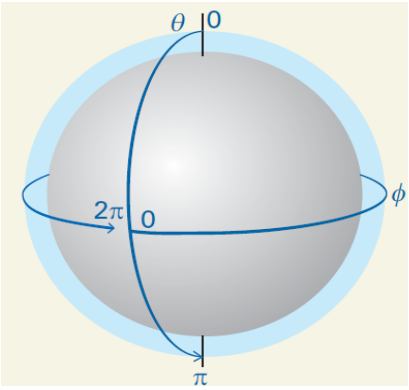
ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ

ЖИЗЗАХ ДАВЛАТ ПЕДАГОГИКА УНИВЕРСИТЕТИ



КВАНТ МЕХАНИКАСИ МАЪРУЗАЛАР МАТНИ

ЖИЗЗАХ – 2022

Квант механикаси фани бўйича ушбу маърузалар матни давлат таълим стандарти асосида ишлаб чиқилган ва Жиззах Давлат Педагогика Университети Илмий кенгаши томонидан 2021 йил 27 февраль № 2 сонли йиғилиш қарори билан тасдиқланган. Маърузалар матни олий ўқув юртларининг физик-бакалавр мутахассислиги бўйича таълим олаётган талабаларга ва физик мутахассисларга мўлжалланган.

© Н.А. Тайланов *Квант механикаси*
Квантовая механика
Quantum mechanics

Маърузалар матни. – 2022 йил.

КИРИШ

Квант механикаси квант объектлари ва ҳодисалари ҳамда уларнинг хоссаларини ўрганувчи фан ҳисобланади. Квант объектлари дейилганда микроолам (зарралар, атомлар, ядролар ва ҳоказолар) тушунилса, квант ҳодисалари дейилганда микрооламда рўй берадиган ҳодисалар тушунилади. Квант механикасининг асосини ташкил қилган назария XX асрнинг бошларида шакллана бошлади. Квант лотинча сўз бўлиб, “энг кичик миқдор” деган маънони англатади. Демак, дискрет (узлукли) физик катталик ўзгариши мумкин бўлган энг кичик миқдорга *квант* дейилади. Шунингдек, қандайдир физик хоссаларни ташувчи заррага ҳам квант деб аталади. Масалан, фотон – электромагнит майдон, гравитон эса гравитацион майдон кванти ҳисобланади.

Квант физикаси чегаравий ҳолда, яъни микрооламдан макрооламга ўтилганида (квант физика қонунлари классик физика қонунларига айланганида), классик физикага айланади. Шу сабабли, квант физика микрооламда “ишлайди”, классик физика эса макрооламда “ишлайди” деб ҳисобланади. Классик физикадан квант физикага ўтиш дейилганида, материяни оддий ўрганишдан чуқурроқ ўрганишга ўтиш тушунилади. Демак, квант физикаси – материя хоссаларини микро-ҳодисалар даражасида ўрганувчи фан экан. Бундан ташқари, квант физикаси модда ва майдоннинг тузилиши ва хоссалари ҳақидаги ҳозирги замон таълимотининг назарий асоси ҳамдир. Квант физикасининг фундаменти, яъни назарий асоси, квант объектларининг тузилиши, хоссалари ва қонунларини ўрганувчи квант механикасидир. Квант электродинамикаси (электрон ва фотонларнинг таъсирлашувини ўрганувчи фан) ва квант хромодинамикаси (элементар зарраларнинг кварк структурасини ўрганувчи фан) фанлари ҳам квант физиканинг таркибий қисмини ташкил этади. Квант кимёси, қаттиқ жисмнинг квант назарияси, квант электроникаси, атом физикаси, ядро ва элементар зарралар физикаси ва ҳоказо фанлар ҳам квант физикасининг таркибий қисмларидир. “Квант физикаси” умумий атамаси билан бирлашган кенг қамровли фанлар тўплами замонавий кўп илмий – техник йўналишлар, жумладан материалшунослик, электродинамика, атом энергетикаси, лазер техникаси каби йўналишларнинг назарий базаси ҳисобланади. Квант физикаси илмий – техник тараққиётнинг назарий базаси ҳам дейиш мумкин.

XIX асрнинг охирига келганида абсолют қора жисмнинг иссиқлик нурланиши маълум бўлди. Абсолют қора жисм дейилганида ўзига тушган исталган тўлқин узунликдаги нурланиш оқимини бутунлай ютиш қобилиятига эга бўлган жисм тушунилади. Бу ҳодиса кашф этилганидан сўнг уни тушунтиришга ҳаракат қилувчи турли назариялар ишлаб чиқилди. Ана шулардан бири Рэлей ва Жинс томонидан таклиф этилган назариядир. Ушбу назария формулаларини келтириб чиқаришда улар ёруғликнинг классик физикадаги электромагнит тўлқин назариясидан фойдаланилди. Абсолют қора жисмнинг иссиқлик нурланишига оид тажриба натижалари Рэлей – Жинс назариясидан келиб чиқадиган натижалар билан таққосланганда, Рэлей – Жинс назарияси фақат нурланиш спектрининг жуда

кичик частоталар соҳаси учун ўринли бўлиши маълум бўлди. Ушбу назарияга биноан, нурланиш частотаси қанчалик катта бўлса, нурланиш энергияси шунча катта бўлади. У ҳолда абсолют қора жисм ўзидан юқори частотали ва катта энергияли электромагнит тўлқин чиқара бошлайди. Бунинг ҳисобига абсолют қора жисм бор энергиясини тезда йўқотиб, манфий температураларгача тез совиб, қотиб қолади. Бу ҳодиса фанда "ультрабинафша ҳалокати" деб номланади. Бундан абсолют қора жисмнинг иссиқлик нурланишини классик физика қонунлари асосида тушунтириб бўлмаслиги келиб чиқади. Вин тақсимоти ҳам, Рэлей-Жинс тақсимоти ҳам классик физиканинг барча имкониятларидан фойдаланиб топилган формулалардир.

Бу янги тушунчани бериш М. Планкга насиб этди. 1899 йилда аниқ ўлчанган тажрибаларни Вин формуласи билан таҳлил этган М. Планк, маълум ўзгартиришлар киритиш билан 1900 йилда нурланиш энергиясининг спектрал зичлигини тўла тавсифловчи формулани топди ва бу формула унинг номи билан аталди. Бу формулани кашф этишда Планк янги ғоя - нурланиш энергиясининг квантланиш ғоясини илгари сурди. Планк формуласи квант назариясининг яратилишига замин яратди.

М. Планк 1900 йилнинг 14 декабридаги немис физик жамияти мажлисида ўзи олган натижаларни баён этиб, ёруғлик квантлари ҳақидаги гипотезасини илгари сурди. М. Планк физикага ёруғлик оқимининг дискретлик (узлуклик) тушунчасини киритди. Планк гипотезасининг мазмуни қуйидагича: модда атомлари ўзларидан алоҳида квантлар шаклида бўлган узлукли нурланишни чиқарадилар. М. Планк атом нурланишида узлукли энергия ҳосил бўлади, нур ютишда эса узлуксиз энергия ютилади деб ҳисоблаган. 1905 йилнинг мартида Эйнштейн "Ёруғликнинг ҳосил бўлиши ва айланишига тегишли бўлган ажойиб бир нуқтаи – назар ҳақида" номли ишида «нурланиш ва нур ютиш жарёнларида ёруғлик квантлар шаклида чиқарилади ёки ютилади» деган гипотезани исботлаб берди.

Квант тасаввурларининг ривожланишида Эйнштейн гипотезасининг икки муҳим хулосалари катта аҳамиятга эга бўлди. Буларнинг бири ушбу гипотеза нурланиши ҳақидаги асосий тасаввурни акс эттирганлиги ва у ёруғликнинг корпускуляр назариясига мос келганлиги бўлса, иккинчиси эса ундан ёруғлик табиатининг келиб чиққанлигидадир. Эйнштейн назариясига мувофиқ, моддага ёруғлик тушганида ундаги электронлар ёруғлик энергиясини порция шаклида ютади. Бу назариянинг кейинги ривожи ёруғликнинг корпускуляр – тўлқин дуализмига олиб келди. Бу дуализм кейинчалик де – Бройль томонидан зарраларга ва моддаларга кўчирилди. Эйнштейн томонидан бажарилган нурланиш ва нур ютиш жараёнларининг аниқ таҳлили атом ва молекулаларнинг квант назариясининг ривожланишида катта роль ўйнади. Бу жараёнларнинг дискретлиги ғояси зарралар энергиясини квантлаш ғояси билан биргаликда атом назариясига бағишланган. Н. Борнинг биринчи мақоласида ўз аксини топди. Бор бу мақолада Эйнштейннинг ишига мурожаат қилади ва у ҳақида "Планк назариясини атом системаларига қўллашни биринчи бўлиб Эйнштейн

кўрсатиб берди” – деб ёзади. Бунда Бор атом системалари тўғрисидаги Эйнштейн ғоясини кўзда тутган эди.

Микроҳодисаларга оид муҳим назарияни яратиш йўлида 1913 йилда Н. Борнинг амалга оширган ишлари керакли босқич вазифасини бажарди. Унда модда энергиясининг квантланганлиги ва нурланиш ҳамда нур ютиш жараёнларининг дискретлиги ғоялари аввало водород атомига ва бошқа атомларга, шунингдек молекулаларга ҳам тадбиқ этилди. Бу ғоялар стационар ҳолатлар ва квант ўтишларининг частоталари ҳақидаги янги ғоялар билан бойитилди. Бунда Н. Бор 1911 йилда Э. Резерфорд томонидан таклиф этилган атомнинг планетар моделидан фойдаланди. Бу назариянинг асосини эса у яратган учта машҳур послулат ташкил қилади. Бу назария ёрдамида жуда ҳам катта миқдордаги тажриба материалларини ўрганиш имконияти туғилди. Эйнштейннинг нурланиш муаммосига бағишланган илмий ишида Бор назариясидан кенг фойдаланилди. 1916 йили Эйнштейн “Квант назария бўйича нурланиш ва нур ютиш” мавзусидаги илмий ишини чоп эттирди. Унда Бор атоми билан атом нурланиш орасидаги термодинамик мувозанат масаласи кўриб чиқилган. Эҳтимоллик тасаввурларидан келиб чиққан ҳолда, Эйнштейн Планкнинг нурланиш қонунини квант механик йўл билан келтириб чиқарди. Бу ишнинг давоми сифатида эса у “Нурланишнинг квант назариясига оид” мавзусидаги ишини 1917 йили чоп эттирди. Унда юқорида келтирилган ғоялар аниқлаштирилди ва ривожлантирилди.

А. Эйнштейннинг ушбу ишлари фундаментал тадқиқотлар бўлиб, улар квант механикасининг ривожланишига муҳим туртки бўлди. Бу тадқиқот ишларида спонтан ва мажбурий нурланишнинг, шунингдек ёруғлик ютилишининг эҳтимолий ўтиши каби муҳим тушунчалар киритилди. Ютилиш ва индукцияланган нурланиш эҳтимолларининг тенглиги ҳақидаги Эйнштейн хулосаси қимматли хулоса бўлди. Ушбу илмий хулосалар методологик нуқтаи – назардан физиканинг сабабият қонунларидан эҳтимолий қонунларига ўтиш учун янги қадамни бошлаб берди. Бошқа томондан бу ишларнинг натижалари ҳозирги замон лазерларининг асосини ташкил қилади.

Физиклар томонидан турли микроскопик, магнит ва электр ҳодисаларининг муваффиқиятли ўрганилиши, кенг ва катта миқдордаги тажриба натижаларида квант тасаввурларнинг ривожланиши квант механикасининг юзага келиши учун шарт – шароит яратди. Бу соҳадаги биринчи қадамни 1925 йили В. Гейзенберг қўйди. У квант механикасининг матрица вариантини ишлаб чиқди. Унда квантлашган катталик диагонал элементлари унинг тажрибада кузатиладиган қийматларидан иборат матрица кўринишида тасвирланган. Мослик принципидан келиб чиқувчи ва алгебраик математик аппаратга асосланган, Гейзенбергнинг квант механикасига оид “Кинематик ва механик муносабатларнинг квант – назарий талқини ҳақида” мавзусидаги мақоласи 1925 йилнинг сентябр ойида чоп этилди. 1926 йили Э. Шредингер “Квантлаш – хусусий қийматлар ҳақидаги мақола” номли ишида тўлқин тасаввурларидан фойдаланган ҳолда

де – Бройль тўлқин функцияси учун ўзининг машҳур дифференциал тенгламасини ишлаб чиқди. Бу тенгламани ечиш муаммосини тўлқин функциянинг хусусий қийматларини топиш муаммоси билан алмаштирди. У бу тенгламани ўзгарувчиларни ажратиш, яъни Фурье методи билан ечди ва натижада водород атомининг энергиясини ва спектрал серияларини матрица механикасида Паули методига қараганда оддий ва содда йўл билан ҳосил қилди. Шредингер фойдаланган физик манзара Борнинг атом модели асосида ётган физик манзарадан кескин фарқ қилади. Лекин иккала методда ҳам бир хил натижага келинди. Шредингернинг 1926 йилдаги ишида унинг тўлқин механикасининг Гейзенберг матрица механикаси билан математик эквивалент эканлиги исботлаб берилди. Гейзенбергнинг қўйилган масалага ёндошишининг ўзига хос хусусияти шу вақтгача кузатилган катталиклар ёрдамида ҳаракатни классик тасвирлашдан воз кечганлигидан, классик механикадагина ўхшаш таркибига фақат кузатиладиган катталик кирадиган квант назарий механикани қуришга интилишдан иборат бўлди. Бундай ёндошиш микроҳодисаларни тасвирлашда классик тасаввурлардан фойдаланиб бўлмаслик ҳақидаги Борнинг умумий ғояси билан мос келиши билан диққатга сазовор бўлди. Гейзенберг атомдаги электроннинг классик тебранишлари частотаси билан Ридберг – Ритцнинг комбинацион принципига мос келувчи ўтишлар частотасини, шунингдек, тебранишларнинг классик амплитудалари билан ўтишлардаги нурланиш интенсивлигини аниқловчи амплитудаларни таққослади. Бунда Гейзенберг ўзи томонидан киритилган динамик катталикларнинг ифодалари коммутатив эмаслигини аниқлади. Бу нарса гармоник осцилляторда учрамаганлиги сабабли, у шу ҳолни кўриб чиқди.

1926 йилнинг ўрталарига келиб ягона квант назария ривожлана бошлаган вақтда, М. Борн тўқнашишлар назариясига оид фундаментал тадқиқотларни амалга оширди. Бунда у тўлқин функциянинг физик мазмуни ҳақидаги саволни тўлқин функцияни статистик талқин қилган ҳолда ҳал этди. М. Борн тарафидан таклиф этилган тўлқин функциянинг физик интерпретацияси А. Эйнштейннинг тўлқин майдонининг ёруғлик квантлари билан ўзаро боғлиқлиги тўғрисидаги ғояга асосланди. Координата ва вақтнинг функцияси бўлган тўлқин функцияни М. Борн Шредингер тенгламасига мувофиқ тарқаладиган “эҳтимолий тўлқин” деб қаралади. Борн бу ҳолни қуйидагича таърифлайди: “Ушбу ҳолатни “зарраларнинг ҳаракати эҳтимолий қонунлар бўйича бўлади”, эҳтимоллик эса сабабият қонунига мос равишда тарқалади” – деб умумлаштириш мумкин.

П. Диракнинг “Квант динамиканинг физик талқини” номли ишида квант назария умумий шаклда ривожлантирилди. Бу ишда Шредингер тенгламасини алмаштирувчи функциялар тенгламаси шаклида олиш ва олинган натижаларни чиройли шаклда учун машҳур δ(дельта) – функция киритилди. Дирак математик аппаратни физик талқин этишда Борннинг эҳтимолий ғояларидан ва тасаввурларидан фойдаланди. Ушбу фундаментал иш Диракнинг “Квант механика принциплари” номли машҳур китобининг асосини ташкил этди. Гейзенберг томонидан ноаниқлик муносабатларининг

кашф этилиши ва Бор томонидан қўшимчалик принципининг таърифланиши норелятивистик квант механика ривожланишининг сўнгги босқичини белгилаб берди.

I-БОБ
КВАНТ ФИЗИКАСИНИНГ ТАЖРИБАВИЙ АСОСЛАРИ

1.1. Абсолют қора жисмнинг иссиқликдан нурланиши

Бизга маълумки, бирорта манба томонидан нурланган ёруғлик ўзи билан энергия олиб кетади. Нурланишларнинг табиати турли хилда намоён бўлиши мумкин. Масалан, оксидланаётган фосфорнинг нурланиши, газларда электр токи ўтиши жараёнида вужудга келадиган нурланиш, қаттиқ жисмларни электронлар билан бомбардимон қилиш жараёнида вужудга келадиган нурланиш, қиздирилган жисмларнинг иссиқлик нурланиши ва ҳоказо. Бу нурланишлар бир-бирларидан ўзларининг ҳосил бўлиш жараёни билан фарқ қилади. Лекин ҳар қандай нурланишда ҳам энергиянинг бирон тури нурланиш энергиясига айланади. Агарда жисмга энергия қиздириш йўли билан узатилса, жисм нурланиши *иссиқлик нурланиши* дейилади. Нурланишнинг бундай тури XIX асрнинг охирида бошқа люминесценция каби турига нисбатан бошқача қизиқиш ўйғотди. Иссиқлик нурланиши қиздирилган жисм билан термодинамик мувозанат ҳолатида бўлиши мумкин. Физиклар жисмларнинг иссиқлик нурланиш қонунларини ўрганиш билан термодинамика ва оптика ўртасида кўприк ўрнатишга ишонган эдилар. Агар ҳар хил температурали жисмларни кўзгусимон қайтарувчи деворлар билан ўралган ёпиқ идишга солиб кузатишса, вақт ўтиши билан термодинамик мувозанатга келиши, яъни барча жисмлар бир хил температурага эга бўлиши экспериментда аниқланди. Жисмлар чиқараётган ва ютаётган нур орқали энергия алмашиниши содир бўлар экан. Мувозанат ҳолатида ҳар бир жисмнинг энергия чиқариш ва ютиш жараёнлари бир-бирини ўртача компенсациялайди. Жисмлараро фазода энергия зичлиги аниқ бир қийматга эришади. Маълум бир температурали термодинамик мувозанатда бўлган бундай жисмларнинг нурланиши мувозанат ёки *қора нурланиш* деб аталади. Мувозанат нурланишнг энергия зичлиги ва унинг спектрал таркиби фақат жисм температурасига боғлиқ бўлади.

Агар термодинамик мувозанатда бўлган ёпиқ идиш ичига кичик туйнук орқали қаралса, унда кўз жисмлар тасвирини илғамайди ва фақат бутун ёпиқ идиш ички томонидан бир хил нурланишини кўради. Айтайлик, идишдаги жисмлардан бири унга тушадиган энергияни бутунлай ютиш хусусиятига эга бўлсин. Бошқача қилиб айтганда ўзига тушаётган барча тўлқин узунликдаги нурланишни батамом ютиб оладиган жисм *абсолют қора жисм* дейилади. Маълум бир температурада иссиқлик мувозанат холатида абсолют қора жисм нурланишининг спектрал таркиби, унинг атрофидаги жисм мувозанат нурланиши спектрал таркиби билан бир хил бўлади. Акс ҳолда абсолют қора жисм ва унинг атрофидаги жисм нурланиши ўртасида мувозанат бўлмаслиги мумкин, шунинг учун абсолют қора жисм нурланиши спектрал таркибини ўрганиш муаммоси туғилди. Мумтоз физика бу муаммони ҳал эта олмаслиги маълум бўлди. Бу нурланиш абсолют нолдан фарқли бўлган ҳамма температурада жисмларда кузатилади ва температуранинг қийматига боғлиқ ҳолда ўзариб боради. Агар нурланиш

оқими F бирор ясси параллел пластинкага тушаётган бўлса, бу оқим қисман қайтади F_q, қисман унда ютилади F_{yu} ва қисман ўтади F_u

$$F_q + F_{yu} + F_{ut} = F. \qquad (1.1)$$

Бу тенгликнинг иккала томонини *F* га тақсимласак қуйидаги тенгликни ҳосил қиламиз

$$\rho+a+D=1\ . \qquad (1.2)$$

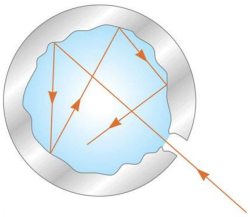
Бу ерда $F_q / F = \rho$ - жисмнинг нур қайтариш қобилияти; $F_{yu} / F = \eta$ - жисмнинг нур ютиш қобилияти; $F_{ut} / F = \chi$ – жисмнинг нур ўтказиш қобилияти. Нисбатан қалинроқ жисмда $\chi=0$ бўлади ва у ҳолда қуйидаги тенглик ўринли бўлади

$$\rho+\eta=1.$$

Шунинг учун Т температурали жисмнинг λ тўлқин узунликли нур қайтариш қобилияти $\rho_{\lambda T}$ ва нур ютиш қобилияти $a_{\lambda T}$ учун қуйидаги тенглик

$$\rho_\lambda+\eta_\lambda=1$$

ўринли бўлади. Умуман, $\rho_{\lambda T}$, $a_{\lambda T}$ лар 0 дан 1 гача бўлган оралиқда ўзгариши мумкин. Қуйидаги иккита хусусий ҳолни кўриб ўтайлик:



1.1-расм

1. $\rho_\lambda=1;\ \eta_\lambda=0$ бўлсин, яъни жисмга тушаётган нур тўла қайтсин. Бундай жисм *абсолют оқ жисм* дейилади.

2. $\rho_\lambda=0;\ \eta_\lambda=1$ яъни жисмга тушаётган нур тўла ютилсин, бундай жисм *абсолют қора жисм* дейилади. Жисмнинг нур ютиш ва қайтариш қобилиятидан ташқари яна бир хоссаси мавжуд, у Т температурадаги жисмнинг бирлик сиртидан бирлик вақтда нурланаётган электромагнит тўлқинларнинг энергиясини ифодалайди. Бу катталикни Т температурадаги жисмнинг *нур чиқариш* ρ_T қобилияти деб атаймиз. Бу ерда ρ, η – катталиклар ўлчамсиз бўлиб, ρ_T катталик эса Вт/м^2 ларда ўлчанади. Жисмлар билан улар солинган ёпиқ идиш ўртасида мувозанат бўлиши учун ҳар бир жисм қанча энергия чиқарган бўлса у шунча энергия ютиши керак бўлади. Бу иссиқлик нурланишининг энг муҳим қонуниятларидан биридир. Бундан кўринадики, маълум бир температурали абсолют қора жисм вақт бирлигида бирлик юзасидан чиқарган нур энергияси бошқа ҳар қандай жисм чиқарган нур энергиясидан кўп бўлади. Абсолют оқ жисм ҳам, абсолют қора жисм ҳам табиатда учрамайди. Ҳар қандай жисм нурланишнинг бир қисмини ютса,

қолган қисмини қайтаради. Уларнинг фарқи шундаки, баъзи жисмлар нурланишнинг кўпроқ қисмини ютса, баъзилари эса камроқ қисмини ютади. Одатда, ўзининг хусусиятлари билан абсолют қора жисмдан кам фарқ қиладиган моделдан фойдаланилади. Кичик тирқишли берк ғовак идиш бундай жисмнинг идеал модели бўлиб ҳисобланади (1.1-расм). Бундай ёпиқ ғовак идишнинг кичик тирқиши орқали тушган ёруғлик идиш ичида унинг деворларидан кўп марта қайтгандан сўнгина қайтиб чиқа олади. Ҳар бир қайтиш жараёнида нур энергиясининг бир қисми идиш томонидан ютилади. Натижада, нур энергиясининг маълум қисмигина ғовакдан қайтиб чиқади. Шунинг учун бундай моделнинг нур ютиш қобилияти 1 га жуда яқин бўлади. Бу ёпиқ ғовак идиш ташқаридан қараганда мутлақо қора бўлади. Аммо, маълум бир температурагача қиздирилган ёпиқ ғовак идиш иссиқлик мувозанатида бўлса, унинг кичик тирқиши орқали чиқарган нурланиши абсолют қора жисмнинг нурланиши каби дейиш мумкин. Айнан шундай иссиқлик нурланишини тадқиқ қилиш бўйича олиб борилган барча экспериментлар асосида абсолют қора жисм моделлаштириш ётади. Ёпиқ ғовак идиш ичида температуранинг ортиши билан унинг тирқиши орқали чиқараётган нурланишининг спектрал таркиби ҳам ўзгариб боради. Берилган температурада абсолют қора жисмнинг нурланиш энергиясининг тўлқин узунлиги бўйича тақсимоти *нур чиқариш қобилияти* коэффициенти $r(\lambda,T)$ билан характерланади. Нур чиқариш қобилияти бирлик жисм юзасидан бирлик тўлқин узунлиги интервалидаги нурланиш қувватига тенг бўлади. $r(\lambda,T)\Delta\lambda$ кўпайтма абсолют қора жисм юза бирлигидан тўлқин узунлик интервалида барча йўналиш бўйича нурланиш қувватига тенг. Шунингдек, энергия тақсимотини $r(\nu,T)$ частота бўйича ҳам келтириш мумкин. $r(\lambda,T)$ функцияни баъзида *спектрал нурланиш* ҳам деб аталади. Барча тўлқин узунликлари учун тўла нурланиш $R(T)$ қуйидагига тенг бўлади

$$R(T)=\int_0^\infty r(\lambda,T)d\lambda=\int_0^\infty r(\nu,T)d\nu \qquad (1.3)$$

R жисмнинг *тўла нур чиқариш қобилияти* деб аталади.

Кирхгоф қонуни. Ҳар қандай жисмнинг муайян температурадаги тўла нур чиқариш ва нур ютиш қобилиятларининг нисбати ўзгармас катталик бўлиб, у айни температурадаги абсолют қора жисмнинг тўла нур чиқариш қобилиятига тенг

$$\frac{r_T}{a_T}=\frac{R_T}{1}=R_T\ . \qquad (1.4)$$

Бу *Кирхгофнинг интеграл қонунидир* - абсолют қора жисмнинг нур чиқариш қобилияти. Кирхгофнинг дифференциал қонунини қуйидагича ёзиш мумкин

$$\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}}=\frac{R_T}{1}=R_{\lambda,T}.$$

Ихтиёрий жисмнинг нур чиқариш ва нур ютиш қобилиятларининг нисбати бу жисмнинг табиатига боғлиқ бўлмай, барча жисмлар учун тўлқин узунлиги ва температуранинг универсал функциясидир, у абсолют қора жисмнинг нур чиқариш қобилиятига тенгдир. Юқоридаги ифодалардан

$$r_T=a_T R_T,$$
$$r_{\lambda,T}=a_{\lambda,T}R_{\lambda,T}. \qquad (1.5)$$

Демак ихтиёрий жисмнинг нур чиқариш қобилияти шу жисмнинг нур ютиш қобилияти билан абсолют қора жисмнинг нур чиқариш қобилиятининг кўпайтмасига тенгдир. Оддий жисм учун $r_T < R_T$.

Стефан-Больцман қонуни. Иссиқлик нурланиш назариясининг энг асосий вазифаси абсолют қора жисм нур чиқариш қобилиятининг температура ва тўлқин узунлигига боғлиқлик характерини аниқлашдан иборат. 1879 йилда Ёзеф Стефан экспериментал маълумотлар таҳлили асосида абсолют қора жисмнинг тўла нур чиқариш қобилиятининг температуранинг тўртинчи даражасига пропорционал деган хулосага келди

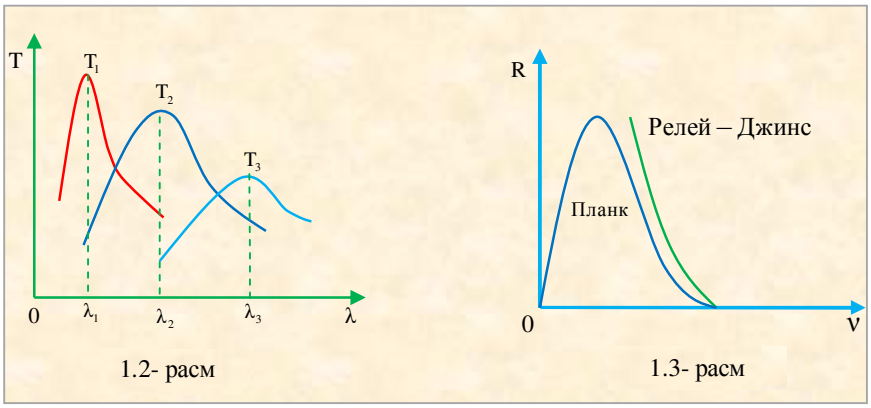
$$R(T)=\sigma T^4 \ . \qquad (1.6)$$

1884 йилда эса Л. Больцман ушбу боғланишни термодинамик нуқтаи назардан назарий исботлади. Бу қонун *Стефан-Больцман қонуни* номини ξ олди. Ушбу тенгликдаги доимийнинг сон қиймати ҳозирги замон ўлчашлари бўйича $\sigma=5{,}671\cdot10^{-8}$Вт/(м·К^4) га тенг. R катталикнинг термодинамик температурага боғлиқлиги абсолют қора жисмнинг спектрал таркиби ҳақида аниқ тасаввур бера олмайди, аммо абсолют қора жисм спектридаги энергия тақсимотини аниқ ифодалай олади.

