5.12) - nji $f(\rho)$ çözgüdiň köpçlene öwrülmeginiň hökmany we ýeterlikli şertidir.

Belläliň: $n = n_r + l + 1,$ (5.13)
onda

$$\alpha = \frac{\check{z}}{n}, \quad ýa\text{-}da \quad \alpha^2 = -\varepsilon = \frac{\check{z}^2}{n^2},$$

ýa-da
$$\varepsilon = \frac{E}{E_1} = -\frac{\check{z}^2}{n^2},$$

başga tarapdan
$$E_1 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}.$$

Şeýlelikde,
$$E_n = -\frac{\check{z}^2 e^4 \mu}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \qquad (5.14)$$

Şeýlelikde, R - iň gutarnykly we birbahaly çözgüdi diňe elektronyň energiýasynyň E_n bahalarynda bar. Kwant sany „n“ , (5.13)-e görä aşakdaky bahalary alýar:

n=1,2,3,..., n_r=0,1,2,3,... - radial kwant sany.

Kulon meýdanda hereket edýän elektronyň E_n energiýasy üçin alynan formula, ýarymklassyky kwant nazaryýetiniň esasynda ilkinji N.Bor tapypdyr. Görnüşi ýaly, şu nazaryýete laýykda nola barabar energiýaly dereje bolup bilmeýär, ýagny $n \neq 0$, ol 1-den başlanýar.

Indi, $R(\rho)$-nyň hususy çözgüdiniň görnüşini tapalyň, onuň üçin (5.13)-i (5.11)-e goýalyň:

$$a_{\nu+1} = -\frac{2ž}{n} \cdot \frac{n-(l+\nu+1)}{(\nu+1)(2l+\nu+r)} a_\nu$$

Koefisiýentleri yzly-yzyna hasaplalyň:

$$a_1 = -\frac{2ž}{h} \cdot \frac{n-(l+1)}{1!\,(2l+2)} \cdot a_0;$$

$$a_2 = -\frac{2ž}{n} \cdot \frac{n-(l+2)}{2(2l+3)} a_1 = \left(\frac{2ž}{n}\right)^r \cdot \frac{(n-l-1)(n-l-r)}{2!(2l+2)(2l+3)} a_0$$

we başg.

Şu aňlatmalary (8)-e goýup alýarys:

$$f(\rho) = a_0 \rho^{l+1} \left\{1 - \frac{(n-l-1)}{1!(2l+r)} \left(\frac{2ž\rho}{n}\right) + \frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)} \left(\frac{2ž\rho}{n}\right)^2 + \cdots + (-1)^{nr} \frac{(n-l-1)(n-l-2)\ldots 1}{n_r!(2l+2)(2l+3)\ldots(2l+n_r+1)} \cdot \left(\frac{2ž\rho}{n}\right)^{n_r}\right\} \tag{5.15}$$

Görnüşi ýaly täze üýtgeýäni girizmeklik amatlydyr.

$$\xi = \frac{2ž\rho}{n} = \frac{2ž}{n} \cdot \frac{r}{a}.$$

Ähli hemişelik köpeldijileri bir N_{nl} faktora birleşdirip, „n“ we „l“ kwant sanlara degişli $R_{nl}(\rho)$ funksiýany alýarys:

$$R_{nl}(\rho) = N_{nl} \cdot e^{-\frac{1}{2}\xi} \cdot \xi^{l} L_{n+l}^{2l+1}. \qquad (5.16)$$

bu ýerde, L_{n+l}^{2l+1} arkaly figura žekilli skobkanyň içinde ýerleşen köpçlen bellenilýär we oňa Laggeranyň utgaşdyrylan polinomy diýilýär. (5.16)-daky N_{ne} köpeldiji R_{ne} funksiýanyň bire normirlenmekligi üçin saýlanylýar:

$$\int_0^\infty R_{ne}{}^2 r^2 dr = 1$$

Energiýa E_n, (5.14)-den gelip çykyşy ýaly diňe "n" esasy kwant sana bagly. Eger şu san berilse, onda (5.13)-den "l" sanyň alyp biljek bahalaryny tapýarys:

$$l = 0,1,2,\ldots,(n-1), \qquad (n_r = n-1, n-2,\ldots,0).$$

Belli bolşy ýaly, „m“ magnit kwant sany, l -iň berilen ýagdaýynda şeýle bahalary alýar

$$m = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm l$$

Indi, E_n kwant dereje näçe dürli tolkun funksiýalaryň degişlidigini hasaplalyň. l-iň her bir bahasynda "m" san bilen tapawutlanýan, $(2l+1)$ funksiýalar alynýar.

Ýöne l san 0-dan (n-1)-e çenli bahany alýar, şol sebäpli funksiýalaryň doly sany bolar:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2 .$$

Şeýlelikde, her bir E_n kwant dereje n^2 dürli ýagdaýlar degişli, ýagny n^2-kratnyýly döremeklik bilen iş salyşylýar.

§6. Elektromagnit meýdanda zarýadly mikrobölejikleriň hereketi.

Erkin elektromagnit meýdanda "e"zarýadly we "μ" massaly bölejigiň hereketine seretmeklige geçeliň. Eger elektrik meýdanyň güýjenmesi $\vec{\varepsilon}$ we magnit maeýdanyň güýjenmesi $\vec{H}$ arkaly bellenilse, onda olar skalýar V we wektor $\vec{A}$ potensiallaryň üsti bilen şeýle aňladylýar:

$$\left.\begin{aligned}\vec{\varepsilon}&=-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}-\nabla V,\\ \vec{H}&=rot\vec{A}.\end{aligned}\right\}\qquad(6.1).$$

Şeýle ýagdaý üçin gamiltonian deňdir

$$\hat{H}=\frac{\hat{P}^2}{2\mu}-\frac{e}{\mu c}(\hat{A}\hat{P})+\frac{i\hbar e}{2\mu c}div\vec{A}+\frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{A}^2+eV+U\qquad(6.2)$$

Erkin elektromagnit meýdanda stasionar ýagdaýlar elmydama bolmaýarlar. Şonuň üçin şu meselede energiýany we funksiýany gözlemeris, bölejikleriň hereketleriniň deňlemelerini dikeltmek bilen çäkleneris. Mikrobölejikler üçin hereketiň deňlemeleri bolup Gamiltonyň deňlemeleri hyzmat edýär. Olar:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{H}\hat{X}], \quad \frac{d\hat{y}}{dt} = [\hat{H}\hat{Y}], \quad \frac{d\hat{z}}{dt} = [\hat{H}\hat{Z}]; \tag{6.3}$$

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = [\hat{H}\hat{P}_x], \quad \frac{d\hat{P}_y}{dt} = [\hat{H}\hat{P}_y], \quad \frac{d\hat{P}_z}{dt} = [\hat{H}\hat{P}_z]. \tag{6.4}$$

Diýmek, x, y, z koordinatalar we $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ impulslar üçin Puassonyň skobkalary tapylmaly, üstesinede, $\hat{H}$ operatory diýip (6.2)-nji gamiltoniany düşünmeli. Ilki tizligiň operatorlaryny $\frac{d\hat{x}}{dt}$ hasaplalyň, onuň üçin alynýar:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = [\hat{H}\hat{X}] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{X}\hat{H} - \hat{H}\hat{X}) = \frac{1}{i\hbar}\left\{\frac{1}{2\mu}(\hat{X}\hat{P}_x^2 - \hat{P}_x^2\hat{X}) - \frac{e}{\mu c}(\hat{X}\cdot\hat{A}\hat{P} - \hat{A}\hat{P}\cdot\hat{X})\right\} =$$

$$= \frac{1}{2\mu i\hbar}(\hat{X}\hat{P}_x^2 - \hat{P}_x^2\hat{X}) - \frac{e}{i\hbar\mu c}(\hat{X}\cdot\hat{A}\hat{P} - \hat{A}\hat{P}\cdot\hat{X})\frac{1}{2\mu}[\hat{P}_x^2\hat{X}]$$

$$-\frac{e}{\mu c}[\hat{A}\hat{P}\cdot\hat{X}] \tag{6.5}$$

Skobkalara aýratynlykda seredeliň:

$$\frac{1}{2\mu}\left[\hat{P}_x^2\hat{X}\right]=\frac{1}{2\mu i\hbar}\left(\hat{X}\hat{P}_x^2-\hat{P}_x^2\hat{X}\right)=\frac{1}{2\mu i\hbar}\cdot 2i\hbar\hat{P}_x=\frac{\hat{P}_x}{\mu};$$

we

$$\frac{e}{\mu c}\left[\hat{A}\hat{P}\cdot\hat{X}\right]=-\frac{e}{\mu c i\hbar}\left(\hat{X}\cdot\hat{A}\hat{P}-\hat{A}\hat{P}\cdot\hat{X}\right)=-\frac{e}{\mu c i\hbar}\left(X\cdot\hat{A}_x\hat{P}_x-\hat{A}_x\hat{P}_x\cdot X\right)=$$
$$-\frac{e}{\mu c i\hbar}\left\{X\cdot\hat{A}\hat{P}-\hat{A}_x(\hat{X}\hat{P}_x-i\hbar)\right\}=-\frac{e}{\mu c i\hbar}\left(X\cdot\hat{A}_x\hat{P}_x-\hat{A}_x\hat{X}\hat{P}_x+i\hbar\hat{A}_x\right).$$

Onda (6.5) şeýle görnüşe geçýär:

$$\left.\begin{aligned}\frac{d\hat{x}}{dt}&=\frac{1}{\mu}\left(\hat{P}_x-\frac{e}{c}\hat{A}_x\right),\\ \frac{d\hat{y}}{dt}&=\frac{1}{\mu}\left(\hat{P}_y-\frac{e}{c}\hat{A}_y\right),\\ \frac{d\hat{z}}{dt}&=\frac{1}{\mu}\left(\hat{P}_z-\frac{e}{c}\hat{A}_z\right)\end{aligned}\right\}\qquad(6.6)$$

Deňlemeleriň (6.4)-nji topary çylşyrymly ýol bilen alynýar. $\frac{d\hat{P}_x}{dt}$ operatory hasaplalyň.

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt}=\left[\hat{H}\hat{P}_x\right]=-\frac{e}{\mu c}\left[\hat{A}\hat{P}\cdot\hat{P}_x\right]+\frac{i\hbar e}{2\mu c}\left[div\,\hat{A}\cdot\hat{P}_x\right]+\frac{e^2}{2\mu c^2}\left[\hat{A}^2\hat{P}_x\right]+\left[(eV+U)\cdot\hat{P}_x\right]$$
(6.7).

Şu skobkalary soňkydan başlap hasaplalyň.

$$\left[(eV+U)\cdot\hat{P}_x\right]=\frac{1}{i\hbar}\left\{(eV+U)\cdot(eV+U)\cdot\hat{P}_x\right\}=\frac{1}{i\hbar}\left\{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\cdot(eV+U)\right\}=$$

$$=-e\frac{\partial V}{\partial x}-\frac{\partial U}{\partial x};$$

$$\frac{e^2}{2\mu c^2}\left[\hat{A}^2\hat{P}_x\right]=\frac{e^2}{2\mu c^2 i\hbar}\left(\hat{P}_x\hat{A}^2-\hat{A}^2\hat{P}_x\right)=$$
$$\frac{e^2}{2\mu c^2 i\hbar}\left(\hat{P}_x\hat{A}^2-\hat{A}_x\left(\hat{P}_x\hat{A}_x++i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\right)-\hat{A}_y\left(\hat{P}_x\hat{A}_y+i\hbar\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}\right)-\hat{A}_z\left(\hat{P}_x\hat{A}_z+i\hbar\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\right)\right)=$$
$$\frac{e^2}{2\mu c^2 i\hbar}\left\{\hat{P}_x\hat{A}^2-\left(\hat{P}_x\hat{A}_x++i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\right)\hat{A}_x-i\hbar\hat{A}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}-\left(\hat{P}_x\hat{A}_y+i\hbar\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}\right)\hat{A}_y-i\hbar\hat{A}_y\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}-\right.$$
$$\left.\left(\hat{P}_x\hat{A}_z++i\hbar\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\right)\hat{A}_z-i\hbar\hat{A}_z\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\right\}=\frac{e^2}{2\mu c^2 i\hbar}\left(\hat{P}_x\hat{A}_x^2++\hat{P}_x\hat{A}_y^2+\hat{P}_x\hat{A}_z^2-\hat{P}_x\hat{A}_x^2-\right.$$
$$i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{A}_x-i\hbar\hat{A}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}-\hat{P}_x\hat{A}_y^2-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}\hat{A}_y-i\hbar\hat{A}_y\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}--\hat{P}_x\hat{A}_z^2-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\hat{A}_z-$$
$$\left.i\hbar\hat{A}_z\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\right)=\frac{dy}{dx}-\frac{e^2}{2\mu c^2}\left(\hat{A}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}-\hat{A}_y\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}--\hat{A}_z\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\right);$$

$$\frac{i\hbar e}{2\mu c}\left[div\,\hat{A}\cdot\hat{P}_x\right]=\frac{i\hbar e}{2\mu c}\cdot\frac{1}{i\hbar}\left(\hat{P}_x div\,\hat{A}-div\,\hat{A}\hat{P}_x\right)=\frac{i\hbar e}{2\mu c}\cdot\frac{1}{i\hbar}-\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x}div\,\hat{A}\right)=$$
$$=-\frac{i\hbar e}{2\mu c}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}+\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial y}+\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial z}\right)==-\frac{i\hbar e}{2\mu c}\left(\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\hat{A}_y}{\partial x\partial y}+\frac{\partial\hat{A}_z-}{\partial x\partial z}\right);$$

$$-\frac{e}{\mu c}\left[\hat{A}\hat{P}\cdot\hat{P}_x\right]=-\frac{e}{\mu c i\hbar}\left(\hat{P}_x\ \cdot\hat{A}\hat{P}-\hat{A}\hat{P}\cdot\hat{P}_x\right)=-\frac{e}{\mu c i\hbar}\left(\hat{P}_x\ \cdot\hat{A}\hat{P}-\hat{A}_x\hat{P}_x\cdot\hat{P}_x--\hat{A}_y\hat{P}_y\cdot\right.$$
$$\left.\hat{P}_x-\hat{A}_z\hat{P}_z\cdot\hat{P}_x\right)=-\frac{e}{\mu c i\hbar}\left\{\hat{P}_x\ \cdot\hat{A}\hat{P}-\left(\hat{P}_x\hat{A}_x+i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\right)\hat{P}_x-\left(\hat{P}_x\hat{A}_y++i\hbar\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}\right)\hat{P}_y-\right.$$
$$\left.\left(\hat{P}_x\hat{A}_z+i\hbar\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\right)\hat{P}_z\right\}=-\frac{e}{\mu c i\hbar}\left(\hat{P}_x\hat{A}_x\hat{P}_x+\hat{P}_x\hat{A}_y\hat{P}_y+\hat{P}_x\hat{A}_z\hat{P}_z--\hat{P}_x\hat{A}_x\hat{P}_x-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x-\right.$$
$$\left.\hat{P}_x\hat{A}_y\hat{P}_y-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y-\hat{P}_x\hat{A}_z\hat{P}_z-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\hat{P}_z\right)=\frac{e}{\mu c}\left(i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x+\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y+\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\hat{P}_z\right);$$

Diýmek, (6.7)-ni göçürip bileris:

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt}=-e\frac{\partial V}{\partial x}-\frac{\partial U}{\partial x}+\frac{e}{\mu c}\left(\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x+\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y+\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\hat{P}_z\right)-\frac{e^2}{\mu c^2}\left(\hat{A}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\right.$$
$$\left.+\hat{A}_z\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\right)-\frac{i\hbar e}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial x}div\hat{A}$$

ýa-da

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt}=-e\frac{\partial V}{\partial x}-\frac{\partial U}{\partial x}+\frac{e}{\mu c}\left\{\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\left(\hat{P}_x-\frac{e}{c}\hat{A}_x\right)+\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}\left(\hat{P}_y-\frac{e}{c}\hat{A}_y\right)+\frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\left(\hat{P}_z-\frac{e}{c}\hat{A}_z\right)\right\}-$$
$$-\frac{i\hbar e}{2\mu c}\frac{\partial}{\partial x}div\hat{A}.$$

(6.8).

(6.6)-nyň birinji deňlemesini şeýle göçüreliň

$$\mu\frac{dx}{dt}=\hat{P}_x-\frac{e}{c}\hat{A}_x \qquad (6.9).$$

Çep tarapy adaty impuls. Şu impulsdan önüm alalyň:

$$\frac{d}{dt}\left(\mu\frac{dx}{dt}\right)=\frac{d\hat{P}_x}{dt}-\frac{e}{c}\frac{d\hat{A}_x}{dt}. \qquad (6.10).$$

Şu ýerde görnüşi ýaly, (6.10) tapmak üçin (6.8)-den $\frac{e}{c}\frac{d\hat{A}_x}{dt}$ ululygy aýyrmaly. Diýmek, şu ululygy hasaplamaly. Ýazyp bileris:

$$\frac{e}{c}\frac{d\hat{A}_x}{dt}=\frac{e}{c}\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial t}+\frac{e}{c}[\hat{H}\hat{A}_x]. \qquad (6.11).$$

(6.2)-niň esasynda tapýarys

$$\frac{e}{c}[\hat{H}\hat{A}_x]=\frac{e}{2\mu c^2}[\hat{P}^2\hat{A}_x]-\frac{e^2}{\mu c^2}[\hat{A}\hat{P}\cdot\hat{A}_x] \qquad (6.12).$$

Skobkalary aýratynlykda hasaplalyň:

$$[\hat{P}^2\hat{A}_x]=\frac{1}{i\hbar}(\hat{A}_x\hat{P}^2-\hat{P}^2\hat{A}_x)=\frac{1}{i\hbar}(\hat{A}_x\hat{P}^2-\hat{P}_x\cdot\hat{P}_x\hat{A}_x-\hat{P}_y\cdot\hat{P}_y\hat{A}_x-\hat{P}_z\cdot\hat{P}_z\hat{A}_x)=$$
$$\frac{1}{i\hbar}\left\{\hat{A}_x\hat{P}^2-\hat{P}_x\left(\hat{A}_x\hat{P}_x-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\right)-\hat{P}_y\left(\hat{A}_x\hat{P}_y-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\right)-\hat{P}_z\left(\hat{A}_x\hat{P}_z-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\right)\right\}=$$
$$\frac{1}{i\hbar}\left\{\hat{A}_x\hat{P}^2-\left(\hat{A}_x\hat{P}_x-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\right)\hat{P}_x+i\hbar\hat{P}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}-\left(\hat{A}_x\hat{P}_y-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\right)\hat{P}_y+i\hbar\hat{P}_y\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}-\right.$$
$$\left.-\left(\hat{A}_x\hat{P}_z-i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\right)\hat{P}_z+i\hbar\hat{P}_z\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\right\}=\frac{1}{i\hbar}\left(\hat{A}_x\hat{P}_x^2+\hat{A}_x\hat{P}_y^2+\hat{A}_x\hat{P}_z^2-\hat{A}_x\hat{P}_x^2++i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x+\right.$$
$$\left.i\hbar\hat{P}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}-\hat{A}_x\hat{P}_y^2+i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y+i\hbar\hat{P}_y\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}-\hat{A}_x\hat{P}_z^2+i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z++i\hbar\hat{P}_z\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\right)=\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x+$$
$$\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x-\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x+\hat{P}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}+\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y+\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y-\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y++\hat{P}_y\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}+\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z+\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z-$$
$$\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z+\hat{P}_z\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}=2\left(\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x+\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y+\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z\right)++\left(\hat{P}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}-\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x\right)+\left(\hat{P}_y\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}-\right.$$
$$\left.\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y\right)+\left(\hat{P}_z\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}-\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z\right)=2\left(\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x++\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y+\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z\right)-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\cdot\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\cdot$$
$$\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\cdot\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}=2\left(\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x+\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y++\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z\right)-i\hbar\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\hat{A}_x$$

Şeýlelikde,

$$[\hat{P}^2\hat{A}_x] = 2\left(\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial x}\hat{P}_x + \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y + \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial z}\hat{P}_z\right) - i\hbar\nabla^2\hat{A}_x;$$

we

$$[\hat{A}\hat{P}\cdot\hat{A}_x] = \frac{1}{i\hbar}(\hat{A}_x\cdot\hat{A}\hat{P} - \hat{A}\hat{P}\cdot\hat{A}_x) = \frac{1}{i\hbar}(\hat{A}_x\cdot\hat{A}\hat{P} - \hat{A}_x\cdot\hat{P}_x\hat{A}_x - \hat{A}_y\cdot\hat{P}_y\hat{A}_x - \quad -\hat{A}_z\cdot \hat{P}_z\hat{A}_x) = \frac{1}{i\hbar}\left\{\hat{A}_x\cdot\hat{A}\hat{P} - \hat{A}_x\left(\hat{A}_x\hat{P}_x - i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\right) - \hat{A}_y\left(\hat{A}_x\hat{P}_y - i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\right) - -\hat{A}_z\left(\hat{A}_x\hat{P}_z - i\hbar\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\right)\right\} = \frac{1}{i\hbar}\left(\hat{A}_x\cdot\hat{A}_x\hat{P}_x + \hat{A}_x\cdot\hat{A}_y\hat{P}_y + \hat{A}_x\cdot\hat{A}_z\hat{P}_z - \hat{A}_x\cdot\hat{A}_x\hat{P}_x + +i\hbar\hat{A}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x} - \hat{A}_y\cdot \hat{A}_x\hat{P}_y + i\hbar\hat{A}_y\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y} - -\hat{A}_z\cdot\hat{A}_x\hat{P}_z + i\hbar\hat{A}_z\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\right) = \hat{A}_x\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x} + +\hat{A}_y\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y} + \hat{A}_z\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z};$$

Şu skobkalaryň netijelerini (6.12)-ä goýup we alynany (6.11)-e goýup, alýarys:

$$\frac{e}{c}\frac{d\hat{A}_x}{dt} = \frac{e}{c}\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial t} + \frac{e}{\mu c}\left\{\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial x}\left(\hat{P}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x\right) + \frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\left(\hat{P}_y - \frac{e}{c}\hat{A}_y\right) + \frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z}\left(\hat{P}_z - \frac{e}{c}\hat{A}_z\right)\right\} - -\frac{i\hbar e}{2\mu c}\nabla^2\hat{A}_x \tag{6.13}$$

Indi (6.13)-i (6.8)-den aýyralyň. Onda alýarys:

$$\frac{d}{dx}\left(\hat{P}_x - \frac{e}{c}\hat{A}_x\right) = \frac{\partial U}{\partial x} - e\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial x}\right) + \frac{e}{\mu c}\left(\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x} + \frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\right)\left(\hat{P}_y - \frac{e}{c}\hat{A}_y\right) - \frac{e}{\mu c}\times \times\left(\hat{P}_y - \frac{e}{c}\hat{A}_y\right) - \frac{e}{\mu c}\left(\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial z} + \frac{\partial\hat{A}_z}{\partial x}\right)\left(\hat{P}_z - \frac{e}{c}\hat{A}_z\right) + \frac{i\hbar e}{2\mu c}\left(\nabla^2\hat{A}_x - \frac{\partial}{\partial x}\cdot div\hat{A}\right) \tag{6.14}$$

Ýöne,

$$-\frac{1}{c}\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial t}-\frac{\partial V}{\partial x}=\varepsilon_x,\quad \frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}-\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}=\widehat{H}_z,\quad \frac{\partial \hat{A}_x}{\partial z}-\frac{\partial \hat{A}_z}{\partial x}=\widehat{H}_z,$$

$$\nabla^2\hat{A}_x-\frac{\partial}{\partial x}\cdot div\hat{A}=\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial z^2}-\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial x^2}-\frac{\partial^2\hat{A}_y}{\partial x\partial y}-\frac{\partial^2\hat{A}_z}{\partial x\partial z}=$$

$$=\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}+\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial \hat{A}_z}{\partial x}+\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial z}\right)=-rot_x\widehat{H}$$

Ýene-de (6.9)-y göz öňünde tutup, (6.14)-den alýarys:

$$\mu\frac{d^2x}{dt^2}=-\frac{\partial U}{\partial x}+e\varepsilon_x+\frac{e}{c}\left[\widehat{H}_z\frac{dy}{dt}-\widehat{H}_y\frac{dz}{dt}\right]-\frac{i\hbar e}{2\mu c}rot_x\widehat{H} \qquad (6.15)$$

Tizligiň $\frac{dy}{dt}$ we $\frac{dz}{dt}$ operatorlary $\widehat{H}$ meýdan (onuň birjynsly däl ýagdaýynda) bilen kommutirleşmeýärler. Şonuň üçin (6.15)-de operatorlary simmetrikleşdirmek amatlydyr. Ol aşakdakydan durýar:

$$\widehat{H}_z\frac{dy}{dt}=\frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}-\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}\right)\left(\hat{P}_y-\frac{e}{c}\hat{A}_y\right)=$$

$$=\frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y-\frac{e}{c}\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}\cdot\hat{A}_y-\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y+\frac{e}{c}\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}\cdot\hat{A}_y\right)=$$

$$=\frac{1}{\mu}\left\{\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y+\frac{e}{c}\hat{A}_y\left(\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}-\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}\right)-\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y\right\}=$$

$$=\frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y-\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}\cdot\hat{P}_y-\frac{e}{c}\hat{A}_y\hat{H}_z\right).$$

Ýöne

$$\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y-\hat{P}_y\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}=i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\cdot\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x};$$

şu ýerden

$$\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}\hat{P}_y=\hat{P}_y\frac{\partial \hat{A}_y}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial^2 \hat{A}_y}{\partial y\partial x}$$

we

$$\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y-\hat{P}_y\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}=i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\cdot\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y};$$

şu ýerden

$$\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}\hat{P}_y=\hat{P}_y\frac{\partial \hat{A}_x}{\partial y}+i\hbar\frac{\partial^2 \hat{A}_x}{\partial y^2}$$

Şuňa görä:

$$\hat{H}_z\frac{dy}{dt}=\frac{1}{\mu}\left(\hat{P}_y\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial^2\hat{A}_y}{\partial y\partial x}-\hat{P}_y\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial y^2}-\frac{e}{c}\hat{A}_y\hat{H}_z+i\hbar\frac{\partial\hat{H}_z}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial\hat{H}_z}{\partial y}\right)=$$

$$=\frac{1}{\mu}\left\{\hat{P}_y\left(\frac{\partial\hat{A}_y}{\partial x}-\frac{\partial\hat{A}_x}{\partial y}\right)+i\hbar\frac{\partial^2\hat{A}_y}{\partial y\partial x}-i\hbar\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial y^2}-\frac{e}{c}\hat{A}_y\hat{H}_z+i\hbar\frac{\partial\hat{H}_z}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial x\partial y}+i\hbar\frac{\partial^2\hat{A}_x}{\partial y^2}\right\}=\frac{1}{\mu}\left(\hat{P}_y\hat{H}_z-\frac{e}{c}\hat{A}_y\hat{H}_z+i\hbar\frac{\partial\hat{H}_z}{\partial y}\right)=$$

$$=\frac{dy}{dt}\hat{H}_z+\frac{i\hbar}{\mu}\frac{\partial\hat{H}_z}{\partial y} \qquad (6.16).$$

Edil şunuň ýaly

$$\hat{H}_y\frac{dz}{dt}=\frac{dz}{dt}\hat{H}_y+\frac{i\hbar}{\mu}\frac{\partial\hat{H}_y}{\partial z} \qquad (6.17)$$

Indi, (6.17)-ni (6.16)-dan aýyralyň,onda alýarys:

$$\hat{H}_z\frac{dy}{dt}-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}=\frac{dy}{dt}\hat{H}_z+\frac{i\hbar}{\mu}\frac{\partial\hat{H}_z}{\partial y}-\frac{dz}{dt}\hat{H}_y-\frac{i\hbar}{\mu}\frac{\partial\hat{H}_y}{\partial z}=$$

$$=\frac{dy}{dt}\hat{H}_z-\frac{dz}{dt}\hat{H}_y+\frac{i\hbar}{\mu}\left(\frac{\partial\hat{H}_z}{\partial y}-\frac{\partial\hat{H}_y}{\partial z}\right)=$$

$$=\frac{dy}{dt}\hat{H}_z-\frac{dz}{dt}\hat{H}_y+\frac{i\hbar}{\mu}rot_x\hat{H}=\frac{dy}{dt}\hat{H}_z+\hat{H}_z\frac{dy}{dt}-$$

$$-\hat{H}_z\frac{dy}{dt}-\frac{dz}{dt}\hat{H}_y+\hat{H}_y\frac{dz}{dt}-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}+\frac{i\hbar}{\mu}rot_x\hat{H}=$$

$$=$$

$$\left(\hat{H}_z\frac{dy}{dt}+\frac{dy}{dt}\hat{H}_z-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}-\frac{dz}{dt}\hat{H}_y\right)-\left(\hat{H}_z\frac{dy}{dt}-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}\right)+\frac{i\hbar}{\mu}rot_x\hat{H}$$

ýa-da

$$2\left(\hat{H}_z\frac{dy}{dt}-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}\right)=\left(\hat{H}_z\frac{dy}{dt}+\frac{dy}{dt}\hat{H}_z-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}-\frac{dz}{dt}\hat{H}_y\right)+\frac{i\hbar}{\mu}rot_x\hat{H},$$

ýa-da

$$\hat{H}_z\frac{dy}{dt}-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}=\frac{1}{2}\left(\hat{H}_z\frac{dy}{dt}+\frac{dy}{dt}\hat{H}_z-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}-\frac{dz}{dt}\hat{H}_y\right)+\frac{i\hbar}{\mu}rot_x\hat{H} \quad (6.18).$$

(6.18)-i (6.15)-e goýup, alýarys:

$$\mu\frac{d^2x}{dt^2}=-\frac{\partial U}{\partial x}+e\varepsilon_x+\frac{e}{2c}\left(\hat{H}_z\frac{dy}{dt}+\frac{dy}{dt}\hat{H}_z-\hat{H}_y\frac{dz}{dt}-\frac{dz}{dt}\hat{H}_y\right),$$

ýa-da

$$\mu\frac{d^2x}{dt^2}=-\frac{\partial U}{\partial x}+\hat{F}_x$$

bu ýerde

$$\hat{F}_x = e\varepsilon_x + \frac{e}{2c}\left(\hat{H}_z\frac{dy}{dt} + \frac{dy}{dt}\hat{H}_z - \hat{H}_y\frac{dz}{dt} - \frac{dz}{dt}\hat{H}_y\right).$$

Şu aňlatma, $\vec{\varepsilon}$, $\hat{H}$ meýdanda zarýadly bölejige täsir edýän Lorensiň güýjüniň operatory ýaly garamaly. Dogrydanam, Lorensiň güýji üçin klassykyy aňlatma aşakdaky görnüşdedir:

$$\hat{F}_x = e\varepsilon_x + \frac{e}{c}\left(\hat{H}_z\frac{dy}{dt} - \hat{H}_y\frac{dz}{dt}\right).$$

Galan iki deňlemeler OY we OZ oklary üçin x, y, z ululyklary siklililik goýmaklyk ýoly bilen ýazylyp bilinjekdikleri, şübhesizdir.

§7. Zarýadly erkin bölejigiň birjynsly magnit meýdanyndaky hereketi.

Eger giňişligiň ähli nokatlarynda meýdanyň güýjenmesi birmeňzeş bolsa, onda şeýle meýdana birjynsly diýilýär. Meseläni sadalaşdyrmak üçin, OZ oky magnit meýdanyň ugry boýunça gönükdireliň. Onda meýdanyň komponentleriniň

$$H_x = H_y = 0, \qquad H_z = H$$

boljakdyklary şübhesizdir. Şeýle ýagdaý, eger wektor potensial $\hat{A}$ aşakdaky görnüşde alynanda ýerine ýetýär, ýagny

$$A_x = -Hy, \quad A_y = A_z = 0 \qquad (7.1)$$

Başga meýdan ýok diýilip hasap edilýär $(\vartheta = 0, V = 0)$, diýmek gamiltonian bolar.

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} - \frac{e}{\mu c}\hat{A}\hat{P} + \frac{i\hbar e}{2\mu c} div\hat{A} + \frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{A}^2$$

Seredilýän mesele üçin şu gamiltonianyň aýdyň görnüşi:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{i\hbar e}{\mu c}Hy\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e^2}{2\mu c^2}H^2y^2,$$

onda stasionar ýagdaý üçin Şryodingeriň deňlemesi şeýle görnüşde ýazylýar:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{i\hbar e}{\mu c}Hy\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{e^2}{2\mu c^2}H^2y^2\psi = E\psi \qquad (7.2)$$

Şu deňlemede üýtgeýänleri bölüşdirmekligi ýerine ýetireliň. Onuň üçin hasap edeliň

$$\psi(x,y,z) = e^{i(\alpha x + \beta z)} \cdot \varphi(y) \qquad (7.3)$$

Bu ýerde, α we β - käbir hemişelikler.
(7.3)-i (7.2)-ä goýup, alarys:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\varphi}{dy^2}+\frac{\hbar e\alpha}{\mu c}Hy\varphi+\frac{e^2}{2\mu c^2}H^2y^2\varphi=\left(E-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}-\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu}\right)\varphi \qquad (7.4)$$

Eger,

$$\left.\begin{aligned} Y &= y'-\frac{\hbar\alpha c}{eH}, \\ \omega_0 &= \frac{eH}{\mu c}, \\ \varepsilon &= E-\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu} \end{aligned}\right\} \qquad (7.5)$$

diýip hasap edilse, onda (7.4) ossilýator üçin deňleme geçýär. (7.5)-i (7.4)-e goýup, ýönekeý özgertmelerden soň, alýarys:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\varphi}{dy'^2}+\frac{\mu\omega_0^2}{2}y'^2\varphi=\varepsilon\varphi \qquad (7.6)$$

Görnüşi ýaly, (7.6)-njy deňleme μ massaly we ω_0 ýygylykly ossilýatoryň deňlemesi bilen gabat gelýär. Şonuň üçin bize gerek bolan çözgütleri gös-göni ýazyp bileris:

$$\left.\begin{aligned} \varphi_n(y') &= e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot H_n(\xi), \\ \xi = \sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}\,y' &= \sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}}\left(Y + \frac{\hbar\alpha c}{eH}\right), \\ \varepsilon = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), &\quad n = 0,1,2,\ldots \end{aligned}\right\} \tag{7.7}$$

Şeýlelikde, magnit meýdanynda ýerleşen bölejigiň hususy funksiýalary bolar.

$$\Psi_{n,\alpha,\beta}(x,y,z) = e^{i(\alpha x + \beta z)} \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot H_n(\xi), \tag{7.8}$$

kwant derejeleri bolsa şeýle formula bilen kesgitlenilýär.

$$E_n(\beta) = \frac{e\hbar H}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu}, \quad n = 0,1,2,\ldots \tag{7.9}$$

soňky çlen OZ oky boýunça kinetik energiýany aňladýar, birinji bölegi bolsa, ýagny

$$E_n(0) = \frac{e\hbar H}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

magnit meýdana perpendikulýar bolan X,Y tekizlikdäki hereketiň energiýasyny berýär. Şu energiýany, magnit meýdanynda μ magnit momente eýe bolan, toguň potensial energiýasy görnüşde ýazyp bolar. Dogrydanam, goý diýeli

$$U_n(0) = -(\vec{\mu}\vec{H}) = -\mu_z H = \mu_\beta(2n+1)H,$$

$$\mu_\beta = \frac{e\hbar}{2\mu c}.$$

Şu formuladan görýäris, ýagny magnit meýdanyň ugruna magnit momentiň μ_z proýeksiýasy, Boruň magnitonyna bitin kratnyýlydyr.

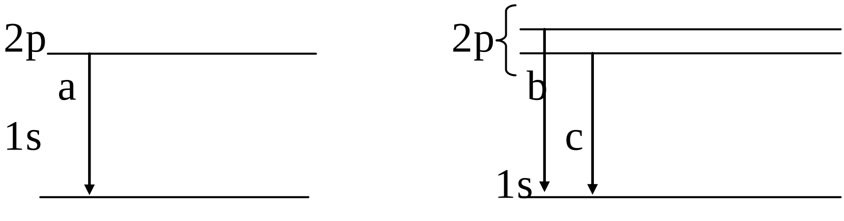
Magnit meýdanda hereket edýän erkin bölejigiň energiýasynyň kwantlanmagy kwant mehanikasynyň wajyp netijesidir, sebäbi ol elektronly gazda diamagnetizmiň barlygyna getirýär, şol bir wagtda klassyky nazaryýeti boýunça elektronly gazda diamagnetizm bolmaly däl.

X bap. Momentleriň umumy nazaryýeti

Umumy bellikler. Şu wagta çenli gürrüň esasan bölejigiň (mysal üçin, elektronyň) mehaniki we magnit momentleri barada edildi. Ýöne, şu mamentler bilen bir hatarda, ähli elementar bölejikleriň hususy mehaniki we magnit moment (ýa-da spini) bar.

Spinli usulyýetiň özboluşly aýratynlygy barada düşünjäni almak maksady bilen, gowy belli meňzeşlikden peýdalanalyň. Eger adaty çaga walçogyny güýçli aýlandyrsaň, onda onuň täze häsiýeti-durnuklygy emele gelýär. Ony her hili gyşartsaňda, ol wertikal ýagdaýy dikeltmäge ymtylýar. Aýlanma gutarsa – durnuklylyk bolmadyk ýaly. Fizikada şu hadysa “hereket mukdarynyň momentiniň saklanmagy” diýilýär. Ähli içkiýadro bölejikleriň, hereketiň

içki mehaniki momentine meňzedip bolýan häsiýetnamasy tapylypdyr. Bölejikler mümkin ugurlaryň birinde “towlanýan” ýaly, we olaryň özlerini alyp baryşlarynda köp zat şu içki häsiýet bilen bagly. Oňa “spin” diýilýär (iňlisçe tu spin – towlanma). Ýöne, mehaniki malçokdan tapawutlykda, bölejigiň hereketiniň mukdarynyň momenti diňe kesgitli kratnyýly baha eýe bolup bilýär.
Belli boluşy ýaly, elektronyň spininiň barlygy baradaky çaklama, aşakdaky iki eksperimental işleri getirdi. Bu, birinjiden, Şterniň-Gerlahyň tejribesi. Ikinjiden, spektral çyzyklaryň inçe strukturasy.



Natriýniň atomynda bir spektral çyzygyň(a) deregine, içki ýakyn derejelerden çykýan, iki örän ýakyn çyzyklar (b, c) tapylypdyr. Olaryň tolkun uzynlyklary degişlilikde 5895.93 A^0 we 5889.96 A^0 . Olara natriýniň dubleti diýilýär. Spektral çyzyklaryň şeýle strukturasyna spektrleriň multipletli strukturasy diýilýär. Şu maglumatlar, amerikaly fizikleri Ulunbegi we Gaudsmiti (1925), elektronyň hususy mehaniki momentiniň S_z proýeksiýasy islendik ugura Plankyň hemişeliginiň ýarymbitin sany bilen ölçelinýär diýen çaklama getirýärler. Şonuň üçin spin baradaky düşünjäniň, kwant mehanikasy jähitden ugur alyp oňa giňişleýin seretmeklige geçeliň we onuň matematiki aňladylyşynyň üsti bilen hususy bahasyny we hususy funksiýasyny aýdyňlaşdyralyň.

§1. Momentleriň hususy bahalary we hususy wektorlary

Umumy belliklerden gelip çykyşy ýaly, elektronyň spini deňdir

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2} \qquad (1.1)$$

Spin baradaky gipotezanyň matematiki aňladylyşyna geçeliň. Kwant mehanikasynyň umumy prinseplerine laýyklykda, elektronyň mehaniki spini çyzyklyözüne çatrymly $\hat{S}$ operatory bilen suratlandyrylmaly. Şu operatoryň $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ proýeksiýalary, M_x, M_y, M_z proýeksiýalaryň çalyşma düzgünine boýun egýärler, ýagny

$$\left.\begin{aligned} \hat{s}_x\hat{s}_y - \hat{s}_y\hat{s}_x &= i\hbar\hat{s}_z, \\ \hat{s}_y\hat{s}_z - \hat{s}_z\hat{s}_y &= i\hbar\hat{s}_x, \\ \hat{s}_z\hat{s}_x - \hat{s}_x\hat{s}_z &= i\hbar\hat{s}_y, \end{aligned}\right\} \quad (1.2)$$

Spiniň proýeksiýasy islendik ugura 2 bahany alyp bilýär: $\pm\frac{\hbar}{2}$.

Diýmek, $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ operatorlary iki hatarly matrisalary bilen suratlandyrylmaly, sebäbi diagonal görnüşe getirilen ikihatarly matrisa diňe iki diagonal çlenleri saklaýar we, ol diňe iki hususy bahalara eýe bolup bilýär.
Goý diýeli

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \ \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \ \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z, \qquad (1.3)$$

Onda, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ operatorlary (spinli matrisalar) aşakdaky görnüşdäki iki hatarly matrisalary bolmaly diýip tassyklap bileris:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \ \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix}, \ \hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{vmatrix}, \quad (1.4)$$

(1.1) we (1.3) aňlatmalardan, şu operatorlaryň hususy bahalarynyň “$\pm 1" - e$ eýedikleri gelip çykýar. (1.3)-i (1.2)-ä goýup we $\frac{\hbar^2}{4}$ ululyga gysgaldyp, alýarys.

$$\left.\begin{aligned} \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x &= 2i\hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y &= 2i\hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z &= 2i\hat{\sigma}_y, \end{aligned}\right\} \quad (1,5)$$

$\hat{\sigma}_x^2, \hat{\sigma}_y^2, \hat{\sigma}_z^2$ operatoryň hususy bahalary „+1”-e deň, şonuň üçin özüniň hususy aňladylmasynda olar şeýle görnüşde bolmaly

$$\hat{\sigma}_x^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \hat{\sigma}_y^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}, \hat{\sigma}_z^2 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (1.6)$$

Ýagny birlik matrisalarydyr:

$$\delta = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$$

Indi aşakdaky kombinasiýasyna seredeliň.

$$2_i(\hat{\sigma}_x\,\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\,\hat{\sigma}_x) = 2_i\hat{\sigma}_x * \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y * 2_i\hat{\sigma}_x =$$
$$(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y) = \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y^2 +$$
$$\hat{\sigma}_y^2\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = 0$$

Diýmek,

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x, \qquad (1.7)$$

ýagny, $\hat{\sigma}_x$ we $\hat{\sigma}_y$ matrtisalary antikommutirleşýär.(1.5) –i (1.7) – i bilen kombinirläp tapýarys

$$\left.\begin{aligned} \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y &= -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z &= -\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x &= -\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_y, \end{aligned}\right\} \qquad (1,8)$$

Indi, $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ matrisalaryň aýdyň görnüşlerini tapalyň. Onuň üçin, $\hat{\sigma}_z$ diagonal çörnüşe getirilipdir diýeliň. Onuň hususy bahalary ± 1, onda onuň diagonal görnüşi bolar.

$$\hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}. \qquad (1.9)$$

$\hat{\sigma}_x$ *we* $\hat{\sigma}_y$ matrisalaryň aýdyň görnüşlerini tapmak üçin, aşakdaky köpeltmek hasyllary emele getireliň.

$$\sigma_z\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{vmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$$

(1.8) –iň esasynda , alýarys

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$$

Şu ýeden

$$a_{11} = -a_{11}, a_{12} = a_{12}, -a_{21} = -a_{21}, -a_{22} = a_{22},$$

diýmek $\quad a_{11} = 0, a_{22} = 0.$

Onda $\hat{\sigma}_x$ matrisa aşakdaky görnüşe geçýär,

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{vmatrix} \qquad (1.10)$$

Indi $\hat{\sigma}_x^2$ emele getireliň:

$$\hat{\sigma}_x^2 = \begin{vmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{12} & a_{21} & 0 \\ 0 & a_{21} & a_{12} \end{vmatrix}$$

Şuny (1.6) –y bilen deňeşdirip, alýarys:
$a_{12} \cdot a_{21} = 1$
Matrisa özüneçatyrymly bolmaly, ýagny
$a_{21} = a_{12}^*$,
Onda, diýmek $|a_{12}|^2 = 1.$

Şunuň esasynda üazyp bileris.

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{vmatrix}, \qquad (1.11)$$

Bu ýerde, α-hakyky san.
Şuňa meňzeşlikde tapýarys.

$$\hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{vmatrix} \qquad (1.12)$$

Köpeltmek hasyllary tapalyň:

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} e^{i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & e^{-i(\alpha-\beta)} \end{vmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} e^{-i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & e^{i(\alpha-\beta)} \end{vmatrix}$$

.

(1.8) –iň esasynda,

$$\begin{vmatrix} e^{i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & e^{-i(\alpha-\beta)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -e^{-i(\alpha-\beta)} & 0 \\ 0 & -e^{i(\alpha-\beta)} \end{vmatrix},$$

Şu ýerden $e^{i(\alpha-\beta)} = -e^{-i(\alpha-\beta)}$,

$$e^{i(\alpha-\beta)} + e^{-i(\alpha-\beta)} = 0,$$

$\cos(\alpha - \beta) = 0$, ýagny $(\alpha - \beta) = \frac{\pi}{2}$.

α-erkin, şol sebäpli çäklendirilmezden alyp bileris:

$$\alpha = 0, \beta = -\frac{\pi}{2}$$

Şeýle ýagdaýda (1.11) we (1.12) bolýar.

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \ \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}.$$

Indi elektronyň spininiň kwadratynyň operatoryny emele getireliň:

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\delta.$$

"s" we "m_s" kwant sanlary girizip, ýazyp bileris

$$\hat{s}^2 = \hbar^2 S(s+1), \qquad S = \frac{1}{2}$$
$$\hat{s}_z = \hbar m_s, \qquad m_s = \pm\frac{1}{2}.$$

Indi hususy wektorlara seretmeklige geçeliň.

Tolkun funksiýanyň Ψ dört üýtgeýänleriň funksiýasy ýaly seredilmelidigi şübhesizdir: üçüsi elektronyň agyrlrk merkezine, dördünji bolsa spine S_z, degişli. Meselem koordinatly aňladylmada elektron üçin ol şeýle ýazylmaly.

$$\Psi_1 = \Psi\left(x, y, z, +\frac{\hbar}{2}, t\right)$$
$$\Psi_2 = \Psi\left(x, y, z, -\frac{\hbar}{2}, t\right)$$

Şeýlelikde, relýatiwistik däl kwant mehanikasynda elektronyň ýagdaýy iki komponentli tolkun funksiýasy bilen suratlandyrylýar. Oňa spinor diýilýär we Ψ

bilen belgilenýär. Şu funksiýany käwagt bir sütünli matrisa görnüşde ýazarys:

$$\Psi = \begin{vmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{vmatrix},$$

Çatrymly funksiýany – çatrymly spinory bolsa bir setirli matrisa görnüşde:

$$\Psi^{+} = \begin{vmatrix} \Psi_1^{*} & \Psi_2^{*} \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$$

(1.13)-nji funksiýany, üýtgeýänleri bölüşdirmek görnüşde ýazalyň:

$$\Psi(x, y, z, S_z, t) = \Psi(x, y, z) \times S_\alpha(S_z), \quad (1.14)$$

Bu ýerde, $S_\alpha(S_z)$ arkaly spinli funksiýa bellenilýär. Indeks α iki baha alýar, adaty olar $''+\frac{1}{2}''$ we $''-\frac{1}{2}''$ diýip hasap edilýär. Birinji $''+\frac{1}{2}''$ baha, haýsy hem bolsa bir saýlanylan ugura, meselem OZ, spiniň proýeksiýasynyň $+\frac{\hbar}{2}-e$ deňligini aňladýar. Ikinjisi bolsa, şol ugura spiniň proýeksiýasynyň başga mümkünli bahasynyň $\left(-\frac{\hbar}{2}\right)$ spiniň ýagdaýyna degişlidigini berýär. S_α funksiýanyň S_z argumentine bagly däl üýtgeýän ýaly seredilýär we, ol iki bahany $\left(\pm\frac{\hbar}{2}\right)$ alyp bilýär.

Onda

$$S_{+\frac{1}{2}}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = 1, \qquad S_{-\frac{1}{2}}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 0$$

Manysy boýunça, $\alpha = +\frac{1}{2}$ ýagdaýda

$S_z = +\frac{\hbar}{2}$, we şu ýagdaýda

$S_z = -\frac{\hbar}{2}$, bolup bilmeýär, şonuň üçin degişli funksiýa nola deň.

Edil şonuň ýaly

$$S_{-\frac{1}{2}}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = 0, \qquad S_{-\frac{1}{2}}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 1\,.$$

Funksiýa $S_\alpha(s_z)$ matrisaly görnüşde hem ýazylyp biliner.

$$S_{+\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad S_{-\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix},$$

$$S^{+}_{+\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad S^{+}_{-\frac{1}{2}} = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$$

Indi, islendik spinli operatoryň, ýagny

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{vmatrix}$$

tolkun funksiýa täsirini hasaplalyň.
Kesgitlemä laýyklykda:
$\Phi = \hat{L}\Psi$,
ýa-da ,

$$\Phi = \begin{vmatrix} \varphi_1 & 0 \\ \varphi_2 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \varphi_1 & 0 \\ \varphi_2 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} L_{11}\varphi_1 + L_{12}\varphi_2 \\ L_{21}\varphi_1 + L_{22}\varphi_2 \end{vmatrix}$$

diýmek,

$$\varphi_1 = L_{11}\varphi_1 + L_{12}\varphi_2,$$
$$\varphi_2 = L_{21}\varphi_1 + L_{22}\varphi_2.$$

Islendik spinli L ululygyň φ_1, φ_2 ýagdaýlarda orta bahasy

$$\bar{L} = \sum_m \sum_n C_m^* L_{mn} C_n$$

umumy formula laýyklykda, deňdir

$$\bar{L}(x, y, z, t) = \varphi_1^* L_{11}\varphi_1 + \varphi_1^* L_{12}\varphi_2 +$$

$$+\varphi_2^* L_{21}\varphi_1 + \varphi_2^* L_{22}\varphi_2,$$

ýa-da Ψ arkaly:

$$\bar{L}(x,y,z,t) = \Psi^+ \hat{L} \Psi.$$

Mysal,

$$\bar{\sigma}_x = \Psi^+ \hat{\sigma}_x \Psi = \begin{vmatrix} \varphi_1^* & \varphi_2^* \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \varphi_1 & 0 \\ \varphi_2 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varphi_1^*\varphi_2 + \varphi_2^*\varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$= \varphi_1^*\varphi_2 + \varphi_2^*\varphi_1,$$

edil şunuň ýaly

$$\bar{\sigma}_y = -i\varphi_1^*\varphi_2 + i\varphi_2^*\varphi_1,$$

$$\bar{\sigma}_z = \varphi_1^*\varphi_1 + \varphi_2^*\varphi_2.$$

§2. Pauliniň deňlemesi. Zeýemanyň normal effekti

Şrýodingeriň nazarýetinde elektronyň spinli effekti hasaba alynmaýar. Mundan beýläk, elektronyň spininiň barlygynyň nähili hadysalary esaslandyrmakda ýerlikli ulanylýandyklaryna giňişleýin serederis.