Вин қонуни. XIX асрнинг 90 йиллари охирига келиб абсолют қора жисм нурланишининг спектрал тақсимоти устида пухта экспериментал ўлчашлар бажарилди. Улар шуни кўрсатадики, температуранинг ҳар бир қиймати учун $R(\lambda,T)$ боғланиш аниқ максимумга эга (1.2-расм). Температуранинг ўзгариши билан максимум қиймат қисқа тўлқинлар соҳаси томон силжий боради. Бунда максимумга мос тушадиган тўлқин узунлиги λ_m билан T температуранинг кўпайтмаси доимий бўлиб қолади

$$\lambda_m T=b \ . \qquad (1.7)$$

Ушбу муносабат Виннинг *силжиш қонуни* деб аталади. Бу қонунга кўра абсолют қора жисм нурланиш энергиясининг максимумига тўғри келувчи λ_m тўлқин узунлиги T температурага тескари



1.2- расм 1.3- расм

пропорционалдир. Бу қонундаги b Вин доимийси дейилади ва унинг қиймати $b=2.898\cdot10^{-3}\,m\cdot K$. Лаборатория шароитида эришилган температурада $R(\lambda,T)$ нурланиш қобилияти максимум қиймати инфрақизил соҳада ётади. Фақат $T\geq5\cdot10^{3}\,K$ да максимум спектрнинг кўринадиган чегарасига ўтади. Қуёшнинг нурланиш энергиясининг максимуми тахминан 470 нм (спектрнинг яшил соҳаси) га тўғри келади. Бу қуёшнинг юза қатламларига 6200 К ҳарорат тўғри келади (агар Қуёшни абсолют қора жисм деб қаралса).

Релей-Жинс формуласи

Инглиз олимлари Д. Жинс ва Д. Релейлар Кирхгофнинг универсал функцияси r_ν ни топиш учун статистика қонунларидан фойдаландилар. Унга биноан, эркинлик даражалари бўйлаб энергиянинг тенг тақсимланишини ҳисобга олиб иссиқлик нурланишида энергетик равшанликнинг спектрал зичлиги формуласини, абсолют қора жисм мисолида

$$r_\nu=\frac{2\pi\nu^2}{c^2};\ \bar{\varepsilon}=\frac{2\pi\nu^2}{c^2}kT \qquad (1.8)$$

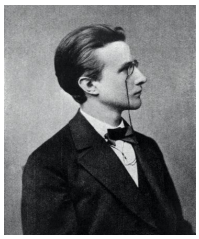
кўринишда ёзиш мумкин. Бу ерда, $\bar{\varepsilon}=kT$ хусусий частотаси ν бўлган осцилляторнинг ўртача энергияси. Тебранаётган осцилляторнинг ўртача кинетик ва потенциал энергияси бир хил бўлади (1.3-расм). Келтирилган ифода тажриба натижалари билан кичик частота ва юқори температуралардагина мос келади. Катта частоталарда эса бу ифода маънога эга бўлмайди, шунингдек Вин ва Стефан-Больцман қонунларидан анча фарқ қилади

$$R_E = \int_0^\infty r_\nu d\nu = \frac{2\pi kT}{c^2}\int_0^\infty \nu^2 d\nu = \infty.$$

Бу ифода тарихда *ултрабинафша «ҳалокати»* номи билан аталади.

М. Планк гипотезаси

Немис физик-назариётчиси Мах Планк 1900 йилда классик физиканинг энергия ҳамма вақт узлуксиз ўзгариши қонунидан воз кечиб, янги квант гипотезасини илгари суради. У атом энергияни узлуксиз чиқармасдан, маълум порцияларда - квантларда чиқаришини таъкидлади. Квантнинг энергияси, тўлқин частотасига пропорционал $E_0 = \hbar\nu = \hbar c/\lambda$, бу ерда $\hbar = 6.6\cdot 10^{-34}$ Ж·с - Планк доимийси. Шуни эслатиб ўтамизки, бундан кейинги ифодаларда ħ катталикнинг ўрнига h доимийликдан фойдаланамиз, яъни уларни $\hbar = h/2\pi$ муносабатга асосан тақрибан тенглаштириб оламиз. Умумий нурланиш, элементар квант энергиясига қолдиқсиз бўлинади $E = h\nu$, ν – бутун сон. Атом - осциллятор энергияси эҳтимоли $e^{h\nu/kT}$ га пропорционаллигидан, осцилляторнинг ўртача энергияси $\varepsilon = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1}$ ни ҳисобга олиб, энергетик равшанликнинг спектрал зичлигини абсолют қора жисм учун ёзсак



М. Планк
(1858-1947)

$$r_\nu = \frac{2\pi\nu^2}{c^2}\frac{h\nu}{e^T-1} = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}.$$

Кирхгофнинг универсал функцияси учун Планк формуласи

$$r_\nu = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1} \qquad (1.9)$$

тажриба натижалари билан мос келади. Шундай қилиб, Планк абсолют қора жисм нурланиш энергиясининг тақсимланишининг температура ва частотага боғланиш формуласини келтириб чиқарди. Иссиқлик нурланиш қонунлари қизиган жисмларнинг ва ўзи нурланар жисмларнинг температурасини ўлчашда кенг қўлланилади. Модда температурасини энергетик равшанликнинг спектрал зичликка боғлиқ равишда қўлланиладиган усулларига *оптик пирометрия* дейилади. Жисм температурасини ўлчашда қайси иссиқлик нурланиш қонунидан фойдаланилганига боғлиқ равишда радиацион, ранг ва равшанлик температуралари фарқланади.

1. *Радиацион температура.* Бу температурада абсолют қора жисмнинг энергетик равшанлиги R_E, оддий жисмнинг энергетик равшанлиги R_t га

тенг. Абсолют қора жисмникига кулранг жисмники тенглаштириб олинади. Бу вақтда оддий жисм температураси абсолют қора жисм учун ёзилган ифодадан топилади

$$T_R = \sqrt[4]{\frac{R_T}{\sigma}}, \quad R_T^s = A_T R_s = A_T \sigma T_r^4;$$
$$R_T^s = A_T \sigma T_r^4 .$$

дан фойдаланиб, $T_R = \sqrt[4]{A_T T}$ дек ёзиб олинади, бу ерда $A_T < 1, T_r < T$ бўлади, жисмнинг ҳақиқий температураси унинг радиацион температурасидан катта бўлади.

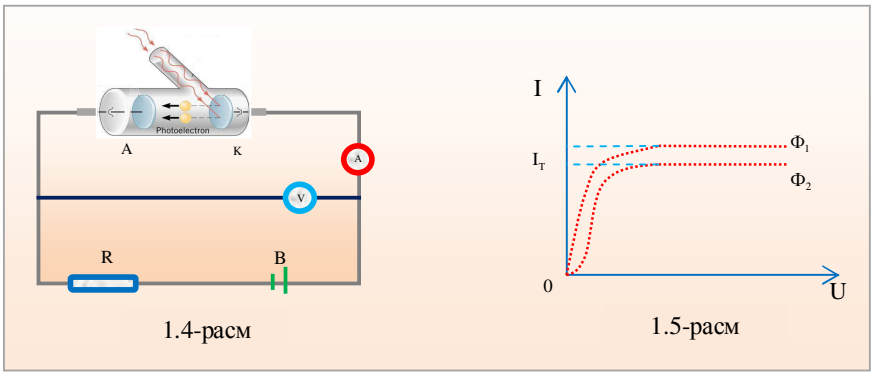
2. *Рангли температура.* Кулранг жисм учун энергетик равшанликнинг спектрал зичлиги $R_{\lambda T} = A_T r_{\lambda T}$ кўринишида. Бу ерда, $A_T = \text{const} < 1$ бўлади. Кулранг жисм учун Вин қонуни қўлланилади $T_{rang}=b/\lambda_{max}$ ва бу *рангли температура* дейилади. Кулранг жисм учун ранг температура ҳақиқий температура билан мос келади.

3. *Ёрқинлик температураси. Ёрқинлик температура* бу кулранг жисмнинг энергетик равшанлигининг спектрал зичлиги айрим тўлқин узунликлар учун абсолют қора жисмнинг энергетик равшанликнинг спектрал зичлиги билан мос келган температурадир: $r_{\lambda T}=R_{\lambda T}$, бу ерда, T – жисмнинг ҳақиқий температураси. Кирхгоф бўйича кузатилаётган жисм учун λ – тўлқин узунлик учун бўлади, $R_{\lambda T} / A_{\lambda T}$ ёки $A_{\lambda T} = R_{\lambda T} / r_{\lambda T}$. Жисмнинг ёрқинлик температурасини аниқлашда асосан йўқолувчи ип усулидан кенг фойдаланилади.

1.2. Фотоэффект ҳодисаси

Франк-Герц тажрибаси. Таниқли немис физиклари Д. Франк (1882-1964) ва Г. Герцлар (1887-1914) 1913 йилда тўхтатувчи потенциаллар усули ёрдамида газ атомлари ва электронлар тўқнашуви оқибатида атом энергиясининг узлукли - дискрет ҳолда ўзгаришини тажрибада кузатдилар. Ушбу тажриба фанда фотоэффект тушунчасининг пайдо бўлишига олиб келди. Ёруғлик таъсирида электронларнинг моддалардан ажралиб чиқиш ҳодисаси *ташқи фотоэффект* дейилади. Бу ҳодиса 1890 йилда рус физиги А. Столетов томонидан тажрибада қайтадан ўрганиб чиқилди. Агар ташқи фотоэффект асосан ўтказгичларда рўй бериши ва улардаги электронларнинг атом ва молекулаларга боғланиш энергияси жуда кичиклигини эътиборга олсак, электронлар атомлар ва молекулалардан ажралиб чиқишига ишонч ҳосил қиламиз. Агар атом ёки молекуладан ажратиб олинган электрон модданинг ичида эркин электронлар сифатида қолса, бундай ҳодисага *ички фотоэффект* дейилади. Ички фотоэффект асосан ярим ўтказгичларда кузатилиб, 1908-йилда рус физиги А. Иоффе (1880-1960) томонидан ўрганилган. Столетов томонидан ташқи

Г.Л. Герц
(1887–1975)



1.4-расм 1.5-расм

фотоэффектни ўрганиш тажрибасининг схемаси 1.4-расмда келтирилган. Вакуумли найда катод вазифасини бажарувчи текширилаётган К пластинка ва анод вазифасини бажарувчи А электрод жойлаштирилган. Катод ва анод R қаршилик орқали ток манбайига уланган. Электродлар орасида кучланиш (анод кучланиши) вольтметр V, занжирдаги ток эса гальванометр (кичик токларни ўлчайдиган асбоб) G ёрдамида ўлчанади. Катод ёритилмаган дастлабки пайтда занжирда ток бўлмайди. Чунки катод ва анод ўртасидаги бўшлиқда заряд ташувчи зарралар бўлмайди. Агар катод шиша кўзгу орқали ёритилса, гальванометр занжирида ток пайдо бўлганини кўрсатади (унга фототок дейилади). Бунга сабаб, катод пластинкасига тушган ёруғликнинг ундан электронларни (улар фотоэлектронлар дейилади) уриб чиқариши ва бу электронларнинг электр майдон таъсирида анод томон батартиб ҳаракатининг вужудга келишидир. Потенциометр ёрдамида анод кучланишининг қиймати ва ишорасини ўзгартириш мумкин. Бу пайтда гальванометр ток кучининг мос ўзгаришларини кўрсатади.

Расмда анод кучланиши ва фототок орасидаги боғланиш кўрсатилган. Бу боғланиш фотоэффектнинг *вольт-ампер характеристикаси* дейилади. Ундан кўриниб турибдики, катод ва анод орасидаги кучланиш ортиши билан фототокнинг қиймати ҳам ортиб боради. Бунга сабаб, ёруғлик таъсирида катоддан уриб чиқарилаётган электронларнинг барчаси анодга етиб бораётганлигидир. Бу токка *тўйиниш токи* (I_T) дейилади. Шуни таъкидлаш лозимки, тўйиниш токининг қиймати катодга тушаётган ёруғлик оқимига боғлиқ бўлиб, ёруғлик оқими кўпайиши билан тўйиниш токининг қиймати ҳам ортади. Фотоэффектнинг вольт-ампер характеристикасидан кўриниб турибдики, анод кучланиши нолга тенг бўлганда ҳам занжирда ток бўлаверар экан. Бунга сабаб, катоддан уриб чиқарилаётган электронларнинг ташқи таъсир бўлмаганда ҳам анодга етиб олишлари учун етарли бўлган кинетик энергияга эга бўлишларидир. Бу электронларни тўхтатиш учун тормозловчи куч бўлиши керак. Бундай кучни вужудга келтириш учун олдингисига тескари йўналишда кучланиш қўйилади ва ҳосил бўлган электр майдон электронларнинг анодга томон ҳаракатига тўсқинлик қилади. Натижада тормозловчи кучланишнинг маълум қийматидан бошлаб барча

электронлар тўхтатиб қолинади ва занжирдаги ток нолга тенг бўлади. Кучланишнинг бу қиймати тутувчи кучланиш (U_T) дейилади. Тутувчи кучланишнинг қийматига қараб чиқаётган электронларнинг тезлигини аниқлаш мумкин. Айтайлик, m массали электронлар υ тезлик билан чиқаётган бўлсин. Унда электроннинг кинетик энергияси $\frac{m\vartheta^2}{2}$ га тенг бўлади. Иккинчи томондан, е зарядли электрон U_T потенциалли тутувчи майдондан ўтиши учун eU_T энергия сарфлаши керак. Агар электроннинг кинетик энергияси тутувчи майдон энергиясидан катта бўлса, яъни $\frac{m\vartheta^2}{2} \succ eU_T$, электрон анодга етиб боради. Акс ҳолда, яъни $\frac{m\vartheta^2}{2} \prec eU_T$ бўлганда, электрон анодга етолмайди

$$\frac{m\vartheta^2}{2} = eU_T .$$

Ушбу тенглик чегаравий ҳол ҳисобланади ва тутувчи потенциалнинг шу қийматидан бошлаб электрон тормозловчи майдонда тутиб қолинади. Демак, юқоридаги тенгликдан, электроннинг анодга етиб бора олишини таъминлай олмайдиган чегаравий тезлигини топиш мумкин

$$\vartheta = \sqrt{\frac{2eU_T}{m}} .$$

1.3. Ёруғликнинг квант табиати

Иссиқлик нурланиш қонунлари ва фотоэлектрик эффект ёруғликнинг квант табиати ҳақида жуда кўп инкор қилиб мумкин бўлмайдиган маълумотлар берди. Қуйида биз фотонларнинг мавжудлигини кўрсатадиган тажрибалардан баъзиларини келтирамиз. А.Ф. Иоффе ва Н.И. Добронравов тажрибасида рентген нурлари ёрдамида вужудга келтирилган фотоэффект кузатилган (1.6-расм). Қалин эбонит пластинкасида бўшлиқ вужудга келтирилган, ундаги газ маълум трубка ёрдамида сўриб олинган. Бу бўшлиқ рентген трубкаси ролини ўйнайди. Бўшлиқдаги алюминий симга нур тушиб ундан электронларни уриб чиқарган, электронлар бўшлиқдан ташқаридаги пластинкага тушган. А пластинка билан алюминий сим орасидаги кучланиш 12000 вольт бўлган. У шундай суст ёруғлик билан ёритилганки, ҳар секундда 1000 та фотоэлектрон уриб чиқарилган, холос. Бу электронлар катта электр майдонида тезлашиб, В пластинкага урилиши натижасида рентген нури чиқаради, демак 1000 элек-трон 1000 та рентген нури чиқаради (импулси). Тажрибада А ва В пластинкалар орасига висмут заррачалар киритилиб, у мувозанат ҳолатида ушлаб турилади. Битта рентген нури (импулси) тушиб битта электронни уриб чиқарган, натижада заррача енгиллашиб пастга туша бошлаган, уни ушлаш учун кучланиш оширилган ва ҳ.к. Ҳар 30 минутда битта электрон уриб чиқарилган. Демак, рентген

нури оқимидан баъзи бирларигина электронни уриб чиқара олган, холос. Тажриба натижасига асосан:

1. Рентген нури оқимидан электрон фақат қатъий энергияга эга бўлганинигина ютади, демак ҳар қандай энергияни ютмайди.

2. Рентген нури энергияси бир неча минг электронни уриб чиқаришга етарли бўлсада, фақат битта электрон томонидан ютилади. Ҳисоблаш кўрсатадики, рентген фотони энергиясини эркин электрон ёки атом билан суст боғланган электрон ютиб атом таъсиридан бутунлай чиқиб кетади

$$\varepsilon = h\nu = hc/\lambda = 6{,}62\cdot10^{-27}\cdot3\cdot10^{10}/\ 10^{-8}\cdot1{,}6\cdot10^{-12} \approx 1.25\cdot10^{4}\ \text{эв} = 2\cdot10^{-15}\ \text{ж}.$$

Чунки, ҳаммаси бўлиб 1-10 эВ ва бу энергия электронни атом таъсиридан чиқишга етарли. Шундай қилиб, рентген нури маълум нисбатан катта энергияга эга бўлган фотонлардан иборатдир. Эйнштейн назариясига асосан ҳар қандай ҳаракатдаги жисм энергияси унинг тезлигига боғлиқдир

$$E = mc^2. \qquad (1.11)$$

Квант назариясига асосан ёруғлик фотони энергияси унинг тебраниш частотасига боғлиқдир

$$E = h\nu\ .$$

Фотоннинг импулси

$$p = \frac{h\nu}{c}. \qquad (1.12)$$

Ёруғлик фотони тўлқин узунлиги унинг тезлигига боғлиқ. Шунингдек, бу формуладан шундай хулоса келиб чиқадики, ҳар қандай маълум тезликда ҳаракат қилаётган заррача, шу тезликка боғлиқ бўлган тўлқин узунликда тебранма ҳаракат қилади, ёруғлик дуализми вужудга келади. Ёруғликнинг дифракцияси, интерференцияси ва қутбланиши унинг тўлқин хоссаси билан тушунтирилса, фотоэлектрик эффект ҳодисаси эса унинг квант хоссаси билан тушунтирилади. Ёруғликнинг тўлқин ва зарра хоссаси тушунчасини бошқа ҳаракатдаги зарраларга ҳам тадбиқ этсак, унда уларнинг тезлигига боғлиқ равишда тебраниш частотасини топиш мумкин. Фақат макроскопик жисмлар тезлиги ёруғлик тезлигига нисбатан жуда кичик бўлганлиги учун тебраниш частотаси ҳам кичик, яъни тўлқин узунлиги жуда каттадир. Нютоннинг корпускуляр назарияси ҳамда Гюгенснинг тўлқин назарияси ўша даврлардаёқ ёруғлик дуализмини кўрсатган эди. «Чорак тўлқинли» слюда (икки оптик ўқли кристалл) ўзига тушган айлана бўйлаб қутбланган ёруғликни чизиқли қутбланган ёруғлик дастасига айлантиради. Шу пайт пластинка ёруғлик дастасидан маълум миқдорда ҳаракат миқдорини олиб қолади. Шу камайган ҳаракат миқдори моментини тажрибада аниқлаш учун «чорак тўлқинли пластинка»ни горизонтал ҳолатда оғирлик марказидан ўтувчи ўқ бўйлаб ипга шундай осиб қўйиладики, натижада у бемалол

тебрана олади. Корпускуляр назарияга асосан ҳар бир фотон $h/2\pi$ га тенг ҳаракат миқдорига эга бўлади. Ўнгга айланма қутбланган ёруғлик дастаси, фақат шундай фотонлардан ташкил топган бўладики, уларнинг ҳаракат миқдори моменти вектори ёруғлик тарқалиш йўналишига параллел бўлади, чап айлана бўйлаб қутбланган ёруғлик дастасининг ҳаракат миқдори моментининг вектори эса ёруғликнинг тарқалиш йўналишига тескари параллел бўлади. Вакуумда ёруғлик тўлқинлари қатъий кўндалангдир. Шунинг учун ҳам фотоннинг ҳаракат миқдори моменти вектори, фотоннинг тарқалиш йўналишига перпендикуляр ташкил этувчига эга бўлади.

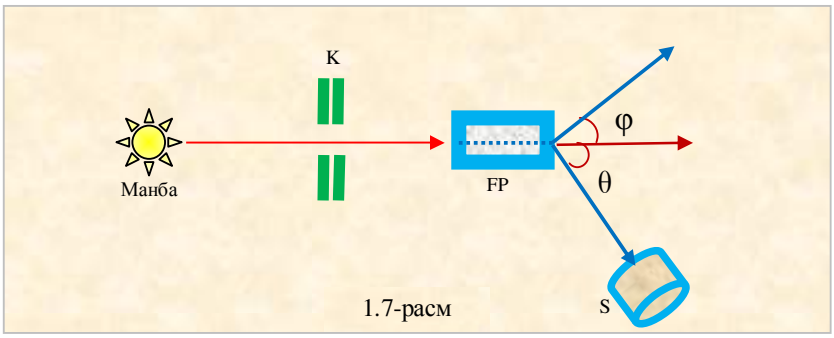
Чизиқли қутбланган ёруғлик дастасида, ёруғликнинг тарқалиш йўналишига параллел бўлган ҳаракат миқдори моменти векторига эга бўлган фотонлар сони шу йўналишга антипараллелларига тенг. Демак, ёруғликнинг тўлқин хоссасига асосан ҳар қандай чизиқли қутбланган ёруғлик дастаси чап ва ўнг айлана бўйича қутбланганлар бирикишидан иборат бўлади. Эллипс бўйича қутбланган нур дастаси эса, айлана ва чизиқли қутбланганлар оралиғида бўлади, бундай ҳолда фотонларнинг ҳаракат миқдори моменти вектори мумкин бўлган ҳолатларнинг устунроғи бўлади. Ёруғликнинг тўлқин хоссасида ёруғликнинг чизиқли қутбланишидан корпускуляр хоссасида эса айлана бўйлаб қутбланишидан келиб чиқади.

Айлана бўйлаб қутбланган ёруғлик жисмга берган ҳаракат миқдори моментини механикавий ўлчашлар натижаси кўрсатадики, биргина фотон учун қаралганда бир тартиб аниқлигида ўлчаш имконини беради. Юқорида келтирилган $h/2\pi=\hbar$ миқдор қимматли спектроскопик танлаш қоидасидан бошқача йўллар билан топилган. Ҳар бир энергетик сатҳлар схемасида ҳар бир сатҳ зиначаси S, P ва D ҳарфлар билан белгиланган ҳамда пастдан-ўнг томонида рақамли индекслар билан ҳам белгиланган. Бу сонлар электроннинг ички квант j – сонини кўрсатади. У электроннинг тўла квант сонини кўрсатади ва спин ҳамда орбитал квант сонларининг йиғиндисидан иборат. У $h/2\pi$ – элементар моментга нисбатан бутун миқдордир. Оптик электроннинг ҳар қандай икки энергетик сатҳлари орасидан ўтишларида нурланиш ёки ютилиш содир бўлади ва квант сони, қоида бўйича бир бирликка ўзгаради. Ҳаракат миқдорининг сақланиш қонунига асосан, ҳар бир ютилаётган ёки нурланаётган ёруғлик кванти, ўзи билан $h/2\pi=\hbar$ га тенг ҳаракат миқдори олиб келади ёки олиб кетади.

А.К. Комптон
(1892-1962)

Комптон тажрибаси 1922-23 йилларда А. Комптон рентген нурларининг бир қатор моддаларда сочилишини кузатди. Тажриба қурилмаси 1.7-расмда тасвирланган. 20 кэВ энергияга эга бўлган рентген нурлари рентген трубкасининг молибдендан ясалган антикатодида ҳосил қилинади. Ҳосил қилинган рентген нури коллиматор ва тирқишлар ёрдамида сочувчи модда графитга йўналтирилади. Коллиматор бир хил тўлқин узунликдаги (λ_0) нурларни ажратади, тирқиш эса кераксиз нурларни нишонга ўтказмайди. Графитдан сочилган нурлар спектрометрда қайд қилинади. Спектрографнинг асосий элементлари

тажриба вақтида тебранувчи К кристаллдан ва фотопластинка ФП дан иборат. Пластинкадаги қорайиш чизиқларининг ўрнига қараб силжиш бурчаги φ билан аниқланади. Сочилган нурларнинг тўлқин узунлиги λ Брегг Вулфнинг $d \cdot \sin\varphi = n\lambda$, n=1,2,3,... формуласи билан ҳисобланади, бунда d-кристалл доимийлиги, n-қайтган нурларнинг максимумларининг тартиби. Спектрометр тушувчи нурга нисбатан θ бурчак остида ўрнатилган. Уни ёки сочувчи моддани турли ҳолатда жойлаштириш билан сочилиш бурчаги ўзгартирилади.



1.7-расм

1.7-расмда графитда сочилган рентген нурларининг спектри φ бўйича тасвирланган (λ тўлқин узунлик φ га пропорционал ўзгаради). х ўқида φ бурчакнинг қийматлари жойлаштирилган. у ўқи эса сочилиш спектрининг интенсивлик қийматларига созланган. 1.8-расмда тасвирланган графиклардаги сочилиш спектрининг интенсивлиги иккита максимумдан иборат. Ордината ўқига яқин бўлган нур спектрининг максимуми силжимаган компонента дейилади, чунки барча силжиш бурчаклари учун у битта силжиш бурчаги, яъни битта тўлқин узунликка эга. Одатда бу компонентага бирламчи *нурланиш спектри* ҳам дейилади. Ўнгда жойлашган максимумдан иборат эгриликли сочилиш спектрининг *силжиган компонентаси* дейилади, чунки у сочилиш бурчакларига мос равишда катта тўлқин узунликлар ω тўғри келади.

1.7-расмдаги А график λ_0=0,71 Å тенг бўлган бирламчи нурланишни характерлайди. B, C, D графикларда эса $\theta=45^0$, 90^0 ва 135^0 дан сочилиш бурчаклари учун сочилиш спектрини интенсивлиги келтирилган. Расмдаги графикларни манзарасига қараб комптон тажрибасига қуйидаги натижалар бериш мумкин:

Сочилиш спектрида λ_0 тўлқин узунликка тенг бўлган бирламчи рентген нурлари ва λ-тўлқин узунликка тенг бўлган иккиламчи рентген нурлари мавжуд.

1. Бу тўлқин узунликлар бир-биридан фарқ қилади, лекин миқдорлари яқин.
2. λ-тўлқин узунлик доимо λ_0 тўлқин узунликдан катта, яъни $\lambda>\lambda_0$ аксинча $\omega<\omega_0$.

3. Сочилиш бурчаги θ ни ортиши билан силжимаган компонентанинг интенсивлиги камаяди, аксинча силжиган компонентанинг интенсивли эса ошади.
4. Силжиган нурнинг тўлқин узунлиги сочилиш бурчаги θ га боғлиқ, бироқ сочувчи модданинг табиатига боғлиқ эмас. Қизиғи шундаки литий элементида қилинган тажрибада сочилган нурланиш спектрида фақат силжимаган компонента кузатилади. Оғир элемент мисда эса силжиган компонентанинг интенсивлиги силжимаган компонентанинг интенсивлигидан унча катта эмас. Δλ ёки иккиламчи нурнинг тўлқин узунлиги модданинг табиатига боғлиқ эмас. Бу тасдиқ рентген нурлари нишоннинг атомларида эмас балки унинг электронларида сочилишидан дарак беради. Енгил элементлар (графит, литий ва ҳ.к) нинг атомларида ташқи электронларнинг ядро билан боғланиш энергияси (ионлашиш энергияси) 10 эВ атрофида. Бу энергия унга тушаётган рентген нурининг энергияси (~20 кэВ) дан 10^3 тартибида кичкина. Электроннинг тинчликдаги энергияси m_0c^2=0.511 мэВ, бу эса ўз навбатида рентген нурининг энергиясидан ниҳоятда катта, бу ҳолда электронларнинг нишондаги ҳаракати норелективистик ҳаракат бўлади ва сочилишни ҳам норелятивистик деб қараш мумкин. Сочилиш спектридаги силжимаган компонентанинг табиати нишон атомларидаги ички электронларга боғлиқ. Ички электронларнинг ядро билан боғланиш энергияси ниҳоятта катта бўлгани учун, тушаётган нур уни тебратмайди, лекин электронлар эркин эмас. Шунинг учун сочилиш жараёни бутун нишон бўйлаб рўй беради. Сочилмаган компонента пайдо бўлишига сабаб, сочилишнинг барча атомларда бўлиши, яъни ички электронлар спектрда силжиш компонентасини бермайди. Тажрибалар $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ фарқ тушувчи нурланишнинг тўлқин узунлиги λ, сочувчи жисмга боғлиқ бўлмай, фақат сочилиш бурчаги θ га боғлиқлигини кўрсатди

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\Lambda_c \sin^2\frac{\theta}{2},$$

бу ердаги Λ_c комптон доимийси деб аталади ва Λ_c=2,41·10^{-12} м га тенг. Нурланиш йўналишда (θ=0) λ ўзгармайди, бошқа йўналишларда

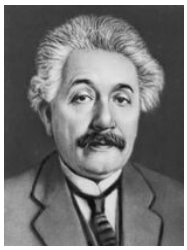
$$\Delta\lambda \approx \sin^2\frac{\theta}{2}.$$

Шундай қилиб, *Комптон эффекти деб* нурланиш (рентген, γ - нурланиш) модданинг эркин электронларида сочилиши натижасида тўқин узунлигининг ортишига айтилади. Тўлқин назария нуқтаи назаридан бу ҳодисани тушинтириб бўлмайди. Электрон ёруғлик тўлқини таъсирида шу тўлқин частотасига тенг частота билан тебраниши ва шу частотага тенг тўлқин нурлантириши керак. Квант нуқтаи назарига кўра рентген фотонларининг кристалл электронлари билан таъсирлашганда юқоридаги

ифода ҳосил бўлади, бунда $\Lambda_c=h/m_0c$. Ҳисоб-китоблар Λ_c учун юқоридаги сон қийматини беради.

1.4. Ёруғликнинг хусусиятлари

Осцилляторларни квантлаш ҳақидаги Планк ғояси абсолют қора жисмнинг нурланиш муаммосига узил-кесил нуқта қўйди ҳамда жисмларнинг нурланиш энергиясини ютиш ва чиқариш жараёни узлукли равишда юз беришини исботлади. Бу билан, классик физика тасаввуридаги ечиб бўлмайдиган муаммо ҳал қилинди, бу эса фан тарихида буюк бурилиш эди. Лекин Планк ўз ғоясини электромагнит нурланишга қўлламади. Нурланишнинг тарқалиш жараёнлари, ёруғликнинг табиати ҳақидаги муаммолар ҳали ҳам классик назария қонунияти асосида тушунтирилар эди. Узлукли катталиклар тушунчаси, яъни Планк ғояси электродинамика назариясига ҳали кириб келгани йўқ эди.



A.Eynshteyn(1879-1955)

1905 йилда Алберт Эйнштейн Планк осцилляторининг квантланиш ғоясини янада ривожлантириб уни бевосита электромагнит нурланиш жараёнларига тадбиқ этди. Планк формуласи энергия бўйича ўртача тақсимот беради. Нурланиш энергияси зичлик флуктуацияни чуқур таҳлил қилган Эйнштейн квант хусусият умуман ёруғликка тегишли хусусият деган хулосага келди. Эйнштейннинг ёруғлик квантлари ҳақидаги янги гипотезасига кўра монохроматик ёруғлик дастаси hν энергияга ва ёруғлик тезлигида ҳаракат қилувчи квантлардан корпускула–фотонлардан иборатдир. Эслатиб лозимки, ”фотон” атамаси 1926 йилда Д. Люис томонидан критилган ва шу сабабли 1927 йилда электронлар ва фотонлар мавзусига бағишланган Соловев конгрессида ёруғлик заррасига расмий равишда фотон номи берилади. Энштейн гипотезасига биноан Планк осциллятори ёруғлик квантини чиқариш ёки ютиш ҳисобига ўз энергиясини ўзгартиради. Фотон зарра бўлганлиги сабабли у E энергияга эга бўлиши билан бирга $p=\frac{E}{c}$ импулсга эга бўлиши зарурлигини Эйнштейн англади. $\vec{k}$ - тўлқин вектори тушунчасини киритайлик. Тўлқин векторнинг компонентлари $k_x=\frac{2\pi}{\lambda}\cos\alpha$, $k_y=\frac{2\pi}{\lambda}\cos\beta$, $k_z=\frac{2\pi}{\lambda}\cos\gamma$ га тенг, бунда λ-тўлқин узунлик, $\cos\alpha$, $\cos\beta$, $\cos\gamma$ ёруғлик тўлқинига нормал бўлган йўналтирувчи косинуслар. Бу ҳолда ёруғлик импулсини вектор кўринишда ёзиш мумкин: $\vec{p}=h\vec{k}$. Шундай қилиб, Эйнштейннинг фотон назариясига кўра иккита формула ҳосил қиламиз

$$Å=h\nu=h\omega, \qquad (1.13)$$

$$\vec{p}=h\vec{k}. \qquad (1.14)$$

(1.13) ва (1.14) формулалар ёруғлик квант назариясининг асосий тенгламалари дейилади. Бу тенгламалар ёруғлик кванти энергияси ва импулсини ясси монохроматик тўлқиннинг частотаси ва тўлқин узунлиги билан боғлайди. Шундай қилиб ёруғлик табиатига аниқлик киритилди. Электромагнит майдоннинг квантлари - бу фотонлардир. Фотоннинг тинчликдаги массаси нолга тенг. Фотоннинг тинчликдаги массаси деган тушунча маънога эга эмас, яъни фотон фақат ҳаракатда мавжуддир. Ёруғликнинг квант назариясига биноан ёруғлик (электромагнит нурланиш) ни $h\omega$ энергияга ва $h\vec{k}$ импулсга эга бўлган зарралардан (фотонлардан) ташкил топган газ сифатида тасаввур қилиш мумкин. Лекин ёруғлик квант назариясининг яна бир вазифаси, ёруғликнинг моддалар билан ўзаро таъсири жараёнини энергия ва импулс сақлаш қонунлари орқали ифодалашдир. Ёруғлик ва микросистемалар (электрон, атом, молекула ва ҳ.к) орасида бўладиган энергия ва импулс алмашинуви бир ёруғлик квантининг пайдо бўлиши иккинчисининг йўқолиши оқибатида содир бўлади. Бу гипотеза ёруғлик билан ўзаро таъсирда бўлган системалар учун энергия ва импулснинг сақланиш қонунлари формуласини ёзишга имконият беради. Натижада классик физикада жисмларнинг тўқнашиш жараёнлари учун ёзиладиган сақланиш қонунларига ўхшаган қонунларни фотон ва микросистемалар учун ҳам ёзиш мумкинлигини кўрсатди ва бу ўз навбатида микромасштабда физикавий катталикларни миқдорини ҳисоблаш имкониятини беради.

Фотон билан электроннинг тўқнашув жараёни учун энергия ва импулснинг сақланиш қонунини кўриб ўтайлик. Фотон ва электрондан ташкил топган системанинг тўқнашгунча бўлган энергияси ва импулсини E ва $\vec{p}$, тўқнашиш содир бўлгандан кейин системанинг энергияси ва импулсини E_1 ва $\vec{p}_1$ дейлик. $h\omega$ ва $h\vec{k}$ ёруғлик квантининг тўқнашгунча энергияси ва импулси, тўқнашиш рўй бергандан кейин ёруғлик квантининг энергияси ва импулси $h\omega_1$ ва $h\vec{k}_1$ бўлсин. Фотон ва электроннинг ўзаро таъсири натижасида частотаси ω ва $\vec{k}$ йўналишдаги электромагнит тўлқиннинг энергияси ва импулси мос равишда $h\omega$ ва $h\vec{k}$ га (ёруғлик кванти йўқолди) камайди, ω_1 частотага ва $\vec{k}_1$ йўналишдаги бошқа электромагнит тўлқинининг энергияси ва импулси $h\omega_1$ ва $h\vec{k}_1$ га ортди (ёруғлик кванти пайдо бўлди). Бу ҳолни математика нуқтаи назаридан қуйидагича ёзиш мумкин:

$$h\omega+E=h\omega_1+E_1, \qquad (1.15)$$

$$h\vec{k}+\vec{p}=h\vec{k}_1+\vec{p}_1\ , \qquad (1.16)$$

(1.15) ва (1.16) формулалар фотонлар билан микрозарраларнинг ўзаро таъсирини характерлайдиган сақланиш қонунларидир. Квант назарияда ушбу энергия ва импулснинг сақланиш қонунлари ёруғлик ва моддалар

орасидаги бўладиган жараёнларни миқдорий ҳисоблашга имкон берадиган универсал тенгламалардир. (1.15) ва (1.16) кўринишдаги энергия ва импулснинг сақланиш қонунларини классик физика тасаввурида доирасида талқин қилиб бўлмайди. Бу тенгламалар математик кўриниши жиҳатидан классик физикадаги энергия ва импулснинг сақланиш қонунларга ўхшаган бўлса ҳам, уларнинг физик маъноси ёруғликнинг тўлқин тасаввурига ҳам, корпускуляр тасаввурига ҳам зиддир.

Механикада қўлланиладиган энергиянинг сақланиш қонунида кинетик энергия К нинг қиймати ν тезлик (ω эмас) билан аниқланади. Механик тўқнашишда, тўқнашгандан кейин зарраларнинг тезлиги ўзгаради, аммо бизнинг ҳолимизда тезлик ўзгармайди. Тўлқин назариясига биноан тўлқин майдонининг энергияси К тўлқиннинг ω частотаси билан эмас, балки шу майдонни ҳосил қилувчи тўлқин амплитудаси билан аниқланади. Лекин иккинчи томондан частота билан амплитудани бир-бирига боғлайдиган формулани биз билмаймиз. Кўриб турибсизки, юзаки мулоҳазалар ҳам (1.15) ва (1.16) қонуниятларнинг классик қонуниятларга зид эканлигини кўрсатади. (1.15) ва (1.16) сақланиш қонунлари ёруғликнинг икки ёқлама хусусияти - тўлқин ва корпускуляр хоссаларни инобатга олган тенгламалар бўлиб, унинг тасаввури классик физиканинг тасаввурига нисбатан бойроқдир. Ҳозирги замон электромагнит майдон квант назарияси ёруғликнинг шу икки томонини ҳисобга олади.

1.5. Фотонлар. Электрон-позитрон жуфтлиги ва аннигляцияси

Фотон релятивистик зарра бўлиб, у доимо ёруғлик тезлигида ҳаракат қилади. Шунинг учун фотоннинг массаси, импулси ва энергияси махсус нисбийлик назариясининг формулалари ёрдамида ҳисобланади. Махсус нисбийлик назариясига кўра исталган зарранинг массаси

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{\nu^2}{c^2}}} \qquad (1.17)$$

формула билан топилади. Агар фотон учун $\nu = c$ деб қабул қилсак, у ҳолда (1.17) формуланинг махражи нолга айланади. Бундан шундай хулоса келиб чиқадики, фотоннинг тинчликдаги массаси нолга тенг бўлиши ёки унинг энергияси $E=m\,c^2$ чексизга тенг бўлиши керак. Лекин, фотон доим ҳаракатда, у ҳеч қачон тинч ҳолатда бўлмайди. $m_0=0$ да фотоннинг импулси

$$E^2 = p^2\,c^2 + m_0^2\,c^4 \qquad (1.18)$$

формулага кўра

$$p=\frac{E}{c} \qquad (1.19)$$

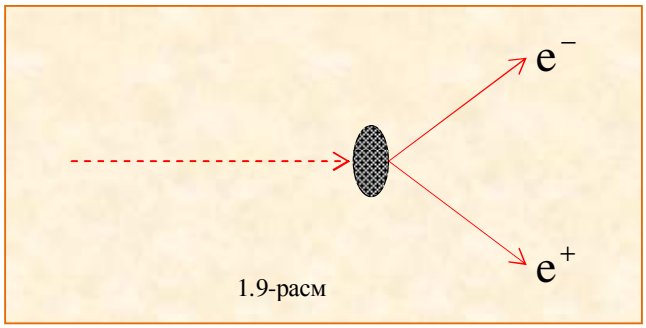
билан аниқланади. $E=h\nu$ бўлгани учун фотоннинг импулси тўлқин узунлик билан

$$p=\frac{h\nu}{c}=\frac{h}{\lambda} \qquad (1.20)$$

муносабат орқали боғланган. Фотон энергияга эга ва бу энергия маълум шароитларда массага айланиши мумкин. Бу ҳодиса позитрон ва электрон туғилиши жараёнида (1.9-расм) рўй беради. Позитрон 1932 йилда С. Андерсон томонидан кашф қилинган бўлиб, кейин у радиоактив ядроларнинг емирилиш пайтида юзага келиши тасдиқланган. Катта энергиядаги γ– нурлар моддадан ўтганда ҳам позитрон пайдо бўлади. Ядронинг электр майдонида γ–квантлар электрон-позитрон жуфтлигини ҳосил қилади. Аксинча позитрон электрон билан тўқнашганда, иккала зарра ҳам йўқолиб (аннигляцияланиб) уларнинг ўрнига тенг кучли энергияга эга бўлган фотонлар пайдо бўлади. Моддаларни позитрон билан нурлантирганда ҳам аннигляция ҳодисаси содир бўлади. Аннигляция жараёни учун

$$e^{+}+e^{-}=n\gamma \qquad (1.21)$$

реакцияни ёзиш мумкин; бунда γ - фотон, n - фотонлар сони. Аннигляция пайтида иккитадан ортиқ ($n \geq 2$) фотон ҳосил бўлади, чунки битта фотон учун энергия ва импулснинг сақланиш қонуни бажарилмайди. Электрон ва позитрон тўқнашиш моментида тенг турган бўлсалар, у ҳолда системанинг дастлабки ҳолатдаги импулси нолга тенг. Импулснинг сақланиш қонунига кўра системанинг тўқнашгандан кейинги ҳолатининг импулси ҳам нолга тенг бўлиши керак; ягона фотон учун импулснинг



1.9-расм

сақланиш қонуни бажарилмайди. Шунга кўра иккала фотон ҳам бир хил миқдордаги импулсга эга бўлиши, йўналиши эса қарама-қарши бўлиши керак. Бундан бу фотонларнинг энергиялари ҳам, частоталари ҳам тенглиги келиб чиқади. Фотоннинг частотасини ω десак, энергиянинг сақланиш қонунига кўра

$$2\,h\omega = 2\,mc^2 \quad \text{ёки} \quad \lambda = \frac{2\,\pi c}{\omega} = \frac{\lambda}{mc}. \qquad (1.22)$$

Фотоннинг тўлқин узунлиги $\frac{h}{mc} = 0{,}0243 A° = 0{,}0243 \times 10^{-10}$м электрон-позитрон аннигляцияси жараёнида пайдо бўлган фотонларнинг тўлқин энергияси 0,0243 $\overset{0}{A}$ бўлиб, у комптон тўлқин узунлигига тенг. Фотоннинг бундай тўлқин узунлигига тўғри келган фотон энергияси mc^2=0,511 МэВ. Фотоннинг ушбу энергияси экспериментда тасдиқланган.

Назорат саволлари

1. Иссиқлик нурланишининг ҳосил бўлишини тушунтиринг.
3. Абсолют қора жисм деб қандай жисмга айтилади?
4. Абсолют қора жисмнинг амалдаги модели қандай?
5. Иссиқлик нурланишининг спектри қандай кўринишда ва ундаги эгри чизиқлар нимани ифодалайди?
6. Кирхгоф қонуни қайси катталиклар орасидаги боғланишни ифодалайди?
8. Вин қонуни қайси катталиклар орасидаги боғланишни ифодалайди?
9. Планк формуласининг моҳияти қандай?
10. Релей-Жинс формуласи иссиқлик нурланиши спектрининг қайси соҳасида тажриба натижалари билан мос келади?
11. Вин формуласи нурланиш спектрининг қайси соҳасини тушунтира олади?
13. Планк формуласи қандай ифодаланади, унинг моҳиятини тушунтиринг.
14. Фотоэффект ҳодисаси қандай ҳодиса ва у ким томонидан очилган?
15. Столетов қонунларини тушунтиринг.
16. Фотоэффектнинг қизил чегарасининг формуласи қандай ва унинг моҳияти нимадан иборат?
17. Эйнштейн формуласини ёзинг ва уни изоҳлаб беринг.
18. Фотоэффект ҳодисаси қандай электронларда ҳосил бўлади?
19. Фотоэффект ҳодисасидан амалда қандай фойдаланилади?

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

Абсолют қора жисм нурланиши

1-масала: Қора жисм нурланиш спектрида энергиянинг максимал қийматига тўғри келган тўлқин узунлиги λ_0=0,58 мкм. Жисм сиртининг R_e энергетик ёритувчанлигини аниқланг.

Берилган: λ_0=0.58мкм

R_e~?

Ечиш: Стефан-Болцман қонунига кўра абсолют қора жисмнинг энергетик ёритувчанлиги *T* термодинамик температуранинг тўртинчи даражасига пропорционал ва у қуйидагича ифодаланади

$$R_e = \sigma T^4, \qquad (1)$$

бунда σ - Стефан-Болцман доимийси, T – термодинамик температура. Виннинг силжиш қонуни ёрдамида температура T ни ҳисоблаш мумкин

$$\lambda_0 = \frac{\beta}{T}, \qquad (2)$$

бунда β – Вин доимийси. (2) ва (1) формуладан фойдаланиб

$$R_e = \sigma\left(\frac{\beta}{\lambda_0}\right)^4,$$

формулани ҳосил қиламиз. Ҳисоблаймиз:

$$R_e = 5,67\cdot 10^{-8}\left(\frac{2,90\cdot 10^{-3}}{5,8\cdot 10^{-7}}\right)^4 \text{ Вт/м}^2 = 3,54\cdot 10^7 \text{ Вт/м}^2 = 35\cdot 4 \text{ мВт/м}^2.$$

2-масала: Нур чиқариши сабабли Ер ўз сиртининг ҳар бир квадрат метр сиртидан 1с да ўртача 91 Ж энергия йўқотади. Ерни абсолют қора жисм деб қабул қилиб, сиртнинг ўртача температураси T ни ва нурланаётган энергия максимумига тўғри келган тўлқин узунлик $\lambda_м$ ни аниқланг.

Берилган: t=1c

W=91Ж

T~? λ_m~?

Ечиш: Стефан-Болцман қонуни асосан

$$E_T = \sigma T^4,$$

бунда $E_т$=91 Ж/(m^2.с) – Ернинг нур чиқариш қобилияти, σ - Стефан-Болцман доимийси. У вақтда

$$T=\sqrt[4]{\frac{E_T}{\sigma}}=\sqrt[4]{\frac{91}{5,67\times10^{-8}}}=200K=-73^0C.$$

Вин қонунига мувофиқ

$$\lambda_m T=\beta,$$

бунда β – Вин доимийси. Шунинг учун

$$\lambda_т=\frac{b}{T}=\frac{2,898\times10^{-3}}{200}=1,45\times10^{-5}м=14,5\,м.$$

Шундай қилиб, Ер нур чиқариш қобилиятининг максимуми спектрнинг узун тўлқин (инфрақизил) қисмига тўғри келади.

3-Масала. λ_1=0.9мкм дан λ_2=0,3мкм гача ўзгаришда қора жисм қувватининг ўзгаришини топинг.

Берилган: $\lambda_1=0.9мкм$; $\lambda_2=0,3мкм$; $\frac{N_1}{N_2}=?$.

Ечиш: абсолют қора жисм нурланишининг максимумига тўғри келадиган тўлқин узунлиги Вин формуласи орқали аниқланади

$$\lambda_{max}=\frac{b_1}{T}. \qquad (1)$$

Бу ерда T – нурланишнинг термодинамик температураси, $b_1=2.89\cdot10^{-3}м\cdot К$ - Вин доимийси. Зарурий тўлқин узунликларига мос келувчи температураларнинг қийматлари (1) ифодага асосан

$$T_1=\frac{b_1}{\lambda_1};\quad T_2=\frac{b_1}{\lambda_2}. \qquad (1)$$

У ҳолда нурланиш қуввати

$$N=R\cdot S,$$

Бу ерда R – жисмнинг энергетик ёритилганлиги; S – нурланувчи жисм сирти. Стефан-Больцман қонунига кўра

$$R=Q\cdot T^4,$$

(бу ерда $\sigma=5.67\cdot10^{-8}Вт/(м^2к^4)$ - Стефан-Больцман доимийси), λ_1 ва λ_2 учун

$$N_1=\sigma T_1^4 S, \quad N_2=\sigma T_2^4 S. \qquad (3)$$

Охирги формулаларни ечиб, топамиз

$$\frac{N_2}{N_1}=\frac{\sigma\cdot S\left(\frac{b_1}{\lambda_2}\right)^4}{\sigma\cdot S\left(\frac{b_1}{\lambda_1}\right)}=\frac{\lambda_1^4}{\lambda_2^4}$$

$\frac{N_2}{N_1}=n$ нисбат жисм қувватининг қанчалик ошганлигини ифодалайди

$$n=\left(0.9\text{мкм}/0{,}30\text{мкм}\right)^4=3^4=81.$$

Жавоб: 81 марта.

Фотоэффект ҳодисаси

1-масала: Цезий тўлқин узунлиги λ=400 нм бўлган бинафша нур билан ёритилганда унинг сиртидан учиб чиққан электронларнинг кинетик энергияси $W_к$ ва тезлиги ν топилсин. Цезийдан электроннинг чиқиш иши $A=1{,}7\cdot10^{-19}$ Ж га, ёруғликнинг тарқалиш тезлиги $c=3\cdot10^8$ м/с га ва Планк доимийси $h=6{,}625\cdot10^{-34}$ Ж.с. га ва электроннинг массаси $м=9{,}1\cdot10^{-31}$ кг га тенг. Эслатиб ўтамиз, соддалик учун бундан кейинги амалларда ħ~h деб оламиз.

Берилган: $\lambda=400\,нм=4*10^{-7}$ м, $A=1{,}7*10^{-19}$ Ж

$c=3\times10^8$ м/с, $h=6{,}625\times10^{-34}$ Ж,с.

$W_к$ ~? J~?

Ечиш: Фотоэффект учун Эйнштейн формуласини ёзамиз:

$$h\nu=\frac{m\vartheta^2}{2}+A \quad \text{ёки} \quad \frac{m\vartheta^2}{2}=h\nu-A,$$

бунда $\nu=\frac{c}{\lambda}$ тенг, у ҳолда

$$W_к=\frac{hc}{\lambda}-A=\frac{6{,}625\times10^{-34}\ 3\times10^8}{4\times10^{-7}}-1{,}7\times10^{-19}=5\times10^{-9}\ Ж.$$

Фотоэлектроннинг W_K кинетик энергиясини билган ҳолда унинг ν тезлигини ҳисоблаймиз:

$$v=\sqrt{\frac{2W_к}{m}}=\sqrt{\frac{2,5\times10^{-9}}{9,1\times10^{-31}}}=\sqrt{1,1\times10^{12}}=1,05\times10^{6}\ м/с.$$

2 Масала. Никел учун фотоэффектнинг қизил чегараси 0,257мкм. Агар фототок 1,5 В. Потенциаллар фарқи қийматидан тўхтатилса, никелга тушаётган ёруғлик тўлқин узунлиги топилсин

Берилган: $\lambda_{кр}$=0,257мкм ; U=1.5В : λ=? .

Ечиш: Ташқи фотоэффект учун Эйнштейн тенгламаси

$$\frac{hc}{\lambda}=A+E_к. \qquad (1)$$

Металдан электронларнинг чиқиш иши

$$A=\frac{hc}{\lambda_{кр}}. \qquad (2)$$

Фотоэлектронларнинг максимал кинетик энергияси

$$E_к=\frac{m\upsilon^2}{2}=eU. \qquad (3)$$

e- электрон заряди; U- потенциаллар фарқи. Ушбу катталиклардан фойдалани (1) формулани қайта ёзиб оламиз

$$\frac{hc}{\lambda}=\frac{hc}{\lambda_{кр}}+eU. \qquad (4)$$

Охирги тенгламадан кўринадики, ёруғликнинг тўлқин узунлиги

$$\lambda=\left(\frac{1}{\lambda_{кр}}+\frac{eU}{hc}\right)^{-1}$$

$$\lambda=\left(\frac{1,6\cdot10^{-19}Кл\cdot1,5В}{6,62\cdot10Дж\cdot с\cdot3\cdot10^{8}м/с}+\frac{1}{0,257\cdot10^{-6}}\right)^{-1}=1,96\cdot10^{-7}м.$$

Жавоб: λ=0,196мкм .

Комптон эффекти

1-Масала: Антикатод тўлқин узунлиги 0.024 Å бўлган фотонлар билан бомбардимон қилинганда сочилган фотонлар 60^0 бурчак остида кузатилган.

а) сочилган фотон узунлиги;

б) тепки электронининг сочилиш бурчаги ҳисоблансин.

Ечиш:

а) λ_0=0.024 Å , ϕ =60^0 бўлганидан

$$\lambda = \lambda_0 + 2\lambda_c \sin^2\frac{\phi}{2} = \lambda_0 + \frac{\lambda_c}{2} = \left(0.024 + \frac{0.024}{2}\right) = 0.036\,\dot{A}\,.$$

б) Тепки электроннинг сочилиш бурчаги бўлган γ ни топиш учун импулслар сақланиш қонунинг x, y ларга проекцияларини ёзамиз:

$$P_0 - P_c\cos\phi = P_e\cos\gamma. \qquad (1)$$

$$P_c\sin\phi = P_e\sin\gamma. \qquad (2)$$

Бу ерда $P_0 = \frac{hc}{\lambda_0} = \frac{19.86\cdot10^{-26}}{0.024\cdot10^{-10}}\cdot кг\cdot\frac{м}{с} = 8.27\cdot10^{-14}\ кг\cdot\frac{м}{с}$ тушаётган фотон импулси,

$$P_c = \frac{hc}{\lambda} = \frac{19.86\cdot10^{-26}}{0.036\cdot10^{-10}}кг\cdot\frac{м}{с} = 5.51\cdot10^{-14}кг\cdot\frac{м}{с}\,.$$

Сочилаётган фотон импулси, P_c - тепки электрон импулси, ϕ-фотоннинг эркин электрондан сочилиш бурчаги. (2) тенгликни (1) тенгликка чап томонни чап томонга, ўнг томонни ўнг томонга мос равишда бўламиз:

$$tg\gamma = \frac{P_s\sin\varphi}{P_0 - P_s\cos\varphi} = \frac{5,51\cdot10^{-14}\cdot\frac{\sqrt{3}}{2}}{(8,27 - 5,51\cdot\frac{1}{2})\cdot10^{-14}} = \frac{5,51\cdot0,865}{5,52} = 0,8634$$

$$\gamma = arctg0,\ \ 8634 = 40^0 50'\,.$$

2 Масала. Бирор сиртга тушаётган ёруғлик босими 9 мкПа ни ташкил этади. Сирт яқинидаги фотонлар концентрациясини аниқланг.

Берилган: $\lambda = 0,55\cdot10^{-6}$м ; $P = 9\cdot10^{-6}$Па ; ρ=1: n=?.

Ечиш: акс эттириш ρ коэффициентига эга бўлган ёруғлик босими

$$P = \frac{I}{c}(1+\rho) = \omega(1+\rho)\,. \qquad (1)$$

Бу ерда I – нурланиш интенсивлиги, $\omega = \frac{I}{c}$ - нурланишнинг ҳажмий зичлиги.

Битта фотон энергияси

$$\varepsilon=\frac{hc}{\lambda}.$$

Нурланиш энергиясининг ҳажмий зичлиги

$$\omega=\frac{nhc}{\lambda}, \qquad (2)$$

n - фотонлар концентрацияси. (2) формулани (1) га қўйиб

$$P=\frac{nhc}{\lambda}(1+\rho). \qquad (3)$$

Бу ердан

$$n=\frac{\lambda P}{hc(1+\rho)};$$

$$n=\frac{0.55\cdot10^{-6}\text{м}\cdot9\cdot10^{-6}\text{Па}}{6,62\cdot10^{-34}\text{Дж}\cdot\text{с}\cdot3\cdot10^{8}\text{м/с}\cdot(1+1)}=2,49\cdot10^{13}\text{м}^{-3}.$$

Жавоб: $n=2,49\cdot10^{13}\text{м}^{-3}$

Бор атоми назарияси

1-Масала: Бор назариясидан фойдаланиб, водород атомининг биринчи ва иккинчи орбиталари учун электр майдони кучланганлигининг ва Кулон тортишув кучининг қийматлари ҳисоблансин.

Ечиш: Бор назариясига кўра n-нчи орбита радиуси

$$r_n=\frac{h^2}{me^2}n^2=r_1n^2$$

формула билан аниқланади, бу ерда $r_1=\frac{h^2}{me^2}=0,52\,A^0=0,52\cdot10^{-10}\,m$ - Борнинг биринчи радиуси. У ҳолда $n=2$ (иккинчи орбита) учун

$$r_2=r_1\,n^2=0,52\cdot10^{-10}\cdot4\text{м}=2,08\cdot10^{-10}\text{м}.$$

Кулон тортишув кучи водород атоми ядроси ва электрон ўртасидаги куч ҳисобланади ва унинг абсолют қиймати

$$\left|F_n\right|=\frac{e^2}{r^2{}_n}=\frac{F_1}{n^4}$$

формула билан аниқланади, бу ерда

$$F_1 = \frac{e^2}{r_1^2} = \frac{\left(1,6\cdot 10^{-19}\,\text{К}\right)^2}{\left(0,52\cdot 10^{-10}\,\text{м}\right)^2} = \frac{2,56\cdot 10^{-38}}{0,26\cdot 10^{-22}}\,\text{Н} = 82,3\cdot 10^{-9}\,\text{Н}$$

$$F_2 = \frac{F_1}{4^2} = \frac{82,3\cdot 10^{-9}\,\text{N}}{16} = 5,14\cdot 10^{-9}\,\text{N}$$

Заряд бирлигидаги бундай кучлар электр майдон кучланганлиги берганлиги учун

$$E_1 = \frac{F_1}{e} = \frac{82,3\cdot 10^{-9}\,\text{Н}}{1,6\cdot 10^{-19}\,\text{К}} = 51,4\cdot 10^{10}\,\text{В/м},$$

$$E_2 = \frac{F_2}{e} = \frac{5,14\cdot 10^{-9}\,\text{Н}}{1,6\cdot 10^{-19}\,\text{К}} = 3,21\cdot 10^{10}\,\text{В/м}.$$

2-масала: Бор назариясидан фойдаланиб, водород атомидаги электроннинг n – Бор орбитасининг радиуси r_n ва бу орбитасидаги тезлиги ϑ_n топилсин. Масала n=3 ҳоли учун ечилсин. Планк доимийси $h=6,625\cdot 10^{-34}$ Ж·с ва электр доимийси $\varepsilon_0=8,85\cdot 10^{-12}$ Ф/м га, электроннинг массаси $m_e=9,1\cdot 10^{-31}$ кг га ва заряди $e=1,6\cdot 10^{-19}$ Кл га тенг.