Spiniň barlygyny hasaba alyp, elektromagnit meýdanda elektronyň hereketine seredeliň. Esasy gipoteza laýykda elektron magnit momente eýedir.

$$\mu_B = \frac{e}{\mu_c} \cdot S$$

Şu momentiň easynda $\hat{H}(\hat{H}_x, \hat{H}_y, \hat{H}_z)$ magnit meýdanda elektron magnit dipolyň energiýasyna barabar bolan goşmaça potensial energiýa eýe bolýar.

$$\Delta U = -(\mu_B \hat{H}) = \frac{e}{\mu_C}(\hat{S}\hat{H}) = \frac{e\hbar}{2\mu_C}(\hat{\sigma}\hat{H}) = \frac{e\hbar}{2\mu_C}(\sigma_x H_x + \sigma_y H_y + \sigma_z H_z) \quad (2.1)$$

Diýmek, elektromagnit meýdanda hereketli bölejigiň gamiltoniany (2.1) bilen doldurylmaly:,

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{P} + \frac{e}{C}\hat{A}\right)^2 - eV + U + \frac{e\hbar}{2\mu_C}(\hat{\sigma}\hat{H})$$

Bu ýerde, elektronyň zarýady "*-e*" diýip alynýar. Şrýodingeriň deňlemesi $\psi(\varphi_1\varphi_2)$ tolkun funksiýasy üçin, indi şeýle ýazylýar:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{P} + \frac{e}{C}\hat{A}\right)^2\psi - eV\psi + U\psi + \frac{e\hbar}{2\mu_C}(\hat{\sigma}\hat{H}) \qquad (2.2)$$

Şu deňleme, Pauliniň deňlemesi diýen ady göterýär. Şu deňlemäniň üsti bilen üznüksizlik deňleme, ähtimallygyň dykyzlygy, bölejikleriň akymynyň (toguň) wektoryny we başg. kesgitläp bolýar, ýöne olarda spin bilen bagly çilenleriň boljakdygy, şubhesizdir. Biz şu ýerde, magnit meýdanda spektral çyzyklaryň bölünmekleriniň fiziki taýdan esaslandyryşyna serederis.

Daşky birjynsly magnit meýdanda ýerleşen, bir walentli elektrony bolan atoma garalyň. Atomda elektron bir wagtda, ýadronyň magnit we elektrik, hem-de, içki elektronleryň meýdany tarapyndan täsire sezewar bolýar. Şu elektrik meýdany merkezi diýip hasap ederis we onda elektronyň potensial energiýasyny U(r) arkaly belgiläris.

Daşky magnit meýdany “oz” oky boýunça ugrukdyralyň. Onda, eger $\hat{A}$ wektor potensialy aşakdaky ýaly alynsa

$$A_x = -\frac{H}{2}y, \quad A_y = \frac{H}{2}x, \quad A_z = 0$$

magnit meýdany $\hat{H} = rot\hat{A}$ formula boýunça hakyky alynýar, ýagny

$$H_x = H_y = 0, \quad H_z = H$$

Şeýlelikde seredilýän mesele üçin gamiltonian bolar:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \mathrm{U} - \frac{e\hbar}{2\mu_C}H\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{e^2}{8\mu C^2}\mathrm{H}^2(\mathrm{x}^2 + \mathrm{y}^2) + \frac{e\hbar}{2\mu c}(\sigma_z H) \quad (2.3)$$

we Pauliniň deňlemesi şeýle ýazylýar.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + U\psi - \frac{e\hbar}{2\mu_c}H\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + \frac{e^2}{8\mu_{c^2}}H^2(x^2+y^2)\psi + \frac{e\hbar}{2\mu_c}(\hat{\sigma}_z\hat{H})\psi \quad (2.3)$$

mundan beýläk, kiçi meýdanlarda H^2 ululygy saklaýan çleni inkär ederis we

$$i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\psi} = \hat{M}_z$$

operatory göz öňüne tutup, hem-de magnit meýdanyň ýoklugyndaky gamiltoniany

$$\hat{H}^0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} + U$$

arkaly belgiläp, (2.3)-i aşakdaky ýaly ýazyp bileris

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}^0\psi + \frac{eH}{2\mu_c}(\hat{M}_z + \hbar\hat{\sigma}_z)\psi \quad (2.4)$$

(2.4)-de ikinji çlen, $\hat{H}$ magnit meýdanda $\hat{\mu} = -\frac{e}{\mu c}(\hat{M}_z + \hbar\hat{\sigma}_z)$ momentli magnit dipolyň ΔU potensial energiýasy ýaly, seredilip biliner:

$$\Delta U = -(\hat{\mu}H) = \frac{eH}{2\mu_c}(\hat{M}_z + \hbar\hat{\sigma}_z)$$

Bölejigiň stasionar ýagdaýlaryny gözläris we onuň üçin tolkun funksiýasyny şeýle görnüşde alalyň:

$$\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \qquad (2.5)$$

(2.5)-i (2.4)-e goýup, alarys

$$\hat{H}^0\psi + \frac{eH}{2\mu_c}(\hat{M}_z + \hbar\hat{\sigma}_z)\psi = E\psi \quad (2.6)$$

$\hat{\sigma}_z$ matrisanyň diagonal bolan aňladylmasyny ("S_z"-aňladylma) alalyň; onda

$$\hat{\sigma}_z\psi = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \psi_1 & 0 \\ \psi_2 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{vmatrix}$$

we diýmek (2.6)-njy deňleme ψ_1 we ψ_2 üçin iki deňleme dargaýar.

$$\begin{cases} \hat{H}^0\psi_1 + \dfrac{eH}{2\mu_c}(\hat{M}_z + \hbar)\psi_1 = E\psi_1 \\ \hat{H}^0\psi_2 + \dfrac{eH}{2\mu_c}(\hat{M}_z - \hbar)\psi_2 = E\psi_2 \end{cases} \qquad (2.7)$$

Eger magnit meýdany bolmasa, onda

$$\begin{cases} \hat{H}^0\psi_1 = E\psi_1 \\ \hat{H}^0\psi_2 = E\psi_2 \end{cases} \qquad (2.8)$$

Şu deňlemeler belli funksiýalara we çözgütlere eýedir:

$\psi'_{nem} = \begin{pmatrix} \psi_{nem} \\ 0 \end{pmatrix}, \; E = E^0_{ne}, \; S_z = +\frac{\hbar}{2}$ spin üçin, (2.9)

$\psi''_{nem} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nem} \end{pmatrix}, \; E = E^0_{ne}, \; S_z = -\frac{\hbar}{2}$ spin üçin, (2.10)

üstesine-de

$$\psi_{nem} = R_{ne}(r)Y_{em}(\theta, \psi)$$

Magnit meýdanyň barlygynda,

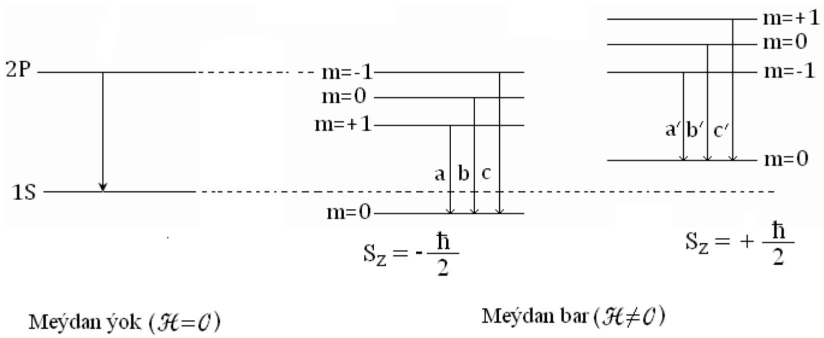
$$\hat{M}_z\psi_{nem} = \hbar m\psi_{nem}$$

aňlatmany göz öňüne tutup we (2.9) we (2.10)-y (2.7)-e goýup, iki çözgüdi alýarys:

$$\psi'_{nem}, \; E = E'_{nem} = E^0_{ne} + \frac{e\hbar}{2\mu_c}H\,(m+1) \; S_z = +\frac{\hbar}{2}, \qquad (2.11)$$

$$\psi''_{nem} \; E = E'_{nem} = E^0_{ne} + \frac{e\hbar}{2\mu_c}H\,(m-1) \; S_z = -\frac{\hbar}{2}, \qquad (2.12)$$

Görnüşi ýaly, tolkun funksiýa üýtgemeýär (H^2 ululygy saklaýan çlen inkär edildi): atom magnit meýdanda deformirlenmeýär. Energiýa bolsa, meýdana görä momentiň oriýentasyýayna (ýagny “m” magnit kwant sana), bagly bolup başlaýar: magnit meýdanyň ýoklugyndaky gabat gelýän derejeler indi bölünýärler (“m”-döremeklik aýrylýar). Aşakdaky çyzgyda S – we p – termleriň bölünmekleri berilýär.



ℓ=1 ýagdaýda, eger “m”-iň mümkin bahalary saýlanylsa onda (2.11) we (2.12) aňlatmalardan P-termiň bölünmegi alynýar. S-termiň (ℓ=0, m=0) bölünmegi diňe elektronyň spininiň esasynda alynýar.

Şeýle bölünmegi, Ştern we Gerlah öz tejribelerinde alypdyrlar.

Derejäniň bölünmeginiň esasynda mümkinli geçişleriň sany artýar, we şonuň bilen birlikde spektral çyzyklaryň sany hem artýar. Şu hadysa Zeýmanyň ýönekeý effekti ady göterýär.

Geçişlerdäki ýygylyklar aşakdaky formula boýunça hasaplanylýar.

$$\omega_{n'l'm'n''l''m''} = \frac{E_{n'l'm'} - E_{n''l''m''}}{\hbar} = \frac{E^0_{n'l'} - E^0_{n''l''}}{\hbar} + \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}(m' - m'')$$

Meýdanyň ýoklugyndaky ýygylygy ω_0, barlygyndakyny bolsa ω arkaly belgiläp, alarys

$$\omega = \omega_0 + \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}(m' - m'') \qquad (2.13)$$

Görünişi ýaly, $m' - m'' = \pm 1, 0$, onda üç ýygylyklary alýarys: biri butnamaýan we ikisi $\pm\frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}$ süýşen. Şeýle üç çyzyga bölünmeklik (Zeýemanyň normal effekti) klassyky nazarýetden alynýar. Klassyky nazarýetde Zeýemanyň hadysasy, magnit meýdanda Lormoryň $O_l = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}$ ýygylygyna deň ýygylyk bilen orbitanyň presessiýasy bilen düşündirilýär.

(2.13)-nji kwant formulasy "$\hbar$" ululygy saklamaýar, şonuň ğçin netije klassyky bilen gabat gelmeli. Kwant mehanikasynda hem Zeýemanyň hadysasy, magnit meýdanynyň ugrunyň daşynda impulsyň momentiniň presessionly hereketi bilen şertlendirilýär. Şuny subut etmek maksady bilen, orbital we spin momentleriň wagt boýunça önümlerini hasaplalyň. Umumy formula boýunça, ýazýarys

$$\begin{cases} \frac{d\hat{M}_x}{dt} = [\hat{H}\hat{M}_x], \quad \frac{d\hat{M}_y}{dt} = [\hat{H}\hat{M}_y], \quad \frac{d\hat{M}_z}{dt} = [\hat{H}\hat{M}_z]; \\ \frac{d\hat{S}_x}{dt} = [\hat{H}\hat{S}_x], \quad \frac{d\hat{S}_y}{dt} = [\hat{H}\hat{S}_y], \quad \frac{d\hat{S}_z}{dt} = [\hat{H}\hat{S}_z]. \end{cases} \tag{2.14}$$

Şu ýere (2.4)-den

$$\hat{H}^0 = \hat{H}^0 + \frac{eH}{2\mu c}\left(\hat{M}_z + \hbar\hat{\sigma}_z\right) = \hat{H}^0 + O_L\hat{M}_z + 2O_L\hat{S}_z$$

gamiltoniany goýup we $\hat{H}^0$- yň $\hat{M}$ we $\hat{S}$ bilen, $\hat{M}$ we $\hat{S}$ operatorlaryň bolsa özara kommutirleşýändiklerini bilip, tapýarys.

$$\frac{d\hat{M}_x}{dt} = \frac{O_L}{i\hbar}\left(\hat{M}_x\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_x\right) = -O_L\hat{M}_y; \quad \frac{d\hat{M}_y}{dt} = \frac{O_L}{i\hbar}\left(\hat{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y\right) = O_L\hat{M}_x; \quad \frac{d\hat{M}_z}{dt} = 0;$$

$$\frac{d\hat{S}_x}{dt} = \frac{2O_L}{i\hbar}\left(\hat{S}_x\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{S}_x\right) = -2O_L\hat{S}_y; \quad \frac{d\hat{S}_y}{dt} = \frac{2O_L}{i\hbar}\left(\hat{S}_y\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{S}_y\right) = 2O_L\hat{S}_x; \quad \frac{d\hat{S}_z}{dt} = 0;$$

Şu operatorly deňlemelerden orta baha geçip we O_L-iň ýönekeý sandygyny hasaba alyp, tapýarys.

$$\frac{d\bar{M}_x}{dt} = -O_L \bar{M}_y; \quad \frac{d\bar{M}_y}{dt} = O_L \bar{M}_x; \quad \frac{d\bar{M}_z}{dt} = 0;$$

$$\frac{d\bar{S}_x}{dt} = -2O_L \bar{S}_y; \quad \frac{d\bar{S}_y}{dt} = 2O_L \bar{S}_x; \quad \frac{d\bar{S}_z}{dt} = 0.$$

Şu deňlemelerden gelip çykyşyna laýykda, magnit meýdanyň ugryna orbital we spin momentleriň proýeksiýalarynyň her biri aýratynlykda hereketiň integrallary. Magnit meýdanyň ugryna perpendikulýar bolan orbital momentiň komponenti O_L Larmoryň ýygylygy bilen aýlanýar. Edil şunuň ýaly spin momentiň proýeksiýasy bolsa ikeldilen $2O_L$ ýygylyk bilen aýlanýar.

§ 3. Impulsyň doly momentiniň häsiýeti

Orbital $\hat{M}$ *we spin* $\hat{S}$ momentleriň diňe kwantly diskret bahalary alýandyklaryna göz ýetirdik. Indi, orbital we spin momentleriň jemi bolan, impulsyň doly momentine seredeliň.

$$\hat{I} = \hat{M} + \hat{S},$$

$$\hat{I}_x = \hat{M}_x + \hat{S}_x, \quad \hat{I}_y = \hat{M}_y + \hat{S}_y, \quad \hat{I}_z = \hat{M}_z + \hat{S}_z \qquad (3.1)$$

$\hat{M}$ we $\hat{S}$ operatorlary özara kommutirleşýär. Şol sebäpli

$$\begin{cases} \hat{I}_x\hat{I}_y - \hat{I}_y\hat{I}_x = i\hbar\hat{I}_z, \\ \hat{I}_y\hat{I}_z - \hat{I}_z\hat{I}_y = i\hbar\hat{I}_x, \\ \hat{I}_z\hat{I}_x - \hat{I}_x\hat{I}_z = i\hbar\hat{I}_y. \end{cases} \qquad (3.2)$$

Doly aýlanma momentiň komponentleri, orbital momentiň $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ komponentleriniň kanagatlandyrýan kommutasiýa düzgünine boýun egýärler. Umumy momentiň operatorynyň kwadratyny emele getireliň, (3.1)-den tapýarys.

$$\hat{I}^2 = \hat{M}^2 + \hat{S}^2 + 2(\hat{M}\hat{S}) = \hat{M}^2 + \hat{S}^2 + 2(\hat{M}_x\hat{S}_x + \hat{M}_y\hat{S}_y + \hat{M}_z\hat{S}_z) \qquad (3.3)$$

Aşakdaky operatorly deňlemeleriň ýerine ýetýändiklerini subut etmek kyn däldir.

$$\begin{cases} \hat{I}^2\hat{I}_x - \hat{I}_x\hat{I}^2 = 0, \\ \hat{I}^2\hat{I}_y - \hat{I}_y\hat{I}^2 = 0, \\ \hat{I}^2\hat{I}_z - \hat{I}_z\hat{I}^2 = 0. \end{cases} \qquad (3.4)$$

we

$$\begin{cases} \hat{I}^2\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{I}^2 = 0, \\ \hat{I}^2\hat{S}^2 - \hat{S}^2\hat{I}^2 = 0. \end{cases} \qquad (3.5)$$

(3.4)-den we (3.5)-den görnüşi ýaly, $\hat{I}^2$ we $\hat{I}_z$, ýenede $\hat{I}^2, \hat{M}^2, \hat{S}^2$ birwagtda ölçelinýän ululyklaryň sanyna girýärler.
(3.3)-den tapýarys.

$$(\hat{M}\hat{S}) = \frac{1}{2}(\hat{I}^2 - \hat{M}^2 - \hat{S}^2) \qquad (3.6)$$

$(\hat{M}\hat{S})$ köpeltmek hasyly birwagtda ölçelinýän ululyklardan emele getirilipdir, onda $(\hat{M}\hat{S})$ skalýar köpeltmek hasyly $\hat{I}^2, \hat{M}^2, \hat{S}^2$ operatorlary bilen birwagtda ölçelinýär.
(3.1)-iň iki tarapyna $\hat{S}$ bilen täsir edeliň.

$$(\hat{M}\hat{S}) + \hat{S}^2 = (\hat{I}\hat{S}),$$

onda (3.6)-dan ýenede bir $(\hat{I}\hat{S})$ skalýar köpeltmek hasylyny alýarys

$$(\hat{I}\hat{S}) = \frac{1}{2}(\hat{I}^2 - \hat{M}^2 + \hat{S}^2)$$

Islendik ugura $\hat{I}^2$ we $\hat{I}_z$ operatorlary, orbital momente meňzeşlikde, kwantlanýarlar, ýöne ýarymbitin sanlary bilen:

$$\hat{I}^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots$$

$$\hat{I}_z = \hbar m_j \,, j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \ldots$$

Onda

$$(\hat{M}\hat{S}) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - \ell(\ell+1) - S(S+1)] \,,$$

$$(\hat{I}\hat{S}) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - \ell(\ell+1) + S(S+1)] \,.$$

Skalýar köpeltmek hasyllarynyň kwantlanmasynyň wajyp formulasy alyndy, olar Zeýemanyň çylşyrymly effektinde ulanylýar.

XI bap Kwant nazarýetiniň ýakynlaşma usuly

Umumy bellikler. Kwant mehanikasynyň deňlemeleriniň ýönekeý çözgütleri bolup bölejigiň stasionar ýagdaýlaryny tapmakdan durýar. Ýöne elmydama şeýle ýönekeý çözgütler bolmaýar, başgaça aýdylanda, atom mehanikasynyň köpsanly problemalarynda ýönekeý çözgütler ýerine ýetirilip bilinmeýär. Şonuň üçin elmydama seredilýän meseläni has ýönekeý sistema utgaşdyrmak synanyşygy amala aşyrylýar, üstesinede şeýle sistema üçin E_n^0 hususy bahalar we $\psi_n{}^0$ hususy funksiýalar belli diýlip hasap edilýär.

Goý, atomda hereket edýän elektronlaryň tolkun funksiýalary we kwant derejeleri belli diýeliň. Bizi gyzyklandyrýan zat, eger şol atomy daşky elektrik ýa-da magnit meýdana ýerleşdirsek, onda onuň tolkun

funksiýalarynyň we kwant derejeleriniň nähili derejede üýtgeýändiklerini anyklamakdan durýar.
Tejribede alynýan meýdan, içki atom kulon meýdany bilen deňeşdirlende adaty kiçi. Daşky meýdanyň täsirini kiçi düzediş ýa-da, tolgundyryjy ýaly seredilýär. Edil şeýle ýol bilen atomlaryň içindäki elektronlaryň gowşak özara täsiri hasaba alynyp biliner, meselem, magnit, käbir halda bolsa, kulon özara täsiri.
Şunuň ýaly meseleleriň çözgüdi tolgundyrma nazarýetiniň predmetini düzýär.

§ 1. Stasionar mesele üçin tolgundyrma nazaryýeti

Energiýanyň $\hat{H}$ operatorynyň diskret spektre eýe bolan halyny seretmeklik bilen çäkleneris. Goý diýeli, gamiltonian $\hat{H}$ deňdir.

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{W} \qquad (1.1)$$

Goşulyjy $\hat{W}$ ululyk kiçi diýlip hasaplanylýar we oňa tolgundyryjynyň energiýasynyň operatory, ýa-da gysgaça tolgundyryjy diýilip atlandyrylýar. Elbetde, tolgundyrylmadyk sistemanyň energiýasynyň operatorynyň $\hat{H}^0$ hususy energiýasy E_n^0 we hususy funksiýasy $\psi_n{}^0$ belli diýlip hasaplanylýar, onda ýazyp bileris.

$$\hat{H}^0\psi_n{}^0 = E_n{}^0\psi_n{}^0 \qquad (1.2)$$

Diýmek, mesele $\hat{H}$ operatoryň hususy energiýasyny E_n we hususy funksiýasyny ψ_n tapmakdan ybaratdyr. Bu mesele, belli boluşy ýaly, Şrýodingeriň.

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (1.3)$$

deňlemesiniň çözülmegine alyp barýar.

Goý koordinatly aňladylmada $\hat{H}^0$ operatoryň hususy funksiýalary $\psi_n{}^0(x)$ bolsun. Gözlenilýän $\psi(x)$ funksiýany $\psi_n{}^0(x)$ funksiýalary boýunça darfadalyň

$$\psi(x) = \sum C_n \psi_n{}^0(x) \qquad (1.4)$$

Onda, şundan gelip çykyşy ýaly, ähli C_n toplumy "E_n^0" – aňladylmada $\psi(x)$ funksiýasy ýaly diýip alynýar.

(1.4)-i (1.3)-e goýalyň

$$\sum C_n \hat{H}\psi_n{}^0\ (x) = \sum C_n E\psi_n{}^0(x)$$

Şu aňlatmanyň iki tarapyna çepden ψ_m^{0*} funksiýasy bilen täsir edeliň we “*x*” boýunça integrirläliň:

$$\sum_n C_n \int \psi_m^{0*} \hat{H}\psi_n^0(x)dx = \sum_n C_n E \int \psi_m^{0*} \psi_n^0(x)dx$$

ýa-da

$$\sum_n H_{mn} C_n = E C_m \qquad (1.5)$$

Bu ýerde

$H_{mn} = \int \psi_m^o(x)\hat{H}\psi_n^o(x)$ –“ E^0 ”- aňladylmada $\hat{H}$ operatoryň matrisaly elementi. Oňa (1.1)-i goýup we (1.2)-ni göz öňünde tutyp, alarys

$$H_{mn} = \int \psi_m^{0*}(x)\left(\hat{H} + \hat{W}\right)\psi_n^0(x)dx = \int \psi_m^{0*}(x)\hat{H}\psi_n^0(x)dx +$$
$$+\int \psi_m^{0*}(x)\hat{W}\psi_n^0(x)dx = E_n^0 \int \psi_m^{0*}(x)\psi_n^0(x)dx + W_{mn} = E_n^0\delta_{mn} + W_{mn}$$
(1.6)

Bu ýerde,
$W_{mn} = \int \psi_m^{0*}(x)\hat{W}\psi_n^0(x)dx - E^0$ - aňladylmada $\hat{W}$ operatoryň matrisaly elementi. (1.6)-ny (1.5)-e goýup alarys.

$$\sum_n (E_n^0 S_{mn} + W_{mn})C_n = EC_m$$

Ähli çlenleri çepe geçireliň

$$(E_n^0 + W_{mn} - E)C_m + \sum_{n\neq m} W_{mn} C_m = 0 \qquad (1.7)$$

Şu çaka çenli $\hat{W}$-niň kiçidigi baradaky çaklama ulanylmady we (1.7)-nji deňleme dogrydyr. Tolgundyrma nazaryýetiň meselesi, W_{mn} ululyklaryň kiçidikleri baradaky çaklamany ulanmakdan durýar. $\hat{W}$- niň kiçiliginiň derejesini aýdyň aňlatmak maksady bilen, goý diýeliň

$$\hat{W} = \lambda\hat{\omega} \quad (1.8)$$

Bu ýerde, λ- kiçi parametr. Eger λ=0 diýip hasap edilse, onda $\hat{H}$ operatory $\hat{H}^0$ operatora geçýär. (1.8)-iň esasynda (1.7) deňleme aşakdaky görnüşe geçýär.

$$(E_m^0 + \lambda W_{mn} - E)C_m + \lambda\sum_{n\neq m} W_{mn} C_m = 0 \qquad (1.9)$$

Şu deňlemäni λ-nyň derejeleri boýunça çözeris. λ=0 bolanda (1.9)-dan “E^0”- aňladylmada ýönekeý (1.2)-nji deňleme alynýar.

$$(E_m^0 - E)C_m = 0 \qquad (1.10)$$

we onuň çözüwi şeýledir.

$$E^0 = E_m^{(0)}, \quad C_m^{(0)} = 1 \qquad (1.11)$$

λ-nyň kiçi bahalarynda ((1.9)-yň çözgütlerininň (1.10)- çözgütlerine (ýagny)
(1.11)-e ýakyn boljakdyklaryna garaşylyp biliner. Şu çaklamany aýdyň aňlatmak üçin, (1.9)-yň C_m hususy funksiýalaryny we onuň E hususy bahalaryny λ parametriň derejeleri boýunça hatarlar görnüşde alalyň:

$$\begin{cases} C_m = C_m^{(0)} + \lambda C_m^{(1)} + \lambda^2 C_m^{(2)} + \cdots \\ E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots \end{cases} \qquad (1.12)$$

(1.7)-nji deňlemäniň çözüwleri, $\hat{H}^0$ sistemanyň ýagdaýynyň döredilenmi we ýok hallara düýpli baglydyr. Biz ilki, tolgundyrylmadyk (1.2)-nji deňlemäniň her bir E_n^0 hususy bahasyna, diňe bir ψ_m^0 hususy funksiýanyň (degişlilikde – bir C_n^0 amplituda) degişli bolan halyna serederis.