Берилган:

$m_e = 9.1\cdot 10^{-31}$ кг, $E = 1.6\cdot 10^{-19}$ Кл, $\varepsilon_0 = 8.85\cdot 10^{-12}\,\frac{\text{Кл}^2}{\text{Н}\cdot\text{м}^2}$,

$h = 6.625\cdot 10^{-34}$ Ж·с, $n = 3$.

$r_3 = ?$, $\upsilon_3 = ?$.

Ечиш: Водород атоми протони ва унинг атрофида айланаётган электроннинг ўзаро таъсир Кулон кучи: $F_x = \frac{1}{4\pi\,\varepsilon_0}\frac{e^2}{r_n^{\,2}}$, марказга интилма куч $F_{m.i} = \frac{m_e\vartheta_n^{\,2}}{r_n}$ дан иборат, яъни

$$\frac{1}{4\pi\,\varepsilon_0}\times\frac{e^2}{r_n^{\,2}} = \frac{m_e\vartheta_n}{r_n}\ . \qquad (1)$$

Борнинг иккинчи постулотига асосан

$$m_e\vartheta_n r_n = n\frac{h}{2\pi}: \qquad (2)$$

бунда n=1,2,3,… орбитанинг тартиб рақамидир. Бундан ϑ_n – орбитадаги электроннинг тезлиги:

$$\vartheta_n = n\frac{h}{2\pi m_e r_n} \qquad (3)$$

га тенг бўлади. Буни ўрнига (1-3) дан фойдаланиб, орбитанинг радиуси r_n ни аниқлаймиз:

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2} = \frac{m_e n^2 h^2}{r_n 4\pi^2 m_e^2 r_n^2} \quad \text{ёки} \quad \frac{e^2}{\varepsilon_0} = \frac{n^2 h^2}{\pi m_e r_n}.$$

Бундан изланаётган орбитанинг радиуси r_n қуйидагига тенг бўлади:

$$r_n = n^2 \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m_e e^2}.$$

Буни юқоридаги ифодага қўйиб, орбитадаги электроннинг тезлиги $\vartheta_н$ ни топамиз:

$$\vartheta_n = \frac{nh}{2\pi m_e} \cdot \frac{1}{r_n} = \frac{nh}{2\pi m_e} - \frac{\pi m_e e^2}{n^2 h^2} = \frac{1}{n} \frac{e^2}{2h}.$$

Масала шартига кўра n=3 бўлган ҳолни ҳисоблаб чиқамиз:

$$r_3 = n^2 \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m_e e^2} = 3^2 \frac{6,625^2 \cdot 10^{-68} 8,85 \cdot 10^{-12}}{3,14 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1.6^2 \cdot 10^{-38}} = 4,78 \cdot 10^{-10} \text{m}$$

$$\vartheta_3 = \frac{1}{n} \frac{e^2}{2hE_0} = \frac{1}{3} \frac{1,6^2 \cdot 10^{-38}}{2 \cdot 6,625 \cdot 10^{-34} \cdot 8,85 \cdot 10^{-12}} = 7,3 \cdot 10 \text{ m/c}.$$

II-БОБ
ЁРУҒЛИКНИНГ ТЎЛҚИН ХОССАЛАРИ

2.1. Де-Бройл тўлқинлари

Бизга маълумки, кўпгина оптика ҳодисаларини тўлқин назарияси асосида тушунтириш мумкин. Интерференция ва дифракция ҳодисалари айнан ушбу назария воситасида тушунтирилади. Бироқ, иссиқлик нурланиши, фотоэффект ва Комптон эффекти каби ҳодисаларнинг таҳлилидан кўрдикки, ёруғлик корпускуляр табиатига ҳам эга. Хулоса қилиш мумкинки, ёруғлик икки хил - бир бирига табиатан зид бўлган хусусиятларга эга экан, яъни ёруғликнинг тўлқин ва зарра хусусиятлари бир-бирига қарама-қарши бўлган тушунчалардир. Ёруғликнинг бу икки табиатини бир вақтда кузатиш мумкин эмас. Ёруғликнинг айнан шу икки хил хусусияти *тўлқин-зарра дуализми* деб аталади. Бундан келиб чиқадики ёруғликнинг тўлиқ назарияси тўлқин дуализмига асосланган бўлиши лозим. Мах Планк ёруғлик зарралари (фотонлар)нинг энергиясини ёруғликнинг тўлқин хусусиятини ифода этувчи катталик - частота билан қуйидагича боғланишини исботлаб берди

$$E=h\nu . \qquad (2.1)$$

Ушбу энергетик формулани махсус нисбийлик назариясидаги

$$E = m_0c^2 + mc^2 \qquad (2.2)$$

муносабатдан ҳам ҳосил қилиш мумкин. Фотоннинг тинчликдаги энергияси

$$E_0 = m_0c^2 = 0 \qquad (2.3)$$

бўлгани учун тўла энергия фақат фотонларнинг кинетик энергияси

$$E = mc^2 \qquad (2.4)$$

га тенг бўлади. Бироқ классик физикада эса энергияни частота билан боғловчи бирорта ҳам формула йўқ. Бу ҳодиса классик физика олдида турган муҳим муаммолардан бири эди. Бу муаммони ҳал этиш учун Луи де Бройл ҳар бир фотон тўлқин жараёни билан узвий боғланган бўлиши керак деган гипотезани илгари суради. Унинг бу гипотезаси фотоннинг тўлқин табиатига мос бўлган интерференция ҳодисасини тушунтиришга имкон берди. Иккинчи томондан ёруғлик тўлқинларининг импулсга эга эканлигини А. Эйнштейн назарий жиҳатдан асослаб берди, кейинчалик А. Комптон бу ғояни тажрибада исботлади. Шундай қилиб (2.1) ва (2.3) муносабатлардан

$$h\nu = pc \qquad (2.5)$$

ифодани ҳосил қилиш мумкин, буерда $p = mc$ - фотоннинг импулси бўлиб

$$p=\frac{h\nu}{c} \qquad (2.6)$$

формула орқали ифодаланади. (2.6) формула фотоннинг корпускуляр табиатини характерловчи импулсни фотоннинг тўлқин табиатини ифодаловчи катталик-частотаси (ёки тўлқин узунлик) билан боғлайди. Демак (2.6) формулада фотоннинг бир-бирига зид бўлган икки ёқлама хусусияти бўлган корпускула-тўлқин табиати мужассамлангандир.

2.2. Микрозарралар дуализми. Де-Бройл ғояси

Ёруғликнинг тўлқин-зарра дуализмини чуқур таҳлил этган Луи де Бройл 1924 йил ўзининг «Квантларга доир изланишлар» деб номланган докторлик диссертация ҳимоясида қуйидаги ғояни илгари сурди: «агар ёруғлик нури кўп ҳолларда ўзининг корпускулярлик хусусиятини намоён этар экан, нима учун электрон ҳам тўлқин хусусиятига эга бўлмаслиги керак». Бу фикрни кейин янада ривожлантириб, ўзининг «Физикада инқилоб» номли асарида фотон каби, тинчликдаги массаси нолга тенг бўлмаган бошқа микрозарралар ҳам тўлқин табиатига эга бўлиши керак деган фикрни илгари сурди.

Луи де Бройл (1892-1986)

Шундай қилиб, де Бройл микрозарралар дуализмининг назариясини ишлаб чиқди ва унга мос келувчи миқдорий муносабатларни топди. Де Бройл ғоясига биноан (2.6) формула ихтиёрий зарранинг ҳаракати учун ўринлидир. Электрон аниқ импулс

$$p=m\nu=\frac{h}{\lambda} \qquad (2.7)$$

га эга бўлиши мумкин, бунда m-электроннинг релятивистик массаси, ϑ - электроннинг тезлиги (2.7) муносабатдан кўриниб турибдики электронга ν - частотага эга бўлган тўлқинга характеристика бердик. (2.7) тенгликдан электроннинг тўлқин узунлиги

$$\lambda=\frac{h}{m\nu}=\frac{h}{p} \qquad (2.8)$$

га тенг. Шундай қилиб электрон тўлқин хоссага эга ва унинг тўлқин узунлиги (2.8) муносабат орқали ифодаланади. Квант механикасида ν - чизиқли частота ўрнига одатда бурчак частота $\omega=2\pi\nu$ қўлланилади. Шу

муносабатга мос ҳолда h -катталикнинг ўрнига Дирак томонидан киритилган доимийлик

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ж} \cdot \text{с} \qquad (2.9)$$

киритилди. (2.9) тенгликни эътиборга олсак, у ҳолда (2.8) формулани

$$\lambda = \frac{2\pi h}{p} \qquad (2.10)$$

кўринишда ёзиш мумкин бўлади. (2.9) ва (2.10) ифодалардаги λ-катталик *де Бройл тўлқин узунлиги* деб номланади. Ҳаракатдаги зарралар учун (2.10) муносабатдан бир қатор фойдали тенгламаларни келтириб чиқариш мумкин. Махсус нисбийлик назариясига кўра релятивистик импулснинг қиймати

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{E^2 - E_0^2} \qquad (2.11)$$

формула билан аниқланади. (2.11) ифодани (2.8) га қўйсак

$$\lambda = \frac{h\,c}{\sqrt{E^2 - E_0}} = \frac{h\,c}{\sqrt{m^2 c^4 - m_0^2 c^4}} = \frac{h\sqrt{1 - \frac{\nu^2}{c^2}}}{m_0 \nu}$$

формулани ёзиш мумкин. Хусусуй ҳол $\nu \ll c$ учун $\lambda = \frac{h}{m\nu}$ ни ҳосил қиламиз. Худди шунингдек уни зарранинг кинетик энергияси формуласи $K = E - mc^2$ билан боғласак, у ҳолда қуйидаги ифодани ҳосил қиламиз

$$\lambda = \frac{2\pi h}{\sqrt{2\,m\,K}}. \qquad (2.12)$$

Норелятивистик электронлар учун $\nu = \sqrt{2\frac{e}{m}U_{\text{тез}}}$ бўлгани учун тўлқин узунлиги учун

$$\lambda = \frac{h}{m\nu} = \frac{h}{\sqrt{2meU_{\text{òåç}}}}. \qquad (2.14)$$

Ушбу муносабат жуда кўп тажрибаларда тасдиқланган. Бу ерда $U_{\text{тез}}$-электронларнинг тезлатувчи потенциалидир. Агар электронлар дастаси

тўлқин хусусиятига эга бўлса, у кристаллдан рентген нурлари каби қайтиши керак. Брегг-Вулф формуласи

$$2\ d\sin j = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, ... \tag{2.15}$$

га асосан тезлатувчи потенциал ушбу формула орқали ҳисобланади

$$\sqrt{U_{тез}} = \frac{n\,h}{\sqrt{2\,m_e \cdot 2\,d\sin\varphi}} = n\,D,\ \ n = 1,2,3,... \tag{2.16}$$

Шундай қилиб, зарраларнинг тўлқин хоссаси ҳақидаги де-Бройл гипотезаси квант механикасининг негизини ташкил қилади. Заррачаларнинг корпускуляр-тўлқин дуализми универсал характерга эга бўлиб, у қарама-қаршиликлар бир бутунлиги ҳақидаги қонунни тўлиқ қониқтиради.

Де-Бройл формулалари

Де-Бройл гипотезасига таяниб ёзилган юқорида келтирилган формулалар

$$E = h\nu = h\omega, \tag{2.17}$$

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda} = h\vec{k} \tag{2.18}$$

де-Бройл формулалари деб номланади. Бу ердан де Бройл тўлқин узунлиги

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi h}{p} \tag{2.19}$$

кўринишга эга бўлар экан. Оптика бўлимидан бизга маълумки, тўлқинларнинг энг соддаси - бу югурувчи ясси монохроматик тўлқинлардир. Частотаси ω га тенг бўлган ясси монохроматик тўлқин

$$\psi(r,t) \sim \exp[-i(\omega\ t - \vec{k}\vec{r})] \tag{2.20}$$

кўринишга эга бўлади. (2.20) ифодага (2.17) ва (2.18) ларни қўйсак, ҳаракатдаги зарралар учун

$$\psi(r,t) = A\exp[-\frac{i}{h}(E \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{r})] \tag{2.21}$$

тенгликни ҳосил қиламиз. (2.21) функция де-Бройл тўлқинини характерловчи функциядир. Оптикада $\psi(r,t)$- функция исталган t вақт моментида фазонинг исталган нуқтасида тебранаётган ψ – катталикнинг оний қийматини ифода этади. Бу эрда $\vec{r}$ –радиус вектор, $\vec{k}$ –тўлқин вектор,

ω –бурчак частота, A –тебраниш амплитудаси, $\vec{p}$ –импулс, E–энергия.

Тўлқин вектор $k=\frac{2\pi}{\lambda}$ бўлиб, у 2π узунлик бирлигига қанча тўлқин узунликлар сони тўғри келишини характерлайди, йўналиши эса тўлқиннинг тарқалиш йўналишини белгилаб беради. Агар тўлқин z йўналишда ҳаракат қилаётган бўлса, у ҳолда қуйидаги муносабат ўринли бўлади

$$\vec{k}\cdot\vec{r}=k_z\cdot z=k\cdot z \qquad (2.22)$$

Тўлқин вектор, тўлқин узунлик билан бевосита боғланган, яъни тўлқин жараённинг фазовий даврийлиги билан боғланган. Циклик (бурчак) частота қуйидаги формула

$$\omega=\frac{2\pi}{T}=2\pi\nu \qquad (2.23)$$

орқали аниқланади ва у тўлқин тарқалиш жараёнининг вақт бўйича даврийлигини характерлайди. Ушбу катталиклар де-Бройл катталиклари билан қандай боғланганлигини кўриб ўтамиз. Тўлқин векторнинг йўналиши ҳаракатда бўлган зарра билан боғланган тўлқиннинг йўналишини характерлагани учун зарра йўналиши сифатида зарра импулсининг йўналишини оламиз. Натижада $\vec{k}$ ва $\vec{p}$ ни боғловчи $\vec{p}=h\vec{k}$ ёки $\vec{k}=\frac{\vec{p}}{h}$ муносабатни ҳосил қиламиз. Де-Бройл тўлқинининг асосий характеристикаларидан бири бўлган тўлқин вектори зарра импулси билан боғланган. Тўлқин вектори $\vec{k}$ ва импулси $\vec{p}$ ни боғловчи катталик вазифасини h –Планк дойимийси бажаради. Бу ердан шундай хулоса келиб чиқадики, (2.18) муносабат билан ифодаланувчи де-Бройл тўлқини квант табиатга эга экан.

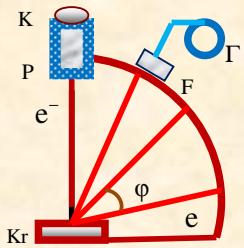
Квант физикасида тезлик эмас, балки импулс асосий роль ўйнайди. Де-Бройл тўлқинида частота билан энергия ҳам h-дойимийлик орқали боғланган, яъни, $\omega=\frac{E}{h}$. Бу формула фотоннинг тўла энергиясининг частотага боғланишини характерлайди. Бу формулани ҳозирги замон физикасида универсал муносабат деб юритилади. Чунки де-Бройл ғоясидан сўнг бу муносабат фақат фотонлар учунгина хос бўлмай, балки ҳаракатдаги барча микрозарралар учун ҳам ўринлидир. Де-Бройл тўлқини амплитудасининг физик маъносини дастлабки пайтда де-Бройлнинг ўзи ҳам, квант механикаси соҳасидаги олимлар ҳам унчалик яхши тушунмаганлар. Унинг асл маъноси квант механиканинг ривожланиши билан ойдинлаша борди ва бу ҳодисани англаш борасидаги илк қадамни Макс Борн қўйди. Тўлқин функциясининг статистик изоҳидан сўнг, де Бройл тўлқини бу эҳтимолият тўлқини эканлиги маълум бўлди. Де-Бройл тўлқини

амплитудасининг квадрати берилган вақтда ва фазонинг берилган нуқтасида заррани қайд қилиш эҳтимолини бериши мумкин.

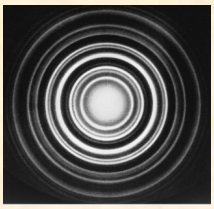
2.3. Тўлқинлар дифракцияси

К. Девиссон ва Л. Жермер тажрибалари

Ўтган асрнинг бошида америкалик физиклар К. Девиссон ва Л. Жермер иккиламчи электронлар чиқиш ҳодисасини тажрибада кузатишди. Аниқроғи, тажрибада никел кристалига тушаётган электронлар дастаси таъсири натижасида, иккиламчи электронларнинг чиқиш ҳодисаси ўрганилди. Маълум вақт давомида никел моддасининг оксидланиш жараёни бошланиб, уни йўқотиш учун никел пластинкаси янада юқори даражада қиздирилади. Аммо кейинчалик ушбу тажриба бутунлай бошқача натижа берди, яъни пластинка узоқ қиздирилиши туфайли майда кристаллар ўрнини йирик монокристаллар эгаллади. Иккиламчи электронларнинг чиқиши олдинги тажрибадагилар каби исталган бурчак орқали содир бўлди, бироқ айрим бурчакларда сиқилган электронларнинг сони кескин кўпайиб кетди. K=54 эВ энергияга эга бўлган электронларнинг $\phi = 50^0$ бурчакдаги сочилган иккиламчи электронларнинг интенсивлигининг тақсимоти графиги 2.1-расмда кўрсатилган.



2.1. расм



2.2.-расм

Девиссон ва Жермер электронларнинг тўлқин узунлигини аниқлаш учун рентген спектрометридан фойдаландилар. Рентген найчаси электрон тўпи билан алмаштирилди. К-катод никел кучланиши ёрдамида қиздирилди. Катоддан учиб чиққан электронлар дастаси ўз навбатида U_t потенциал ёрдамида тезлаштирилди. Тезлаштириш кучланишининг миқдори Р-потенциометр ёрдамида бажарилади. Потенциометр ёрдамида тўпдан чиққан электронларнинг тезлиги бошқарилади. Электронлар кристалл сиртига тушгандан сўнг, маълум бурчаклар бўйлаб оғадилар ёки қайтадилар. Қайтган нурлар электрон детектори (Фарадей цилиндри) билан қайд қилинади ва I ток миқдори галванометр ёрдамида ўлчанади. Электрон тўпи, кристалл ва Фарадей цилиндри вакуумга жойлаштирилади. Тажриба қуйидагича олиб борилди. Кристалл моддасига тушаётган электрон нурларининг тезлиги тезлантирувчи кучланиш ёрдамида ўзгартирилди ва унга мос равишда Фарадей цилиндридаги ток галванометр билан ўлчанди.

Бу ҳолда кристалл сиртига тушаётган электронларнинг бурчаги ўзгармай қолади. Фарадей цилиндрида олинган натижа 2.2-расмда тасвирланган. 2.2-расмдан кўринадики эгрилик бир-биридан баравар узоқликда ётувчи максимумларга эга. Қурилманинг электр схемаси диоднинг вольт-ампер характеристикасига ўхшаш монотон бўлиши керак эди. Бироқ ундай эмаслиги 2.2-расмдан кўриниб турибди. Шу сабабли Девиссон-Жермер тажрибасининг натижаларини тушунтириш учун де-Бройлга ўз ғоясини жалб қилиш керак бўлди. Тажрибаларнинг бирида электронлар дастасининг энергияси $K = 54$ эВ бўлганда сочилган (қайтган) электронларнинг интенсивлигининг максимал қиймати $\phi = 50^0$ да рўй берди. Электронларнинг импулси $p = \sqrt{2m_0 K}$ ни билган ҳолда эркин электроннинг де-Бройл тўлқин узунлигини қуйидаги формуладан топамиз

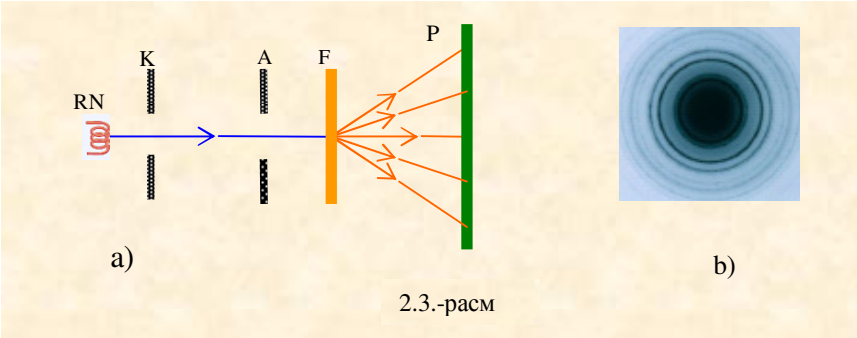
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6{,}62 \cdot 10^{-34}\,\text{ж} \cdot \text{с}}{\sqrt{2 \cdot 9{,}11 \cdot 10^{-34}\,\text{кг} \cdot 54 \cdot 1{,}6 \cdot 10^{-19}\,\text{ж}}} \cdot 10^{10}\,\frac{\overset{0}{\text{A}}}{\text{м}} = 1{,}67\,\overset{0}{\text{A}}.$$

Бу электрон билан боғланган тўлқиннинг де-Бройл тўлқин узунлигидир. Иккинчи томондан кристалл текислигида тўлқин дифракцияси ҳодисасига асосланган ҳолда Брегг методи ёрдамида даври $d = 0{,}91\,\overset{0}{\text{A}}$ га тенг бўлган никел кристалида содир бўлган электронлар дифракциясини биринчи тартибдаги максимуми (h=1) қуйидагича аниқланади

$$\lambda = 2\,d\sin\theta = 2 \times 0{,}91 \times \sin 65^0 = 1{,}65\,\overset{0}{\text{A}}.$$

Кўриниб турибдики, ҳар иккала натижа бир-бирига мос тушади. Бу эса ўз навбатида электронлар зарра хоссаси билан бир қаторда тўлқин хусусиятини ҳам намоён этар экан.

Томсон ва Тартаковский тажрибалари. Электронлар дифракциясини кузатиш учун олимлар Д. Томсон ва П.С. Тартаковскийлар Дебай-Шерер усулидан фойдаландилар. Бунда электронлар дастаси поликристал металл пластинкадан ўтказилганда сочилган электронлар фотопластинкада дифракцион халқаларни ҳосил қилиши керак. Томсон ва Тартаковский тажрибаларида ҳақиқатдан ҳам дифракцион халқалар тизими кузатилди. 1927-йилда Д.П. Томсон тажрибани ўтказишда энергияси (17,5-56,5) кэВ бўлган тез электронлардан фойдаланди. Томсон тажрибаси схемаси 2.3.-расмда келтирилган.



2.3.-расм

Энергияси 104 эВ бўлган электронларнинг параллел дастаси қалинлиги 10^{-5} см бўлган олтин фолгага йўналтирилди. Бунда Томсон экранда бир қатор дифракцион халқалар ҳосил бўлишини кузатади. Электронларнинг сочилиш бурчаклари q_1, q_2, q_3 ёруғлик нурлари дифракциясининг тенгламаси nl =d sinq (n=1,2,3,…), (3.31) орқали аниқланадиган бурчакларга тўғри келади. q – тушаётган электронлар дастаси билан дифракцияланган электронлар дастаси йўналишлари орасидаги бурчак. Томсон тажрибасида электронларнинг кузатилган дифракцияси, уларнинг тўлқин хоссасига эга эканлигини тасдиқлади. П.С.Тартаковский энергияси 1,7 кэВ гача бўлган секин электронлар билан тажриба ўтказди. Тартаковский тажрибасининг схемаси 2.3а-расмда тасвирланган. Электронлар дастаси К юпқа поликристал метал варағига F йўналтирилади. Дифракцияланган электронлар дасталари Р фотопластинкада ўз изларини қолдиради. Кейинчалик де-Бройл гипотезаси тўғрилиги кўп олимларнинг тажрибаларида ҳам исботланди. Масалан, рус олими П.С. Тартаковский катта тезликдаги электронларни юпқа (d=1 мкм) металл қатламдан ўтказиб, бу электронлар ҳосил қилган дифракция манзарасининг расмини фотоқоғозга туширди (2.3б-расм). 1948 йилда В. Фабрикант, Б. Биберман ва Н. Сушкинлар ниҳоятда заиф интенсивликдаги электронлар оқими билан тажриба ўтказиб, тўлқин хусусиятлар электронлар оқими учунгина эмас, балки айрим электронлар учун ҳам тегишлидир деган хулосани исбот қилишди. Хулоса қилиб айтганда, де-Бройл, гипотезаси бир қатор тажрибаларда тасдиқланди ва у тўлқин механикасининг яратилишида муҳим рол ўйнади. Қуйидаги зарраларнинг тўлқин табиатини тасдиқлаган тажрибаларнинг рўйхатини келтирамиз:

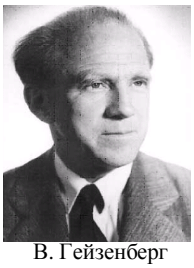
1. Немис физиги П. Рупп 1929 йилда содда дифракцион панжара ҳодисаси асосида жуда кичик сирпаниш бурчаклари учун электроннинг тўлқин узунлигини ўлчади.
2. 1931 йилда Ж. Жонсон водород молекуласининг кристалда сочилиш дифракциясини тажрибада кузатди.
3. 1938 йилда Эстермен, Фриш ва Штерн гелий атомлари дастасининг фторли литий кристалида сочилиш ҳодисасини тажрибада аниқлаб унинг тўлқин хусусиятига эга эканлигини тасдиқладилар.

Шундай қилиб, ушбу келтирилган тажриба натижалари зарраларнинг ҳақиқатан ҳам тўлқин табиатига эга эканлигини тўла тасдиқлади, лекин шу билан бирга бир қатор янги муаммолар ва жумбоқлар пайдо бўлди. Масалан,

фотонлар ва электронлар ўзларининг тўлқин ва зарра табиатини намоён қилар эканлар, у вақтда демак зарралар билан тўлқинлар орасида ҳеч қандай фарқ йўқдир. Бироқ фақатгина тўлқин назариясига асосланиб, фотоэффект, Комптон сочилиши каби тажриба натижаларини тушунтириб бўлмайди. Шу билан бирга зарраларни ёруғлик тезлигидаги тезлик билан ҳаракат қила олмаслиги ҳам муаммолигича қолади. Тўлқин дуализми муаммосини тушунтириш мақсадида Нилс Бор ўзининг тўлдириш принципини таклиф қилди. Битта тажрибанинг ўзида электроннинг бир вақтда ҳам тўлқин хоссаси, ҳам корпускуляр хоссаси ҳеч қачон намоён бўлмаслиги факт бўлиб, бу тўлдириш принципининг мағзини ташкил этади. Ҳар бир ҳолатда, у нима, нурланиш бўладими ёки электронлар дастаси бўладими барибир, ҳодисани тўла тавсифлаш учун тўлқин моделни ҳам корпускуляр моделни ҳам қўллаш зарур бўлади.

2.4. Гейзенбергнинг ноаниқлик муносабати.

Электроннинг тўлқин хоссасининг кашф этилиши унга оддий заррача сифатида эмас, балки тўлқин хоссасига эга бўлган мураккаб бир борлиқ сифатида қараш кераклигини кўрсатади. Унинг ўлчами, аниқ траекторияси ҳақида гапириш қийин. Электрон фотондан фарқли зарядга эга бўлиб, унинг фазодаги вазияти ва тақсимланиши бошқа заррачалар билан, масалан, атомда ядро билан ўзаро таъсирлашувига боғлиқ бўлади.


В. Гейзенберг
(1901-1976)

Классик механикада моддий нуқта бир вақтнинг ўзида аниқ координатага, импулс ва траекторияга эга бўлади. Микрозарра тўлқин хоссага эга бўлгани учун у классик механикадаги заррачадан фарқ қилади. Асосий фарқ шундаки, микрозаррачанинг траекторияси бўлмайди. Бундан ташқари уни аниқ координатаси ва импулси ҳақида ҳам гапириш мумкин эмас. Масалан, микрозаррачанинг импулсини тўлқин узунлиги орқали ифодалашимиз мумкин. Аммо микрозаррача тўлқин хоссага эга бўлгани учун у фазода анча катта оралиқни эгаллайди ва координатасининг ноаниқлиги катта бўлади. Демак, заррачанинг импулси аниқ бўлса, унинг координатаси ноаниқ қолади. Аксинча микрозарранинг координатасини аниқ ҳисобласак, унинг импулсининг ноаниқлиги Δp ортади, яъни $\Delta x \to 0$, бўлганда $\Delta p \to \infty$ бўлади.

1927 йилда немис олими Вернер Гейзенберг микрозаррачаларнинг тўлқин хоссасини ҳисобга олиб, уларнинг импулс ва координаталарини бир хил аниқлик билан ҳисоблаб бўлмайди деган хулосага келди ва ўзининг ноаниқликлар муносабатини яратди. Бирор ҳодисани тушунтиришда у ёки бу назариянинг қўлланиш меъёрини аниқлаш билан бевосита боғлиқ бўлган масалалардан бири физик катталикларни ўлчаш масаласидир. Физик учун бирор ҳодисани ўрганиш бу ҳодисани оддий кузатишдан иборат бўлиб қолмасдан, берилган ҳодисани характерловчи айрим катталикларни ўлчашдан ҳам иборат ҳисобланади. Текширилаётган объектнинг хусусиятлари тўғрисида олинадиган маълумотларнинг ҳаққонийлиги

ўлчанадиган ана шу физик катталикларнинг аниқлигига боғлиқдир. Гейзенберг фикрича квант механикасида зарра импулси ва координатасини бир вақтнинг ўзида аниқ ўлчаб бўлмайди. Буни исбот қилиш мақсадида Гейзенберг бир неча фикрий тажрибаларни таклиф этган. Электронлар параллел дастаси кенглиги Δx бўлган тирқиш орқали ўтиб экранга тушса, дифракция манзараси ҳосил бўлади. Корпускуляр нуқтаи назардан (классик физика нуқтаи назаридан) тирқишнинг кенглиги зарра координатасининг аниқмаслик ўлчами вазифасини ўтайди, чунки зарра тирқиш орқали ўтганида тирқишнинг қайси жойидан ўтганлиги бизга номаълум ҳисобланади. Экранда дифракция манзарасининг ҳосил бўлиши ҳар бир электрон тирқиш орқали ўтаётганида ўзининг бошланғич йўналишига тик бўлган йўналишда қўшимча Δp импулс олиниши кўрсатади. Шунинг учун электрон юқорига ёки пастга четланган бўлади. Олинган қўшимча импулснинг ўртача қиймати $\Delta p = p \sin\alpha$ га тенг бўлади. Бу ерда α электронларнинг дастлабки йўналишдан четланишининг ўртача бурчаги. Иккинчи томондан тўлқин механикасидан маълумки, тирқиш четларида «нурлар» йўлининг фарқи $d=\Delta x \sin\alpha$ дифракция ҳосил бўлиши учун $d \approx \lambda$ шартни қаноатлантириши керак. Бундан $\Delta x=\frac{\lambda}{\sin\alpha}$ эканлигини топамиз. У ҳолда $\Delta x \cdot \Delta p$ кўпайтмани ҳосил қилсак, у

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx p \cdot \lambda$$

тартибда бўлади ҳамда Де-Бройл формуласи $p=\frac{h}{\lambda}$ ни эътиборга олсак,

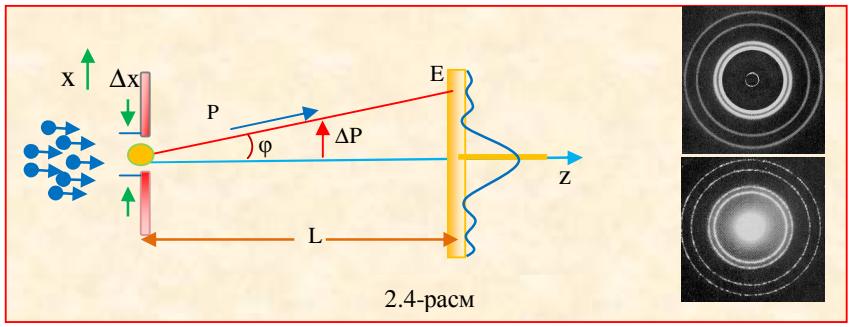
$$\Delta x \cdot \Delta p \sim h$$

кўринишидаги Гейзенбергнинг машҳур *ноаниқлик муносабатини* ҳосил қиламиз. Бу муносабат электроннинг координатаси ва импулсини бир вақтнинг ўзида фақатгина Δp ва Δx аниқлигида ўлчаш мумкинлигини кўрсатади. Ўлчашнинг бу аниқликлари бир-бири билан Гейзенбергнинг муносабати орқали чамбарчас боғланишда бўлади. Микрозарранинг импулс ва координатасини аниқ ўлчаб бўлмаслиги ўлчов асбоблари аниқлик даражасига боғлиқ бўлмасдан микрозарранинг тўлқин хоссасидан келиб чиқади. Агар микрозарранинг фазодаги координаталарини x, y, z ва импулсининг ўқлардаги проексиялари p_x, p_y, p_z десак, Гейзенберг ноаниқлик муносабатларига кўра координата ноаниқлигини импулс ноаниқлигига кўпайтмаси Планк доимийсидан кичик бўлмайди, яъни

$$\left.\begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_X &\geq h \\ \Delta y \cdot \Delta p_Y &\geq h \\ \Delta z \cdot \Delta p_Z &\geq h \end{aligned}\right\} . \qquad (2.24)$$

Демак, координата ноаниқлиги импулс ноаниқлигига кўпайтмаси доимо h дан катта бўлади. Импулс ва координаталар жуда катта аниқликда ўлчанганда уларнинг кўпайтмаси h тенг бўлиши мумкин. (2.24) муносабатлардан кўринадики, координаталарни жуда катта аниқликда ўлчаб, унинг ноаниқлиги x нинг жуда кичик бўлишига ($\Delta x=0$) эришиш мумкин. Аммо бу вақтда микрозарра импулсининг ноаниқлиги p ортиб кетади ($p=\infty$). Доимо Δx ни Δp га кўпайтмаси Планк доимийси h дан катта бўлади. Бундан зарранинг импулси ва координатасини бир хил аниқликда ўлчаб бўлмаслиги келиб чиқади. Бундан ташқари микрозарранинг энергияси ва вақтини ўлчашдаги ноаниқликлар учун қуйидаги муносабат ҳам мавжуд

$$\Delta W \cdot \Delta t \geq h. \qquad (2.25)$$



2.4-расм

Бу ифодадан яшаш вақти Δt бўлган зарранинг энергияси аниқ бир W қийматга эга бўлмаслиги келиб чиқади. Зарранинг яшаш вақти камайиши билан унинг энергиясининг ноаниқлиги ортади. Шундай қилиб, ноаниқликлар муносабатлари инсон иродасига боғлиқ бўлмаган ўзаро боғланишларни ифодалайди. Шунинг учун ҳам бу муносабаталарни табиатнинг объектив қонуни деб қарамоқ лозим.

Шундай қилиб, қараб чиқилган «тажриба» юқорида қўйилган саволга маълум даражада жавоб беради, чунончи, квант механикасида ҳар қандай катталиклар исталган даражада бир вақтнинг ўзида аниқ ўлчана олинмас экан: бир катталикнинг бирор аниқликда ўлчаниши бошқа катталикнинг ўлчаниши аниқлигига албатта таъсир этар экан. Бирор катталикни қанчалик аниқ ўлчасак, иккинчи бир катталикни шунчалик аниқ ўлчай олмас эканмиз.

*Тўлқинлар дифракцияси***.** Қуйидаги содда тажрибани кўриб чиқамиз. Эркин заррача x координатасининг қийматини уларнинг ҳаракат йўналишига перпендикуляр жойлашган Δx тирқишга нисбатан аниқлайлик (2.4-расм). Заррачанинг тўсиқдан ўтишидан олдинги импулси аниқ қийматга эга $p_x = 0$, аммо заррачанинг x координатаси ноаниқ $\Delta x = \infty$. Заррачанинг тўсиқдан ўтиш вақтида координатасининг ноаниқлиги тўсиқнинг кенглиги билан тенг, аммо импулснинг аниқлиги йўқолади

$$\frac{\Delta p_x}{p} = \sin\phi .$$

Дифракция туфайли, зарраларнинг 2φ бурчаги бўйлаб ҳаракатланиши эҳтимоли мавжуд, бу ерда φ биринчи диффракция минималига мос бурчак. Δx тўсиқ кенглигига мос келувчи биринчи диффракция минимумлик шарти қуйидагича аниқланади

$$\Delta x \sin\phi = \lambda .$$

2.5. Тўлқин функциянинг физик талқини

Де-Бройл гипотезасининг тажрибада тасдиқланиши, микрозарраларнинг импулс ва координаталарини аниқлашда ноаниқлик муносабатларининг бажарилиши ва бошқа қатор тажрибалар квант механикасининг яратилишига олиб келди. Квант механикасининг яратилиш даври 1900 йилда М. Планк томонидан ёруғлик кванти ҳақидаги гипотезани эълон қилинишидан бошлаб 1920 йилларнинг охиригача бўлган даврни ўз ичига олади. Квант механикасини яратишга австриялик физик Э. Шредингер, немис физиги В. Гейзенберг ва англиялик физик П. Дираклар катта ҳиссаларини қўшган. Бу механикада фақат микро-объектлардагина аниқ кузатиладиган квант тасаввурлар ўз аксини топганлиги учун уни *квант механикаси* деб аталади. Ёруғликнинг квант назариясига кўра дифракция манзарасининг интенсивлиги, ўша жойга тушаётган квантлар сони билан аниқланади. Шунингдек, дифракция манзарасининг маълум нуқтасига мос квантлар сони ёруғлик тўлқини амплитудасининг квадрати билан аниқланади. Битта квант учун тўлқин амплитудасининг квадрати уни фазонинг у ёки бу нуқтасига тушиш эҳтимоллигини билдиради. Микрозарраларда кузатиладиган дифракция манзараси ҳам маълум йўналишлар бўйича зарралар оқимини бир хилда тақсимланганлигига боғлиқ. Маълум йўналишга кўп сондаги зарралар тўғри келса, бошқа йўналишга кам сонли зарралар тўғри келади.

Тўлқин назариясига кўра дифракция максимумига де-Бройл тўлқинининг энг катта интенсивлиги мос келади. Фазонинг қайси нуқтасига кўп сонли зарралар тушаётган бўлса, ўша жойда де-Бройл тўлқинининг интенсивлиги ҳам катта бўлади. Бошқача айтганда микрозарралардан ҳосил бўладиган дифракция манзараси зарраларнинг фазонинг ўша нуқтасига тушиш эҳтимоллигига боғлиқ. Маълумки, исталган тўлқинли жараён тўлқин тенгламасининг ечими бўлган тўлқин функцияси билан ифодаланади. Энергияси E, импулси p бўлган эркин зарра учун де Бройл тўлқин функцияси

$$\psi(x,t)=C_p e^{\frac{i}{h}(p\,x-E\,t)} \qquad (2.26)$$

кўринишда берилади. Бу ерда $E=\hbar\omega$. Бу ифода тўлқин функциянинг физик

маъносини ойдинлаштиришга қўйилган биринчи қадам бўлиб, бу функция модулининг квадрати $|\psi|^2$ мода зичлиги билан боғлангандир. Бунга кўра $|\psi|^2$ қанча катта бўлса, мода зичлиги шунча катта бўлиши керак. Аммо тўлқин функциясининг бундай талқини қуйидаги сабабларга кўра қаноатланарли бўлмайди. Биринчидан, (2.26) формула орқали ифодаланувчи тўлқинлар гуруҳи амплитудаси вақтнинг функцияси бўлиб, бу амплитуданинг ҳаракат тезлиги гуруҳ тезлигини ифодалайди ва бу тезлик

$$x\text{-}\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} t=const$$

тенгликдан аниқланади ҳамда

$$\frac{dx}{dt}=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}=\upsilon_{\text{ãóð}}$$

кўринишда ёзилади. Бу тезлик билан тўлқинлар пакети маркази ҳаракат тезлигини ҳам боғлаш мумкин

$$\upsilon_{\text{ãóð}}=\frac{d\omega}{dk}=\frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)}=\frac{dE}{dp}=\frac{d\sqrt{p^2c^2+m_0{}^2c^4}}{dp}=\frac{pc^2}{E}=\upsilon\,.$$

Демак, тўлқин пакетини ҳосил қилувчи ясси тўлқинлар ташкил этувчиларнинг вакуумда дисперсиянинг мавжуд бўлиши тўлқин пакетининг вақт бўйича ёйилиб кетишини кўрсатади. Ҳақиқатдан, фаза тезлиги тўлқин фазасининг доимийлик

$$Et-px=h(\omega t-kx)=const$$

шартидан

$$\upsilon_{\text{ô àç}}=\frac{x}{t}=\frac{\omega}{k}$$

тариқасида аниқланади. Бу эса тўлқин пакетининг ташкил этувчилари ҳар хил дисперсия ҳосил қилишини кўрсатади ва тўлқин пакети шаклининг вақт бўйича ўзгаришига олиб келади. Иккинчидан, тўлқин функциясини мода зичлиги билан боғлашнинг нотўғри эканлигини микрозарралар дифракцияси кўрсатиб беради. Маълумки, кристалл сиртига тушаётган тўлқинлар (микрозарралар оқими) кристаллнинг ҳар хил атом текисликларидан турли бурчак остида қайтиб, бир-бирини интерференцияловчи когерент тўлқинларга ажралади ва экранда дифракцион ҳалқалар ҳосил қилишади. Тажриба натижасини бу ҳолда тўлқин функциясининг «мода зичлиги» талқини нуқтаи назаридан таҳлил қиладиган бўлсак, тушаётган зарранинг

М.Борн
(1882-1970)

бирор бурчак остида бир қисми, иккинчи бурчак остида бошқа қисми тарқалаяпти деб тушуниш керак бўлади. Ваҳоланки, берилган тажрибада зарра турғун бўлиб қолади. Демак, бу натижа тўлқин функциясининг юқорида айтилган талқинидан воз кечишга мажбур этади. Квант назариясининг ўзига хос хусусияти шундан иборатки, микрозарраларнинг хоссаларини ўрганишда эҳтимолликлар қонуниятларидан фойдаланилади. Де-Бройл тўлқинини эҳтимолликлар тўлқинидан иборат деб қараш, яъни зарранинг фазода топилиш эҳтимоллиги тўлқин қонуният билан ўзгаради дейиш хато бўлар эди. Чунки, бундай бўлганда зарранинг фазода топилиш эҳтимоллиги манфий қиймат ҳам олади. Эҳтимолликнинг манфий бўлиши маънога эга эмас. Тўлқин функциясининг тўғри талқини 1926 йилда М. Борн томонидан берилган. Бунга кўра фазонинг бирор қисмида қандайдир вақт моментида Де-Бройл тўлқинлар интенсивлиги фазонинг ўша қисмида зарранинг топилиш эҳтимолига пропорционал бўлади. Де-Бройл тўлқини Шредингер тенгламасини қаноатлантиргани учун квант механикасининг асосий тенгламасида иштирок этувчи ҳар қандай тўлқин учун бундай статистик талқин тўғри ҳисобланади. Агар биз тирқишдан ўтаётган зарраларнинг дифракцияланиш ҳодисасини эсласак, тўлқин функциясининг борнча талқинига кўра экраннинг равшан жойларида зарранинг топилиш эҳтимоли максимум бўлиб, қоронғу жойларида эса бу эҳтимолият минимал қийматга бўлади.

Тўлқин функциясининг бундай статистик талқини квант механикаси қонунларининг эҳтимолли характерга эга эканлигини кўрсатади. Бу ҳолат фақатгина зарралар тўпламига тегишли бўлмасдан, шунингдек, алоҳида олинган заррага ҳам тегишли бўлади ва шу маънода квант механика қонунлари классик статистика қонунларидан фарқ қилади. Квант механикасига оид айрим дарсликларда тўлқин функциясининг статистик талқини баён этилганда, бу функция модулининг квадрати зарранинг фазонинг бирор қисмида топилиши эҳтимоли билан боғланган деб қайд қилинсада, бу функциянинг ўзи ҳеч қандай маънога эга эмас деган нотўғри хулосага келинади. Классик физикада тўлқин интенсивлиги унинг энергияси билан боғлиқ бўлса, квант механикасида тўлқин интенсивлиги зарранинг топилиши эҳтимоли билан боғлангандир. Шу сабабга кўра тўлқин функциясининг талқинини қуйидагича таърифлаш тўғрироқ бўлган бўлур эди: *тўлқин функцияси физик система ҳолатини тавсифлаб, унинг модулининг квадрати зарранинг фазонинг бирор қисмида топилиш эҳтимолини аниқлайди.* Эҳтимолликнинг амплитудаси фазонинг координаталари ва вақтга боғлиқ бўлган (x, y, z, t) тўлқин функция орқали ифодаланади. Эҳтимоллик амплитудаси мавҳум бўлиши мумкин. Шунинг учун эҳтимоллик унинг модулининг квадратига пропорционал

$$W=\left|\Psi(x,y,z)\right|^2. \qquad (2.27)$$

Демак, де-Бройл тўлқини амплитудасининг квадрати фазонинг айни нуқтасида микрозаррани қайд қилиш эҳтимоллигини характерлайди. Шундай қилиб, микрозарранинг ҳолатини тўлқин функция билан ифодалаш статистик ёки бошқача айтганда эҳтимоллик характерига эга. Тўлқин функция қийматининг квадрати зарранинг t вақт моментида фазонинг томонлари x, x+дx, y, y+dy, z ва z+dz соҳасида топилиш эҳтимоллигини кўрсатади. Квант механикасида зарранинг ҳолати бутунлай янгича, яъни зарранинг ҳам тўлқин, ҳам корпускуляр хусусиятини ўзида мужассамлаштирган тўлқин функцияси орқали ифодаланади. Зарранинг dV ҳажм бўлакчасида бўлиш эҳтимоллиги

$$dW=|\Psi|^2\,dV \qquad (2.28)$$

кўринишда ифодаланади. Бунда ψ - функция қийматининг квадрати

$$|\Psi|^2=\frac{dW}{dV}$$

эҳтимоллик зичлиги деб аталади. Агарда зарра ҳақиқатдан ҳам мавжуд бўлса, уни бутун V ҳажмда бўлиш эҳтимоллиги 1 га тенг бўлади. Бу ҳолда ψ - функция нормаллаштириш шарти

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi|^2 dV=1 \qquad (2.29)$$

тенгликни қаноатлантиради. Бундан ташқари, тўлқин функциянинг физик маъносидан келиб чиқувчи қуйидаги шартлар ҳам бажарилиши керак

а) ψ-функция чекли бўлиши керак, чунки микрозаррани қайд қилиш эҳтимоллиги бирдан катта бўла олмайди;

б) ψ-функция бир қийматли бўлиши керак, чунки микрозаррани фазонинг бирор нуқтасида қайд қилиш эҳтимоллигининг қиймати бир нечта бўлиши мумкин эмас;

в) ψ-функция узлуксиз бўлиши керак, чунки микрозаррани қайд қилиш эҳтимоллиги сакрашсимон характерда ўзгармайди. Бу шарт тўлқин функциясининг талқини суперпозиция тамойилига олиб келади. Бу тамойилга кўра система ҳолатини тавсифловчи тўлқин функция ψ системанинг мумкин бўлган ҳолатларини тавсифловчи

$$\Psi_1,\Psi_2,....,\Psi_n$$

функцияларнинг чизиқли комбинациясидан иборат бўлади

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + ... + C_n\Psi_n = \sum_{m=1}^{n} C_m\Psi_m \quad . \qquad (2.30)$$

Бу тамойил ташқи кўринишидан классик механикадаги суперпозиция тамойилига ўхшасада, мазмунан ундан фарқ қилади. Биринчидан, (2.30) дан кўринадики, бирор тўлқин функциянинг нолга тенг бўлмаган исталган комплекс сон С га кўпайтириш натижасида ҳосил бўладиган янги тўлқин функция системанинг дастлабки ҳолатига мос келади. Классик физикада эса, масалан, иккита бир хил тебранишларни қўшиш натижасида бу тебранишларни характерловчи физикавий катталиклар қийматлари ўзларининг бошланғич қийматларидан фарқ қилади. Квант механикасида бир хил ҳолатларни қўшиш физикавий катталиклар қийматини ўзгартирмайди. Шунинг учун тўлқин функция квант механикасида бирор фазоли кўпайтувчи аниқлигида берилган бўлади. Ҳақиқатдан, $\psi(r,t)$ ва $e^{i\alpha}\psi(r,t)$ функциялари бир хил эҳтимол зичлигини беради.

Иккинчидан, квант механикасида бошланғич ҳар хил ҳолатларни қўшиш натижасида ҳосил бўладиган ҳолатда бирор физикавий катталик λ ни қандайдир эҳтимол билан ўлчаш вақтида биз ёки λ_1, ёки λ_2,..., ёки λ_n қийматларни оламиз. Классик физикада эса бундай ҳолда натижавий ўлчанадиган катталик $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ ларнинг чизиқли комбинацияга тенг бўлади. Шундай қилиб, квант механикасида физикавий катталик λ ни ўлчаш натижаси λ_1, ёки λ_2, ёки λ_n дан фарқ қилмасдан, эҳтимоллар қонунига мос равишда шу қийматларнинг бирига тенг бўлади. Албатта, топиладиган қиймат аралаш ҳолат ψ да $\psi_1, \psi_2, ..., \psi_n$ ҳолатларнинг нисбий салмоғига боғлиқ бўлади. Квант механикасининг математик аппарати эса системанинг ψ тўлқин функцияси билан тавсифланувчи йиғинди ҳолатида физикавий катталик L нинг алоҳида-алоҳида ўлчашлар натижаси эҳтимолини ҳисоблаш имконини беради. ψ - функцияни 1926 йилда Шредингер томонидан таклиф этилган ва унинг номи билан аталадиган тенгламани ечиш орқали топилади

$$-\frac{h^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + U\psi = ih\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \qquad (2.31)$$

Бу ерда *m*-микрозарранинг массаси, U-микрозарранинг потенциал энергияси, $i=\sqrt{-1}$ - мавҳум бирлик. (2.31) да ψ - функциядан вақт бўйича олинган ҳосилали ҳад қатнашаётгани учун уни вақтга *боғлиқ бўлган Шредингер тенгламаси* деб аталади. Бу тенгламада микрозаррага таъсир этувчи кучлар потенциал функция $U(x, y, z, t)$ орқали акс эттирилган, яъни микрозарра потенциал энергиясининг қиймати фазонинг турли нуқталаридагина эмас, балки фазонинг айни нуқтасида ҳам вақтнинг турли онларида турличадир.Лекин микрооламда содир бўладиган аксарият

ҳодисаларда микрозарранинг потенциал энергияси вақтга ошкор боғлиқ бўлмайди (турғун ҳолатлар учун). Бу ҳолда ψ - функция иккита кўпайтувчига ажралиб, бири фақат координаталарга, иккинчиси фақат вақтга боғлиқ бўлади

$$\psi(x,y,z,t)=\Psi(x,y,z)\times\varphi(t) \quad (2.32)$$

Натижада бир қатор математик амаллардан сўнг (2.32) тенгламани қуйидаги кўринишга келтириш мумкин:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{h^2}(W\text{-}U)\Psi=0 \quad . \quad (2.33)$$

Бу тенгламада W – микрозарранинг тўлиқ энергияси. (2.33) ифода вақт иштирок этмаган турғун ҳолат учун Шредингернинг стационар тенгламасидир. Квант механикасининг кўп масалаларини ечишда шу тенгламадан фойдаланамиз. Дифференциал тенгламалар назариясидан маълумки, Шредингер тенгламасига ўхшаш тенгламалар ҳар доим ҳам ечимга эга бўлавермайди. У фақат энергиянинг маълум бир аниқ қийматидагина хусусий ечимга эга бўлади. Топилган W энергиянинг қиймати узлуксиз ёки дискрет бўлиши мумкин. Биз ҳам айрим масалаларни ечишда шу тенгламанинг тадбиқларини кўриб чиқайлик.

Назорат саволлари

1. Зарралар дуализми ва де-Бройль ғоясининг мазмунини тушунтиринг.
2. Де-Бройль тўлқин узунлиги учун турли кўринишдаги формулаларини ёзинг
3. Де-Бройль тўлқини функциясини ёзинг ва тушунтиринг.
4. Дэвиссон-Жермер қурилмасини чизинг ва тушунтиринг.
5. Вульф-Брэгг формуласини тушунтиринг.
6. Импулс ва координата учун ноаниқлик муносабати қайси формула билан ифодаланади?
7. Энергия учун ноаниқлик муносабатини ёзинг ва изоҳланг.
8. Тўлқин-пакет деганда нимани тушунаси?
9. Фазовий тезликни тушунтиринг. Нима учун маъноси йўқ?
10. Шредингер тенгламасининг математик ифодасини ёзиб тушунтиринг.

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

Де Бройл гипотезаси. Зарраларнинг тўлқин хоссалари

1-Масала: Массаси 0,14 кг бўлган футбол тўпи зарб билан тепилганда 50 м/с тезликка эришса, бу тўп ҳаракати билан боғлиқ бўган де Бройл тўлқини узунлиги баҳолансин. Шунингдек υ=50 м/с тезлик билан ҳаракат қилаётган электрон учун ҳам шундай тўлқин узунлиги ҳисоблансин.

Ечиш: Зарра де Бройл тўлқин узунлиги

а) футбол тўпи учун

$$\lambda=\frac{h}{mV}=\frac{6{,}63*10^{-34}Ж*с}{0{,}14кг*50\ м/с}10^{10}\frac{A^0}{м}=0{,}9\cdot10^{-24}A^0.$$

b) электрон учун

$$\lambda=\frac{h}{mV}=\frac{6{,}63*10^{-34}Ж*с}{9{,}11*10^{-31}кг\times50\ м/с}10^{10}\frac{A^0}{м}=1{,}46\cdot10^{5}A^0.$$

Булардан кўрамизки, бир хил тезлик билан футбол тўпи ва электрон ҳаракат қилаяпти деб фараз этилганда, макрожисм ҳисобланган футболл тўпи учун λ шунчалик кичик катталик ҳисобланар эканки, уларнинг қийматини тажрибада ўлчаб бўлмаслик даражада бўлар экан. Электрон учун эса λ тажрибада осонликча ўлчаниши мумкин бўлган қийматга эга бўлар экан. Демак, бу тажриба тўлқин хоссасининг микрозарралага хос хусусият эканлигини кўрсатади.

2-масал:. Бошланғич тезлигини ҳисобга олмаслик мумкин бўлган электрон У тезлантирувчи потенциаллар фарқи орқали ўтади. Ушбу икки ҳол учун 1) U_1=51 В 2) U_2=510 кВ. Де-Бройл тўлқин узунлиги λ топилсин.

Берилган: $\dfrac{U_1=51В,\ \ U_2=510\ кВ}{\lambda\sim?}$

Ечи: Зарра де-Бройл тўлқинининг узунлиги λ,унинг импулси Р га боғлиқ ва

$$\lambda=\frac{2\pi h}{P} \qquad (1)$$

формула билан аниқланади.Агар зарранинг кинетик энергияси $W_к$ маълум бўлса, унинг импулси аниқланади. Норелятивистик ($W_к<<W_o$ да) ва релятивистик ($W_к\approx W_o$ да) ҳоллар учун импулснинг кинетик энергия билан боғланиши мос равишда қуйидаги формулалар билан ифодаланади:

$$P=\sqrt{2m_0W_к}\ , \qquad (2)$$

$$P = \frac{1}{c}\sqrt{(2W_0 + W_к)W_к} \quad . \tag{3}$$

Норелятивистик ва релятивистик ҳоллар учун мос равишда (2) ва (3) муносабатларни ҳисобга олганда, (1) формула қуйидаги кўринишда ёзилади:

$$\lambda = \frac{2\pi\, h}{\sqrt{2m_0 W_к}} \quad , \tag{4}$$

$$\lambda = \frac{2\pi\, h}{\frac{1}{c}\sqrt{(2W_0 + W_к)W_к}} \quad . \tag{5}$$

Маълумки, U тезлантирувчи потенциаллар фарқини ўтган электроннинг кинетик энергияси $W_к = |E|\,U$. Биринчи ҳолда $W_{к1} = |E|U_1 = 51$ эВ$=0{,}51\cdot 10^{-4}$ МэВ. Бу электроннинг тинчликдаги энергияси $W_0 = m_0c^2 = 0{,}51$ МэВ дан кўп марта кичик. Демак (4) формулани қўллаш мумкин. Ҳисоб-китобни қисқартириш учун $W_{к1} = 10^{-4}\, m_0c^2$ эканлигини назарга оламиз. Бу ифодани (4) формулага қўйиб, уни

$$\lambda_1 = \frac{2\pi\, h}{\sqrt{2m_0 \times 10^{-4} m_0 c^2}} = \frac{10^2\, 2\pi\, h}{\sqrt{2}\, m_0 c}$$

кўринишда ёзиб оламиз. $\left[\frac{2\pi\, h}{m_0 c}\right]$ Комптон тўлқин узунлиги λ_c эканлигини ҳисобга олиб, қуйидагини оламиз

$$\lambda_1 = \frac{10^2}{\sqrt{2}}\lambda_s, \quad \lambda_1 = 2.43\times 10^{-12} \text{ м.}$$

эканлигидан

$$\lambda_1 = \frac{10^2}{\sqrt{2}}\, 2{,}43\times 10^{-12}\text{м} = 172 \text{ Нм.}$$

Иккинчи ҳолда кинетик энергия $w_{k2} = (E)\,U_2 = 510$ кэВ$=0.51$ МэВ, яъни электроннинг тинчликдаги энергиясига тенг. Демак, релятивистик формула (5) ни қўллаш керак. $W_{к2} = 0{,}51$ МэВ$= m_0c^2$ эканлигини ҳисобга олиб (5) формулага биноан қуйидагини топамиз

$$\lambda_2 = \frac{2\pi\, h}{\frac{1}{c}\sqrt{(2m_0c^2 + m_0c^2)m_0c^2}} = \frac{2\pi\, h}{\sqrt{3}m_0 c} \quad \text{ёки} \quad \lambda_2 = \frac{\lambda_s}{\sqrt{3}} .$$

λ_c нинг қийматини охирги формулага қўйиб ва ҳисоблаб, натижани топамиз: λ_2=1,4 Нм.