§ 2. Döremekligiň ýoklugyndaky tolgundyrma

Maksat, (1.12)-nji aňlatmalardaky $C_m^{(1)}, C_m^{(2)}, \ldots$ we $E^{(1)}, E^{(2)}, \ldots$ ululyklary tapmakdan ybaratdyr. Onuň üçin, (1.12)-ni (1.9)-a gaoýarys.

$$\{E_m + \lambda\omega_{mn} - (E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \cdots)\}(C_m^{(0)} + \lambda C_m^{(1)} + \lambda^2 C_m^{(2)} + \cdots) + \lambda \sum_{n \neq m} \omega_{mn} (C_n^{(0)} + \lambda C_n^{(1)} + \lambda^2 C_n^{(2)} + \cdots)$$
$$= 0$$

"λ" parametrik bir meňzeş derejelerini saklaýan çlenleri ýygnalyň:

$$(E_m^{(0)} - E^0) = C_m^{(0)} + \lambda\left\{(\omega_{mn} - E^{(1)})C_m^{(0)} + (E_m^{(0)} - E^{(0)})C_m^{(1)} + \sum_{n\neq m} \omega_{mn} C_m^{(0)}\right\}$$
$$+ \lambda^2\left\{(\omega_{mn} - E^{(1)})C_m^{(1)} - E^{(2)}C_m^{(0)} + (E_m^{(0)} - E^{(0)})C_m^{(2)} + \sum_{n\neq m} \omega_{mn} C_n^{(1)}\right\} + \cdots = 0 \quad (1.13)$$

(1.9) deňlemäniň şeýle aňladylmasy, ony yzygiderli ýakynlaşma usuly bilen ýeňil çözmeklige mümkinçilik berýär. Eger λ=0 diýlip hasap edilse, onda nolunjy ýakynlaşmany alarys, ýagny

$$(E_m^{(0)} - E^0)C_m^{(0)} = 0, \quad m = 1,2,3,\ldots,k \qquad (1.14)$$

Bu, tolgundyrylmadyk sistemasy $\hat{H}^0$ üçin deňlemedir. Tolgundyryşy $\hat{W}$-niň täsiri astynda E_k^0 dereje we ψ_k^0 hususy funksiýa nähili üýtgeýärler diýen sorag bizi gyzyklandyrýar diýeliň. Onda (1.14)-den k-ny alýarys:

$$E^0 = E_k^0, \quad C_m^{(0)} = \delta_{mk} \qquad (1.15)$$

ýagny, $C_k^{(0)} = 1$-den ähli başgasy $C_m^{(0)} = 0$ (1.15)-nji çözgüde, nolunjy ýakynlaşmadaky çözgüt diýip atlandyrylýar.

Şu ýakynlaşmany (1.13)-e goýup,birinji ýakynlaşmany tapýarys

$$\lambda(\omega_{mm} - E^{(1)})\left\{\delta_{mk} + (E_m^0 - E_k^0)C_m^{(1)} \sum_{n\neq m} \omega_{mn}\delta_{nk}\right\} + O(\lambda^2) = 0\,. \qquad (1.16)$$

Bu ýerde,O(λ^2) arkaly λ^2 tertipli we ýokary çlenler belgilenilýär.Birinji ýakynlaşma bilen çäklenip,olary kiçi diýip hasap ederis we goýbereris.Onda alýarys

$$\left(\omega_{mm} - E^{(1)}\right)\delta_{mk} + (E_m^0 - E_k^0)C_m^{(1)} + \sum_{n\neq m}\omega_{mn}\delta_{nk} = 0 \qquad (1.17)$$

Eger şu deňlemelerden m=k haly alsak ,onda

$$\omega_{kk} - E^{(1)} = 0$$

Şu ýerden,birinji ýakynlaşmada E_k^0 dereje düzedişi tapýarys

$$E^{(1)} = \quad \omega_{kk} \qquad (1.18)$$

(1.17) –nji deňlemeden m≠k halda tapýarys

$$(E_m^0 - E_k^0)C_m^{(1)} + \omega_{mk} = 0$$

Şundan,birinji ýakynlaşmada amplitudalara $C_m^{(1)}$ düzedişleri alýarys.

$$C_m^{(1)} = \frac{\omega_{mk}}{E_k^0 - E_m^0}. \qquad (1.19)$$

Birinji çaklamany (1.13)-e goýup we (1.18) we (1.19)aňlatmalary göz öňüne tutup, alýarys.

$$\lambda^2\left\{(\omega_{mm} - \omega_{kk})\frac{\omega_{mk}}{E_k^0 - E_m^0} - E^{(2)}\delta_{mk} + (E_m^0 - E_k^0)C_m^{(2)} + \sum_{n\neq k}\frac{\omega_{mn}\omega_{nk}}{E_k^0 - E_n^0}\right\} + 0(\lambda^3) = 0,$$

Bu ýerde , $o(\lambda^3)$-λ^3 tertipli we ýokary çlenler belgilendi.Şu çlenleri inkär edip ,ikinji ýakynlaşmada $E^{(2)}$ we $C_m^{(2)}$ ululyklary kesgitlemek üçin, deňlemäni alarys.

$$(\omega_{mm} - \omega_{kk})\frac{\omega_{mk}}{E_k^0 - E_m^0} - E^{(2)}\delta_{mk} + (E_m^0 - E_k^0)C_m^{(2)} + \sum_{n\neq k}\frac{\omega_{mn}\omega_{nk}}{E_k^0 - E_n^0} = 0$$

Şu ýerden, m=k bolanda tapýarys.

$$-E^{(2)} + \sum_{n\neq k}\frac{\omega_{kn}\omega_{nk}}{E_k^0 - E_n^0} = 0.$$

Şundan,ikinji ýakynlaşmada energiýa düzedişi tapýarys.

$$E^{(2)} = \sum_{k\neq n}\frac{\omega_{kn}\omega_{nk}}{E_k^0 - E_n^0}. \qquad (1.20)$$

Eger, m≠ k bolanda, onda şol deňlemeden alýarys:

$$(\omega_{mn} - \omega_{kk})\frac{\omega_{mk}}{E_k^0 - E_m^0} + (E_m^0 - E_k^0)C_m^{(2)} + \sum_{n}\frac{\omega_{mn}\omega_{nk}}{E_k^0 - E_n^0} = 0,$$

diýmek,

$$C_2 = \frac{(\omega_{mm} - \omega_{kk})\omega_{mk}}{(E_k^0 - E_m^0)^2} + \sum_{n}\frac{\omega_{mn}\omega_{nk}}{(E_k^0 - E_n^0)(E_k^0 - E_m^0)} \qquad (1.21)$$

Şeýle ýol bilen ýokary ýakynlaşmalara geçilip biliner (1.15), (1.18), (1.19), (1.20) we (1.21) aňlatmalaryň esasynda, (1.12)-den alýarys.

$$E_k = E_k^0 + \lambda\omega_{kk} + \lambda^2\sum_{n\neq k}\frac{\omega_{kn}\omega_{nk}}{E_k^0 - E_n^0} + o(\lambda^3) \qquad (1.22)$$

$$C_m = \delta_{mk} + \lambda\frac{\omega_{mk}}{E_k^0 - E_m^0} + \lambda^2\left\{\frac{(\omega_{mm} - \omega_{kk})\omega_{mk}}{(E_k^0 - E_m^0)^2} + \sum_{n}\frac{\omega_{mn}\omega_{nk}}{(E_k^0 - E_n^0)(E_k^0 - E_m^0)}\right\} + o(\lambda^3)$$

Şu formulalardan görnüşi ýaly, $\hat{H}^0$ operatory bilen deňeşdirilende $\hat{W}$ operatoryň kiçiligi baradaky çaklama aşakdaky ýaly gatnaşygyň kiçidigini aňladýar:

$$\left|\frac{\lambda\omega_{nm}}{E_n^0 - E_m^0}\right| << 1\,, \qquad n \neq m$$

Muňa,tolgundyrma nazarýetiniň ulanylmagynyň şerti diýilýär. Ony şeýle görnüşde hem ýazyp bileris

$$\frac{|W_{mn}|}{|E_n^0 - E_m^0|} << 1, \qquad n \neq m.$$

Indi, çözgüdi „x“-aňlatmada ýazyp bolýar.

$$\psi_k(x) = \psi_k^0(x) + \sum_{m\neq k} \frac{W_{mk}}{E_k^0 - E_m^0}\psi_m^0(x) + \cdots,$$

$$E_k = E_k^0 + W_{kk} + \cdots\,, \qquad W = \int \psi_k^{0*}(x)\,\hat{W}\psi_k^0(x)\,dx$$

Soňky formuladan görnüşi ýaly, birinji ýakynlaşmada derejelere düzediş, tolgundyrylmadyk ýagdaýyndaky (ψ_k^0) tolgundyryjy energiýanyň orta bahasyna deňdir.

§ 3.Döremekligiň barlygyndaky tolgundyrma.

Wajyp meseleleriň köpüsinde, tolgundyrylmadyk sistemanyň $(\hat{H}^o)$ hususy bahasyna $E = E_n^0$ *bir* ψ_n^0 funksiýa däl-de, olaryň bir näçesiniň

$$\psi_{n1}^0, \psi_{n2}^0, \dots, \psi_{n\alpha}^0, \dots, \psi_{nf}^0$$

degişlidigine duş gelinýär,ýagny döremeklik bar.Eger indi nähilide bolsa $\hat{w}$ bir täsir etse, onda wajyp netije alynýar: tolgundyryjynyň täsiri astynda döredilen dereje E_n^0 ýakyn derejeleriň hataryna dargaýar.

$$E_{n1}^0, E_{n2}^0, \dots, E_{n\alpha}^0, \dots, E_{nf}^0.$$

Diýmek, döremeklik aýrylýar: gabat gelýän derejeler bölünýärler.

Şu bölünmekligiň sebäbini aýdyňlaşdyralyň.

Merkezi güýç meýdanda elektronyň derejesiniň 2l+1 gezek döredilendigine öň göz ýetirildi.Bu döremeklik, merkezi güýç meýdanda elektronyň energiýasynyň meýdana görä impulsyň momentiniň orientasiýasyna bagly däldigi bilen şertlendirilýär. Matematiki nukdaýnazardan bu gamiltonianyň aýlanma simmetriýasyna eýedigi bilen aňladylýar, ýagny gamiltonian

$$\hat{H}^0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \hat{U}(r), \qquad \left(r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right) \quad (3.1)$$

koordinat sistemasynyň aýlanmasynda,haçanda x, y, z koordinatlar x', y', z' koordinatlara geçende, üýtgemeýär. Dogrydanam, aýlanmada

$$\left.\begin{aligned} x^2 + y^2 + z^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2, \\ \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \end{aligned}\right\} \quad (3.2)$$

Sebäbi ∇ wektor operatory, wektoryň kwadraty bolsa aýlanmada üýtgemeýär.

Şeýlelikde,

$$\hat{H}^0(x,y,z) = \hat{H}^0(x^{'},y^{'},z^{'}) \qquad (3.3).$$

Eger goýulan tolgundyryjy sferiki simmetriýa eýe bolmasa, onda elektronyň energiýasy momentiň opientasiýasyna bagly bolup başlaýar we derejelerin-bölünmekligi emele gelýär.Şunuň bilen birlikde indi (3.3) deňleme hem ýerine ýetmeýär.

Şu mysalyň görkezişi ýaly,döremekligiň barlygy meýdanyň nähilide bolsa bir simmetriýasy,döremekligiň aýrylmagy bolsa şu simmetriýanyň bozulmagy bilen bagly.

Başga mysaly getireliň.Goý, x,y tekizlikde ossiltar bar diýeliň, üstesine-de ol ox we oy oklaryň her biri boýunça birmeňzeş w_0 ýygylykly yrgylda sezewar bolýar diýip hasap edeliň.Şeýle ossiltator üçin Şrýodingeriň deňlemesi şeýle görnüşe eýedir.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right)+\frac{\mu\omega_0}{2}(x^2+y^2)\psi = E\psi \qquad (3.4)$$

şu deňlemäniň gamiltoniany, oz okuň töwereginde koordinat sistemasynyň aýlanmagynda üýtgemän galýar.Diýmek, ol aýlanmak simmetriýasyna eýedir we döremeklige garaşylmalydyr.Soňky tassyklama göz ýetirmek üçin, (3.4)-de üýtgeýänleri bölüşdirmekligi amala aşyralyň:

$$\left.\begin{array}{c}\psi(x,y) = \psi_1(x)\psi_2(y), \\ E = E_1 + E_2\end{array}\right\} \qquad (3.5)$$

(3.5) – i(3.4) –e goýup,iki deňlemeleri alýarys

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}+\frac{\mu\omega_0{}^2}{2}x^2\psi_1 = E_1\psi_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi_2}{\partial y^2}+\frac{\mu\omega_0{}^2}{2}y^2\psi_2 = E_2\psi_2 \end{aligned}\right\} \qquad (3.6).$$

Şu deňlemeler ossilýatorlar üçin belli funksiýalara we belli hususy bahalara eýedirler.

$$\left.\begin{aligned} \psi_1(x) = \psi_{n_1}(x), \quad E_1 = \hbar\omega_0\left(n_1+\frac{1}{2}\right), \quad n_1 = 0,1,2,\ldots \\ \psi_2(y) = \psi_{n_2}(y), \quad E_2 = \hbar\omega_0\left(n_2+\frac{1}{2}\right), \quad n_2 = 0,1,2,\ldots \end{aligned}\right\} \qquad (3.7)$$

Onda (3.5)-den:

$$\psi_{n_1n_2}(x,y) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(x), \quad E_{n_1n_2}=\hbar\omega_0(n_1+n_2+1). \quad (3.8)$$

,,Esasy” kwant sany girizeliň

$$n = n_1+n_2+1, n_2 = n-n_1-1 \qquad (3.9)$$

Onda

$$\psi_{nn_1}(x,y) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n-n_1-1}(y), \quad E_n = \hbar\omega_0 n, \quad n = 1,2,3,\ldots \qquad (3.10)$$

Energiýanyň her bir E_n bahasyna n_1 funksiýalar $(n = 0,1,\ldots,n-1)$ degişli, diýmek döremeklik hakykatdanda bar.Goý indi diýeli, tolgundyryjynyň $\hat{\omega}$ wezipesi, ,,oy” okuň ugry arkaly yrgyldy üçin maýyşgaklyk koeffisiýetti üýtgetmekden durýar.Onda ,,oy” oky boýunça yrgyldynyň ýygylygy üýtgär we diýeli ω_1-e deň bolar.Onda, tolgundyrylan sistemanyň gamiltoniony bolar:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+\frac{\mu\omega_0 x^2}{2}+\frac{\mu\omega_1}{2}y^2,$$

$\hat{W}(y) = \frac{\mu}{2}(\omega_1^2-\omega_0^2)y^2$-tolgundyryjy.

Onda (3.10)-yň deregine alýarys:

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y),$$

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega_0 n_1 + \hbar\omega_0 n_2 + \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{\hbar\omega_1}{2},$$

ýa–da

$$\left.\begin{aligned} \psi_{n,n_1}(x,y) &= \psi_{n_1}(x)\psi_{n-n_1-1}(y)\ , \\ E_{nn_1} &= \hbar\omega_0 n_1 + \hbar\omega_1(n-n_1-1) + \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{\hbar\omega_1}{2} \end{aligned}\right\} \qquad (3.11)$$

Görnüşi ýaly,şol bir ,,n” ,ýöne n_1-iň dürli bahaly derejeleri dürli energiýa eýedirler.Tolgundyrylmadyk sistemanyň bir E_n derejesi $E_{n0}, E_{n1}, \dots, E_{n,n-1}$ derejelere bölünýär.Döremeklik aýrylýar. Jemläp aýdylanda, eger gamiltonian koordinatlaryň käbir özgertmelerine görä $(x,y,z \to x',y',z')$ inwarianlykda galýan bolsa, onda E^0 hususy bahalar döredilendir.Eger tolgundyryjy şu inwariantlygy bozsa, onda döremeklik aýrylýar.

§ 4.Angarmoniki ossilýator.

Tolgundyrma nazarýetiniň ýönekeý ulanylyşyna mysal edip angarmoniki ossilýatora seredeliň.Garmoniki ossilýator real mehaniki sistemalaryň hyýaly görnüşidir.Dogrydanam, bölejikleriň potensial energiýasy hiç wagt $\frac{\mu\omega_0^2}{2}x$ funksiýanyň üsti bilen berilmeýär, we has çylşyrymly $U(x)$ funksiýasy arkaly suratlandyrylýar:

$$U(x) = \frac{\mu\omega_0^2}{2}x^2 + \lambda x^3 + \cdots \quad (4.1)$$

Şeýle ossilýatora angarmoniki diýilýär.Şu aňlatmanyň goşmaça çleni kiçi diýip, angarmoniki ossilýatoryň kwantly derejelerini tapalyň.Tolgundyryjy hökmünde (4.1)-iň goşmaça çleni göz öňünde tutulýar.

$$\hat{W}(x) = \lambda x^3 + \cdots \qquad (4.2)$$

Tolgundyrylmadyk sistemanyň $(\lambda = 0)$ kwantly derejeleri, çyzykly garmoniki ossilýatoryň derejeleridirler.Onuň hususy bahalaryny we hususy funksiýalaryny

$$E_n^0 = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad \psi_n^0(x) \qquad (4.3)$$

arkaly belgiläliň.

Tolgundyryjy energiýanyň operatorynyň $\hat{w}$ matrisaly elementleri deňdir.

$$W_{mn} = \int \psi_m^{0*} \hat{W} \psi_n^0 dx = \lambda \int \psi_m^{0*} x^3 \psi_n dx = \lambda (x^3)_{mn} \quad , \quad (4.4)$$

Belli boluşy $(1.22.ser.)$ ýaly, tolgundyrylan sistemanyň k-a derejesiniň energiýasy ikinji ýakynlaşmada deňdir:

$$E_k = E_k^0 + \lambda (x^3)_{kk} + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \frac{(x^3)_{nk} \ (x^3)_{kn}}{E_k^0 - E_n^0} . \qquad (4.5).$$

Diýmek, mesele $(x^3)_{nm}$ matrisaly elementleri hasaplamakdan durýar.

Belli boluşy ýaly

$$X_{nm} = x_0 \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n-1,m} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n+1,m} \right\}, \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_0}} . \quad (4.6)$$

Matrisalaryň köpeltmek düzgüni boýunça X_{nm} matrisalardan $(x^3)_{nm}$ matrisalary hasaplap bileris, ýagny

$$(x^3)_{kn} = \sum_l X_{kl} (x^2)_{ln} = \sum_l X_{kl} \cdot \sum_m X_{lm} X_{mn} =$$
$$= \sum_l \sum_m X_{kl} X_{lm} X_{mn} \qquad (4.7)$$

(4.7)-a (4.6)-dan X_{kl}, X_{lm}, X_{mn}, matrisalaryň bahalaryny goýup alarys.

$$(x^3)_{kn}=x_0^3\sum_l\sum_m\left\{\left(\sqrt{\frac{k}{2}}\delta_{k-1,l}+\sqrt{\frac{k+1}{2}}\delta_{k+1,l}\right)\left(\sqrt{\frac{l}{2}}\delta_{l-1,m}+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\sqrt{\frac{l+1}{2}}\delta_{l+1,m}\right)\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{m-1,n}+\sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{m+1,n}\right)\right\}.$$

Özgertmeleriň has çylşyrymlygy sebäpli, ony has giňişleýin ýerine ýetireris.Ilki skobkalary biri-birine köpelderis we yzly-yzyna olary l we m sanlary boýunça jemläris:

$$(x^3)_{kn}=x^3\sum_l\sum_m\left\{\sqrt{\frac{kl}{4}}\delta_{k-1,l}\,\delta_{l-1,m}+\sqrt{\frac{k(l+1)}{4}}\delta_{k-1,l}\delta_{l+1,m}+\right.$$
$$\left.+\sqrt{\frac{(k+1)l}{4}}\delta_{k+1,l}\delta_{l-1,m}+\sqrt{\frac{(k+1)(l+1)}{4}}\,\delta_{k+1,l}\,\delta_{l+1,m}\right)\times$$
$$\left.\times\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{m-1,n}+\sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{m+1,n}\right)\right\}=x^3\sum_m\left(\sqrt{\frac{k(k-1)}{4}}\delta_{k-2,m}+\right.$$
$$\left.+\sqrt{\frac{k^2}{4}}\,\delta_{k,m}+\sqrt{\frac{(k+1)^2}{4}\delta_{k,m}}+\sqrt{\frac{(k+1)(k+2)}{4}}\delta_{k+2,m}\right)\times$$
$$\times\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{m-1,n}+\sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{m+1,n}\right)=x^3\sum_m\left(\sqrt{\frac{k(k-1)m}{8}}\,\delta_{k-2,m}\delta_{m-1,n}+\right.$$
$$+\sqrt{\frac{k(k-1)(m+1)}{8}}\,\delta_{k-2,m}\delta_{m+1,n}+\sqrt{\frac{k^2m}{8}}\delta_{km}\delta_{m-1,n}+$$
$$+\sqrt{\frac{k^2(m+1)}{8}}\delta_{k,m}\delta_{m+1,n}+\sqrt{\frac{(k+1)^2m}{8}}\delta_{km}\,\delta_{m-1,n}+\sqrt{\frac{(k+1)^2(m+1)}{4}}\delta_{km}\,\delta_{m+1,n}+$$
$$\left.+\sqrt{\frac{(k+1)(k+2)m}{8}}\delta_{k+2,m}\delta_{m-1,n}+\sqrt{\frac{(k+1)(k+2)(m+1)}{8}}\delta_{k+2,m}\delta_{m+1,n}\right)=$$

$$= x_0^3\left(\sqrt{\frac{k(k-1)(k-2)}{8}}\delta_{k-3,n} + \sqrt{\frac{k(k-1)^2}{8}}\delta_{k-1,n} + \right.$$

$$+\sqrt{\frac{k^3}{8}}\delta_{k-1,n} + \sqrt{\frac{k^2(k+1)}{8}}\delta_{k+1,n} + \sqrt{\frac{k(k+1)^2}{8}}\delta_{k-1,n} + \sqrt{\frac{(k+1)^2}{8}}\delta_{k+1,n}$$

$$\left.+\sqrt{\frac{(k+1)(k+2)^2}{8}}\delta_{k+1,n} + \sqrt{\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{8}}\delta_{k+3,n}\right) =$$

$$= x_0^3\left\{\sqrt{\frac{k(k-1)(k-2)}{8}}\delta_{k-3,n} + \sqrt{\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{8}}\delta_{k+3,n} + \right.$$

$$+\left(\sqrt{\frac{k(k-1)^3}{8}} + \sqrt{\frac{k^3}{8}} + \sqrt{\frac{k(k+1)^3}{8}}\right)\delta_{k-1,n} + \left(\sqrt{\frac{(k+1)k^2}{8}} + \right.$$

$$\left.\left.+\sqrt{\frac{(k+1)^3}{8}} + \sqrt{\frac{(k+1)(k+2)^2}{8}}\delta_{k+1,n}\right)\right),$$

ýa-da

$$(x^3)_{kn} = \left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\sqrt{\frac{k(k-1)(k-2)}{8}}\delta_{k-3,n} + \right.$$

$$+\sqrt{\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{8}}\delta_{k-3,n} +$$

$$\left.+\sqrt{\frac{9k^3}{8}}\delta_{k-1,n} + \sqrt{\frac{9}{8}(k+1)^3\delta_{k+1,n}}\right). \qquad (4.8)$$

Şu taýdan görnüşi ýaly $(x^3)_{kk} = 0$, we şonuň üçin birinji ýakynlaşmada E^0 energiýa düzediş nola deň.Ikinji ýakynlaşmadaky düzediş ýönekeý hasaplanylýar, sebäbi (4.8)-e laýyklykda jemden diňe dört çlen galýar:

$n = k \pm 3$ we $n = k \pm 1$ .Mundan başga-da $(x^3)_{kn} = (x^3)_{nk}$. Ýene-de, hasaba alynmaly

$$E_k^0 - E_n^0 = \hbar\omega_0\left(k + \frac{1}{2} - n - \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega_0(k-n),$$

onda, diýmek şu ýerden $n = k \pm 3$ bolanda alýarys. $E_k^0 - E_{k+3}^0 = \pm 3\hbar\omega_0$ we $n = k \pm 1$ halda bolsa

$$E_k^0 - E_{k+1}^0 = \pm\hbar\omega_0.$$

Şeýlelikde, (4.8)-i (4.5)-e goýup, alýarys.

$$E_k = E_k^0 - \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3\left\{\frac{1}{3}\cdot\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{8} - \frac{1}{3}x\right.$$
$$\left. x\frac{k(k-1)(k-2)}{8} + \frac{9}{8}(k+1)^3 - \frac{9}{8}k^3\right\} = E_k^0 - \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3\cdot$$
$$\cdot\left\{\frac{1}{3\cdot 8}(k^3+6k^2+11k+6-k^3+3k^2-2k) + \frac{9}{8}(k^3+3k^2+\right.$$
$$\left.+3k+1-k^3)\right\} = E_k^0 - \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3\cdot\left\{\frac{1}{3\cdot 8}(9k^2+9k+6)+\right.$$
$$\left.+\frac{9}{8}(3k^3+3k+1)\right\} = E_k^0 - \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3\cdot\left\{\frac{1}{3\cdot 8}(9k^2+9k+6+\right.$$
$$\left.+27)(3k^2+3k+1)\right\} = E_k^0 - \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3\cdot\left\{\frac{1}{8}(3k^2+3k+2+\right.$$
$$\left.+27k^2+27k+9)\right\}.$$

Ahyrky netije şeýle ýazylýar.

$$E_k = \hbar\omega_0\left(k+\frac{1}{2}\right) - \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_0}\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3\cdot\frac{15}{4}\left(k^2+k+\frac{11}{30}\right), \quad (4.9)$$

bu ýerde, $k = 0,1,2,\ldots$

Şu, düzedíji angarmoniki çleni $\lambda(x^3)$ hasaba alyp, ossilýatoryň energiýasynyň kwantly derejeleri üçin gözlenilen ýakynlaşan aňlatmadyr.