3-Масала. Электрон E_k=1,02 МэВ кинетик энергияга эга. Агар унинг кинетик энергияси икки марта камайса, электроннинг де Бройл тўлқин узунлиги неча марта камаяди

Берилган: E_{k1}=1,02 МэВ = $1{,}63\cdot10^{-13}$ Дж; E_{k2}=0,5E_{k1}=0,51 МэВ = = $8{,}16\cdot10^{-14}$ Дж; m_0=9,11∗10^{-31} кг; $c=3{,}00\cdot10^{8}$ м/с: λ_2/λ_1=?

Ечиш. Микрозарранинг де Бройля тўлқин узунлиги

$$\lambda=\frac{h}{p}.$$

Фараз қилайлик, p_1 – электроннинг дастлабки ҳолатдаги импулси а в начальном состоянии, p_2 – электроннинг кейинги ҳолатдаги импулси. У ҳолда

$$\lambda_1=\frac{h}{p_1},\ \lambda_2=\frac{h}{p_2},\ \text{а}\ \frac{\lambda_2}{\lambda_1}=\frac{p_1}{p_2}.$$

Электроннинг тинч ҳолатдаги массасини топамиз

$$E_0=m_0c^2=9{,}11\cdot10^{-31}\cdot\left(3{,}00\cdot10^{8}\right)^2\ \text{ж}\approx8{,}20\cdot10^{-14}\text{ж}.$$

Бу ерда m_0 – электроннинг тинч массаси. Электроннинг кинетик энергияси билан импулси ўртасидаги боғланиш

$$p=\frac{1}{c}\sqrt{E_k(E_k+2E_0)}.$$

Электроннинг дастлабки ва кейинги ҳолатдаги импулслари эса

$$p_1=\frac{1}{c}\sqrt{E_{k1}(E_{k1}+2E_0)}\ \text{ и}\ p_2=\frac{1}{c}\sqrt{E_{k2}(E_{k2}+2E_0)}.$$

Ҳисоблан шуни кўрсатадики $E_0=E_{k2}=0{,}5E_{k1}$. Бу муносабатни ҳисобга олиб де Бройля тўлкинининг дастлабки ва охирги ҳолатлар учун нисбатини топамиз

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1}=\frac{p_1}{p_2}=\frac{\sqrt{E_{k1}(E_{k1}+E_{k1})}}{\sqrt{E_{k2}(E_{k2}+2E_{k2})}}=\sqrt{\frac{2}{3}}*\frac{E_{k1}}{E_{k2}}.$$

Керакли сон қийматларни охирги ифодага қўйиб

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1}=\sqrt{\frac{2}{3}}\cdot\frac{1{,}63\cdot10^{-13}}{8{,}16\cdot10^{-14}}\approx1{,}63\,.$$

эканлигини топамиз.

Жавоб: $\lambda_2/\lambda_1=1{,}63$.

4 Масала. $\upsilon=0{,}75c$ тезлик билан ҳаракатланаетган электроннинг де бройл тўлқин узунлиги топилсин.

Берилган: $\upsilon=0{,}75c$, $\lambda=?$

Ечиш: Заррачанинг де Бройл тўлқин узунлиги

$$\lambda=\frac{h}{p}\,. \qquad (1)$$

Заррача ёруғлик тезлигига яқин тезликда ҳаракатланганлиги учун унинг массаси тезликка боғлиқ бўлади. Шунинг учун қуйидаги формула ўринли

$$p=m\upsilon\,; \quad m=f(\upsilon)\,, \qquad (2)$$

бу ерда m – зарранинг массаси. Масса билан тезлик орасидаги боғланиш

$$m=\frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{\upsilon^2}{c^2}}}\,. \qquad (3)$$

Бу ерда m_0 – зарранинг тинч массаси. (1) ва (3) тенгламалардан

$$\lambda=\frac{h}{m_0\upsilon}\sqrt{1-\frac{\upsilon^2}{c^2}} \qquad (4)$$

ҳосил қиламиз. Заррача тезлиги 0,75с эканлигидан фойдаланиб

$$\lambda=\frac{h}{m_0\cdot0.75\cdot c}\sqrt{1-\frac{0.75^2c^2}{c^2}}=\frac{h}{cm_0}\cdot\frac{1}{0.75}\sqrt{1-0.75^2}\,.$$

Бу ерда $\Lambda = \frac{h}{m_0 c}$ - комптон тўлқин узунлиги. Демак

$$\lambda = 0.88 \cdot 2.42\text{нм} = 2,24\text{нм}.$$

Жавоб: λ=2,24нм .

Гейзенберг ноаниқлик муносабатлари

1-Масала: Тўғри чизиқли траектория бўйлаб ҳаракат қилувчи электрон координатасини ўлчашда йўл қўйилган аниқсизлик 10 A^0 бўлса, унинг а) импулсини, б) тезлигини, в) кинетик энергиясини ўлчашдаги аниқсизликлар ҳисоблансин.

Ечиш: Масала шартига кўра $\Delta x = 10A^0 = 10^{-9}$ м бўлгани учун

а) $\Delta p_x \approx \frac{h}{\Delta x} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}\,\text{Ж} \cdot \text{с}}{10^{-9}\,\text{м}} = 1,05 \cdot 10^{-25}\,\text{кг} \cdot \text{м/с}$

b) $\Delta V_x = \frac{\Delta p_x}{m} = \frac{1,05 \cdot 10^{-25}\,\text{кг} \cdot \text{м/с}}{9,11 \cdot 10^{-31}\,\text{кг}} = 1,15 \cdot 10^5\,\text{м/с}$

в)

$$E_k = \frac{(\Delta P_x)^2}{2m} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-25})^2}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31}}\,\text{Ж} = 6,02 \cdot 10^{-21}\,\text{Ж} = 6,02 \cdot 6,25 \cdot 10^{-3}\,\text{эВ} = 37,6 \cdot 10^{-3}\,\text{эВ}$$

2-Масала: Уй температурасидаги тезликка эга бўлган ва массаси $m = 2 \cdot 10^{-27}$ кГ бўлган молекуланинг ҳолатини аниқлашда хатолик 10^{-10} м атрофида бўлса, унинг импулсини аниқлашдаги хато, шунингдек нисбий хато ҳисоблансин.

Ечиш: Молекула импулсининг аниқлашдаги хато

$$\Delta P_x \approx \frac{h}{\Delta x} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{10^{-10}}\,\text{кг} \cdot \text{м/с} = 1,05 \cdot 10^{-21}\,\text{кг} \cdot \text{м/с}$$

Уй температураси (T=290 K) га тўғри келувчи ўртача тезлик

$$v_x = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{\frac{3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 290}{2 \cdot 10^{-27}}}\,\text{м/с} = 2500\ \text{м/с}$$

бўлгани учун молекула импулси

$$P_x = mv_x \cdot 2 \cdot 10^{-27} \cdot 2500\ \text{кг×м/с} = 5 \cdot 10^{-24}\ \text{кг×м/с}$$

бўлади. Импулсни аниқлашдаги нисбий хато эса

$$\frac{\Delta P_x}{P_x} = \frac{5 \cdot 10^{-24}}{1{,}05 \cdot 10^{-24}} \cong 5 \,.$$

Шундай қилиб, молекуланинг импулсини унинг дастлабки қийматидан 20% дан катта аниқликда ўлчаб бўлмайди.

3-Масала: Уйғонган ҳолатда атомнинг яшаш вақти 10^{-8} с. Атом нурланган вақтда нурланадиган фотон энергиясидаги четланиш (энергетик сатҳ кенглиги) ҳисоблансин. Агар нурланувчи фотон спектрнинг кўзга кўринадиган қисмига мансуб бўлса (λ=4000 A^0), спектрал чизиқ кенглиги қандай бўлади?

Ечиш: Гейзенбергнинг координата ва импулс аниқсизликлари учун муносабати атом энергиясига ва унинг уйғонган ҳолатда яшаш вақтига ҳам хос бўлади:

$$\Delta E \Delta t \geq h$$

$$\Delta E \geq \frac{h}{\Delta t} = \frac{1.05 \cdot 10^{-34}\,Ж \cdot c}{10^{-8}\,c} = 1{,}05 \cdot 10^{-26}\,Ж = 1{,}05 \cdot 6{,}25 \cdot 10^{-8}\,эВ = 6{,}6 \cdot 10^{-8}\,эВ$$

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{19{,}86 \cdot 10^{-26}}{4 \cdot 10^{-7}}\,Ж = 4{,}96 \cdot 10^{-19}\,Ж = 4{,}96 \cdot 25 \cdot 10^{-1}\,эВ = 3{,}1\,эВ$$

4 Масала. Ноаниқлик муносабатидан фойдаланиб кенглиги l = 5 Å чексиз потенциал чуқурликда жойлашган электроннинг минимал энергияси E_{min} ни аниқланг.

Берилган: $l = 5\ \mathring{A} = 5 \cdot 10^{-10}$ м; h=$1{,}05 \cdot 10^{-34}$ ж$\cdot$с; m_0=$9{,}11 \cdot 10^{-31}$ кг: E_{min} =?

Ечиш: Ноаниқлик муносабатини ёзиб оламиз

$$\Delta x \Delta p_x \geq h\,. \qquad (1)$$

Бу ерда Δp_x- импульснинг ноаниқлиги; $\Delta x -$ координата ноаниқлиги. Электрон импульси ва кинетик энергияси ўртасидаги боғланиш

$$p = \sqrt{2m_0E_k} = \sqrt{2m_0E}\,,$$

ҳамда тўлиқ энергия ифодаларидан

$$E = \frac{p^2}{2m_0}\,.$$

Фойдаланиб қуйидаги муносабатни ҳосил қиламиз

$$E \geq \frac{(\Delta p_x)^2}{2m_0}.$$

Агар $\Delta x = l/2$ қийматини эътиборга олсак, у ҳолда

$$E \geq \frac{2h^2}{m_0 l^2}.$$

Бинобарин, электрон энергиясининг минимал қиймати

$$E_{min} = \frac{2h^2}{m_0 l^2}$$

формуладан топилади. Ўлчамларни текширамиз

$$[E] = \frac{[h]^2}{[m_0][l]^2} = \frac{ж^2 \cdot с^2}{кг \cdot м^2} = \frac{ж^2}{Н \cdot м} = ж.$$

Охирги муносабатга берилган зарур сон қийматларни қўйиб

$$E_{min} = \frac{2 \cdot \left(1{,}05 \cdot 10^{-34}\right)^2}{9{,}11 \cdot 10^{-31} \cdot \left(5 \cdot 10^{-10}\right)^2} \approx 10^{-19} ж.$$

Жавоб: $E_{min} = 10^{-19}$ ж.

Тўлқин функция. Эҳтимолият тақсимоти

1. *Масала:* Эркин ҳаракат қилувчи электрон ҳолати

$$\Psi_p(r) = Ce^{\frac{i}{\hbar}pr}$$

тўлқин функцияси билан ифодаланса, С коэффициент топилсин.

Ечиш: Биз 1-мисолда кўрдикки, берилган функция стандарт шартларни р нинг $[-\infty, \infty]$ қийматларида қаноатлантиради. Демак, бу функция учун нормаллик шарти

$$\int |\Psi_p(r)|^2 d\tau = 1 \qquad (11)$$

ўринли бўлмайди. Шунинг учун нормаллик шарти Диракнинг δ- функцияси орқали бажарилади:

$$\int |\Psi(r)|^2 d\tau = \delta(p' - p),$$

бу ерда

$$\delta(p'-p)=\int \Psi_p^*(r)\Psi_{p'}(r)d\tau=C^2\int e^{\frac{i}{h}(p'-p)r}d\tau=(2\pi h)^3\frac{C^2}{(2\pi)^3}\int e^{\frac{i}{h}(p'-p)r}\frac{d\tau}{h^3}=(2\pi h)^3C^2\delta(p'-p) \quad (12)$$

деб ёзамиз ва бундан $C=(2\pi h)^{-3/2}$ эканлигини топамиз. Агар Ψ - функция бир ўлчамли яъни

$$\Psi_p(x)=Ce^{\frac{i}{h}px}$$

бўлса,

$$C=(2\pi h)^{-1/2}$$

бўлади.

III-БОБ
ОПЕРАТОРЛАР

3.1. Операторлар. Хусусий функция ва хусусий қиймат.

Классик механикада ҳар бир физикавий катталик фазонинг у ёки бу нуқтасида ёки вақтнинг у ёки бу онида ўзининг сон қиймати билан тасвирланади. Масалан, вақтнинг ҳар бир онида зарранинг ўрни учта сон x,y,z - зарранинг координаталари билан тасвирланади. Бошқача айтганда классик физикада физикавий катталиклар вақт ва координата функциялари билан тавсифланади. Бирор сонга ёки сонлар тўпламига муносиб келган бошқа сон ёки сонлар тўпламини қўйиш қоидаси функция дейилади. Классик физиканинг асосий вазифаси турли катталиклар орасидаги функционал боғланишни топишдир. Квант механикада, умуман қараганда, физикавий катталик аниқ бир сон қийматга эга бўлмайди. Масалан, квант механикада заррани ўрнини қайд қилиш эҳтимол қонуниятига бўйсунади. Бу эҳтимол эса тўлқин функция ёрдамида ҳисобланади. Бироқ тўлқин функция зарранинг ўрнини топиш координаталарини вақт функцияси сифатида қарамайди. Квант механика зарранинг бу ёки у координатасини эҳтимолини ва унинг ўртача қийматини ҳисоблаб беради. Бошқача айтганда квант механика ўлчанаётган катталикнинг у ёки бу сон қийматини эҳтимолини айтиб бера олади. Шунинг учун ҳам квант механикада физикавий катталиклар ўзининг сон қиймати билан эмас, балки операторлар билан тасвирланади. Берилган конкрет шароитда физикавий катталикнинг сон қиймати ноаниқ, аммо бу физик катталикни тасвирлаётган оператор аниқ. Функциялар бир сонни иккинчи сон билан боғлашга хизмат қилади. Операторлар эса бир функцияни иккинчи функция билан боғлайди. Бирор функцияга муносиб келган бошқа функцияни қўйиш қоидаси *оператор* дейилади.

Квант механикасининг асосий тамойиллари аниқ математик аппаратни – операторлар назариясини қўллашни тақозо этади. Системанинг ўлчов асбоб билан ўзаро таъсирини назорат қилиб бўлмаслиги натижасида физик катталикларнинг қийматини аниқ ўлчаб бўлмайди, ўлчаш натижаларида табиий четланишлар юзага келади. Шунинг учун физик катталикларни уларнинг сон қийматлари билан эмас, балки уларнинг операторлари орқали тавсифлаш мақсадга мувофиқдир. Математикада операторлар функция, функционал каби тушунчаларнинг умумлашмаси ҳисобланади. Агар функция тушунчасида бирор сонга иккинчи бир сон қарама-қарши қўйилса (масалан, $y=x^2$ да $x=2$ сонига $y=4$ сони қарама-қарши қўйилади), функционалда эса сонларга функциялар қарама-қарши қўйилган бўлади (масалан, аниқ интеграл $\int_{\grave{o}}^{\grave{e}} f(x)dx=F(b)-F(a)$ да $f(x)$ функцияга $F(b)-F(a)$ сони қарама-қарши қўйилган). Операторлар ёрдамида эса бирор функция иккинчи бир функцияга қарама-қарши қўйилади, масалан

$$\phi = \hat{L}u \qquad (3.1)$$

Бу ерда L- оператор (оператор L ҳарфи устига $\wedge$ белгиси қўйиш билан белгиланади), u, ϕ- бир соҳада аниқланувчи функциялардир. Оператор маълум функцияни дифференциаллаш ёки интеграллаш, даражага кўтариш ёки илдиздан чиқариш имкониятига эгадир. Операторлар таъсир қилиши мумкин бўлган ҳар хил функциялар орасида бундай таъсир натижасида ўз кўринишини ўзгартмайдиган функциялар муҳим аҳамиятга эгадир

$$\hat{L}\phi_n = \lambda_n \phi_n \qquad (3.2)$$

Квант механикасининг кўпгина масалаларида оператор L дифференциалловчи оператор кўринишида берилади, шунинг учун (3.2) ахтарилувчи φ_n функцияларга нисбатан бир жинсли чизиқли тенглама ҳисобланади. Дифференциал тенгламалар назариясидан маълумки, (3.2) кўринишидаги тенгламанинг нолга тенг бўлмаган ечими λ_n параметрининг барча қийматларида ҳам мавжуд бўлавермайди. Агар (3.2) тенгламанинг ечими λ_n нинг бирор қийматларида мавжуд бўлса, λ_n нинг бу қийматлари L операторнинг *хусусий қийматлари*, тенглама ечимлари φ_n эса бу оператор хусусий қийматларига тегишли *хусусий функциялари* дейилади. Агар λ_n алоҳида сонлар қаторидан иборат бўлса, бу сонлар тўплами оператор хусусий қийматларининг *дискрет спектри* дейилади. Агар у узлуксиз қатордаги қийматларни қабул қилса, бу сонлар тўплами *узлуксиз спектрни* ташкил этади. Бизга маълумки, (3.2) тенгламанинг ечими аниқ чегаравий шартларни қаноатлантириши керак: квант механикасининг масалалари учун бу чегаравий шартлар функция аргументи ҳисобланган ўзгарувчиларнинг ўзгариш соҳасида топиладиган ечимларга қўйиладиган стандарт шартлар (функциянинг чеклилиги, узлуксизлиги ва бир қийматлилиги) дан иборат бўлади. Дискрет ва узлуксиз спектрларга тегишли бўлган хусусий функциялар бир-биридан тамоман фарқ қилади. Операторлар назариясидан маълумки, дискрет спектрга тегишли хусусий функциялар квадратик интегралланувчи функциялар ҳисобланади, яъни бу функциялар учун

$$\int |\psi_n|^2 d\tau$$

интеграл яқинлашувчи интеграл бўлиши талаб этилади. Узлуксиз спектр ҳолида эса бундай интеграл узоқлашувчи қиймат қабул қилади. Квант механикасининг масалаларини ечишда биз фақатгина чизиқли ва эрмит (ўзига қўшма) операторлардан фойдаланамиз.

3.2. Чизиқли ва эрмит операторлар.

1. Агар оператор L қуйидаги шартни

$$\hat{L}(C_1u_1 + C_2u_2) = C_1\hat{L}u_1 + C_2\hat{L}u_2 \qquad (3.3)$$

қаноатлантирса, бу оператор *чизиқли оператор* дейилади. Бу ерда C_1, C_2 - доимий катталиклар. Агар L тариқасида $\frac{d}{dx}$ ва x операторларини оладиган бўлсак, равшанки бу операторлар чизиқли бўлади ва (3.3) тенгликни қаноатлантиради. Агарда оператор $\hat{L}$ функция устида даражага кўтариш ёки илдиздан чиқариш амаллари бажариш лозим бўлса, (3.3) тенглик ўринли бўлмайди ва бинобарин улар чизиқли оператор бўла олмайди. (3.3) тенгликдан кўринадики, оператор L чизиқли бўлгандагина квант механикасининг муҳим тамойили бўлган суперпозиция тамойили бажарилади.

2. Агар чизиқли оператор L қуйидаги

$$\int u^*\hat{L}\upsilon\, d\tau = \int \upsilon\hat{L}^*u^*\, d\tau \qquad (3.4)$$

тенгликни қаноатлантирса, у *эрмит оператори* дейилади. Бу ерда интеграллаш ўзгарувчиларнинг барча ўзгариш соҳаси бўйича олиб борилади. Масалан, $\hat{L} = i\frac{d}{dx}$ кўринишидаги оператор бўлса, (3.4) асосида текшириб кўрамиз

$$\int u^*\hat{L}\upsilon\, d\tau = \int u^* i\frac{d}{dx}\upsilon\, d\tau = iu^*\upsilon\Big|_{-\infty}^{\infty} - i\int_{-\infty}^{\infty}\upsilon\frac{du^*}{dx}dx = -i\int_{-\infty}^{\infty}\upsilon\frac{du^*}{dx}dx = \int\upsilon\left(i\frac{du}{dx}\right)^* dx = \int\upsilon\hat{L}^*u^*\, d\tau$$

Демак, оператор $L = i\frac{d}{dx}$ эрмит оператори экан. Энди биз эрмит операторининг хусусий қийматининг ҳақиқий сондан иборат эканлиги тўғрисидаги муҳим теоремани исбот қиламиз. Бунинг учун (3.4) даги υ функция тариқасида эрмит оператори бўлган L нинг хусусий функцияларидан бирини оламиз

$$L\upsilon = \lambda\upsilon$$

Агар $u=\upsilon$ деб белгиласак, қуйидагиларга эга бўламиз

$$\int u^*\hat{L}\upsilon\, d\tau = \int u^*\hat{L}\upsilon\, d\tau = \lambda\int u^*u\, d\tau\ ;$$

$$\int \upsilon \hat{L} * u * d\tau = \int u \hat{L} u * d\tau = \lambda * \int u * u \, d\tau .$$

Бу тенгламаларнинг чап томонлари (3.4) асосида тенг бўлганликлари учун

$$\lambda \int u^* u d\tau = \lambda^* \int u^* u d\tau$$

интеграл ўринли бўлади. Охирги тенглик λ фақат ҳақиқий сон бўлганидагина бажарилади. Эрмит операторлари хусусий қийматларининг бу хусусияти физик катталиклар ўртача қийматининг ҳамма вақт ҳақиқий бўлиш принципига мос тушади. Эрмит операторларининг хусусий функциялари муҳим хоссага эга. Агар улар ҳар хил хусусий қийматга тегишли бўлса, ўзаро ортогонал бўлишади. Ҳақиқатдан, агар эрмит оператори L нинг хусусий қиймати ва хусусий функцияси учун қуйидаги тенгликлар

$$\hat{L} u_n = \lambda_n u_n , \quad \hat{L}^* u_m^* = \lambda_m u_m^*$$

ўринли бўлса, у ҳолда (3.4) га кўра

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int u_m^* u_n \, d\tau = 0$$

шарт бажарилади. Бу ерда $\lambda_n \neq \lambda_m$ бўлганлиги учун

$$\int u_m^* u_n \, d\tau = 0$$

бўлади ҳамда u_n, u_m функциялар *ортогонал функциялар* дейилади. Агар $\lambda_m = \lambda_n$, яъни L оператор бир хил хусусий қийматга эга бўлса, у ҳолда

$$\int u_m^* u_n \, d\tau = 1$$

бўлади, функциялар системаси нормаллашади. Функциялар системасининг ортогоналлиги ва нормаллиги, яъни ортонормаллиги, бирликда Кронекер белгиси билан ифодаланади

$$\int u_m^* u_n \, d\tau = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n, \\ 0, & m \neq n. \end{cases} \qquad (3.5)$$

Агар оператор L нинг бирор хусусий қиймати λ га бир неча хусусий функция тўғри келса, у ҳолда ҳолатларнинг турланиши мавжуд бўлади. Бундай функциялар сони эса ҳолатнинг турланиш даражасини кўрсатади.

1-изоҳ. Турланган хусусий функциялар ўзаро ортогонал бўлмасдан, улар бошқа хусусий қийматларга тегишли хусусий функцияларга нисбатан албатта ортогонал бўлади, яъни агар

$$\hat{L}u_{n\alpha} = \lambda_n u_{n\alpha} \qquad (\alpha = 1,2,3,...,k)$$

бўлса, ҳар доим

$$\int u_{m\mu} u_{n\alpha} d\tau = 0 \quad (m \neq n), \quad \int u_{m\mu} u_{n\alpha} d\tau = \delta_{\mu\alpha} \tag{3.6}$$

тенглик бажарилади. Чизиқли операторлар муҳим хоссага эга – уларнинг хусусий функциялари тўплами нормаллашган ва ортогонал функцияларнинг тўлиқ системасини ташкил этади. Стандарт шартларни қаноатлантирувчи исталган функция u ни ортонормаллашган функциялар u_n нинг тўлиқ системаси бўйича қаторга ёйиш мумкин

$$u = c_1 u_1 + c_2 u_2 + ... + c_n u_n = \sum c_n u_n \tag{3.7}$$

Ёйилма коэффиценти c_n ни қуйидагича топамиз: (3.7) ни u_n^* га кўпайтириб, кейин эса интеграллаймиз

$$\int u_m^* u \, d\tau = \sum c_n \int u_m^* u_n d\tau = \sum c_n \delta_{mn} = c_m \tag{3.8}$$

2-изоҳ. Юқорида келтирилган оператор тенгламалар операторлар хусусий қийматлари тўплами дискрет бўлганда, (яъни, дискрет спектр ҳолида) тўғри бўлади. Агар спектр узлуксиз бўлса, бу спектрга тегишли хусусий функциялар учун нормаллик ва ортогоналлик шартлар бошқача ёзилади

$$\int u_x^* u_x(x) d\tau = \delta(\lambda - \lambda'). \tag{3.9}$$

Бу ерда $\delta(\lambda\text{-}\lambda')$ - Дирак делта-функцияси бўлиб, у қуйидаги хоссаларга эга

$$\delta(\lambda\text{-}\lambda') = \begin{cases} 0, & \lambda^1\lambda' \\ 1, & \lambda = \lambda' \end{cases} \qquad \int \varphi(\lambda)\, \delta(\lambda\text{-}a)\, d\lambda = \varphi(a).$$

Умумий ҳолда, Дирак делта-функцияси нуқтавий заряднинг зичлигини аниқлаши мумкин. Ҳақиқатдан, x узунлик бўйича чизиқли тақсимланган заряд e нинг зичлиги ρ бу функция орқали қуйидагича аниқланади

$$\rho = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta e}{\Delta x} = \frac{de}{dx} = e\, \delta(x)$$

Бундан кўринадики, агар заряд координата марказида жойлашса, унинг зичлиги x=0 нуқтадан ташқари барча нуқталарда нолга тенгдир. Делта – функция бир қанча аналитик кўринишларда берилиши мумкин. Шулардан бири қуйидагичадир

$$\delta(x)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{\sin xq}{\pi x}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ikx}dk. \qquad (3.10)$$

Узлуксиз спектр ҳоли учун (3.9) ёйилма қуйидагича ёзилади

$$u(x)=\int c(\lambda)\,u_{\lambda}(\lambda)\,d\lambda \qquad (3.11)$$

Делта-функция хоссаларидан фойдаланиб, (3.11) даги $c(\lambda)$ функцияни топиш мумкин. Бунинг учун (3.11) ни u_x^* га кўпайтириб, кейин интеграллаймиз

$$\int u_{\lambda'}^*(x)\,u(x)\,d\tau=\int c(\lambda)\,d\lambda\int u_{\lambda'}^*(x)\,u_{\lambda}(x)d\tau=\int c(\lambda)\,\delta(\lambda-\lambda')\,d\lambda=c(\lambda')$$

яъни

$$c(\lambda)=\int u_{\lambda'}^*(x)\,u(x)\,d\tau \qquad (3.12)$$

тенгликни ҳосил қиламиз.

3.3. Операторлар алгебраси

Операторлар устида амаллар.

1) Икки оператор L ва N лар йиғиндиси (айирмаси) деб қуйидаги шартни қаноатлантирувчи M операторга айтилади

$$Mu=(L\pm N)u\,. \qquad (3.13)$$

2) Икки оператор L ва N лар кўпайтмаси деб $M=LN$ операторга айтилади. Бу ерда M операторнинг u функцияга таъсири натижаси L ва N операторларнинг (дастлаб N нинг u га, сўнгра унинг натижасига L нинг таъсири) кетма-кет таъсир натижасига тенг бўлади.

Икки ва ундан ортиқ операторларни қўшганда (айирганда), шунингдек, кўпайтирганда йиғинди (айирма), кўпайтма тўғрисида фақатгина бу операторлар ўхшаш хусусий функцияга эга бўлганларидагина сўзлаш мумкин. Умумий ҳолда, L ва N операторлар кўпайтмаси ўзаро коммутатив бўлмайди, яъни

$$LN \neq NL \tag{3.14}$$

Масалан, $\hat{L} = x$, $\hat{N} = \frac{d}{dx}$ операторлари берилган бўлсин. У ҳолда

$$L\,N\,u = x\frac{d}{dx}u = x\frac{du}{dx}$$

бўлса,

$$\hat{N}\hat{L}u = \frac{d}{dx}(xu) = u + x\frac{du}{dx} = \left(1 + x\frac{d}{dx}\right)u$$

бўлади. Бундан кўрамизки, $LN \neq NL$ бўлар экан. L ва N операторнинг ўзаро нокоммутативлигининг ўлчами тариқасида қуйидаги оператор олинади

$$[\hat{L}, \hat{N}] \equiv \hat{L}\hat{N} - \hat{N}\hat{L} \tag{3.15}$$

$[\hat{L}, \hat{N}]$ $-L$ ва N операторларнинг коммутатори деб аталади. Агар $[\hat{L}, \hat{N}] = 0$ бўлса, бу операторлар ўзаро *коммутатив операторлар* дейилади. Масалан, $LNOP$ операторлар кўпайтмасида OP операторлар ўзаро коммутатив бўлса, у ҳолда

$$LNOP = LNPO \tag{3.16}$$

тенглик ўринли бўлади. Агар $[\hat{L}, \hat{N}] \neq 0$ бўлса, бу операторлар ўзаро *нокоммутатив операторлар* деб аталадилар. Агар икки ва ундан ортиқ операторлар умумий хусусий функцияга эга бўлсалар, улар ўзаро коммутатив бўлишади ёки аксинча: агар операторлар ўзаро коммутатив бўлса, бу операторлар умумий хусусий функцияга эга бўлади

$$\hat{L}u = \lambda u, \quad \hat{N}u = \eta u, \quad \hat{M}u = \mu u$$

тенгликлар бажарилса, у ҳолда

$$\hat{L}\hat{N}\hat{M}u = \hat{L}\hat{N}(\hat{M}u) = \mu\hat{L}(\hat{N}u) = \mu\eta(\hat{L}u) = \mu\eta\lambda u;$$

$$\left[\hat{L}, \hat{N}\hat{M}\right]u = (\hat{L}\hat{N}\hat{M} - \hat{N}\hat{M}\hat{L})u = (\mu\eta\lambda - \mu\eta\lambda)u = 0$$

тенгламалар ўринли бўлади. Ўзаро коммутатив операторлар бир вақтнинг ўзида аниқ хусусий қийматларга эга бўладилар. Ҳозиргина қараб ўтган

L, N, M коммутатив операторларнинг хусусий қийматлари λ, η, μ аниқ бўлади. Демак, ўзаро коммутатив операторларга тегишли хусусий қийматлар бир вақтнинг ўзида ўлчанувчан катталиклар ҳисобланади. Масалан, $\hat{L} = z, \hat{N} = \frac{d}{dx}$ берилган бўлса, бу операторлар коммутаторини топайлик

$$\left[\hat{L},\hat{N}\right]f=(\hat{L}\hat{N}-\hat{N}\hat{L})f=\left(z\frac{d}{dx}-\frac{d}{dx}z\right)f=z\frac{df}{dx}-z\frac{df}{dx}=0\,.$$

Агарда $L = x, N = \frac{d}{dx}$ бўлса эди, $LN \neq NL$ ёки $x\frac{d}{dx} \neq \frac{d}{dx}$ бўлишини кўрар эдик. Биз $\frac{d}{dx}$ операторини маълум бир коэффициентлар аниқлигида импулснинг x координатаси бўйича ташкил этувчиси $\left(\hat{p}_x = -ih\frac{d}{dx}\right)$ эканлигини ва уларнинг қийматларини бир вақтнинг ўзида ўлчаб бўлмаслигини биламиз. Бу ҳолат Гейзенбергнинг ноаниқлик муносабатидан бевоста келиб чиқади. Координата у нинг, импулс p_x нинг ташкил этувчилари бир вақтнинг ўзида аниқ қийматларга эга бўлишини кўрамиз. Қуйидаги шартлар $\hat{L}u = \upsilon, \hat{M}\upsilon = u$ ни қаноатлантирувчи L ва M операторлар бир-бирига *тескари операторлар* дейилади, яъни $\hat{L} = \hat{M}^{-1}$, $\hat{M} = \hat{L}^{-1}$ тенгликлари ўринли бўлади. Таърифга кўра,

$$\hat{L}^{-1}\hat{L}u = \hat{L}^{-1}\upsilon = u \tag{3.17}$$

Агар ихтиёрий $\hat{L}$ оператор учун транспозицияланган оператор мавжуд бўлса, қуйидаги интеграл тенглик

$$\int u^*(\hat{L}\upsilon)\,d\tau = \int \upsilon(\hat{L}u^*)\,d\tau \tag{3.18}$$

ўринли бўлади. Оператор L нинг эрмит оператори бўлиши учун

$$\int u^*(\hat{L}\upsilon)\,d\tau = \int \upsilon(\hat{L}^*u^*)\,d\tau \tag{3.19}$$

шарт бажарилиши керак эди. Шунинг учун (3.18) ва (3.19) ларни солиштириб, ҳар қандай эрмит операторлари учун

$$\hat{L} = \tilde{\hat{L}}^*,\ \ \hat{L} = \hat{L}^+ \tag{3.20}$$

тенглик ўринли эканлигини топамиз. Кўрсатиш мумкинки, агар L ва M операторларнинг ҳар бири эрмит оператори бўлса,

$$(\hat{L}\hat{M})^{+} = \hat{M}^{+}\hat{L}^{+} \qquad (3.21)$$

тенглик ўринли бўлади. Ҳар қандай оператор ўз-ўзи билан коммутация қилгани учун чизиқли ўзига қўшма L операторининг исталган даражаси ўша турдаги оператор бўлиб ҳисобланади

$$\hat{L}^{n} = \underline{\hat{L}\cdot\hat{L}\cdot.....\hat{L}}.$$

3.4. Квант механикасида физикавий катталикларнинг операторлари

Квант механикадаги физикавий катталикларнинг операторларининг кўринишлари билан танишамиз. Классик физикада L катталикка квант механикадаги чизиқли эрмит оператори L ни мос қўйиш қоидаси бор. Одатда физикавий катталикнинг классик ифодаси каноник (ихчам) ёзилади, унинг ўзгарувчилари бўлиб координаталар ва импульслар ўйнайди. Масалан, $U(x, y, z, t)$ - потенциал майдонда харакат қилаётган моддий нуқтанинг тўла энергияси Гамилтон функцияси дейилади ва у

$$H = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + U(x, y, z, t) \qquad (3.18)$$

кўринишда ёзилади. Классик функциядан тўла энергияни квантомеханик оператори (гамилтониан) га ўтиш учун каноник ўзгарувчиларни уларга мос бўлган операторларга алмаштириш керак:

$$x \to \hat{x},\ y \to \hat{y},\ z \to \hat{z},\ \text{âà}\ P_x \to \hat{P}_x,\ P_y \to \hat{P}_y,\ P_z \to \hat{P}_z \qquad (3.19)$$

$$x \to \hat{x},\ y \to \hat{y},\ z \to \hat{z},\ \text{âà}\ P_x \to \hat{P}_x,\ P_y \to \hat{P}_y,\ P_z \to \hat{P}_z \qquad (3.20)$$

Координата оператори. Координата оператори энг оддий оператор бўлиб, функцияни координата операторига кўпайтириш керак, яъни: $\hat{x}\,\psi(x, y, z) = x\,\psi(x, y, z)$ ёки қисқача

$$\hat{x} = x,\ \hat{y} = y,\ \hat{z} = z \qquad (3.21)$$

фақат координата функцияси бўлган потенциал энергия учун ҳам

$$\hat{U}(x,y,z) = U(x,y,z) \qquad (3.22)$$

тенглик ўринлидир.

Импульс оператори. Импульс операторининг x, y, z ўқлар бўйича проекциялари қуйидаги кўринишга эга

$$P_x \to \hat{P}_x = -i\,h\frac{\partial}{\partial x},\quad P_y \to \hat{P}_y = -i\,h\frac{\partial}{\partial y},\ P_z \to \hat{P}_z = -i\,h\frac{\partial}{\partial z} \qquad (3.23)$$

Импульс операторининг компонентлари қуйидаги векторни ҳосил қилади

$$\hat{\vec{P}} = -i\,h\left(\frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}\right) = -i\,h\,\nabla \qquad (3.24)$$

$\vec{i},\vec{j},\vec{k}$ - ортлар ва ∇ - набла оператори ёки

$$\hat{P} = -ih\,\vec{\nabla} \qquad (3.25)$$

шаклда ёзилди. Импульс оператори ва координата операторлари жойлаштириш қоидаларига бўйсунади. Бу қоидаларга риоя қилиш ҳисоблашларни осонлаштиришга ёрдам беради. ψ (x,y,z) тўлқин функция бўлсин, у ҳолда бу функция учун қуйидаги муносабатлар ўринли бўлади

$$x\,(P_x\psi) = x\,(-ih\frac{\partial}{\partial x}\psi) = -ih\,x\frac{\partial\psi}{\partial x} \qquad (3.26)$$

$$P_x\,(x\psi) = -ih\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -ih\,x\frac{\partial\psi}{\partial x} - ih\psi \qquad (3.27)$$

(3.26) дан (3.27) ни айирсак $(x\,\hat{P}_x - \hat{P}_x\,x)\,\psi = ih\,\psi$ ёки

$$x\,\hat{P}_x - \hat{P}_x\,x = ih \qquad (3.28)$$

Худди шунга ўхшаш

$$y\,\hat{P}_y - \hat{P}_y\,y = i\,h, \qquad (3.29)$$

$$z\,\hat{P}_z - \hat{P}_z\,z = i\,h. \qquad (3.30)$$

ифодаларни ҳосил қиламиз. (3.28), (3.30) жойлаштириш қоидаларига Гейзенбергнинг жойлаштириш (ўрнини алмаштириш) муносабатлари дейилади. Шунингдек

$$x\hat{P}_y - \hat{P}_y x = 0,$$
$$y\hat{P}_z - \hat{P}_z y = 0, \qquad (3.31)$$
$$z\hat{P}_y - P_x z = 0.$$

муносабатларни ҳам осон топиш мумкин. Умуман олганда исталган F(x,y,z) функция учун

$$F\hat{P}_x - P_x F = ih\frac{\partial F}{\partial x},$$
$$F\hat{P}_y - \hat{P}_y F = ih\frac{\partial F}{\partial y}, \qquad (3.32)$$
$$F\hat{P}_z - \hat{P}_z F = ih\frac{\partial F}{\partial z}.$$

(3.28), (3.30) ва (3.32) муносабатлардан кўрамизки бир вақтда импульсни ва уни қўшма бўлган координатани аниқлаш мумкин эмас *x* ва $\hat{P}_x$ операторлар нокоммутатив операторлардир. Бу муносабат ноаниқлик муносабатини ҳам характерлайди. Ох ўқига нисбатан импульс проекцияси операторининг хусусий қиймати ва хусусий функциясини аниқлайлик. Импульс операторининг хусусий функцияларга нисбатан тенгламаси

$$\hat{P}_x\ \psi = P_x\ \psi$$

бунда P_x -хусусий қиймат $\hat{P}_x = -ih\frac{\partial}{\partial x}$ бўлгани учун

$$-ih\ \frac{\partial\psi}{\partial x} = P_x\psi$$

Интегралласак

$$\psi_{P_x}(x) = N\exp\left[i\frac{P_x x}{h}\right].$$

N - доимий сон. Бу ечим ҳамма жойда чекли бўлгани учун P_x -исталган ҳақиқий сон бўлиши керак. Шу сабабга кўра P_x ни қиймати узлуксиз, яъни

$$-\infty < P_x < +\infty$$

ψ_{P_x} ни δ-функцияга нисбатан нормаллаш натижасида $N=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}$ ни оламиз. $\hat{P}_x$ ни хусусий функцияси

$$\psi_{P_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} e^{i\frac{P_x x}{h}}$$

$$\int \psi^*_{P^1_x}(x)\psi_{\beta_x}(x)dx = \delta(P^1_x - P_x)$$

Демак импульс операторининг хусусий функцияси ясси де-Бройль тўлқинидир.

Энергия оператори. Гамилтон функциясидаги ўзгарувчиларни, уларга мос келган операторлари билан алмаштирамиз:

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(x,y,z) = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y,z)$$

бунда $\nabla^2 = \Delta$ - Лаплас оператори ёки Лапласиан дейилади. $\hat{H}$-тўла энерия оператори ёки гамильтиан дейилади. Кинетик энергия оператори

$$\hat{T} = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2$$

Квант механикада гамильтониан алоҳида ўрин тутади. У системанинг хоссасини аниқлайди.

Импульс моментининг оператори. Классик механикада импульс моменти $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ кўринишга эга. Радиус-векторнинг импульсга векториал кўпайтмаси импульс моменти дейилади. Импульс моментини тўғри чизиқли координата системасида қуйидагича ёзамиз

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

$$\hat{L}_y = \hat{P}_x z - \hat{P}_z x = ih\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right),$$

$$\hat{L}_z = \hat{P}_y x - \hat{P}_x y = ih\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

ва

$$\hat{L}^2 = \hat{L}^2_x + \hat{L}^2_y + \hat{L}^2_z = -h^2\left\{\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)^2\right\}.$$

Импульс моментининг координаталари учун жойлаштириш (ўрин алмаштириш) қоидасини топамиз $\hat{G} = \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y$ коммутаивлигини ҳисоблайлик:

$$\hat{L}_y\hat{L}_z = (\hat{P}_z x - \hat{P}_x z)(\hat{P}_x y - \hat{P}_y x) = y\,\hat{P}_z x\,\hat{P}_x - z\,y\,\hat{P}^2_x - x^2\,\hat{P}_z\,\hat{P}_y + z\,\hat{P}_y\,\hat{P}_x x,$$

шунингдек,

$$\hat{L}_z \hat{L}_y = y \hat{P}_z \hat{P}_x x - z y \hat{P}_x^2 - x^2 \hat{P}_z \hat{P}_y + z \hat{P}_y x \hat{P}_x ,$$

у ҳолда

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = y\hat{P}_z (x\hat{P}_x - \hat{P}_x x) + z\hat{P}_y (\hat{P}_x x - x\hat{P}_x)$$

ёки

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i h (y\hat{P}_z - \hat{P}_y z) = i h \hat{L}_x ;$$

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i h \hat{L}_x ,$$
$$\hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i h \hat{L}_y ,$$
$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i h \hat{L}_z .$$

.

Импульс моментининг компонентлари нокоммутатив операторлардир. Аксинча

$$\hat{L}_x \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_x = 0 ; \ \hat{L}_y \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_y = 0 ; \hat{L}_z \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_z = 0$$

Тўла импульс моментини квадрати ва унинг битта проекциясининг кўпайтмаси коммутативдир. Бу қоидалардан шуни кўрамизки импульс моментининг проекциялари $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ ларни бир вақтда ўлчаш мумкин эмас. Энди импульс моменти проекциясини бирор ўққа нисбатан йўналишини ва мумкин бўлган абсолют қийматларини аниқлайлик. Бу масалани қутбий координаталари системасида ечиш қулай. Қутбий координата системасида

$$x = r \sin\theta \cos\varphi; \ y = r \sin\theta \sin\varphi; \ z = r \cos\theta$$

бунда $\theta -$радиус вектор $\vec{r}$ билан *z*-ўқ орасидаги бурчак, $\varphi -$эса Ох ўқида ху текисликда ҳисобланадиган бурчак. Декарт координата системасидан қутбий координата системасига ўтиш формулалари қуйидагича бўлади:

$$\hat{L}_x = i h (\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}); \hat{L}_y = - i h (\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \mathrm{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi});$$
$$\hat{L}_z = - i h \frac{\partial}{\partial\varphi}; \hat{L}^2 = - h^2 \nabla^2_{\theta\varphi}$$

Бунда

$$\nabla^2_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\ \frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\ \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad (3.33)$$

$\nabla^2_{\theta\varphi}$ – Лаплас оператори (сфера учун) дейилади. Операторлар фақат θ, φ бурчакларга таъсир этгани учун тўлқин функцияга

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

кўринишда ёзиш мумкин. $\hat{L}^2$ -оператори учун тенглама

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

кўринишда ёзилади. Бу функцияга (3.33) ни олиб келиб қўйсак, λ деб белгиласак

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

тенгламани оламиз. Бу тенгламани ечими

$$\lambda = e\ (e+1)$$

кўринишда бўлади. Ҳар бир е учун $2\ e+1$ та ечим мавжуд. L^2 ни хусусий қийматлари

$$L^2_e = h^2\ e\ (e+1);\ \ e = 0, 1, 2, 3, ...$$

кўринишда бўлади. Хусусий функцияси эса

$$\psi_{em}(\theta, \varphi) = Y_{em}(\theta, \varphi);\ \ m = 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm e\ .$$

Энди

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

ни ечайлик: $-i\,h\dfrac{\partial\psi}{\partial\varphi}=L_z\,\psi$. Бу тегламани ечими $L_z=h\,m$, $m=0,\pm1,...,\pm e$ кўринишда бўлади.

Кинетик энергия оператори.

Классик механикада зарранинг кинетик энергияси

$$T=\frac{P^2}{2\,\mu}=\frac{1}{2\,\mu}\;(P_x^2+P_y^2+P_z^2)\;.$$

Кинетик энергия оператори

$$\hat{T}=\frac{\hat{P}^2}{2\mu}=\frac{1}{2\mu}\;(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2+\hat{P}_z^2)=-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\,. \qquad (3.34)$$

μ-келтирилган масса. Кинетик энергия тенгламаси

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

$$\psi_T(x,y,z)=\frac{1}{(2\,\pi\,h)^{3/2}}e^{i\frac{xP_x+yP_y+zP_z}{h}}\;.$$

Қутбий координата системасида

$$\hat{T}_r=-\frac{h^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \qquad (3.35)$$

ва

$$\hat{T}=\hat{T}_r+\frac{\hat{L}^2}{2\mu\,r^2}\;. \qquad (3.36)$$

$\hat{T}_r$-радиус вектори боғлиқ кинетик энергия оператори, $\dfrac{\hat{L}^2}{2\,\mu\,r^2}$-трансверсал ҳаракат таъсир кинетик энергия оператори.

3.5. Эволюция оператори ва унинг хусусиятлари

Квант-механик тизимларни тавсифлашда иккита ёндашув мавжуд. Улардан бирига кўра, тизим эволюцияси тўлқин функциянинг вақтга боғлиқ бўлган ҳолати ёрдамида тавсифланади. Иккинчи ҳолга кўра - оператор вақтга боғлиқ бўлади, аммо тўлқин функция чегаралангандир. Классик механикада, тизимнинг ҳаракати фазо траекторияси бўйлаб нуқта ҳаракати билан тавсифланади. Классик механикада ўзгарувчиларни каноник алмаштириш тушунчаси мавжуд: биз динамик импульс $\vec{p}$ ва динамик координата $\vec{q}$ ҳақида аниқ тасаввурга эга эмасмиз, чунки битта координатадан иккинчисига каноник алмаштириш қоидаси мавжуд, яъни

$$\vec{p},\vec{q} \to \vec{P},\vec{Q}.$$

Моддий нуқтанинг ҳаракатини вақтнинг бошланғич моментидаги координаталари ва вақтнинг охирги моментидаги координаталарини каноник алмаштириш ёрдамида тавсифлаш мумкин. Яъни, классик тизим эволюциясини каноник алмаштиришлар ёрдамида тасвирлаш мумкин. Қуйидаги Шредингер тенгламаси

$$ih\,\psi\,(q,t)=\hat{H}\,\psi\,(q,t)$$

ни кўриб ўтамиз. Бу тенгламанинг ечими тизимнинг эволюциясини тавсифловчи тўлқин функцияни топишга имкон беради

$$\psi = \psi(\vec{q},t).$$

Вақтнинг дастлабки ҳолатидаги тулқин функция

$$\psi = \psi(\vec{q},t_0),$$

кўринишда бўлса, (бу ерда t_0 вақтнинг дастлабки моменти), у ҳолда тизим эволюциясини тавсифлайдиган алмаштриш

$$\psi(\vec{q},t) = \hat{U}(t,t_0)\psi(\vec{q},t_0). \qquad (3.37)$$

ўринли бўлади. Оператор $\hat{U}$ маълум бўлса, биз бошланғич ҳолатдан якуний ҳолатга ўтишимиз мумкин. Охирги тенгликни Шредингер тенгламасига қўямиз

$$ih\,\hat{U}(t,t_0)\,\psi(\vec{q},t_0) = \hat{H}\,\hat{U}(t,t_0)\,\psi(\vec{q},t_0)$$

Бу ерда опрератор $\hat{U}(t,t_0)$- динамик $\vec{q}$ координаталарга боғлиқ. Ўзгарувчиларни охирги тенгликнинг бир томонига ўтказиб, тўлқин функцияни қавсдан ташқарига чикарамиз

$$ih\dot{\hat{U}}(t,t_0) = \hat{H}\hat{U}(t,t_0).$$

Агар $\hat{H}$ оператор вақтга боғлиқ бўлса, масала мураккаблашади ва биз бу ҳолда аниқ ечимга эга бўла олмаймиз. Шунинг учун стационар майдонни кўриб ўтамиз ва

$$\dot{\hat{H}} = 0$$

деб оламиз. Бундай ҳол учун оператор $\hat{U}$ қуйидаги кўринишга эга бўлади

$$\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{h}\hat{H}t\right).$$

Шредингернинг тавсифлаш усулини кўриб чиқамиз, унда вақтга боғлиқлик ψ- функцияга юклатилади. Ушбу юкламани $\hat{U}$ эволюция операторига ўтказиш ва у орқали ψ- функцияни топиш мумкин бўлади. Аммо кўпгина ҳолларда, операторлар аниқ вақтга боғлиқ бўлмайди, яъни

$$\dot{\hat{A}} = 0.$$

Бу ҳолатда шундай вазият юзага келадики, ψ функция вақтга боғлиқ бўлади. Бинобарин, тизимнинг эволюцияси ҳақидаги барча маълумотларни ушбу ψ тўлқин функция ёки вақт оператори орқали олиш мумкин бўлади. Эволюция операторининг хусусиятлари қуйидагича:

1. Оператор ушбу тенгламани

$$ih\hat{U}(t, t_0) = \hat{H}\hat{U}(t, t_0),$$

қаноатлантиради.

2. $\dot{\hat{H}} = 0$ бўлса, у $\hat{U} = \exp\left(-\frac{i}{h}\hat{H}t\right)$ кўринишга эга бўлади.

3. $\hat{U}$ - унитар оператор.

Юқоридаги фаразларни исботлаймиз. Ушбу тенглама $ih\dot{\psi} = \hat{H}\psi$ норманинг сақланишини таъминлайди, яъни

$$(\psi, \psi) = \text{const}.$$

Нормани исталган вақтда олиш мумкин. t_0=0 деб фараз қиламиз ва (3.37) тенгламанинг нормаллаштириш шарти

$$\psi(q, t_0) \equiv \psi(q) = \psi.$$

$$(\hat{U}\psi, \hat{U}\psi) = (\psi, \hat{U}^+\hat{U}\psi) = \text{const} = (\psi, \psi)$$

кўринишга келади. Шундай қилиб

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{I},$$

$\hat{U}$ - унитар оператор эканлиги келиб чиқади.

3.6. Гейзенберг усули. Оператор учун ҳаракат тенгламаси

Гейзенберг ёндашувини кўриб ўтамиз: биз тўлқин функцияни маълум бир вақт t_0 га боғлиқ бўлсин ҳисоблаймиз, яъни ψ-функция қуйидаги тенгламани қаноатлантирсин

$$\psi = \psi(q,t_0) = \psi(q),$$

ёки

$$\psi_S = \hat{U}\psi_H,$$

Бу ерда ψ_S- Шредингер тасаввуридаги ва ψ_H- Гейзенберг тасавуридаги тўлқин функциялар. Вақт ўтиши билан тизим ўзгаради ва бу ўзгариш $\hat{U}$ операторнинг ўзгариши билан боғлиқ бўлиши шарт

$$\hat{A}_H = \hat{U}^+\hat{A}\hat{U}.$$

Эслатиб ўтамиз, тасаввурлар назариясида қуйидаги қоида мавжуд. Функцияни қуйидагича

$$\psi(q) = \hat{S}C(f)$$

ўзгартириш учун ушбу операторнинг ўзгариши талаб этилади

$$\hat{A}(q) = \hat{S}\hat{A}(f)\hat{S}^+.$$

Биз Гейзенберг тасавурида кўриб турганимиздек, функция $\psi_H = \psi(q,t_0)$ аниқ вақтга боғлиқ эмас, лекин оператор вақтга боғлиқ

$$\hat{A}_H = \hat{U}^+(t,t_0)\hat{A}\hat{U}(t,t_0).$$

Оператор $\hat{A}_H$ ни ажратиб ёзамиз

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \dot{\hat{U}}^+\hat{A}_S\hat{U} + \hat{U}^+\dot{\hat{A}}_S\hat{U} + \hat{U}^+\hat{A}_S\dot{\hat{U}} \qquad (3.38)$$

ва эволюция оператори учун ушбу тенгламани ёзамиз

$$ih\dot{\hat{U}} = \hat{H}\hat{U}$$

Қуйидаги

$$(ih\dot{\hat{U}})^{+}=(\hat{H}\hat{U})^{+}$$

$$-ih\dot{\hat{U}}^{+} = \hat{U}^{+}\hat{H}^{+} = \hat{U}^{+}\hat{H}$$

$$\dot{\hat{U}}^{+} = \frac{i}{h}\hat{U}^{+}\hat{H},$$

$$\dot{\hat{U}} = -\frac{i}{h}\hat{H}\hat{U}.$$

тенгликлардан фойдаланиб ва уларни (3.38) олиб келиб қўямиз

$$\frac{d\hat{A}_{H}}{dt} = \frac{i}{h}\dot{\hat{U}}^{+}\hat{H}\hat{A}_{S}\hat{U} + \hat{U}^{+}\dot{\hat{A}}_{S}\hat{U} - \frac{i}{h}\hat{U}^{+}\hat{A}_{S}\hat{H}\dot{\hat{U}} =$$

= { $\hat{U}^{+}$ ва $\hat{U}$, ҳадларни қавс ташқарисига чиқариш мумкин} $= \hat{U}^{+}[\frac{i}{h}\hat{H}\hat{A}_{S} + \dot{\hat{A}}_{S} - \frac{i}{h}\hat{A}_{S}\hat{H}]\hat{U} = \hat{U}^{+}[\dot{\hat{A}}_{S} + \frac{i}{h}\{\hat{H}\hat{A}_{S}\}]\hat{U} =$

= {квадрат қавс ичида алмаштириш амалга оширишга имкон берувчи оператор мавжуд ва ундан фойдалани

$$\hat{a}_{H} = \hat{U}^{+}\hat{a}_{S}\hat{U},$$

$$\dot{\hat{a}}_{H} \equiv \hat{U}^{+}\dot{\hat{a}}_{S}\hat{U}\} =$$

$$= \dot{\hat{a}}_{H} + \frac{i}{h}\{\hat{H}_{H}, \hat{a}_{H}\}.$$

Оператор учун ҳаракат тенгламасини ҳосил қилиб олдик

$$\frac{d\hat{a}_{H}}{dt} = \dot{\hat{a}}_{H} + \frac{i}{h}\{\hat{H}_{H}, \hat{a}_{H}\}$$

Шредингер тасаввури квант физикасининг деярли барча жабҳаларида кенг тарқалган, аммо Гейзенберг тасаввури фақатгина чекли тизимлар учун ўринлидир. Бир тасавурдан бошқа тасаввурга ўтишда кузатув натижалари ўзгармай қолади. Бундай тасаввурлар инвариантлардир.