Şu ýakynlaşmanyň ulanylmak şertini ýeňil tapyp bileris.

Tolgundyryjy energiýanyň matrisaly elementleri $\lambda(x^3)_{kn}$, uly kwant sanlary k üçin ululyklaryň tertibi boýunça, (4.8)-e laýyklykda deňdir.

$$\omega_{kn} \approx \lambda\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3 k^{\frac{3}{2}}$$

Derejeleri tapawudy $E_k^0 - E_n^0 \approx \hbar\omega_0$
Şeýlelikde, tolgundyrma nazaryýetiň ulanylmagynyň şerti aşakdaka eltilýär.

$$\lambda\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^3 \cdot \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\hbar\omega_0} << 1$$

Diýmek,alynan ýakynlaşma , beýle bir ýokary däl derejeler üçin ulanylýar,ýagny

$$k << \left(\frac{\hbar\omega_0}{\lambda}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{\mu\omega_0}{\hbar},$$

Şundan , yrgyldynyň amplitudasynyň beýle bir uly bolmaly däldigi gelip çykýar.

XII bap.Köp bölejikleriň nazaryýetiniň esaslary.

§1.Mikrobölejikleriň birmeňzeşlik prinsipi.

Elementar bölejekleriň birmeňzeşlikleri olaryň has uly fundamental häsiýetleriniň biridir we oňa laýyklykda berilen hilli bölejikleriň ählisi biri-birine barabardyr.Älemde takmynan 10^{80} elektronlar bar.Olaryň hemmesi birmeňzeşlik we tapawutlandyryp bolmaýar we bu protonlara, we neýtronlara, we şu bölejiklerden düzülen atomlara degişlidir.Bir meňzeş (bir derejeli ýa-da deň) bölejikler diýip massasy μ,zarýady e, spini s we başga ululyklary deň bolan bölejiklere aýdylýar, olar deň şertlerde özlerine bir meňzeş alyp barýarlar.Kwant mehanikasyna daýanyp, birmeňzeş bölejikleriň ähli wekilleri biri-biri bilen deňmi, ýa-da ýok diýen soragy çözüp bolýar.

Şu soragyň nähili çözülýändigini anyklamak maksady bilen N birmeňzeş bölejiklerden düzülen sistema seredeliň. ,,k”-a bölejige degişli koordinatalary q_k harpy bilen belgiläliň. q_k diýip , bölejikleriň agyrlyk merkezleriniň orunlaryny (x_k, y_k, z_k), we mümkin, ýene dördünji, bölejigiň spinini (s_k) kesgitleýän koordinatalar düşünilýär.

Bölejikleriň massasyny μ, daşky meýdandaky energiýasyny $U(q_k, t)$, ,,k” we ,,j” bölejikleriň özara täsirleşme energiýasyny bolsa $w(q_k, q_j)$ bilen belgiläliň.Onda şeýle bölejikleriň sistemasynyň gamiltoniany deň bolar.

$$\widehat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \sum_{k=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_k^2 + U(q_k, t) \right] +$$

$$+ \sum_{k>j=1}^{N} \omega(q_k, q_j) \ . \qquad (1.1).$$

eger (1)-de ,,k” bölejigiň (q_k) we ,,j” bölejigiň (q_j) koordinatlarynyň ýeri çalşyrylsa, onda gamiltonian üýtgemeýär.Dogrydanam, şeýle çalşyrmak, gamiltoniana girýän goşulyjylaryň ýerleriniň çalyşmagyny aňladýar.

$$\widehat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) =$$

$$= \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) \qquad (1.2).$$

Şeýlelikde, birmeňzeş bölejikleriň sistemasynyň gamiltoniany ondaky iki jübüt bölejikleriň koordinatlarynyň çalşyrmagyna görä inwariantdyr (simmetrikdir).Şunuň bilen baglylykda täze operatory-çalşyrma $\hat{P}_{kj}$ operatory girizmek oňaýlydyr.Şu operatoryň görkezişi ýaly k we j bölejikleriň koordinatlary ýerlerini çalyşmaly.Meselem, eger $f(\dots, q_k, \dots, q_j, \dots)$ funksiýasy bar bolsa, onda

$$\hat{P}_{kj} f(\dots, q_k, \dots, q_j, \dots) = f(\dots, q_j, \dots, q_k, \dots) \qquad (1.3)$$

Şu operatoryň çyzykly operatorlaryň sanyna degişlidigi tebigydyr.

$\hat{P}_{kj}$ operatoryň birmeňzeş bölejikleriň sistemasynyň $\hat{H}$ gamiltoniany bilen kommutirleşýändigini bellemelidiris, ýagny

$$\hat{P}_{kj}\hat{H} = \hat{H}\hat{P}_{kj} \qquad (1.4)$$

„N” bölejikleriň sistemasynyň tolkun funksiýasyny $\psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ diýip alynsa, onda ol Şrýodingeriň aşakdaky deňlemesini kanagatlandyrmaly:

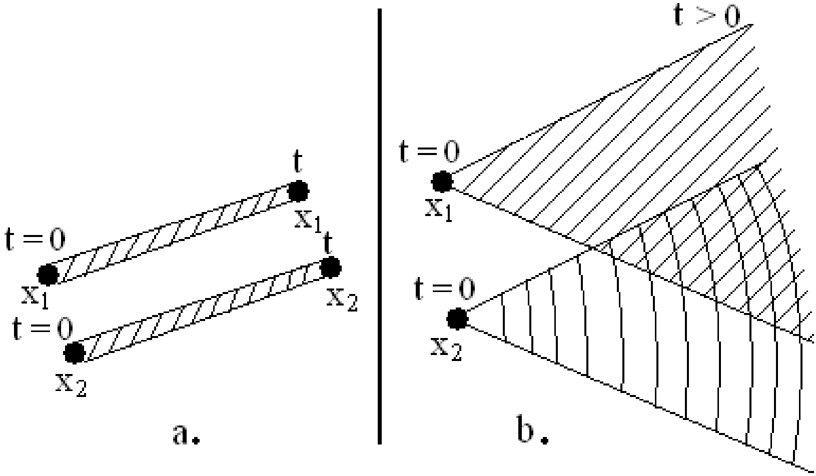
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \qquad (1.5)$$

Şu deňlemede k we j bölejikleriň koordinatlaryny çalşyrmak üçin onuň iki tarapyna $\hat{P}_{kj}$ operator bilen täsir edeliň:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\cdot\left(\hat{P}_{kj}\psi\right)=\hat{H}\left(\hat{P}_{kj}\psi\right). \qquad (1.6)$$

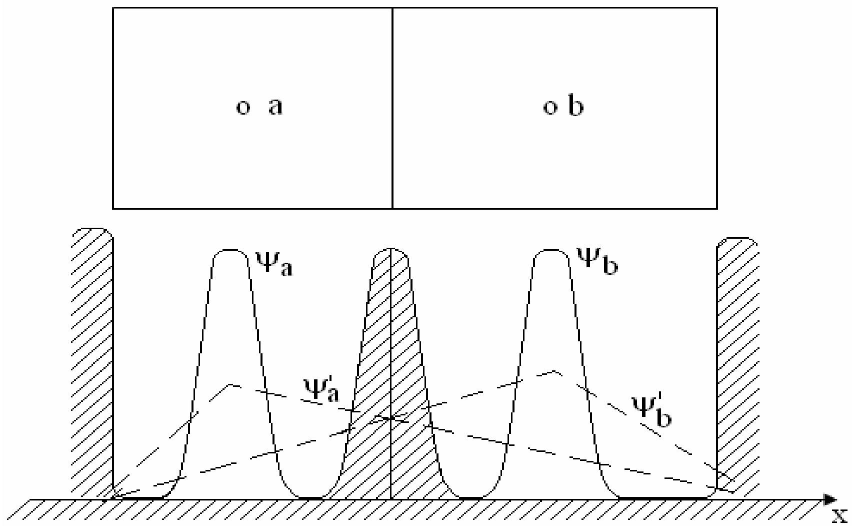
Eger ψ (1.5)-iň çözgüdi bolýan bolsa, onda $\psi^{'} = \hat{P}_{kj}\psi$ hem şu deňlemäniň çözgüdi bolmaly we şeýlelikde, ψ bilen deňlikde $\psi^{'}$ sistemanyň mümkin bolan ýagdaýlarynyň birini aňladýar.Çalşyrmagy dowam etdirip, ýagdaýlary boýunça bölejikleriň paýlanmagyny biri-birinden tapawutlandyrýan, sistemanyň täze mümkin ýagdaýlaryny $\psi^{''}, \psi^{''}, \ldots$ alýarys.

Şunuň şeýledigine göz ýetirmek aşakdaky çyzgylara seredeliň.



1-nji çyzgy

Şu çyzgyda, klassykyy (a) we kwant (b) nazaryýetlerine laýyk bölejikleriň çaklanan traýektoriýalary berilýär.Klassiki fizikasynda prinsipde bölejigiň traýektoriýasyny yzarlasaň bolýar,ýagny t=0 wagt pursatynda olaryň ýerleri bellenilse, onda islendik wagtda olaryň her biriniň nirede ýerleşýändigini aýdyň bolýar.Kwant mehanikasynda şeýle tassyklama ýerlikli däldir.Eger t=0 wagt pursatynda olaryň ýerleri belgilense, onda dürli bölejiklere degişli tolkun paketleri ýaýraýarlar we biri-birini ýapýarlar.Şol sebäpli t>0 wagtda olary özara tapawutlandyrp bolmaýar.
Başga mysal getireliň.



2-nji çyzgy

Goý bölejikler içi bölünen ýaşikde ýerleşýärler diýiliň (çyzgy-2). Ýaşigiň açyk däl gapdallary , olary ýakynlaşdygyňça bölejikleriň potensial energiýasynyň artýandygyny aňladýar.Ýaşigiň içini bölýän germewi potensial barýer ýaly kabul edilýär.Bu barýer ýaşigiň aşagynda suratlandyrylýar.Eger bölejigiň energiýasy barýeriň beýikliginden kiçi bolsa, onda klassykyy mehanikasyna laýykda, bölejikler ondan geçip bilmeýärler, olar üçin germew açyk däl.Şonuň üçin, wagtyň islendik pursatynda bölejikleriň ýerlerini ýaşigiň çep ýa-da sag böleginde tapawutlandyryp bolýar:

Kwant mehanikasyna laýykda bolsa, gutarnykly beýikli islendik barýer üçin tunnel effekti zerarly bölejigiň ondan geçmegi ähtimaldyr. Eger başda bölejikleriň tolkun funksiýalary ψ_a we ψ_b bolýan bolsa (çyzgy-2.a), onda wagtyň geçmegi sebäpli olar ψ'_a weψ'_b öwrülýärler, diýmek bölejik „a” sagda, bölejik „b” bolsa çepde tapylyp biliner.

Şeýlelikde, kwant mehanikasy nukdaý nazardan, bölejikler doly suratda özleriniň $<<$ aýrybaşgalygyny $>>$ ýitirýärler we prinsipde tapawutlandyrylmaýan halda bolýarlar.Şeýle tassyklama mikro bölejikleri tapawutlandyryp bolmaýan prinsipiň mazmunyny düzýär. Başgaça aýdylanda biri-birine birmeňzeş bölejikleriň ýerlerini çalşyrylyp alynan kwant sistemalaryň ýagdaýlaryny, şol bir ýagdaý ýaly seretmeli.

§ 2.Simmetrik we antisimmetrik ýagdaýlar.

Mikrobölejikleriň birmeňzeşlik prinsipinden gelip çykyşy ýaly ; ψ we ψ' funksiýalar hakygatdan şol bir ýagdaýy suratlandyrýarlar.Şol bir fiziki ýagdaýy suratlandyrýan tolkun funksiýalary bir-birinden diňe hemişelik köpeldiji bilen tapawutlanýarlar.Diýmek, tojdestolaýyk prinsipinden gelip çykýar, ýagny

$$\psi'(q_1, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) = \lambda\psi(q_1, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t),$$

nirede, λ-käbir hemişelik köpeldijisi.Şu deňleme, çalşyrma operatorynyň kömegi bilen şeýle görnüşde ýazylyp bilner.

$$\hat{P}_{kj}\psi = \lambda\psi \qquad (2.1).$$

(2.1)-nji deňlemede, çepde funksiýa $\hat{P}_{kj}$ operator täsir edýär, sagda bolsa λ sana köpeldilen şol funksiýanyň ýene-de özi ýerleşýär. Diýmek, (2.1) deňleme çalşyrma $\hat{P}_{kj}$ operatoryň ψ hususy funksiýasy we λ hususy bahasy üçin deňlemelidir.Şu hususy funksiýalaryň we hususy bahalaryň nähillidiklerini kesgitlemek kyn däldir.Onuň üçin (2.1)-e ýene-de bir gezek $\hat{P}_{kj}$ operatory ulanalyň.Alýarys

$$\hat{P}^2_{kj}\psi = \lambda\hat{P}_{kj}\psi = \lambda \cdot \lambda\psi = \lambda^2\psi$$

Iki gezek ulanylan $\hat{P}_{kj}$ operatory ψ funksiýany üýtgetmeýär we, şonuň üçin

$$\psi = \lambda^2\psi,$$

ýagny

$$\lambda^2 = 1.$$

Şu ýerden, çalşyrma $\hat{P}_{kj}$ operatoryň hususy bahalaryny alýarys:

$$\lambda = \pm 1.$$

Onda.(2.1)-iň esasynda degişli hususy funksiýalaryň şeýle häsiýetlere eýediklerini gelip çykýar:

$$\hat{P}_{kj}\psi = +\psi\,, \;\; \lambda = +1\,, \qquad (2.2)$$

ýa-da

$$\hat{P}_{kj}\psi = -\psi\,, \;\; \lambda = -1\,, \qquad (2.3)$$

ýagny çalşyrma $\hat{P}_{kj}$ operatoryň hususy funksiýalary, „k” bölejigiň (q_k) we „j” bölejigiň (q_j) koordinatlary çalşyrylanda ýa üýtgemeýärler (2.2), ýa-da özüniň alamatyny tersine üýtgedýärler (2.3).Birinji funksiýalara k we j tertipli bölejikleriň çalşyrylmagyna göra simmetrik, ikinjilere bolsa antisimmetrik diýilýär.Bölejikleriň tojdestwolaýyk prinsipinden birmeňzeş bölejikler üçin gutarnykly diňe iki ýagdaýyň mümkindigi gelip çykýar:

$$\hat{P}_{kj} \cdot \psi_s = \psi_s \qquad (k, j - islendik) \tag{2.4}$$

-ähli bölejiklerde simmetrik we

$$\hat{P}_{kj} \cdot \psi_a = -\psi_a \qquad (k, j - islendik) \tag{2.5}$$

-ähli bölejiklerde antisimmetrik.

Şu iki ýagdaýlaryň arasynda geçiş bolup bilmeýär: eger wagtyň nähili-de bolsa bir pursatynda sistema simmetrik (ψ_s), ýa-da antisimmetrik (ψ_a) ýagdaýlarda ýerleşen bolsa, onda ol elmydama simmetrik ýa-da antisimmetrik ýagdaýda ýerleşýär.Şu wajyp düzgünnamany subut etmek üçin Şrýodingeriň deňlemesinden peýdalanalyň.Şrýodingeriň

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

Deňlemesini aşakdaky görnüşde ýazmak oňaýlydyr:

$$d_t\psi = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi dt, \tag{2.6}$$

bu ýerde d_t-tolkun funksiýanyň d_t wagtda artmasyny aňladýar.

Goý wagtyň t=0 pursatynda ψ tolkun funksiýa simmetrik diýeliň $(\psi = \psi_s)$. Onda $\widehat{H}$-yň simmetrikligi sebäpli $\widehat{H}\psi_s$ ululyk, ýagny bölejikleriň koordinat funksiýasy hem simmetrik bolýar, we funksiýanyň $d_t\psi$ artmasy bölejikleriň kordinatalaryndan simmetrik funksiỳa bolỳar.

Şu oỳlanmany çalyçma P_k, operatoryň kömegi bilen şeỳle aňladyp bilner:

$$\hat{P}_{kj}\left(\hat{H}\psi_3\right) = \hat{H}\left(\hat{P}_{kj}\psi_s\right) = \hat{H}\psi_s$$

Şu ỳerde (2,6)-nyň komegi bilen ähli k,j jübiti üçin aşakdaky gelip çykỳar.

$$P_{kj}(d_t\psi_s) = d_t\psi_s \qquad (2.7)$$

Şu subutnamanyň tassyklaỳşy ỳaly, wagtyn t=0 pursatyndaky simmetrik funksiỳasy , wagtyň goňşy pursatlarynda (öň we soň) hem simmetrikligine galỳar. Diỳmek funksiỳanyň simmetrikligi $t = -\infty$ - den $t = +\infty$-e çenli wagtyň ähli pursatynda üỳtgemeỳär. Birkemsiz şuňa meňzeşlikde subudy antisimmetrik funksiỳasy üçin hem yerine ýetirip bolỳar.

Goỳ, t=0 wagyt pursatynda sistemanyň ỳagdaỳyny suratlandyrỳan ψ funksiỳa antisimmetrik diỳeliň, ($\psi = \psi_0$). Onda

$$P_{kj}\psi_a = -\psi_a.$$

Mundan soň

$$\hat{P}_{kj}\left(\hat{H}\psi_a\right) = \hat{H}\left(\hat{P}_{kj}\psi_a\right) = -\hat{H}\psi_a,$$

Onda (2-6) –da gelip çykỳar.

$$\hat{P}_{kj}(d_t\psi_a) = -d_t\psi_a \qquad (2.8)$$

ỳagny ψ_a antisimmetrik funksiỳasynyň artmasynyň özi hem antisimmetrikdir. Subut edilen teoremanyň görkezişi ỳaly ỳagdaỳyň iki klasa bölüjilik <<absalỳut>>häsiỳetidir; egerde haỳsy-da bolsa bir sistema wagtyň haỳsy-da bolsa bir pursatynda ψ_s ỳa-da ψ_a ỳagdaỳlarda bolsa, onda ol hiç wagt bir klasdan başga geçmeỳär. Ähli şertlerde şeỳle tassyklama ỳerine ỳetỳär. Sebäbi daşky meỳdan ỳa-da şert birmeňzeş bolejiklere birmeňzeş täsir edỳär, we diỳmek daşky meỳdanyň islendik üỳtgemeginde gamiltatsion simmetrikligine galỳar.

§3. Bozeniň bölejikleri we Ferminiň bölejikleri

Biz meňzeş bölejikleriň sistemasynyň ỳagdaỳyny suratlandyrmak üçin iki mümkinçiligiň ($\psi = \psi_s$ ya-da $\psi = \psi_a$) nähili halda haỳsy birinji ulanmaly diỳen soragyň çözülmelidigi şübhesizdir. Ol ỳagdaỳlaryň biri-biri bilen absalỳut goşulmaỳandyklary hem kwant mehanikasynda subut ediỳär. Şol sebäpli bölejikleriň nähili hem bolsa bir sistemasy üçin ψ_a ỳa-da ψ_s fuksiỳalaryň haỳsy biriniň saỳlanyp alynmagy, daşky meỳdanyň häsiỳetini ỳa-da nahili hem bolsa başga bir ỳagdaỳ bilen däl-de sistemany emele getirỳän bölejikleriň diňe tebigaty bilen görkezilip bilner.

Tebigatda iki klasyň hem her birine degişli bölejikleriň bardygy tejribe dikeldipdir.

Şunlukda aşakdaky düzgün ỳerine ỳetỳär: Plankyň hemişeliginiň bitin sanyna barabar spinli bölejikler

$$s=\hbar m, \qquad m=0,1,2,\ldots \qquad (3.1)$$

simmetrik funsiỳalary (ψ_s) bilen suratlandyrylỳar. Şeỳle bölejikler Bozenyň bölejikleri, olaryň toplumyna bolsa, şeỳle bölejikler üçin statistikany işläp taỳarlan fizikleriň atlary boỳunça, Bozeniň-Eỳnşteỳniň ansambllary diỳilỳär.

Tersine, Plankyň hemişeliginiň ỳarym bitin sanyna deň spine eỳe bölejikler:

$$S=\hbar m, \; m=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\ldots \qquad (3.2)$$

antisimmetrik funksiỳalary (ψ_s) bilen suratlandyrylỳar. Olara Ferniň bölejikleri, toplumyna bolsa-Ferminiň-Diragyň ansambllary diỳilỳär.

Ähli ỳönekeỳ “elementar” bölejikleri $0,\frac{1}{2}$ ỳa-da 1 spinlidir.

Elektronlar, protonlar, neỳtronlar, giperonlar, μ-mezon, neỳtrino we olaryň antibölejikleri $\frac{1}{2}$ spine

eỳedir. Şonuň üçin olaryň ählisi Ferminiň bölejikleri (“fermionlar”). π- mezonlaryň we K-mezonlaryň spini 0-a deň we olar Bozeniň bölejikleri (“bozonlar”).
Ỳeke bir elementar bölejigiň-fotonyň spini 1-e deň. Ol hem Bozeniň-Eỳnşteỳniň statistikasyna boỳun egỳär.
Çylşyrymly sistemalaryň (meselem atomyň ỳa-da ỳadronyň), bölejikleriň klaslarynyň haỳsy birine degişlidikleri, çylşyrymly sistemany emele getirỳän has ỳönekeỳ bölejikleriň sany we klasy bilen kesgitlenỳär. Mysal üçin, wodorodyň atomyna seredeliň. Wodorodyň atomy Ferminiň iki bölejiklerinden (proton we elektron) durỳan sistemadyr. Normal ỳagdaỳda wodorodyň jemleỳji mehaniki momentini almak üçin protonyň mehaniki momenti (spini) we elektronyň spini goşulỳar. Olaryň her biriniň momenti $\pm\frac{h}{2}$, onda normal ỳagdaỳda wodorodyň atomynyň umumy momenti 0 ỳa-da $\pm\frac{h}{2}$ bolup bilỳär, ỳagny Plankyň hemişeliginiň bitin sany bilen ölçenilỳär.
Indi wodorod atomlarynyň ansamblyna seredeliň. k-a atomyň protonynyň koordinatalaryny Q_k, elektronyňkyny bolsa ξ_k arkaly belgiläliň. Onda N wodorod atomlardan duran sistemany suratlandyrỳan tolkun funksiỳa şeỳle görnüşdedir.

$$\Psi = \Psi(Q_1, \xi_1, \dots, Q_k, \xi_k, \dots, Q_N, \xi_N, t) \qquad (3.3)$$

Wodorod atomlarynyň her birini bir bölejik ỳaly seredeliň. Onda wodorod atomlarynyň ikisiniň (k ỳa-da j) ỳagdaỳlary çalşyrylsa, onda bu bir wagtda “k” we “j” atomlaryň ỳadrolarynyň Q_k,Q_j we elektronlarynyň ξ_k, ξ_j koordinatalarynyň çalyşmaklaryny aňladỳar. Elektron we protonlar Ferminiň bölejikleri diỳip hasaplanylỳar, şonuň üçin islendik iki jübüt ỳadrolaryň (Q_k we Q_j) çalşyrylmagyna görä Ψ tolkun funksiỳa antisimmetrik bolmalydyr.

Edil şonuň ỳaly iki jübüt elektronlaryň (ξ_k we ξ_j) çalşyrylmagyna görä hem ol antisimmetrikdir. Şeỳlelikde “k” we “j” protonlaryň çalşyrylmagynda Ψ alamatyny üỳtgedỳär, “k” we “j” elektronlaryň çalşyrylmagynda ol ỳene-de alamatyny üỳtgedỳär. Diỳmek, wodorod atomlary çalşyrylanda, haçan-da bir wagtda jübüt protonlar we übüt elektronlar çalşyrylsalar Ψ alamatyny üỳtgemeỳär, ỳagny wodorod atomlarynyň çalşyrylmagyna görä Ψ simmetrikdir we wodorod atomlary Bozeniň bölejikleriniň sanyna girỳärler.

Edil şonuň ỳaly pikiri, iki protondan we iki neỳtrondan durỳan α-bölejikleri üçin hem ỳerine ỳetirip bolar. Protonlaryň we neỳtronlaryň aỳratynlykda ỳerleriniň çalyşmaklaryna görä α-bölejikleriň sistemasy üçin tolkun funksiỳanyň antisimmetrik bolmaklygyndan ugur alyp, α-bölejikleriň çalşyrylmaklaryna görä tolkun funksiỳanyň simmetrik bolmalydygyna gelỳäris, ỳagny α-bölejigi Bozeniň bölejikleriniň sanyna girỳär.

α-bölejigiň umumy momenti, her biri $\frac{h}{2}$ bolan dört spinlerden düzülỳär, diỳmek bitin san bolmaly. Dogrudanam, α-bölejigiň mehaniki momenti 0-a deň.

§4. Pauliniň prinsipi we onuň kwant mehanikasynda aňladylyşy.

Fermi tipli bölejikleriň esasy özboluşlygyna seredeliň. Şu özboluşlygyň fundamental ähmiỳeti, diňe şeỳle çynsly bölejikleriň, kwant mehanikanyň matematiki apparatynyň işlenilip döredilmeginden has öň W.Pauli tarapyndan kesgitlenilen, Pauliniň prinsipine boỳun egỳändikleri bilen düşundirilỳär.

Şu prinsip ỳönekeỳ görnüşde, berlen sistemada şol bir kwant ỳagdaỳda birden artyk elektronyň ỳerleşip bilmejekdigini tassyklaỳar.

Şu prinsipi mysalyň üsti bilen düşündireliň. Merkezi güỳç meỳdanda hereket edỳän elektronyň kwant ỳagdaỳy dört kwant sanlary bilen häsiỳetlendirilỳär. Olar:

1. Baş kwant sany "n". Ol atomda elektronyň umumy ätiỳaçlyk energiỳasyny we berlen elektronyň ỳerleşen gabygyny kesgitleỳär. Baş kwant san diňe bitin sanly bahalary alỳar: 1,2,3,4,5,6,7,…; şu bahalara K-, L-, M-, N-, O-, P-, Q- we başga gabyklar degişlidir. "n"-i bir bahaly atom elektronlarynyň toplumy elektronly gabygy emele getirỳär, eger ol, n-iň berlen bahasynda mümkin bolan maksimum

elektronlaryň sanyny saklasa, onda gabyk doldurylan diỳip hasaplanylỳar.

2. Orbital kwant sany “l”. Şu san, ỳadro görä elektronyň hereket mukdarynyň orbital momentiniň ölçegidir we berlen n-de gabykda elektronyň dürli energetiki ỳagdaỳyny häsiỳetlendirỳär. “n” we “l” sanlaryň bahalarynyň birmeňzeş birikmeginde elektronlaryň toplumy elektronly aşaky gabygy emele getirỳär. Şonuň üçin s-, p-, d-, f- we başga aşaky gabyklar tapawutlandyrylỳar. Berlen “n” üçin “l” ululyk 0-dan (n-1)-e çenli bahalary alỳar. Şeỳlelikde, l-iň bahalarynyň umumy sany n ululyga deň.Dogrudan-da n=1 üçin l=0,ỳagny diňe bir baha alynỳar; n=2 üçin l=0 we 1;n=3 üçin l=0,1 we 2 we ş.m. l-iň bahalaryna baglylkda s-aşaky gabyk (l=0), p-aşaky gabyk (l=1), d-aşaky gabyk (l=2,)f-aşaky gabyk (l=3) we başgalar, tapawutlanỳar, olary emele getirỳän elektronlara bolsa s-,p-,d-,f-elektronlar we başgalar diỳilỳär.

3. Magnit kwant sany “m” . Ýadro meỳdanda elektrik hereketleri bilen şertlendirilen q elektronyň magnit momenti bilen ol bagly. Şu san hem diňe bitin sanly bahalary “-*l*”-den “+*l*”-e çenli alỳar, üstesine-de “0”-a deň bahany hem girizỳär. Meselem *l*=3 üçin , $m = \pm 1, \pm 2, \pm 3$.Şeỳlelkde berlen *l*-de m-iň umumy bahalarynyň sany (2*l*+1)-e deň we berlen aşaky gabykda elektronlaryň ỳerleşip biljek dürli ỳagdaỳlaryň sanyny kepillendirỳär.

4. Spin kwant sany m_s. Şu san, elektronlaryň özüniň okunyň töwereginde aỳlanmasynyň hususy

momentini häsiỳetlendirỳär, we diňe iki bahany $\left(+\frac{1}{2} we -\frac{1}{2}\right)$ alỳar. Diỳmek, m-iň berlen bahasyna jogply iki elektron, spin kwant sanyň alamaty boỳunça tapawutlanỳar.

Şaỳlelikde, kwant ỳagdaỳ doly suratda ỳokarda getirilen dört sanlar bilen berilỳär. Pauliniň prinsipi, şeỳle ỳagdaỳda, ỳa umuman elektron ỳok , ỳa-da diňe biri bar diỳip tassyklaỳar. Birden artyk elektron onda bolup bilmez. Şol bir n, *l* we m bilen kesgitlenỳän ỳagdaỳda spini gapmagarşylykly iki elektrony $(m_s = \pm\frac{1}{2})$ ỳerleşdirip bolar. Indi Pauliniň prinsipiniň, kwant mehanikasynda bölejekleriň birmeňzeşlik prinsipiniň netijesidigini subut edeliň. Meseläni ỳönekeỳleşdirmek maksady bilen subutnamany diňe iki bölejikden duran ansambl üçin ỳerine ỳetireliň. Bölejikleriň ỳagdaỳy $\psi(q_1, q_2, t)$ antisimmetrik funksiỳa bilen häsiỳetlenỳär diỳip guman edeliň. Birinji electron üçin onuň ỳagdaỳyny doly suratda häsiỳetlendirỳän dört ululyklaryň (ähli koordinatalaryň toplumy we spin) topary ölçenilỳär diỳeliň. Olaryň bahalaryny bir n_1 harp bilen belgiläliň. Ikinji elektron üçin şol ululyklaryň bahalaryny n_2 arkaly belgiläliň. Elektronlary suratlandyrỳan tolkun funksiỳalary degişlilikde $\psi_{n_1}(q_1)$ we $\psi_{n_2}(q_2)$ diýeliň. Sistemanyň ỳagdaỳyny suratlandyrỳan $\psi(q_1, q_2, t)$ funksiỳany, elektronlarda ölçenilen hususy funksiỳalar, ỳagny $\psi_{n_1}(q_1)$ we $\psi_{n_2}(q_2)$ boỳunça dargadalyň. Alarys

$$\psi(q_i, q_2, t) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} C(n_1, n_2, t)\psi_{n_1}(q_1)\psi_{n_2}(q_2), \qquad (4.1)$$

bu ỳerde

$$C(n_1, n_2, t) = \int \psi(q_1, q_2, t)\psi^*_{n_1}(q_1)\psi^*_{n_2}(q_2)dq_1dq_2; \qquad (4.2)$$

Umumy nazarỳete laỳylykda

$$w(n_1, n_2, t) = |c(n_1, n_2, t)|^2 \qquad (4.3)$$

ululyk, t wagt pusatda ölçenilỳän ululyklaryň bahasynyň birinji elektronda n_1 –e, ikinji elektronda bolsa, şol ululyklaryň n_2 –ä deň boljakdygynyň ähtimallygyny berỳär.

$\psi(q_1, q_2, t)$ - de birinji we ikinji elektronlary çalşyralyň. Olar Ferminiň bölejikleri, şonuň üçin şeỳle hal üçin ψ özüniň alamatyny üỳtgedỳär. Diỳmek

$$\Psi(q_2, q_1, t) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} C(n_1, n_2, t)\psi_{n_1}(q_2)\psi_{n_2}(q_1) = -\psi(q_1, q_2, t) \qquad (4.4)$$

ỳagny

$$\sum_{n_1} \sum_{n_2} C(n_1, n_2, t)\psi_{n_1}(q_2)\psi_{n_2}(q_1) = \sum_{n_1}\sum_{n_2} C(n_1, n_2, t)\psi_{n_1}(q_1)\psi_{n_2}(q_2) \qquad (4.5)$$

Eger indi belgilemeleri üỳtgetsek, ỳagny n_1-i n_2-ä, n_2-ni bolsa n_1-e çalyşsak ähli zat öňküligine galỳar, sebäbi jem n_1 we n_2 ululyklaryň ähli bahalary boỳunça ỳaỳylyp gidỳär we olar şol bir bahany alỳarlar. Şeỳle belligiň esasynda (4.5)-i şeỳle görnűşde göçűrip bilỳäris.

$$\sum_{n_2}\sum_{n_1} C(n_2,n_1,t)\psi_{n_2}(q_2)\psi_{n_1}(q_1) = -\sum_{n_1}\sum_{n_2} C(n_1,n_2,t)\psi_{n_1}(q_1)\psi_{n_2}(q_2)$$

Ortoganal funksiỳalar boỳunça şu hatarlar, birmeňzeş funsiỳalaryň koeffisiýentleri diňe özara deň bolan şertlerde, biri-birine deň bolup bilerler, ỳagny

$$C(n_1,n_2,t) = -C(n_2,n_1,t)$$

Şu ỳerden $n_1=n_2$ üçin , alýarys.

$$C(n_1,n_1,t) = -C(n_1,n_1,t),$$

ỳöne ters alamatly öz-özüne deň funksiỳa nola deň.

Diỳmek

$$C(n,n,t)=0.$$

Şuny (4.3)-e goỳup, tapýarys.

$$w(n,n,t)=0. \qquad (4.6)$$

Şu taỳdan gelip çykyşy ỳaly, eger n_1 we n_2 bahalar meňzeş bolsalar, onda ähtimallyk nola deň. Şeỳlelikde, kwant mehanikasynda Pauliniň prinsipi aşakdaky ỳaly formulirlenỳär: Ferminiň bölejikleriniň sistemasynda, hiç bolmanda iki bölejik üçin, olaryň ỳagdaỳlaryny häsỳetlendirỳän ähli ululyklary ölçemegiň netijeleriniň birmeňzeş bolmaklarynyň ähimallygy nola deň.

Şeỳle zady aỳratyn bellälíň, ỳagny elektronlar atomlaryň düzüm bölegi, protonlar we neỳtonlar bolsa ỳadronyň düzüm bölekleri, onda Pauliniň prinsipi, atomlaryň elektronly gabyklarynyň nazaryỳetinde, edil şonuň ỳaly atom ỳadrosynyň hem nazaryỳetinde birinji derejeli baha eỳedir.

§ 5 Köpelektronly atomlar. Geliýniň atomy.

Geliniň atomy, periỳodiki sistemanyň ikinji atomy bolup köpelektronly atomlaryň has ỳönekeỳidir. Muňa garamazdan, onda klssiki mehanikasy doly weỳrançylyga sezewar bolỳar. Klassiki mehanikanyň usuly bilen ony hasaplamak, iki we köp sanly elektonlary bolan atom sistemasyna klassiki mehanikanyň ulanyp bolmajakdygyna getirdi. Häzirkizaman kwant mehanikasy, köpelektronly sistemasynyň meselesinde hiç hili prinsipỳal kynçylyklara duş gelmeỳär.

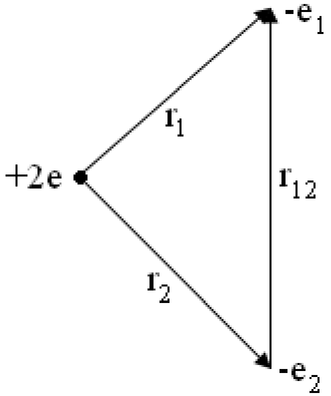
Birmeňzeş bölejiklerden duran sistemalaryň umjumy nazarỳetine daỳanyp geliniň atomynyň hil taỳdan derňewine başlalyň. Ilki bilen atomynyň elektronlary üçin Gamiltonyň $\hat{H}$ operatorynyň görnüşini kesgitläliň. Geliniň atomynda özara täsiri iki topara bölüp bolỳar. Olaryň birinjisine, ỳadro we elektronlaryň arasyndaky ep- esli klon özra täsiri, ikinjisine- elektronlaryň spinleriniň özara we orbital hereket bilen özaratäsirleriniň şertlendirỳän, gowşak magnit özaratäsiri getirilỳär.

Elektronlaryň kordinatalaryny $x_1, y_1, z_1\left(\vec{r_1}\right)$ we $x_2, y_2, z_2\left(\vec{r_2}\right)$ olaryň spinlerini bolsa $\hat{S}_1 we \hat{S}_2$ arkaly belgileỳäris.

Kulon özaratäsiriň operatory deň bolar.

$$\hat{U} = -\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

bu ỳerde birinji iki çlenler birinji we degişlilikde ikinji elektronyň, +2e zarỳady bolan atomyň ỳadrosy bilen özara täsirenergiỳalary berilỳär, üçinji glen bolsa elektronlaryň klon özaratäsir energiỳasyny kesgitleỳär.(çyzgy. 1)



1-nji çyzgy Geliý otomdaky özaratäsirler.

Magnit özaratäsiriň operatoryny w arkaly belläliň. Ol elektronlaryň spinlerine, orunlaryna we tizlikler bagly bolỳar.

$$w = w(s_1, s_2, r_1, r_2, -i\hbar\nabla_1 - i\hbar\nabla_2)$$

ỳenede iki elektronlaryň knetik energiỳalary hasaba alyp, geli atomyň elektronlarynyň doly gamiltonyny şeỳle görnüşde ỳazyp bileris.

$$H(r_1, r_2, s_1, s_2) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_1^2 - \frac{\hbar}{2\mu}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} + w$$

Soňky çlen birmeňzeş ỳaly örän kiçi we ol spektirleriň multipletnli strukturasyny şertlendirỳär. Mundan beỳläk geliniň derejesiniň multiplet gurluşynyň hil derňewi bilen çäklenip, şol çleni başlap bilỳäris we aşkdaky gamiltondan ugur alarys.

$$H(r_1, r_2,) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_1^2 - \frac{\hbar}{2\mu}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \qquad (1.2)$$

Haçanda şu ỳakynlaşmada kiç spinli özaratäsirleri inkär edilseler, onda elektronlaryň agyrlyk merkezine we olaryň spinlerine degişli üỳtgeỳänleri bölünỳänler. Haỳsy hem bolsa bir ugra (meselem OZ) spinli üỳtgeỳänleriň deregine spinleriň proỳeksiỳalaryny (Sz1 we Sz2) saỳlasak, onda geliỳniň atomynyň elektronlarynyň doly tolkun funksiỳasynyň aşakdaky görnüşde ỳazyp bileris:

$\Psi(r_1, r_2, S_{z1}, S_{z2}) = \varphi(r_1, r_2)\, S(S_{z1}, S_{z2})$ (1.3)

bu ỳerde $S(S_{z1}, S_{z2})$ arkaly spinlere bagly, tolkun funksiỳa belgilenipdir.

Gumiltonyň (1.2) operatory, elektronlaryň birmeňzeşdikleri üçin, olaryň ikisine görä simmetrikdir. Elektronlar-fermionlar, diỳmek tolkun funksiỳa bölejiklere görä antisimmetrik bolmaly. Şol sebäpli, (1.3) tolkun funksiỳasy elektronlaryň çalşyrylmasyna görä antisimmetrik bolmalydyr, ỳagny

$$\hat{P}_{12}\,\Psi(r_1, r_2, S_{z1}, S_{z2}) = -\,\Psi(r_1, r_2, S_{z1}, S_{z2}) \quad (1.4)$$

Çalşyrma operatory $\hat{P}'_{12}$ we $\hat{P}''_{12}$ iki operatorlaryň köpeltmek hasyly ỳaly görkezip bileris. Olaryň birinjisi elektronlaryň agyrlyk merkeziniň r_1 we r_2 koordinatalarynyň, ikinjisi bolsa elektronlaryň S_{z1} we S_{z2} spinleriniň ỳerlerini çalşyrỳar. Onda (1.3)-iň kömegi bilen (1.4)-I aşakdaky görnüşde ỳazyp bileris

$$\hat{P}''_{12}\,\varphi(r_1, r_2)\;\hat{P}''_{12}\,S(S_{z1}, S_{z2}) = -\,\varphi\,(r_1, r_2)\,(S_{z1}, S_{z2}) \quad (1.5)$$

Şundan iki mümkinçiligi alỳarys:

$$\hat{P}''_{12}\,\varphi(r_1, r_2) = +\,\varphi\,(r_1, r_2)$$

we onda

$$\hat{P}''_{12}\,S(S_{z1}, S_{z2}) = -\,S(S_{z1}, S_{z2}),$$

ỳa-da $\hat{P}''_{12}\,\varphi(r_1, r_2) = -\,\varphi\,(r_1, r_2)$

we onda

$$\hat{P}''_{12}\,S(S_{z1}, S_{z2}) = +\,S(S_{z1}, S_{z2}).$$

Birinji mümkinçilik, koordinatly funksiỳanyň simmetrikligini, spinli funksiỳanyň bolsa antisimmetrikligini aňladỳar, ikinji mümkinçilik, koordinatly funksiỳanyň antisimmetriklidigini, spinli funksiỳanyň bolsa simmetriklidigini aňladỳar. Şol sebäpli He geliỳniň atomynyň ỳagdaỳynyň iki mümkinçiligi üçin tolkunly funksiỳanyň iki klasyny alarys, hut aşakylar

$$\Psi_1=\Phi_S(r_1,\ r_2)\ S_a(S_{z1}\ S_{z2}), (1.6)$$

$$\Psi_{11}=\Phi_A(r_1,\ r_2)\ S_S\ (S_{Z1}\ S_{Z2}), \qquad (1.7)$$

bu ỳerde s we a bilen simmetrik we degişlikde antisimmetrik funksiỳalary belgilenỳärler.

Indi, Sa we Ss spin funksiỳalaryna has giňişleỳin seredeliň. Spinleriň özara täsirleri inkär ediỳändigi sebäpli, her bir funksiỳany, aỳratynlykda her bir elektrona degişli.

Spinli funksiýalaryň kömegi görnüşde ýazyp bolýar, ýagny

$$S\left(S_{z_1}, S_{z_2}\right) = S_{\alpha_1}\left(S_{z_1}\right)\cdot S_{\alpha_2}\left(S_{z_2}\right) \qquad (1.8)$$

nirede α_1 we α_2 belgileri, elektronyň spininiň OZ oky boýunça ýa-da oňa garşy nähili ugrukdyraldygyny görkezýärler. Ýöne (1.8) funksiýa, elektronlaryň spinleriniň simmetrik we antisimmetrik funksiýalary däl. Ýöne ondan antisimmetrik S_a we simmetrik S_s funksiýalary gurmak, aňsatdyr.

Haçanda elektronlaryň spinleriniň biri-birine garşy ýagdaýyny ilki seredeliň. Onda (18) tolkun funksiýa görnüşine eýedir

$$S'\left(S_{z_1}, S_{z_2}\right) = S_{+\frac{1}{2}}\left(S_{z_1}\right)\cdot S_{-\frac{1}{2}}\left(S_{z_2}\right), \quad (1.9)$$

ýöne başga ýagdaý hem mümkin, ýagny haçanda birinji elektronyň spini OZ oka garşy, ikinjiniň spini bolsa OZ oky boýunça ugrukdyrylan;

$$S''\left(S_{z_1}, S_{z_2}\right) = S_{-\frac{1}{2}}\left(S_{z_1}\right) \cdot S_{+\frac{1}{2}}\left(S_{z_2}\right) \quad (1.9`)$$

Iki ýagdaý hem OZ oky boýunça nola deň jemleýji spine jogap berýärler, we ikisi-de şol bir E energiýa degişlidirler. Şonuň üçin şu energiýa ol ýagdaýlaryň islendik superpozisiýasy degişli bolup biler. Olaryň içinde diňe biri, antisimmetrik S_a funksiýa bilen suratlandyrýan, görnüşe eýedir.

$$S_a\left(S_{z_1}, S_{z_2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[S_{+\frac{1}{2}}\left(S_{z_1}\right)S_{-\frac{1}{2}}\left(S_{z_2}\right) - S_{-\frac{1}{2}}\left(S_{z_1}\right)S_{+\frac{1}{2}}\left(S_{z_2}\right)\right]. \quad (1.10)$$

Şeýlelikde, antisimmetrik spinli funksiýalaryň görnüşi kesgitlenildi. Eger elektronlaryň spinleri parallel bolsalar, onda antisimmetrik funksiýanyň bolup bilmejekdigi, şübhesizdir. şeýle halda elektronlaryň spinleriniň aşakdaky ýagdaýlaryny alarys.

$$S'_S\left(S_{z_1}, S_{z_2}\right) = S_{+\frac{1}{2}}\left(S_{z_1}\right)S_{+\frac{1}{2}}\left(S_{z_2}\right), \quad (1.11)$$

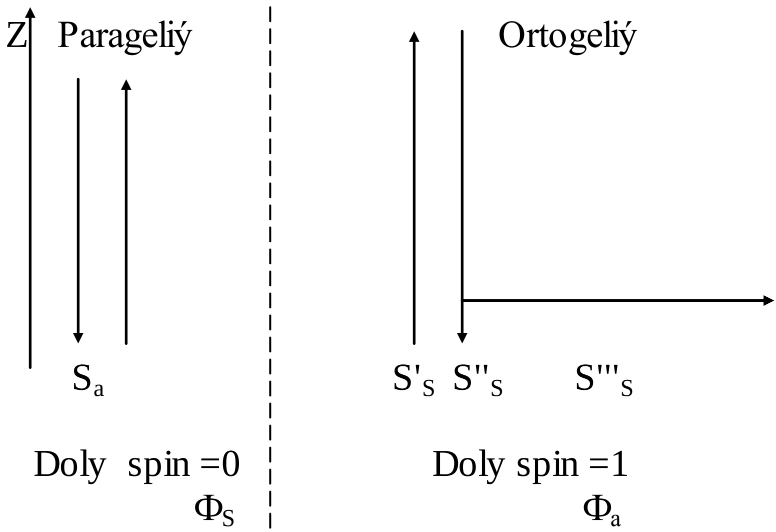
$$S''_S\left(S_{z_1}, S_{z_2}\right) = S_{-\frac{1}{2}}\left(S_{z_1}\right)S_{-\frac{1}{2}}\left(S_{z_2}\right) \quad (1.11`)$$

Şu funksiýalar elektronlaryň spinleri boýunça başdan simmetrikdirler. Mundan başga, (1.9) we (1.9`) funksiýalardan ýene-de bir, elektronlaryň spinlerinde simmetrik funksiýany emele getirip bolýar, hut,

$$S''_S\left(S_{z_1}, S_{z_2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[S_{+\frac{1}{2}}\left(S_{z_1}\right)S_{-\frac{1}{2}}\left(S_{z_2}\right) + S_{-\frac{1}{2}}\left(S_{z_1}\right)S_{+\frac{1}{2}}\left(S_{z_2}\right)\right]. \quad (1.11')$$

Şeýlelikde spin boýunça bary üç simmetrik funksiýalary S'_S, S''_S, S'''_S bar bolýar. Olaryň birinji ikisi jemlenen spiniň 1-e deň bolan ýagdaýyna

degişli, ýäne S'_S ýagdaýynda spin OZ oky, S''_S ýagdaýynda bolsa spin oňa ters ugur boýunça ugrukdyrylan. S'''_S ýagdaýynyň hem umumy spiniň 1-e deňligine degişlidigi şeýle bir düşnükli däl, ýöne ol OZ okuna perpendikulýar oriýentirlenen.
Çyz. 2-de tapylan ýagdaýlar üçin spinleriň shematiki ýerleşmekleri getirilýär.

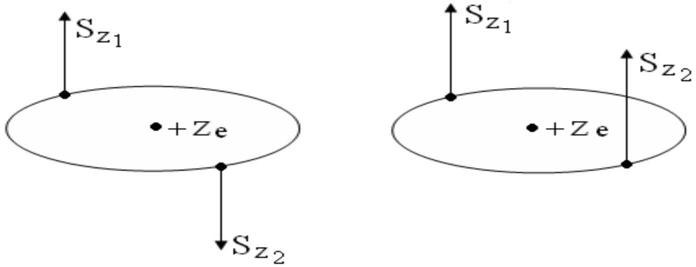


Çyz.-2. Iki elektronlaryň spinleriniň goşulyşynyň shemasy.

Şeýlelikde, elektronlaryň agyrlyk merkezleriniň koordinatlarynda simmetrik Φ_S funksiýa, elektronlaryň umumy spininiň nola deň ýagdaýynyň esasydyr. Elektronlaryň agyrlyk merkezleriniň koordinatlarynda antisimmetrik Φ_a funksiýa, parallel spinli elektronlaryň ýagdaýynyň esasydyr (umumy spin 1 deň). Umumy spin üç kwant oriýentasiýasyna degişli, şeýle ýagdaýlaryň üçüsi bar. Şonuň üçin geliýniň atomynyň derejeleri iki klasa dargaýar: antiparallel spinli derejeler we parallel spinli derejeler.

Antiparallel spinli derejeler ýekedirler (singletler), parallel spinli derejeler bolsa, orbital hereketiň dörедýän magnit meýdana görä umumy spiniň üç mümkin oriýentasiýasyna degişlilikde üç ýakyn derejelere (tripletler) dargaýar.

Şu iki ýagdaýlaryň ajaýyp häsiýetleri, olaryň arasynda kwant geçişiň ýoklugydyr. Şeýlelikde, elektronlaryň spinleri parallel we antiparallel geliýniň iki hili bar. Onuň birinji hiline ortogeliý, ikinji hiline bolsa parageliý diýilýär. (çyz. 3)



Çyz.3. Orto we parageliýde elektronlaryň ýerleşmekleri.

Bu geliýni beýlekä geçirmek üçin, elektronlaryň biriniň spinininiň ugruny üýtgetmeli. Elektronyň magnit momentiniň kiçiligi zerarly şu üýtgetmegi amala aşyrmak örän kyn. Geliýniň energetiki aşaky ýagdaýy parageliýiniň ýagdaýy bolmaly. Dogrydanam

$$\hat{O}_a(r_1, r_2) = -\hat{O}_a(r_1, r_2);$$

$r_1=r_2=r$ bolan ýagdaýda, alarys

$$\hat{O}_a(r, r) = -\hat{O}_a(r, r),$$

ýagny

$$\hat{O}_a(r, r) = 0.$$

Şonuň aşaky ýagdaýyň funksiýasy $\hat{O}_S(r, r)$ simmetrik funksiýa bolmaly. Diýmek, spinlerde antisimmetrik ýagdaý bolmaly, ýagny parageliýniň ýagdaýy.

Şeýlelikde, normal ýagdaýda geliý parageliýdir.

§6. Wodorodyň molekulasy.

Ýönekeý molekulalaryň nazaryýetinde wodorodyň molekulasyny kwant mehanikasynyň esasynda seredeliň.

Himiýada molekulany emele getirýän baglylygyň iki jynsy tapawutlandyrylýarlar: ionly (geteropolýarly) we gomopolýarly. Eger položitel we otrisatel ionlardan durýar (meselem Nacl) diýip hasap edip bolýan bolsa, onda ionly baglanyşyk amala aşyrylýar. Haçanda şeýle ionlara bölmeklik başa barmaýan bolsa ýagdaýda bolsa, gomopolýarly baglanyşyk amala aşyrylýar. Gomopolýarly baglanyşyga tipiki ýagdaý bolup, birmeňzeş atomlardan düzülen (meselem H_2) molekulalaryň ýagdaýlary mysal bolup bilerler. Wodorodyň iki atomynyň merkezleriniň aralygynyň R (ýadrolaryň aralygy) funksiýasy ýaly, olaryň potensial energiýasy V(R) iki ululyklardan goşulýar: ýadrolaryň kulony özara täsir energiýasyndan we ýadrolaryň arasyndaky aralyga bagly bolan, elektronlaryň E energiýalaryndan. Şeýlelikde, gözlenilýän V(R) energiýany şeýle görnüşde ýazyp bileris

$$V(r)=\frac{e^2}{R}+E(R) \qquad (2.1)$$

Diýmek, mesele elektronlaryň E(R) energiýalaryň kesgitlenilmegine alyp barýar. Atomlaryň arasynyň R uly ýagdaýy üçin, bir atomyň elektronynyň täsirini beýleki atomyň elektronynyň hereketine edip biljek täsirini inkär edip boljakdygy, şübhesizdir, şol sebäpli R → ∞ üçin, dektronlaryň energiýasynyň jemine ýönekeý deňdir. Mundan beýläk, diňe aşaky energetiki ýagdaýdaky wodorodyň molekulasy barada mesele alynyp barylar. Şuňa degişlilikde, atomlary biri-birinden tükeniksizlige daşlaşdyrylanda, wodorodyň atomlary normal ýagdaýlarda alynyp bilinerler.

Wodorodyň atomynyň energiýasyny normal ýagdaýda E_0(E_0 =13,595 ew) arkaly belläliň. Onda, molekulanyň bize gerekli ýagdaýyüçin, energiýa uly R üçin $2E_0$ deň.

Goý aýdaly

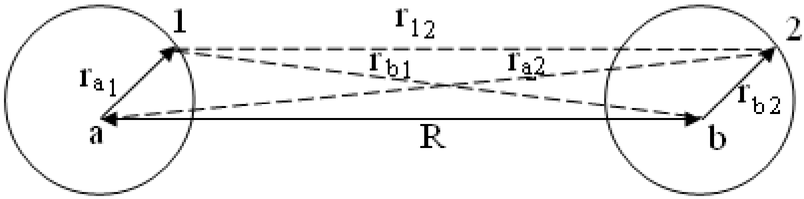
$$E(R) = 2E_0 + \varepsilon(R) \qquad (2.2)$$

Bu ýerde, ε(R) ululyk wodorodyň atomlarynyň ýakynlaşmagynda energiýanyň üýtgemegini görkezýär. Şu ululyk hem kesgitlenilmeli. Elektronlaryň ähli E(R) energiýasy, elektronlaryň sistemasy üçin Gamiltonyň operatorynyň hususy bahasy ýaly Şrýodingeriň deňlemesinden kesgitlenýär. Gamiltonyň şu operatory ýeňil ýazylýar:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{a_1}} - \frac{e^2}{r_{a_2}} - \frac{e^2}{r_{b_1}} - \frac{e^2}{r_{b_2}} + \frac{e^2}{r_{1_2}} \quad (2.3)$$

(2.3)-de, birinji iki çlenler her bir elektronyň kinetik energiýasynyň operatory; “$-\frac{e^2}{r_{a_1}}$” - birinji elektronyň we birinji ýadronyň potensial energiýasy; “$-\frac{e^2}{r_{a_2}}$” - birinji elektronyň we ikinji ýadronyň potensial energiýasy; “$-\frac{e^2}{r_{b_1}}$” - birinji elektronyň we birinji ýadronyň potensial energiýasy; “$-\frac{e^2}{r_{b_2}}$” - - birinji elektronyň we ikinji ýadronyň potensial energiýasy we, ahyrynda “$+\frac{e^2}{r_{1_2}}$”

– iki elektronyň özara täsir energiýasy. Aşakdaky çyzgy, r_{a1}, r_{a2}, r_{b1}, r_{b2}, r_{12} aralyklar üçin, ulanylan bellikleri düşündirýär.

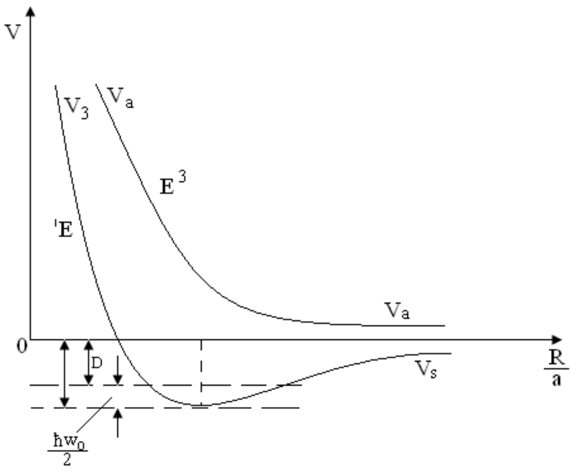


Çyz. 1.

Eger elektronlaryň sistemasy üçin tolkun funksiýa $\Phi(r_1, r_2)$ arkaly belgilense, onda Φ we E ululyklary kesgitlemek üçin, Şrýoderiň deňlemesi şeýle görnüşde alynýar

$$\hat{H}(r_1, r_2)\Phi = E\Phi \qquad (2.4)$$

Şu deňlemäni diňe takmynan çözüp bolýar. Bu örän kyn we çylşyrymly mesele, şonuň üçin biz diňe wodorodyň iki atomlarynyň özaratäsir energiýasynyň, triplet (^{3}E) we singlet ('E) ýagdaýlary üçin grafigi getirmek bilen çäkleneris.



çyz.2. Triplet (^3E) we singlet (^1E) ýagdaýlar üçin wodorodyň iki atomlarynyň özaratäsir energiýasy.
Şu çyzgyda, $2E_o$ ululyk energiýanyň hasaplanmagynda “O” derek alynýar. Aralyk R borly radiusyň “a” birliginde ölçelinýär we şol sebäpli absissa oky boýunça R dälde $\frac{R}{a}$ ýerleşdirilýär.

Çyzgydan görnüşi ýaly, Antisimmetrik ýagdaý (Φ_a) üçin energiýa $U_a(R)$ wodorodyň iki atomlarynyň itişmesine jogap berýär, diýmek H_2 molekula emele gelip bilmeýär. Tersine, simmetrik ýagdaý (Φ_S) üçin U(R) energiýa $R_o=1{,}4\cdot a=0{,}74\cdot 10^{-10}$m – de minimuma eýe bolýar, şeýle ýagdaýda wodorodyň atomlary biri-birinden R_o aralykda ýerleşmeklige ymtylyşýarlar. Simmetrik ýagdaýda, diýmek, H_2 wodorodyň durnukly molekulasy emele gelýär.
Çyzgydaky U_a we U_s üçin egrilere ýüz urup, şol ýerde getirilen netijäni şeýle aýan edip bileris: spinleri garşylykly ugrukdyrylan elektronlary bolan wodorodyň iki atomy ('E-ýagdaý), biri-birine çekişýärler we molekulany emele getirýärler; Spinleri parallel bolan elektronlary bolan (^{3}E-ýagdaý), wodorodyň iki atomy, itekleşýärler.

§7. Atomyň kwant mehanikasy we Mendeleýewiň elementler üçin periodiki sistemasy.

Umumy bellikler.Beýik rus alymy D. Mendeleýewiň mundan 150 ýyl öň açan we işlenilip gurulan himiki elementleriň periodiki sistemasy tebigatyň wajyp kanunydyr. Ol himiki elementleriň ähli köp hililiklerini yzygiderli we sazlaşykly toparlara bölünmeklerine getirdi. Ol diňe himiýanyň däl-de, ähli häzirki zaman atom we ýadro fizikasynyň esasyny düzýär. Mendeleýewiň dikelden kanunynyň fiziki manysy has soň, ýagny haçan atomyň modeliniň dikeldilenden we ýadronyň zarýadynyň artmagy bilen atomlaryň elektronly konfigurasiýasynyň kesgitli tipleriniň gaýtalanýandygyny görkezilenden soň, düşündirilýär. Ýadro fizikasynyň ösmegi babatda wagtal-wagtal gaýtalanmak pikiri atom ýadrolaryna ösdürilipdir, we ahyr soňy, ylymyň ösmegi bilen elementar bölejikleriň oblastynda şu kanuny ulanyp bolarmy diýen soragyň ýüze çykmagy tebigydyr.

XIX-njy asyryň ikinji ýarymynda belli himiki elementleriň sany 60-a golaý bolupdyr. Hemeki derňew üstünlikli ösmegi zerarly şu sanow ýyl-ýyldan artdyrylypdyr. Olaryň sanawy tükeniksizmi, biri-biri bilen baglanyşyklymy ýa-da her biri özbaşdakmy diýen ýaly soraglar alymlaryň ünsüni özüne çekipdir. Başgaça aýdylanda, himiki elementleriň sistematikasy baradky sorag gün tertibine giripdir. Üstesine-de islindik däl-de, dinamiki sistematika, ýagny onuň üsti bilen diňe belli maglumatlary suratlandyrylman täze netijeleri we umumylaşdyrmalary amala aşyrmaga ýardam edýän täze kanunalaýyklary gözlemeklige, umuman, himiki elžementler baradaky ylymyň mundan beýläk ösmegine kömek edýän sistematika gerek bolupdyr. Şeýle sistemany D. Mendeleýew dikeldipdir.

Elementleriň häsiýetleri, olaryň atom agyrlyklarynyň ululyklarynyň periodiki funksiýasy ýaly görkezilipdir. Şu netije periodiki diýen ady alýar we ol himiki elementleriň täze sistemasynyň – olaryň periodiki sistemasynyň esasynda ýerleşýär.
Şu kanunyň nazaryýeti häzirki döwürde hem gutarnykly dikeldilen däldir. Atom ýadrolarynyň strukturasy baradaky problema heniz başlangyç ýagdaýdyr, bu öz gezeginde, atomyň elektronly gabyklarynyň strukturasyny doly kesgitleýär, we şonuň bilen birlikde atomyň himiki we fiziki häsiýetlerini bütinleý beýan edýär. Eger atom ýadrolaryň häsiýetnamalary tejribeden alynanlar ýaly hasap edilse, onda ýadronyň elektrik meýdanynda elektronlaryň sistemasynyň hereketiniň nazaryýetinden ugur alyp, atomlaryň elektronly gabyklarynyň strukturasyndaky wagtal-wagtalyga düşünmeklige kwant mehanikasy ýardam edýär. Şeýlelikde, wagtal-wagtalygygyň tebigatyny aýdyňlaşdyrmak üçin, ýadronyň massasynyň we onuň zarýadynyň berlenlerinden ugur alyp, atomlarda

elektronlaryň hereketlerini hasaplamak bilen çäklenilse bolar. Atomlarda elektronlaryň sanynyň köplügi zerarly bu matematiki taýdan kyn mesele bolup durýar, ýöne atomlarda elektronyň ýagdaýynyň diskretliligi sebäpli onuň ýagdaýy ýakynlaşma usulyň kömegi bilen alynyp biliner. Şu zerarly, Pauliniň prinsipiniň we merkezi güýç meýdanda elektronnyň hereketiniň esasynda, atomlarda elektronlaryň paýlanmagyna we şonuň bilen birlikde elementleriň himiki häsiýetlerindäki wagtal-wagtalyga düşünmeklikde wajyp netijeler gazanyldy.

Mendeleýewiň periodiki sistemasyna düşünmeklikde, onuň özüniň tarapyndan girizilen elementleriň Z tertip belgisiniň birinji derejeli ähmiýetiniň bardygyny aýratyn bellenilmelidir. Ol özüniň tablisasynyň käbir ýerinde başlangyç prinsipden atom agyrlygyň artmagy boýunça elementleri ýerleşdirmekden gaýra durup, himiki häsiýetlerdäki wagtal-wagtalyga uly ähmiýet beripdir. Soňra Rzerfordyň we mozliniň klassiki barlamalary atom belgisiniň çuňňur fiziki manysynyň bardygy görkezilipdir, hut elementiň Z belgisi, (+e) elementar zarýad birliklerinde ölçelinen ýadronyň zarýadyna deňdir. Mundan başga-da, şu belgi neýtral atoma onuň elektronly gabyklaryndaky elektronlaryň sanyna hem deňdir. Şonuň üçin, elementiň Z belgisini bilip, atom mehanikasy üçin wajyp ululyklary-ýadronyň zarýadyny we atomdaky elektronlaryň sanyny bilýäris. Belli bolşy ýaly atomlaryň ýadrolary zarýadsyz bölejiklerden-neýtronlardan (zarýady O, massasy 1,0084 m. a. b) we protonlardan (zarýady +e, massasy 1,0079 m.a.b) emele getirýärler. Ýadrodaky protonlaryň sany, ýokarda aýdylyşyna laýykda, Z-e deň bolmaly. Protonlary birmeňzeş sanly, ýöne neýtronlaryň sany bilen tapawutlanýan atomlar, şol bir Z-e eýedirler, ýöne A atom agyrlygy dürlüdir. Şeýle atomlara izotoplar diýilýär. Himiki häsiýet neýtral atomdaky elektronlaryň sanyna, ýagny Z-e bagly, şol sebäpli izotoplar deňbahalydyr, we şol bir Z-e degişli izotoplaryň toplumy şol bir himiki elementi suratlandyrýar. Mälim bolşuna görä, atom agyrlyk $A \approx 2Z$, diýmek ýadrolarda protonlaryň we neýtronlaryň sany biri-birine takmynan deň. Şuňa laýyklykda atom agramyň artmagy tertipde elementleriň ýerleşmekleri, olaryň edil +eZ ýadro zarýady boýunça hem ýerleşmeklerine alyp barýar. Elementlerde elektronlaryň paýlanmasyny aýdyňlaşdyrmak üçin, her bir indiki element öňküden ýadro bir protony (we degişli neýtronyň sanyny) we degişlilikde elektronly gabygyna bir elektrony goşmaklygyň ýoly bilen emele getirilýär diýip hasap ederis. Üstesine-de elektronlaryň özara täsirleri hasaba alynmaýar. Periodiki sistemada, neýtrony nolunjy periody emele getirýän nolunjy element (Z=0) ýaly seredip bolýar. Birinji element wodorod (Z=1). Wodorodyň ýadrosyny bir proton emele getirýär .

Wodorodyň atomyndaky ýeke-täk elektronyň ýagdaýy n=1, l=0, m=0, $m_s = \pm\frac{1}{2}$ kwant sanlary bilen häsiýetlendirilýär. Onda degişli tolkun funksiýa $\psi_{nlmm_s}(q)$ bolar, bu ýerde "q" arkaly elektronyň agyrlyk merkeziniň koordinatlary we spinli koordinatasy belgilenilýär.
Ýadronyň zarýadyny "+e" ulaldyp, geliýniň ýadrosyny alýarys. n=1, l=0, m=0 ýagdaýda ikinji elektrony ýerleşdirip bolýar, ýöne onuň spini birinji elektronynyň spinine garşy ugrukdyrylan bolmaly (biri üçin) $m_s = +\frac{1}{2}$, beýleki üçin $m_s = -\frac{1}{2}$). Has takyk aýdylanda, $\Psi_{1,0,0,,+\frac{1}{2}}(q_1)$ we $\Psi_{1,0,0,,-\frac{1}{2}}(q_2)$ funksiýalardan antisimmetrik tolkun funksiýany emele getirmeli. Geliýniň iki elektrony, n=1-e degişli ähli mümkin ýagdaýlary eýeleýärler. Ýagdaýlaryň şu topary (n=1, l=0, m=0, $m_s = \pm\frac{1}{2}$) K-gabygy emele getirýär. Şeýlelikde, K- gabyk doldurulan. Şonuň bilen birlikde, diňe H we He iki elementlerden duran, periodik sistemanyň birinji periodytamamlanýar. Ýadronyň zarýadyny ýene +e ulaldyp we bir elektron goşup, Li geçirýäris. K-

gabyk eýýam doldurulan, onda üçünji elektron n=2, l=0, m=0, $m_s = \pm\frac{1}{2}$ ýagdaýda ýerleşmeli. n=2 degişli ýagdaýlaryň toplumyna L – gabyk diýilýär. Şeýlelikde Li-de L-gabyk doldurylyp başlanýar. L – gabykda bary $2n^2=2\cdot2^2=8$ ýagdaýlar bar. Olaryň ikisi s-terme (l=0, m=0, $m_s = \pm\frac{1}{2}$) we altysy P-terme (l=0, m=0, ±1, $m_s = \pm\frac{1}{2}$) degişlidirler.

Mundan beýläk ýadronyň zarýadyny ulaldyp we elektron goöup, Li-den Be-ýe, Be-den B-ýa we başg. C, N, O, F arkaly Ne-ýe geçýäris. Neonda L-gabygyň ähli 8 ýerleri eýelenen; ýene-de inert gazy alynýar we şonuň bilen birlikde periodik sistemanyň ikinji periody tamamlanýar. Indiki elektronlar diňe n=3 ýagdaýda ýerleşip bilinerler. Oňa M-gabyk diýilýär. M-gabykda bary $2\cdot3^2=18$ ýagdaýlar (l=0, l=1, l=2) bar. l=0 we l=1 ýagdaýlaryň toplumy bütinleý L-gabyga meňzeş we Na-dan Ar-e çenli dowamlykda doldurylar. Periodik sistemabnyň üçünji periody alynýar. Argonyň (Ar) zarýadyny +e artdyryp we elektron goşup, kaliýni alarys. Eger kaliýniň elektrony M-gabykda ýerleşdirilse, onda şu elektronyň ýagdaýy l=2 (d-term) bilen häsiýetlendirilmeli. Ýöne, we hem optiki hem-de himiki ähli tarapdan garanda K-nyň atomy, s-terme daşkybalentli elektronlary bar bolan

Li-niň we Na-nyň atomlary bilen ýeterlikli meňzeş. Şonuň üçin kaliýniň elektrony, M-gabygyň doldurylmagy heniz gutarman hem bolsa, täze gabygy (N-gabyk) başlap, n=4, l=0 ýagdaýda ýerleşmeli. Şeýlelikde, kaliýde hem elektronlaryň paýlanyşy, olaryň Na-daky paýlanyşyna bütinleý meňzeşdir (tabl. seret).

Kaliýden soň kalsiý (Ca, Z=20) gelýär. Ýene-de, spektroskopiki berilenler Ca-nyň elektronyny s-termde (M-gabyk) ýerleşmegini görkezýärler. Mundan beýläk elementlerde M-gabygyň doldyrylmagy bolýar (Sc-den (Z-21) Zn-e (Z=30) çenli). Onsoň kriptona (kr, Z=36) çenli N-gabyk doldurylýar we şonuň bilen indiki period tamamlanýar (inert gazlary alynýar). Şeýlelik-de, inert gazlary (He-den başga) üçin 8 elektronlardan ybarat konfigurasiýalar alynýar: s-ýagdaýda 2 we p-ýagdaýda bolsa 6 aňladýan tablisany getireliň.

n	Period	Element	Z	K	L		M			N		Esasy term
				1,0 1s	2,0 2s	2,1 2p	3,0 3s	3,1 3p	3,2 3d	4,0 4s	4,1 4p	
1	I	H	1	1	-	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$
		He	2	2	-	-	-	-	-	-	-	$^1S_0$
2	II	Li	3	2	1	-	-	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$
		Be	4	2	2	-	-	-	-	-	-	$^1S_0$
		B	5	2	2	1	-	-	-	-	-	$^2P_{1/2}$
		C	6	2	2	2	-	-	-	-	-	$^3P_0$
		N	7	2	2	3	-	-	-	-	-	$^4S_{3/2}$
		O	8	2	2	4	-	-	-	-	-	$^3P_2$

		F	9	2	2	5	-	-	-	-	-	$^2P_{3/2}$
		Nl	10	2	2	6	-	-	-	-	-	$^1S_0$
3	III	Na	11	2	2	6	1	-	-	-	-	$^2S_{1/2}$
		Mg	12	2	2	6	2	-	-	-	-	$^1S_0$
		Al	13	2	2	6	2	1	-	-	-	$^2P_{1/2}$
		Si	14	2	2	6	2	2	-	-	-	$^3P_0$
		P	15	2	2	6	2	3	-	-	-	$^4S_{3/2}$
		S	16	2	2	6	2	4	-	-	-	$^3P_2$
		Cl	17	2	2	6	2	5	-	-	-	$^2P_{3/2}$
		Ar	18	2	2	6	2	6	-	-	-	$^1S_0$
4	IV	K	19	2	2	6	2	6	-	1	-	$^2S_{1/2}$
		Ca	20	2	2	6	2	6	-	2	-	$^1S_0$
		Sc	21	2	2	6	2	6	1	2	-	$^2D_{3/2}$
		Ti	22	2	2	6	2	6	2	2	-	$^3F_2$
		V	23	2	2	6	2	6	3	2	-	$^4F_{3/2}$
		Cr	24	2	2	6	2	6	4	1	-	$^7F_3$
		Mn	25	2	2	6	2	6	5	2	-	$^6S_{5/2}$
		Fe	26	2	2	6	2	6	6	2	-	$^5D_4$

Kriptondan yzky element-rubidiý (Rb, Z=37). Ol Na we K elementlerine meňzeş. Diýmek, rubidiýniň daşky elektrony N-gabykda ýerleşdirilmeýär, ol täze gabygy başlaýar (n=5, O-gabyk). Hromyň (Cr) elektrony ýene-de O-gabykda ýerleşýär, ýagny hrom kalsiýa meňzeşdir. Hrom soňky elementlerde O-gabyk we N-gabygyň boş ýerleri doldurulýar. Seziýden (Cs, Z=55) P-gabyk doldurylyp başlanýar. Seýrek ýer elementleri toparynyň (La-dan, Z=57, Hl-e, Z=72 çenli) meňzeş himiki häsiýetleri bar, şonuň üçin olaryň ählisiniň O-we P-gabyklarynda elektronlaryň paýlanyşy hem meňzeş. Olar biri-birinden N-gabygy we aýratyn ýagdaýlardav O-gabygy doldyrmagyň derejesi bilen tapawutlanýarlar. Şeýle doldurma seriýden (Ce, Z=58) başlanýar we lýutensiýada (Lu, z=71) tamamlanýar. Seýrek elementler tarapyna köplenç “lantanidalar” diýilýär. Uzak wagtlap gafniý (Hł, z=72) element hem şu topara girýär diýip hasaplanylyp gelindi. Ýöne, Lu-da Hł-iň ähli gabygy eýýam doldurylan we indiki 72-nji elektron 5d gabykda ýerleşmeli bolýar. Şeýle ýagdaý, gafniý sirkoniýniň (Zr, z=40) meňzeşligi bolmaly diýen netije N. Bory getiripdir. Dogrydanam, şu element tiz wagtda sirkoniýli magdanlarda tapylýar.

Görnüşi ýaly, Mendeleýewiň açan himiki elementleriň häsiýetlerindäki wagtal-wagtalyk, atom mehanikasy nukdaý nazardan, daşky elektronly gabyklaryň strukturasynda gaýtalanmagy aňladýar.Meselem, Ne, Ar, Kr, Xe, we Rn inert gazlaň 8 elektronlardan ybarat birmeňzeş daşky gabyklary bar. Ähli aşgarly metallaryň s-terminde, inert gazyň ($^2S_{1/2}$-term) gabygyndan daşary, bir elektron bar. Aşgarly ýer metallarynda, inert gazyň ($^1S_0$ – term) gabygyndan daşary, iki elektron bar. F, Cl, Br I galaidleriň, inert gazyň gabygyna ($^2P_{3/2}$-term) çenli bir elektron azlyk edýän gabyklary bar. Periodlaryň uzynlygy bolsa, her bir gabykda kwant ýagdaýlaryň sany kesgitlenýär. Bu san $2n^2$. Şol sebäpli periodlaryň uzynlygy 2, 8, 18, 32... sanlar bilen kesgitlenýär.

Şu ýerde bir zady bellemek zerurdyr, ýagny “elementleriň sistemasy” düşünjesi bilen bir hatarda “atomlaryň periodiki sistemasy” diýen tassyklama hem ulanylýar. Haşanda, häzirki wagta fundamental fiziki kanunalaýyklyklara daýanýan elementleriň periodiki sistemasynyň ýeterlikli takyk nazaryýeti işlenilip taýýarlanan diýip tassyklanylsa, onda oňa atomlaryň periodiki sistemasynyň nazaryýeti diýilip hem düşünilýär. Şu iki düşünjäniň biri-birine deň däldiklerini bellemelidiris; tersine, himiki elementleriň sistematikasy özüniň mazmuny boýunça, atomlaryň sistematikasy bilen deňeşdirilende, has çuň we giň. Soňky diňe himiki elementleriň klassifikasiýasynyň esasynda ýerleşýär.

Jemläp aýdylanda, häzirki zaman atom mehanikasy, tebigatyň wajyp kanunlarynyň birine- elementleriň himiki häsiýetleriniň wagtal-wagtalygyň kanunyna düşünmeklige ýerlikli goşant girizdi diýip tassyklamak, şübhesizdir.

XIII bap. Relýatiwistik kwant mehanikasy

Umumy bellikler. Iki bilen kwant mehanikasynyň, has takygy relýatiwistik däl kwant mehanikasynyň, ulanylşynyň çäklerine göz aýlalyň. Ol çäkler aşakdakylardan durýar;

- kwant mehanikasy relýatiwistik däl nazarýetdir;
- kwant mehanikasy erkinlik derejesi çäkli, gutarnykly sanly sistemalaryň mehanikasydyr.

Klassykyy mehanikasynda erkinlik derejesi alta (x, y, z, v_x, v_y, v_z), kwant mehanikasynda bolsa üçe $(x, y, z\ \ ýa-da\ \ P_x, P_y, P_z)$ deň,

- $\hbar\omega \geq 2m_0c^2$ energiýaly foton $"e^- - e^+"$ jübütine öwrülýär.şeýle hadysalarda erkinlik derejesi üýtgeýär. Şuňa meňzeş prosesler hem kwant mehanikasynda öwrenilmeýär.

Kwant mehanikasynyň esasy deňlemesi- Şrýodingeriň deňlemesi, tizligi ýagtylygyň tizliginden has kiçi bolan bölejigiň hereketini beýan etmek üçin ulanylýar. Şrýodingeriň relýatiwistik tolkun deňlemesi otnasitelligiň ýörite nazarýetiniň özgertmelerine (Lorensiň özgertmeleri) görä inwarýant däl, sebäbi oňa wagtyň we giňişligiň koordinatlary deňhukukly girmeýärler; deňleme wagt boýunça birinji we koordinatlar boýunça ikinji önümleri saklaýar, şol bir wagtda, otnasitelligiň ýörite nazarýeti, giňişlik we wagt koordinatlaryň deň esasda girmekligini talap edýär.

§1. Kleýniň – Gordonyň deňlemesi.

Relýatiwistik tolkun deňlemäni getirip çykarmak üçin, erkin bölejik üçin massanyň we energiýanyň arasyndaky klassiki relýatiwistik gatnaşykdan ugur alarys;

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}. \qquad (1.1).$$

Şu gatnaşykdan deňlemä geçmek üçin energiýanyň we impulsuň deregine operatorlary girizmeli, ýagny

$$\hat{E} \to E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \hat{P} \to p = -i\hbar\nabla. \qquad (1.2).$$

Ýöne, kwadrat köküň aşagynda ýerleşen operatorlaryň tolkun funksiýasyna nähili täsir etmelidikleri belli däl. Diýmek, klassiki gatnaşykdan relýatiwistik halda tolkun deňlemä geçmeklik üçin, ilki bilen kwadrat kökden dynmaly. Bu iki ýol bilen amala aşyrylyp biliner; ýa deňligiň iki tarapyny kwadrata götermeli we Kleýniň – Gordonyň skalýar deňlemesini almaly, ýa-da bolsa matrisalaryň kömegi bilen kwadrat kökden çykarmaly we relýatiwistik bilen bir hatarda spin effekti hasaba alýan Diragyň spinor deňlemesini almaly. Biz ilki bilen, Fok tarapyndan hem hödürlenilen, birinji usula serederis. (1.1)-nji deňligiň iki tarapyny kwadrata göterip, alýarys.

$$E^2 - c^2 p^2 - m_0^2 c^4 = 0 \qquad (1.3).$$

Şu ýere (1.2)-nji operatorlaryň bahalaryny goýup, erkin bölejik üçin Kleýniň – Gordonyň deňlemesini alarys;

$$\left(c^2\hbar^2\nabla^2 - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2} - m_0^2 c^4\right)\psi = 0. \qquad (1.4).$$

Elektromagnit meýdanyň brlygynda (1.2)-niň deregine utgaşdyrlan operatorlary goýulmalydyrlar;

$$E = \hat{F} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\boldsymbol{V},$$

$$p \to \hat{P} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\hat{A}. \qquad (1.5).$$

Onda meýdanyň barlygynda relýatiwistik deňlemäni alarys

$$\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\boldsymbol{V}\right)^2 - c^2\left(\frac{\hbar}{i} - \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 - m_0^2c^4\right]\psi = 0. \qquad (1.6).$$

Şrýodingeriň deňlemesinden tapawutlylykda, (1.6)-njy relýatiwistik tolkun deňlemesi, (1.1)-nji klassiki aňlatmasy ýaly, Lorensiň özgertmelerine görä inwarýantdyr, sebäbi oňa wagt we giňişlik koordinatlary formal taýda deö esasda girýärler, we (1.6)-y relýatiwistik inwarýant görnüşde ýazylyp biliner

$$\left(P_t^2 - \hat{P}^2 - m_0^2c^2\right)\psi = 0,$$

bu ýerde, $P_t = \frac{\hat{F}}{c}$.

(1.6)-njy deňlemäniň käbir soraglaryna seredeliň.

Zarýadyň we toguň dykyzlyklary üçin aňlatmany, elektromagnit meýdanyň ýoklugyndaky hal üçin tapalyň, onda $V=A=0$.

Şrýodingeriň nazarýetindäki ýaly, aňlatmalary getirip çykarmaklygyň esasynda üznüksizlik deňlemäni goýalyň

$$div \cdot j + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \qquad (2.1).$$

Görnüşi ýaly, (2.1) relýatiwistik inýarýant forma eýedir.

(1.4)-i çepden ψ^*, kompleks- çatrymly deňlemäni bolsa ψ bilen köpeldip we aýyrmagy ýerine ýetirip, alýarys

$$\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* - \frac{1}{2}\left(\psi^*\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi - \psi\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi^*\right) = 0. \qquad (2.2).$$

Şuny aşakdaky görnüşe özgerdip bolar

$$div\{\psi\ grad\ \psi^* - \psi^* grad\ \psi\} + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\left\{\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right\} = 0. \qquad (2.3).$$

Indi, zarýadyň dykyzlygyny we toguň dykyzlygyny degişlilikde aňlatmalar bilen kesgitläp

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2im_0c^2}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\psi\right], \qquad (2.4)$$

$$j = \frac{e\hbar}{2im_0}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\psi\right], \qquad (2.5).$$

Olaryň (2.1)-nji üznüksizlik deňlemäni kanahatlandyrýandyklaryna göz ýetirýärise we, ondan başga-da, dört ölçegli wektory emele gtirýärler

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{2im_0}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_\mu} - \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x_\mu}\right)\psi\right],$$

bu ýerde $x_4 = ict$, $j_4 = ic\rho$.

toguň dykyzlygy (2.5), relýatiwistik däl formula bilen gabat gelýär, zarýadyň dykyzlygy $v \ll c$ halda relýatiwistik däl aňlatma geçýär. Dogrydanam,

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to E$ çalşyrmany ulanyp, (2.4)-iň kömegi bilen, zarýadyň dykyzlygy üçin aňlatma alynýar

$$\rho = \frac{eE}{m_0c^2}\psi^*\psi. \qquad (2.6).$$

(2.6)-y $E \sim m_0c^2$ relýatiwistik däl ýakynlaşmada adaty formula geçýär, ýagny

$$\rho = e\psi^*\psi.$$

Ýöne relýatiwistik nazarýetde ikinji, *E*- niň otrisatel bahaly çözgüdiniň bolmaklygy mümkin $(E < 0)$. Onda, ρ dykyzlyk üçin, *"e"*-ýe ters alamat alynýar. Şeýlelikde, relýatiwistik deňleme prinsipde, diňe otirsatel däl-de, položitel zarýtly bölejigi hem aňladyp biler.

§2. Diragyň matrissalary we deňlemesi

Ýokarda bellenilşi ýaly, relýatiwistik kwant mehanikasyny gurmagyň esasynda, bölejigiň *E* energiýasynyň, *P* impulsunyň we m_0 dynçlyk massasynyň arasyndaky belli relýatiwistik (1.1)-nji gatnaşyk ýerleşýär. Onda kwadrat kökden dynmagyň ikinji usuluna seredeliň. Ony 1928-nji ýylda iňlis alymy P.Dirak hödürläpdir. Bu (1.1)-nji gatnaşygyň "çyzyklandyrylyşyna" alyp barýar. Netijede, spini $\frac{1}{2}$ -e ($\hbar$ birlikde) deň bolan elektron üçin relýatiwistik tolkun deňlemäniň açylmagyna gelindi. Şu ýerde, klassiki elektrodinamikanyň deňlemesinden (Makswelliň-Lorensiň deňlemesi) soň, elektron baradaky taglymat Diragyň deňlemesi bilen baglydygyny aýratyn bellemege mynasypdyr. Şrýodingeriň relýatiwistik kwant mehanikasy we Pauliniň deňlemesi, Diragyň deňlemesiniň käbir ýakynlaşmasy ýaly alynyp bilinerler.

Energiýanyň we impulsuň arasyndaky relýatiwistik gatnaşygy "çyzyklandyrmak" ýa-da dörtçleni kwadrat kökden çykarmak üçin, (1.1)-i aşakdaky görnüşde alalyň.

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2} = c\sum_{\mu=0}^{3} \alpha_\mu p_\mu, \qquad (3.1).$$

bu ýerde, $P_0=m_0c$, $P_1=P_x$, $P_2=P_y$, $P_3=P_z$, (3.1)-i aşakdaky görnüşde ýazalyň.

$$\frac{E}{c} = \sqrt{p^2 + m_0^2c^2} = \alpha_x P_x + \alpha_y P_y + \alpha_z P_z + \alpha_0 m_0 c, \qquad (3.2).$$

Iki tarapyny kwadrata göterýäris

$$\frac{E^2}{c^2} = \\ = \begin{cases} p^2 + m_0^2c^2, \\ \alpha_x^2 P_x^2 + \alpha_y^2 P_y^2 + \alpha_z^2 P_z^2 + \alpha_0^2 m_0^2 c^2 + (\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x)P_xP_y + (\alpha_y\alpha_z + \alpha_z\alpha_y)P_yP_z + \end{cases}$$

-

$$+(\alpha_z\alpha_x + \alpha_x\alpha_z)P_zP_x + (\alpha_x\alpha_0 + \alpha_0\alpha_x)m_0c + \cdots$$

Eger, (3.3)-iň ikinji hatarynyň diňe birinji dört çleni bolup, we $\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \alpha_0^2 = 1$ bolsa, onda (3.2)-niň dogrydygyna şübhelenmeseň bolar, ýöne şeýle ýagdaýda onuň soňky çlenleri hem bar. (3.2)-niň ýerine ýetmekligi üçin, Dirak $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \alpha_0$ ululyklary diňe san bolman, dört hatarly matrissalar bolmaly diýip çaklapdyr we olar iki hatarly Pauliniň matrissalary bilen şeýle baglanşykdadyrlar;

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0' & \alpha'_x \\ \alpha'_x & 0' \end{pmatrix}, \qquad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0' & \alpha'_y \\ \alpha'_y & 0' \end{pmatrix}, \qquad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0' & \alpha'_z \\ \alpha'_z & 0' \end{pmatrix},$$

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}, \qquad (3.4).$$

bu ýerde,

$\alpha'_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \alpha'_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \alpha'_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ -Pauliniň matrissalary, $I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$- birlik matrissasy.

Eger, aşakdaky şertler ýerine ýetse, ýagny

$$\begin{gathered} \alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \alpha_0^2 = 1, \\ \alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x = 0, \\ \alpha_y\alpha_z + \alpha_z\alpha_y = 0, \\ \alpha_z\alpha_x + \alpha_x\alpha_z = 0, \\ \alpha_x\alpha_0 + \alpha_0\alpha_x = 0, \end{gathered} \qquad (3.5)$$

we başgalar, onda, (3.3)-den (3.2)-ä geçilýär.
Şeýlelekde, (3.2)-de

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad p = -i\hbar\nabla$$

operatorlary girizip, Diragyň deňlemesini alýarys.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \widehat{H}_p\psi, \qquad (3.6),$$

bu ýerde, $\widehat{H}_p = c(\hat{\alpha}\hat{p}) + \alpha_0 m_0 c^2$-Diragyň operatory. Şu ýerde Diragyň matrissalarynyň aýdyň görnüşlerini getireliň

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \alpha_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Şu matrissalardan ugur alyp, (3.5)-nji şertleriň ýerine ýetýändiklerini barlamak kyn däldir.

§3. Zarýadyň we toguň dykyzlygy.

Energiýanyň we impulsuň arasyndaky, "çyzyklandyrlan" relýatiwistik gatnaşygynda operatorlara geçip erkin bölejik üçin Diragyň deňlemesini alýarys.

$$\left(\hat{E} - \widehat{H}\right)\psi = 0, \qquad (4.1),$$

bu ýerde, $\hat{E}$ *we* $\hat{P}$ operatorlary, adatdakysy ýaly, deňdirler.

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{P} = -i\hbar\nabla.$$

$\widehat{H}$ gamiltonian bolsa şeýle aňlatma bilen aňladylýar;

$$\hat{H} = c(\hat{\alpha}\hat{P}) + \hat{\alpha} m_0^2 c^2. \qquad (4.2)$$

Elektronyň, wektor we skolýar $(\hat{A}, V)$ potensiýallary bilen berilen elektromagnit meýdanynda hereketinde hem (4.1) we (4.2) deňlemeleri ulanylýar, ýöne energiýanyň we impulsuň operatorlary diýip olaryň utgaşdyrlan bahalary alynmalydyr;

$$\hat{F} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - eV, \quad \hat{P} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\hat{A}. \qquad (4.3).$$

Şonuň üçin Diragyň tolkun deňlemesi, elektromagnit meýdanyň barlygynda aşakdaky görnüşde ýazylyp biliner;

$$\left(\hat{F} - c(\hat{\alpha}\hat{P}) - \alpha_0 m_0 c^2\right)\psi = 0. \qquad (4.4).$$

Matrissalarynyň hatarynyň we sütüniniň sanyna laýyklykda ψ funksiýa dört komponente eýe bolmalydyr we, olary bir sütünden duran matrissa görnüşde toplalyň;

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \qquad (4.5).$$

(4.5)-den çatrymly bispinory emele getirip bolýar;

$$\psi^* = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*). \qquad (4.6).$$

Belli bolşy ýaly

$$(\hat{\alpha}\hat{P}) = \frac{\hbar}{i}\left(\alpha_x\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

we (4.4)-nji deňleme $\alpha_0, \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ we ψ ululygyň bahalaryny goýup, Diragyň deňlemesiniň has aýdyň görnüşini alýarys;

$$\left\{\hat{F} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{\hbar c}{i} \cdot \right.$$

$$\cdot \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \right.$$

$$\left. \left. + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \right] - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} m_0 c^2 \right\} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = 0.$$

Şeýlelikde, Diragyň matrissaly tolkun deňlemesi (4.4) dört deňlemeleriň sistemasyna ekwiwalentdir.

$$\begin{aligned} &(\hat{F} - m_0 c^2)\psi_1 - c(\hat{P}_x - i\hat{P}_y)\psi_4 - c\hat{P}_z\psi_3 = 0, \\ &(\hat{F} - m_0 c^2)\psi_2 - c(\hat{P}_x + i\hat{P}_y)\psi_3 + c\hat{P}_z\psi_4 = 0, \\ &(\hat{F} + m_0 c^2)\psi_3 - c(\hat{P}_x - i\hat{P}_y)\psi_2 - c\hat{P}_z\psi_1 = 0, \\ &(\hat{F} + m_0 c^2)\psi_4 - c(\hat{P}_x + i\hat{P}_y)\psi_1 + c\hat{P}_z\psi_2 = 0. \end{aligned} \qquad (4.7).$$

Şu ýerden, položitel zarýatly elektronyň-pozitronyň barlygy baradaky gipotezanyň gelip çykýanlygyny aýratyn bellenmäge mynasypdyr.

Indi (4.4)-i çatrymly funksiýasy ψ^+ üçin ýazalyň.

$$\psi^+\left(\hat{F} - c(\hat{\alpha}\hat{P}) - \alpha_0 m_0 c^2\right) = 0, \qquad (4.8),$$

bu ýerde, çepde ýerleşen tolkun funksiýasyna, $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ we $-i\hbar\nabla$ operatorlaryň täsirini birneme adaty däl manyda düşünmeli.

$$-\psi^+ i\hbar\nabla \rightarrow i\hbar\nabla\psi^+, \quad \psi^+ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^+$$

Şeýlelikde, (4.4) we (4.8) deňlemeler şeýle görnüşde ýazylyp biliner.

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - eV\right)\psi - c\left[\hat{\alpha}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\hat{A}\right)\right]\psi - \alpha_0 m_0 c^2\psi = 0, \qquad (4.9),$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - eV\right)\psi^+ - c\left[\left(i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\hat{A}\right)\psi^+\hat{\alpha}\right] - m_0 c^2\psi^+ + \alpha_0 = 0. \qquad (4.10).$$

(4.9)-njy deňleme çepden ψ^+, (4.10)-na bolsa sagdan ψ bilen köpeldip we ikinji deňlemäni birinjiden aýyryp, gatnaşygy alýarys.

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\psi^+\psi + div\psi^+\hat{\alpha}\psi = 0. \qquad (4.11).$$

Şuny ähtimallygyň dykyzlygy ρ we toguň dykyzlygy j üçin, üznzksilik deňlemesi ýaly seredip bolar.

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + divj = 0. \qquad (4.12),$$

bu ýerde $\rho = e\psi^+\psi, \quad j = ec\psi^+\hat{\alpha}\psi.$

Soňky formuladan gelip çykyşyna laýyklykda matrissany,tizligiň operatory ýaly düşündirip bolýar. Eger (4.12)-nji deňleme açylsa, alýarys

$$\rho_0 = \frac{\rho}{c}\psi^+\psi = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 + \psi_3^*\psi_3 + \psi_4^*\psi_4,$$

Ýagny ρ_0 bir elementden ybarat bolan matrissadyr, we şol sebäpli ol adaty funksiýadyr.
Edil şonuň ýaly ýeňil görkezilip biliner, ýagny

$$\frac{j_x}{ec} = \psi^+\alpha_x\psi = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*)\begin{pmatrix}\psi_4\\ \psi_3\\ \psi_2\\ \psi_1\end{pmatrix}$$
$$= \psi_1^*\psi_4 + \psi_2^*\psi_3 + \psi_3^*\psi_2 + \psi_4^*\psi_1,$$

Kleýniň-Gordanyň deňlemesinden tapawutlylykda, ρ_0 dykyzluk položitel kesgitlenen ululykdyr. Ýöne bu, Diragyň nazaryýetinde ρ_0 ululygy bölejikleriň sanlarynyň dykyzlygy ýaly seredilmekligi aňlatmaýar. Kleýniň-Gordanyň nazaryýetindäki ýaly, Diragyň nazaryýetinde hem elektronlar bilen bir hatarda ters zarýatly bölejikler- pozitronlar bolmalydyrlar.

M A Z M U N Y

Giriş
I bap. Kwant mehanikasynyň tejribe we nazaryýet esaslary.
Umumy bellikler.
§1. Ýagtylygyň kwant nazaryýeti. Plankyň formulasy.
§2. Ýagtylygyň kwantlarynyň tebigaty.
§3. Fotoeffekt.
§4. Komptonyň effekti.
II bap. Atomyň kwant nazaryýeti.
III bap. Mikrobölejikleriň korpuskula-tolkun häsiýeti.
§1. Lui de Broýlyň gipotezasy. Tolkun funksiýa.
§2. Kesgitsizlik gatnaşygy we onuň matematiki aňladylyşy.
§3. Mikrobölejikleriň giňişlikde ýerleşmekleriniň ähtimallygy.
§4. Ýagdaýyň superpozisiýa prinsipi.
IV bap. Kwant mehanikasynda dinamiki üýtgeýänler.
§1. Fiziki ululyklaryň orta bahalary.
§2. Operatorlar we olaryň üstündäki algebraik amallar.

§3. Fiziki ululyklar üçin kesgitsizlik gatnaşygy.
§4. Operatorlaryň hususy funksiýalary we hususy bahalary.
§5. Hususy funksiýalaryň esasy häsiýetleri.
§6. Dürli mehaniki ululyklary birwagtda ölçemek mümkinçiliginiň şerti.
V bap. Kwant mehanikasynyň ýönekeý operatorlary.
§1. Koordinatlaryň we impulsyň operatorlary.
§2. Impulsyň momentiniň operatory.
§3. Doly energiýanyň operatory.
§4. Gamiltonyň deňlemesi.
VI bap. Relýatiwistik däl kwant mehanikasynyň esaslary.
§1. Şrýodingeriň deňlemesi.
§2. Üznüksizligiň deňlemesi.
§3. Stasionar ýagdaýlar.
§4. Geýzenberg görnüşdäki esasy deňleme.
§5. Kwant we klassykyy nazaryýetleriniň gatnaşygy. Erenfestiň teoremasy.
§6. Hereketiň integrallary.
VII bap. Kwant mahanikasyndan klassyky mehanika geçilişi.
§1. Kwant deňlemeden Nýutonyň deňlemesine geçilişi.
§2. Şrýodingeriň deňlemesinden Gamiltonyň-Ýakobiniň deňlemesine geçilişi.
§3. Kwant mehanikasy we optika.

VIII bap. Kwant mehanikasynyň matrisaly görnüşi.
§1. Matrisaly mehanikanyň zerurlygy we onuň dikeldilişi.
§2. Ýagdaýyň wektorynyň dürli aňladylyşy.
§3. Operatorlaryň dürli aňladylyşlary.
§4. Matrisalar we olaryň üstündäki amallar.
§5. Kwant mehanikasynyň käbir düşünjeleriniň matrisaly görnüşleri.
IX bap. Kwant nazaryýetiniň käbir ulanylyşy.
Umumy bellikler.
§1. Potensial barýerden bölejikleriň geçmegi.
§2. Çyzykly garmoniki ossilýator.
§3. Energetiki aňladylmadaky ossilýator.
§4. Merkezi güýç meýdanda bölejigiň hereketi.
§5. Kulon meýdanyndaky bölejigiň hereketi.
§6. Elektromagnit meýdanda zarýadly bölejikleriň hereketi.
§7. Zarýadly erkin bölejigiň birjynsly magnit meýdanyndaky hereketi.
X bap. Momentleriň umumy nazaryýeti.
Umumy bellikler.
§1. Momentleriň hususy bahalary we hususy wektorlary.
§2. Pauliniň deňlemesi. Zeýemanyň normal effekti.
§3. Impulsyň doly momentiniň häsiýeti.
XI bap. Kwant nazaryýetiniň ýakynlaşma usuly.
Umumy bellikler.
§1. Stasionar mesele üçin tolgundyrma nazaryýeti.
§2. Döremekligiň ýoklugyndaky tolgundyrma.

§3. Döremekligiň barlygyndaky tolgundyrma.
§4. Angarmoniki ossilýator.
XII bap. Köp bölejikleriň nazaryýetiniň esaslary.
§1. Mikrobölejikleriň birmeňzeşlik prinsipi.
§2. Simmetrik we antisimmetrik ýagdaýlar.
§3. Bozeniň bölejikleri we Ferminiň bölejikleri.
§4. Pauliniň prinsipi we onuň kwant mehanikasynda aňladylyşy.
§5. Köpelektronly atomlar. Geliýniň atomy.
§6. Wodorodyň molekulasy.
§7. Atomyň kwant mehanikasy we Mendeleýewiň elementler üçin periodiki kanuny.

XIII bap. Relýatiwistik kwant mehanikasy.
Umumy bellikler.
§1. Kleýniň-Gordonyň deňlemesi.
§2. Diragyň matrisalary we deňlemesi.
§3. Zarýadyň we toguň dykyzlygy.

Edebiýat

1. Gurbanguly Berdimuhamedow. Ősűşiň täze belentliklerine tarap. Saýlanan eserler. Tom I., Aşgabat, 2008.
2. Gurbanduly Berdimuhamedow. Ősűşiň täze belentliklerine tarap. Saýlanan eserler. Tom II., Aşgabat, 2009.
3. Блохинцев Д.И. «Основы квантовой механики» М.,1976.
4. Соколов А.А., Лоскутов Ю.М.,Тернов Л.М. «Квантовая механика», М.,1962.
5. Соколов А.А., Тернов Л.М. «Квантовая механика и атомная физика». М.,1970.
6. Шифф Л. «Квантовая механика» М.,1959.
7. Липкин Г. «Квантовая механика» М.,1977.
8. Альберт Мессиа «Квантовая механика» Том 1 и 2; М.,1978.
9. Медведев Б.В. «Начало теоретической физики» М., 1977.
10. Кемпфер Ф. «Основные положения квантовой механики» М.,1967.
11. Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. «Квантовая механика» М.,1963.

12. Левич В.Г, Вдовин Ю.А, Мямлин В.А. Курс теоретической физики, ФИЗМАТ ГИЗ, 1962.
13. Галинский В.М , Карнаков Б.М., Коган В.И. «Задачи по квантовой механике» М., 1981.