3.7. Операторлар матрицаси

Дискрет спектрли оператор учун қуйидаги тенгламани кўриб чиқамиз

$$\hat{a}\psi_{i} = a_{i}\psi_{i} \qquad (3.39)$$

Операторнинг матрица элементи тушунчасини киритамиз

$$a_{ji} \equiv (\psi_{j}, \hat{a}\psi_{i})$$

(3.39) тенгликнинг чап ва ўнг томонларини ψ_j кўпайтирамиз

$$(\psi_j, \hat{a}\psi_i) = (\psi_j, a_i\psi_i)$$

Хусусий қийматларни скаляр кўпайтмадан ташқарига чиқарамиз

$$(\psi_j, \hat{a}\psi_i) = a_i(\psi_j, \psi_i),$$

чунки ψ_i функция нормаллаштириш шартини

$$(\psi_j, \hat{a}\psi_i) = a_i\delta_{ji}$$

қаноатлантиради. У ҳолда (3.39) тенглик қуйидаги кўринишга эга бўлади

$$a_{ji} = a_i\delta_{ij}$$

Ечимни топиш матрицани диагоналлаштириш муаммосига келди. $\hat{a}$ операторнинг ихтиёрий функцияга таъсирини кўриб ўтамиз

$$\hat{a}\psi = \{\ \psi$$

функцияни операторнинг хусусий функциялари бўйича қаторга ёямиз}

$$= \hat{a}\sum C_i\psi_i = \sum C_i\hat{a}\psi_i \equiv \psi' = \sum C'_j\psi_j .$$

Энди C'_j коэффициентларни топамиз. Охирги тенгликни ψ_k га кўпайтириб

$$\sum_i C_i(\psi_k, \hat{a}\psi_i) = \sum_j C'_j(\psi_k, \psi_j) = C'_k .$$

$$\sum_i C_i a_{ki} = C'_k \qquad (3.40)$$

муносабатларга эга бўламиз. Бу ерда C' коэффициентлар $\hat{a}$ операторнинг C коэффициентларга таъсири натижасида ҳосил қилинди, яъни

$$C' = \hat{a}C$$

Кўриш мумкинки, ҳосил қилинган спектр дискретдир. Агар (3.40) ни (3.39) га қўйсак, у ҳолда

$$\hat{a}C = aC ,$$

Демак, C векторлар матрицанинг диагоналлигини исботлайди. Энди оддийлик учун энергия операторининг матрица элементлари диагоналлик шартини кўриб ўтамиз. "E"– тасаввур - бу энергия матрицаси диагонал бўлган тасаввурдир. Бинобарин, $\hat{H}$ оператор дискрет спектрга эга бўлганлиги сабабли дискрет ҳолатни тавсифловчи Шредингер тенгламасини кўриб чиқамиз

$$\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i .$$

Бу тенгламани координата тасаввурида ечамиз. Матрица элементи

$$a_{ij} = (\psi_i, \hat{a}\psi_j) .$$

$\hat{H}$ оператор матрицаси эса

$$H_{ij} = E_i\delta_{ij} .$$

кўринишга эга бўлиб, бу ерда иштирок этаётган энергия матрицаси диагоналдир. Бундан ташқари, ψ - функция динамик ўзгарувчилар ва вақтнинг тўлиқ тўпламининг функциясидан иборат. Агар энергияни ушбу ўзгарувчилардан бири сифатида оладиган бўлсак, у ҳолда $n-1$ ўзгарувчи қолади. Қуйидаги функцияни кўриб чиқайлик

$$\psi(q, t_0) \equiv \psi(q) .$$

$$\psi(\mathbf{q}) = \sum C_i\psi_i = \hat{S}C \qquad (3.41)$$

C катталикни қуйидагича ёзиш мумкин

$$C = C(E) ,$$

ёки

$$C = C(E, \vec{k}) .$$

Агар $\vec{k}$ аргументни ташлаб юборадиган бўлсак, у ҳолда

$$C = C(E) = C_i ,$$

бу ерда i E_i энергия қийматларининг сони. Шундай қилиб, (3.41) каноник алмаштириш тасаввурларнинг ўзгаришини тавсифлайди: $\vec{q}$ координата тасаввуридан E тасаввурига ўтишни ифодалайди. Бу ерда тўлқин

функциянинг ролини C_i коэффициентлар ўйнайди. Бинобарин, ушбу тўлқин функцияларининг ўзгаришига мос ҳолда операторлар ҳам ўзгаради, яъни

$$\hat{a}(E,\vec{k}) = \hat{S}^{+}\hat{a}(\vec{q})\hat{S}\,.$$

Оператор ядроси яқинида $\vec{k}$ аргументни ташлаб юборадиган бўлсак

$$A(E,E_1) = \int\int S^{+}(E,q)A(q,q_1)S(q_1,E_1)dqdq_1 = (\psi_E,\hat{a}\psi_{E_1})^{o}a_{E,E_1}\,,$$

тенгликни оламиз. Бу ерда S энергия операторининг координата тасаввуридаги хусусий функциясидир. Дискрет спект учун қуйидаги муносабатни ёзишимиз мумкин

$$a_{E,E_1} \Rightarrow a_{ij}\,,$$

У ҳолда E тасаввурда оператор ядро $\hat{a}$ си ролини a_{ij} матрица ўйнайди. Демак, $\psi(q)$ функциядан C_i функцияга ва $\hat{a}(q)$ оператордан a_{ij} операторга ўтамиз. Агар $\hat{a}$ операторнинг C функцияга таъсирини кўрадиган бўлсак

$$\hat{a}C_i = a_{ij}C_j$$

У ҳолда, $C_i(t)$ коэффициентлар қуйидагича аниқланади

$$C_i(t) = (\psi_i, \Psi)\,,$$

Бу ерда ψ_i - энергия операторининг хусусий функцияси; Ψ - вақтга боғлиқ функция, яъни.

$$\Psi = \Psi(q,t)\,.$$

3.8. Шредингер тенгламасининг матрица кўриниши

Биз қараётган ҳол учун Шредингер тенгламаси:

$$ih\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$$

қуйидагича ёзилади

$$ih\dot{C}_k(t) = \sum_l H_{kl}C_l(t)\,,$$

Бу ерда H_{kl}- энергия операторининг матрица элементлари. Охирги тенгламанинг ечимини топиш учун энергия тасаввуридаги оператор $\hat{H}$ стационар бўлиши лозим, яъни $\dot{\hat{H}} = 0$. У ҳолда масала

$$ih\dot{C}_k(t)=E_kC_k(t) \qquad (3.42)$$

тенгламанинг ечимини топишга келади. Акс ҳолда бу вазифани ечиш анча мураккаблашади, чунки $E_k = E_k(t)$ вақтга боғлиқдир. Демак, $\dot{\hat{H}} = 0$ ҳол учун

$$H_{kl} = E_k\delta_{kl},$$

эга бўламиз. (3.42) тенгламанинг ечими

$$C_k(t) = C_k(0)\exp[-\frac{i}{h}E_kt].$$

кўринишда бўлади. Агар энергия оператори диагонал бўлса, у ҳолда Шредингер тасаввуридан Гейзенберг тасаввурига ўтиш мумкин бўлади. Бу ҳолда оператор вақтга боғлиқ бўлади ва буни энергия тасаввурида қуйидагича ифодалаш мумкин

$$\Psi_S = \hat{S}\hat{U}\psi_H.$$

$\hat{U}$ - вақтга боғлиқликни операторга ўтишни, $\hat{S}$ - энергия тасаввурига ўтишни тавсифлайди. Бу ерда қуйидаги оператор

$$\hat{B} = \hat{S}\hat{U}.$$

муҳим ҳисобланади. У ҳолда оператор

$$\hat{a}_H(E)=\hat{B}^+\hat{a}_S(q)\hat{B}.$$
$$\hat{a}_H(E)=\hat{U}^+\hat{S}^+\hat{a}_S(q)\hat{S}\hat{U},$$

ёзиш мумкин, чунки $\hat{S}$ ва $\hat{U}$ операторлар коммутативлик хоссасига эга

$$\hat{S}\hat{U} = \hat{U}\hat{S},$$

У ҳолда

$$\hat{a}_H(E) = \hat{S}^+\hat{U}^+\hat{a}_S(\mathbf{q})\hat{U}\hat{S},$$
$$\hat{a}_H(E)=\hat{S}^+\hat{a}_H(q)\hat{S}.$$

Бу ердан $\hat{a}_H(E)$ операторни матрица орқали ифодалаш амали келиб чиқади

$$\hat{a}_H(E) \Rightarrow a_{ij}^H = (\psi_i, \hat{a}_H \psi_j) = \{\text{оператор (стационар ҳолат учун } \hat{H}: \dot{\hat{H}} = 0)\ \hat{U}:$$

$$\hat{U} = \exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t]\ \}\ (\psi_i, \exp[-\frac{i}{h}\hat{H}t]\hat{a}_S \exp[-\frac{i}{h}\hat{H}t]\psi_j) = =$$

$$\hat{U}^+ = (\exp[\frac{i}{h}\hat{H}t])^+ = \exp[-\frac{i}{h}\hat{H}^+ t] = \exp[-\frac{i}{h}\hat{H}t]\ \{\text{ чунки } \hat{H} \text{ унитар оператор}$$

$$\text{ҳисобланади, у ҳолда } \exp[-\frac{i}{h}\hat{H}t]\psi_j = \exp[-\frac{i}{h}E_j t]\psi_j\ \}$$

$$= (\psi_i, \exp[-\frac{i}{h}E_i t]\hat{a}_S \exp[-\frac{i}{h}E_j t]\psi_j) =$$

$$= \exp[\frac{i}{\hbar}(E_i - E_j)t](\psi_i, \hat{a}_S \psi_j) = \{\ \omega_{ij} = \frac{E_i - E_j}{h} \text{ частотани киритдик}\} = \exp[i\omega_{ij}t]\hat{a}_{ij}^S.$$

Охирги ифодани энергия тасаввурида қуйидагича

$$a_{ij}^H = e^{i\omega_{ij}t} a_{ij}^S$$

ёзиш мумкин. Айнан шу усулда чизиқли гармоник осциллятор масаласини кўриб чиқамиз. Бу ҳолда Гейзенберг тасаввурида қуйидаги муносабат ўринли бўлади

$$\frac{d}{dt}(\psi_i, \hat{a}_H \psi_j) = (\psi_i, \frac{d}{dt}\hat{a}_H \psi_j).$$

Ҳаракат тенгламаси

$$\frac{d}{dt}\hat{a}_{ij}^H = (\psi_i, \frac{d}{dt}\hat{a}_H \psi_j).$$

Бу маълум бир ҳаракат тенгламаси. Кўриб чиқайлик

$$\frac{d}{dt}\hat{a}_{ij}^H = i\omega_{ij}\hat{a}_{ij}^H.$$

Матрица элементлари $(\hat{\xi}, \hat{p}_\xi, \hat{h})$ ни ҳисоблаймиз. Фараз қилайлик, нолга тенг бўлмаган матрица элементлари

$$\xi_{j\pm1,j} \neq 0.$$

берилган бўлсин. У ҳолда $\xi_{j,j\pm1}$ ва $\xi_{j\pm1,j}$ операторлар ўртасида қуйидаги боғланиш мавжуд

$$\hat{\xi}^{+} = \hat{\xi}$$

$$(\xi^{+})_{ij} = \xi_{ij} \qquad (3.43)$$

Матрица шаклида

$$\xi_{ij}^{+} = \xi_{ji}^{*}. \qquad (3.44)$$

(3.44) ни (3.43) га қўйиб

$$\xi_{ji}^{*} = \xi_{ij}.$$

ни ҳосил қиламиз. Координата оператори ҳақиқий бўлгани учун, биз қуйидаги тенгликка эга бўламиз

$$\xi_{ji} = \xi_{ij}.$$

Демак, координата матрицалари асосий диагоналга нисбатан симметрик экан. Олдинги параграфдаги матрицани кўриб чиқамиз ва унда $k = j \pm 1, i \pm 1$ шарт бажарилгандагина нолга тенг бўлмаган ҳадлар мавжуд деб фараз қиламиз. Аввало i=j ва унга мос келувчи $\omega_{ik} = -\omega_{ki}$ ҳолни кўриб ўтамиз, яъни

$$\sum_{k} (\xi_{ki}^{2}\omega_{ki} - \omega_{ik}\xi_{ik}^{2}) = 1,$$

У ҳолда

$$\sum_{k} \xi_{ki}^{2}\omega_{ki} = \frac{1}{2},$$

ва $k = i \pm 1$ эканлигини ҳисобга олиб ҳамда $\omega_{i\pm1,i} = \pm 1$ эканлигидан, қуйидаги тенгламаларни ҳосил қиламиз

$$\xi_{i+1,i}^{2}(+1) + (-1)\xi_{i-1,i}^{2} = \frac{1}{2}$$

$$\xi_{i+1,i}^{2} - \xi_{i-1,i}^{2} = \frac{1}{2}.$$

Масала бир жинсли эканлигини ҳисобга олсак ҳолатлар сони энергетик сатҳларга тўлиқ мос келишини кўрамиз. Қуйидаги асосий i=0 ҳолатни кўриб чиқамиз

$$\xi_{1,0}^2 - \xi_{-1,0}^2 = \frac{1}{2}.$$

$$\xi_{-1,0} = (\psi_{-1}, \hat{\xi}\psi_0) = 0.$$

$$\psi_{-1} \equiv 0.$$

Бундай ҳолатлар мавжуд эмас, чунки

$$\xi_{1,0} = \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}.$$

Энди $i = 1$ ҳолни кўрамиз. У ҳолда

$$\xi_{2,1}^2 - \xi_{0,1}^2 = \frac{1}{2},$$

аммо

$$\xi_{0,1} = \xi_{1,0} = \sqrt{\frac{1}{2}},$$

бўлганлиги учун, ушбу тенглик

$$\xi_{2,1} = (2 \cdot \frac{1}{2})^{1/2},$$

ўринли бўлади ва ҳоказо. Ҳар бир n учун

$$\xi_{n,n-1}^2 = n \cdot \frac{1}{2},$$

$$\xi_{n,n-1} = \left(n \cdot \frac{1}{2}\right)^{1/2}.$$

эканлигини ҳисобга олсак, координата операторининг матрица элементларини умумий тарзда қуйидагича ёзишимиз мумкин

$$\xi_{kl} = \xi_{l+1,l}\delta_{k,l+1} + \xi_{l-1,l}\delta_{k,l-1} = \left(\frac{l+1}{2}\right)^{1/2}\delta_{k,l+1} + \left(\frac{l}{2}\right)^{1/2}\delta_{k,l-1}.$$

Импульс оператори $\hat{p}_\xi$ учун матрица элементларини топамиз. Бунинг учун уни қуйидагича ёзамиз

$$p_{\xi,ij} = \frac{d}{dt}\xi_{ij} = i\xi_{ij}\omega_{ij}.$$

$$p_{\xi,ij} = p^{*}_{\xi ji} = -p_{\xi,ij},$$

Импульс оператори $\hat{p}_{\xi}$ учун антисиметрик матрицани ёзиб оламиз

$$p_{\xi,kl} = i\left(\frac{l+1}{2}\right)^{1/2}\delta_{k,l+1} - i\left(\frac{l}{2}\right)^{1/2}\delta_{k,l-1}.$$

ёки

$$p_{\xi n,n-1} = -p_{\xi n-1,n} = i\left(\frac{n}{2}\right)^{1/2}.$$

Ушбу оператор учун матрица элементлари $\hat{h}$ қуйидаги кўринишга эга

$$2h_{kl} = \sum_{n}(p_{\xi kn}p_{\xi nl} + \xi_{kn}\xi_{nl}) = 2(k+\frac{1}{2})\delta_{kl}.$$

Бу ерда диагонал матрицани сақлаб қоламиз

$$h_{kl} = (k+\frac{1}{2})\delta_{kl}.$$

Демак, асосий ҳолат $k=0$ координата тасаввурида ψ_0 функция ва C_0 энергия орқали ифодаланар экан. Бу ҳолат учун нолинчи тебранишга мос келувчи энергия мавжуд

$$E_0 = h\omega\left(0+\frac{1}{2}\right) = \frac{h\omega}{2}.$$

ψ_0 - функция Эрмит полинмлари орқали ифодаланади

$$\psi_0(x) = \pi^{-1/4}e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

Асосий ҳолатдаги координатанинг эҳтимоллик зичлиги қуйидагича кўринишга эга бўлади

$$|\psi_0|^2 = \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi}}.$$

Назорат саволлари:

1. Қандай операторларга чизиқли ва қандай операторларга эрмит операторлари дейилади?
2. Нима учун квант механикасида чизиқли ва эрмит операторлари ишлатилади?
3. Хусусий функцияга қандай шартлар юкланади ва нима учун?
4. Эрмит операторлари хусусий функцияларининг қандай хоссалари мавжуд?
5. Коммутатив ва нокоммутатив операторлар деб қандай операторларга айтилади?

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 масала.

Берилган: а) $x\frac{d}{dx}$, б) $\frac{1}{x}\frac{d}{dx}$, в) $x+\frac{d}{dx}$ операторлари иккинчи даражага кўтарилсин.

Ечиш:

а) $\hat{L}^2\Psi(x)=\left(x\frac{d}{dx}\right)^2\Psi(x)=\left(x\frac{d}{dx}\right)\left(x\frac{d}{dx}\right)\Psi=x\frac{d}{dx}\left(x\frac{d\Psi}{dx}\right)=x\left(\frac{d\Psi}{dx}+x\frac{d^2\Psi}{dx^2}\right)=x\left(\frac{d}{dx}+x\frac{d^2}{dx^2}\right)\Psi(x)$

Демак,

$$\hat{L}^2=\left(x\frac{d}{dx}\right)^2=x\left(\frac{d}{dx}+x\frac{d^2}{dx^2}\right)$$

б)

$$\hat{L}^2\Psi(x)=\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^2\Psi(x)=\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)\Psi=$$

$$=\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x}\frac{d\Psi}{dx}\right)=\frac{1}{x}\left(-\frac{1}{x^2}\frac{d\Psi}{dx}+\frac{1}{x}\frac{d^2\Psi}{dx^2}\right)=\frac{1}{x^3}\left(x\frac{d^2}{dx^2}-\frac{d}{dx}\right)\Psi(x)$$

$$\hat{L}^2=\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^2=\frac{1}{x^3}\left(x\frac{d^2}{dx^2}-\frac{d}{dx}\right)$$

в)

$$\hat{L}^2\Psi(x)=\left(x+\frac{d}{dx}\right)^2\Psi(x)=\left(x+\frac{d}{dx}\right)\left(x+\frac{d}{dx}\right)\Psi=$$

$$=x^2\Psi+x\frac{d\Psi}{dx}+x\frac{d\Psi}{dx}+\Psi+\frac{d^2\Psi}{dx^2}$$

$$\hat{L}^2=\left(x+\frac{d}{dx}\right)^2=x^2+x\frac{d}{dx}+x\frac{d}{dx}+1+\frac{d^2}{dx^2}=x^2+2x\frac{d}{dx}+\frac{d^2}{dx^2}+1$$

*2. Масала***.** Қуйидаги коммутаторлар очиб ёзилсин:

$$\text{а)}\ \left[x,\frac{d}{dy}\right];\qquad \text{б)}\ \left[x,x\frac{d}{dx}\right];$$

Ечиш: Бу мисолларни ечиш учун барча коммутаторларни ихтиёрий функцияга ўнг томондан кўпайтирамиз

а) $\left[x,\frac{d}{dy}\right]\Psi=\left(x\frac{d}{dy}-\frac{d}{dy}x\right)\Psi=x\frac{d\Psi}{dy}-x\frac{d\Psi}{dy}=0,$

чунки

$$\frac{d}{dy}(x\Psi)=\frac{dx}{dy}\Psi+x\frac{d\Psi}{dy}=x\frac{d\Psi}{dy},\qquad \frac{dx}{dy}=0.$$

Демак,

$$\left[x,\frac{d}{dy}\right]=0;$$

б) $$\left[x,x\frac{d}{dx}\right]\Psi=x^2\frac{d\Psi}{dx}-x\frac{d}{dx}(x\Psi)=x^2\frac{d\Psi}{dx}-x\Psi-x^2\frac{d\Psi}{dx}=-x\Psi,$$

$$\left[x,x\frac{d}{dx}\right]=-x.$$

3 Масала. Қуйидаги операторларнинг ўзига қўшма (эрмит оператори) операторлар эканлиги исботлансин:

а) $\hat{P}_x$ б) $\hat{L}_x$

Ечиш: $\hat{A}$ операторнинг ўзига қўшма оператор бўлишлик шарти

$$\int\psi_1^*\hat{A}\psi_2dx=\int\psi_2\hat{A}^*\psi_1^*dx$$

кўринишда ёзилар эди. Шунга кўра:

а) $\hat{A}=\hat{P}_x$

$$\int\psi_1^*\hat{A}\psi_2dx=\int\psi_1^*\hat{P}_x\psi_2dx=-i\hbar\int\psi_1^*\frac{d\psi_2}{dx}dx\Rightarrow$$

$$\Rightarrow -ih\left[\psi_1^*\psi_2\ \Big|_{-\infty}^{\infty}-\int\psi_2\frac{d\psi_1^*}{dx}dx\right]=ih\int\psi_2\frac{d\psi_1^*}{dx}dx=\int\psi_2\hat{P}_x^*\psi_1^*dx \qquad (4)$$

а) $\hat{A}=\hat{L}_x$

$$\begin{gathered}\int\psi_1^*\hat{L}_x\psi_2d\tau=\int\psi_1^*(y\hat{P}_z-z\hat{P}_y)\psi_2dydz=\int\psi_1^*y\hat{P}_z\psi_2dydz-\int\psi_1^*z\hat{P}_y\psi_2=\\=\int ydy\int\psi_1^*\hat{P}_z\psi_2dz-\int zdz\int\psi_1^*\hat{P}_y\psi_2dy=\int y^*dy\int\psi_2\hat{P}_z^*\psi_1^*dz-\int z^*dz\int\psi_2\hat{P}_y^*\psi_1^*dy=\\=\int\psi_2(y^*\hat{P}_z^*-z^*\hat{P}_y^*)\psi_1^*dydz=\int\psi_2\hat{L}_x^*\psi_1^*d\tau\end{gathered} \qquad (7)$$

4 Масала. Агар хусусий функция $\psi(x)=\psi(x+a)$ (бу ерда a - доимий сон) бир қийматлилик шартини қаноатлантирса, қуйидаги $\hat{L}=-i\frac{d}{dx}$ операторнинг хусусий функциялари ва хусусий қийматлари топилсин.

Ечиш: Хусусий функция ва хусусий қиймат таърифидан фойдаланамиз, яъни

$$\hat{L}\psi(x)=\lambda\psi(x)$$

$\hat{L}=-i\frac{d}{dx}$ бўлганлигидан $-i\frac{d\psi}{dx}=\lambda\psi$ буни осонлик билан $\frac{d\psi}{\psi}=-\lambda dx$ кўринишга келтирамиз. Интеграллаб, $\psi(x)=Ce^{i\lambda x}$ ечимни топамиз. Бу ечим (1-мисолнинг а-қисмига қаралсин) λ нинг ҳақиқий қийматларда хусусий ечим ёки функция бўла олади. $\psi(x)=\psi(x+a)$ шартга асосан $Ce^{i\lambda x}=Ce^{i\lambda(x+a)}$ деб ёза оламиз ва ундан $e^{i\lambda a}=\cos\lambda a+i\sin\lambda a=1$, бундан $\cos\lambda a=1$ эканлигини топамиз. Демак, $\lambda a=2\pi m,(m=0,\pm1,\pm2,...)$, ёки $\lambda_m=m\frac{2\pi}{a}$ бўлади. Шундай қилиб, $\hat{L}=-i\frac{d}{dx}$ операторнинг хусусий қийматлари $0,\pm\frac{2\pi}{a},\pm\frac{4\pi}{a}$ қатордаги дискрет сонларни қабул қилади. Хусусий функциялари эса

$$\psi_m(x)=Ce^{i\lambda_m x}$$

кўринишда ёзилади.

5 Масала Агар импулс моменти квадрати оператори $\hat{L}^2$ нинг хусусий функцияси $\psi(\theta,\varphi)=A(\cos\theta+2\sin\theta\cos\varphi),\hat{M}=\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2}{x}\frac{d}{dx}$ операторники $f(x)=\frac{1}{x}\sin x$ эканлиги маълум бўлса , $\hat{L}^2,\hat{M}$ операторлар хусусий қийматлари топилсин.

Ечиш: $\hat{L}\psi=\lambda\psi$ тенгламага асосан

а) $\hat{L}^2\psi(\theta,\varphi)=\lambda\psi(\theta,\varphi)$

$\hat{L}^2$ ни сферик координаталар системасида олиш қулай бўлади

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\nabla^2(\theta,\varphi)=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})\right]$$

$$\hat{L}^2\psi(\theta,\phi) = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\right]A(\cos\theta+2\sin\theta\cos\varphi) =$$

$$= -A\hbar\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(-\sin^2\theta+2\sin 2\theta\cos\varphi)+\frac{1}{\sin^2\theta}(-2\sin\theta\cos\varphi)\right] =$$

$$= -A\hbar^2\left[-\frac{2\sin\theta\cos\theta}{\sin\theta}+\frac{2\cos 2\theta\cos\varphi}{\sin\theta}-\frac{2\cos\varphi}{\sin\theta}\right] = 2A\hbar^2(\cos\theta-\frac{\cos^2\theta-\sin^2\theta}{\sin\theta}\cos\varphi+\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}) =$$

$$= 2A\hbar^2(\cos\theta-\frac{1-\sin^2\theta}{\sin\theta}\cos\varphi+\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}) = 2A\hbar^2(\cos\theta+2\sin\theta\cos\varphi) = \lambda\psi(\theta,\varphi)$$

Бундан

$$\lambda=2h^2$$

б) $$\hat{M}f = (\frac{d^2f}{dx^2}+\frac{2df}{xdx}) = \frac{d^2}{dx^2}\frac{\sin x}{x}+\frac{2}{x}\frac{d}{dx}\frac{\sin x}{x} = \lambda\frac{\sin x}{x}$$

$$\frac{d}{dx}(\frac{\sin x}{x}) = \frac{x\cos x-\sin x}{x^2}; \qquad (8)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}(\frac{\sin x}{x}) = \frac{d}{dx}(\frac{x\cos x-\sin x}{x^2}) = \frac{x^2\cos x-x^3\sin x-x^2\cos x-2x^2\cos x+2x\sin x}{x^2} =$$

$$= -\frac{2}{x^2}\cos x-\frac{1}{x}\sin x+\frac{2}{x^3}\sin x$$

(8) га $\frac{df}{dx}$ ва $\frac{d^2f}{dx^2}$ ҳосилалар қийматларини қўямиз:

$$-\frac{2}{x^2}\cos x-\frac{1}{x}\sin x+\frac{2}{x^3}\sin x+\frac{2}{x}(\frac{1}{x}\cos x-\frac{1}{x^2}\sin x) = -\frac{1}{x}\sin x = \lambda\frac{\sin x}{x}$$

(8) га асосан $\lambda = -1$

6 Масала. $\hat{A}^+$ операторни топинг, агар

а) $\hat{A} = \frac{d}{dx}$, $x\in(-\infty,+\infty)$; $\psi\equiv\psi(x)$, $\psi(\pm\infty)=0$;

б) $\hat{A}=\frac{d}{d\varphi}$, $\varphi\in[0,2x]$; $\psi\equiv\psi(\varphi)$, $\psi(\varphi+2\pi)=\psi(\varphi)$.

Ечиш: $\hat{A}$ нинг аниқ кўринишини $(\hat{A}^+\psi_1,\psi_2)\equiv(\psi_1,\hat{A}\psi_2)$ ўнг томонига қўямиз ва бўлаклаб интеграллаймиз

а) $$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*\left(-\frac{d}{dx}\psi_2\right)dx = (\psi_1\psi_2)\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{d}{dx}\psi_1\right)\psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(-\frac{d}{dx}\psi_1\right)\psi_2 dx,$$

$$(\psi_1^*\psi_2)|_{x=\pm\infty} = 0 \Rightarrow \hat{A}^+ = -\frac{d}{dx}$$

б) $\int_0^{2\pi} \psi_1^* \left(\frac{d}{d\varphi}\psi_2\right) d\varphi = (\psi_1^* \psi_2)\Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} \left(\frac{d}{d\varphi}\psi_1^*\right)\psi_2 d\varphi = \int_0^{2\pi} \left(-\frac{d}{d\varphi}\psi_1^*\right)\psi_2 d\varphi$,

$(\psi_1\psi_2)|_{\varphi=0,2\pi} = c \Rightarrow \hat{A}^+ = -\frac{d}{d\varphi}$.

Эслатиб ўтамиз, биз бу ерда $\psi_1(x)$ ва $\psi_2(x)$ функцияларнинг чексизликда нолга интилиш шартидан фойдаландик.

7 Масала. $\hat{F}$ чизиқли оператор қуйидагича

$$\hat{F} = \hat{F}_1 + i\hat{F}_2;$$
$$\hat{F}_1^+ = \hat{F}_1,$$
$$\hat{F}_2^+ = \hat{F}_2.$$

кўринишга эга бўлишини кўрсатинг

Ечиш. $\hat{F}$ ни қуйидагича қаторга ёйиш мумкин

$$\hat{F} = \frac{1}{2}\left(\hat{F} + \hat{F}^+\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{F} - \hat{F}^+\right)$$

Биринчи оператор эрмит оператори

$$\left(\hat{F} + \hat{F}^+\right)^+ = \hat{F}^+ + \hat{F}^{++} = \hat{F}^+ + \hat{F},\ \hat{F}^{++} \equiv \hat{F},$$

Ва иккинчиси ноэрмит оператордир

$$\left(\hat{F} - \hat{F}^+\right)^+ = \hat{F}^+ - \hat{F}^{++} = -\left(\hat{F}^+ - \hat{F}\right).$$

Охирги ҳар иккала тенгликни ўзаро биргаликда ечамиз $\hat{F} = \hat{F}_1 + i\hat{F}_2$;

$$\hat{F}_1 \equiv \frac{1}{2}\left(\hat{F} + \hat{F}^+\right),\ \hat{F}_1^+ = \hat{F}_1;$$

$$\hat{F}_2^+ = \frac{1}{2i^*}\left(\hat{F} - \hat{F}^+\right)^+ = \hat{F}_2,\ i^* = -i.$$

Демак, ҳар қандай ҳақиқий коэффициентли иккита эрмит операторининг чизиқли комбинацияси ҳам эрмит ҳисобланади, аммо уларнинг кўмайтмаси эрмит бўлиши шарт эмас.

8 Масала. Агар икки $\hat{A}_1$ ва $\hat{A}_2$ операторлар эрмит бўлса $\hat{A} \equiv \hat{A}_1\hat{A}_2 + \hat{A}_2\hat{A}_1$ ва $\hat{B} \equiv i\left\{\hat{A}_1, \hat{A}_2\right\}$ операторлар ҳам эрмит эканлигини кўрсатинг. *Ечиш.* Маълумки, $\hat{F} \equiv \hat{A}_1\hat{A}_2$ чизиқли операторга мос равишда иккита

$$\hat{F}_1 \equiv \frac{1}{2}\left[\hat{A}_1\hat{A}_2 + \hat{A}_2\hat{A}_1\right];\ \hat{F}_2 \equiv \frac{i}{2}\left[\left(\hat{A}_1\hat{A}_2\right)^+ - \left(\hat{A}_1\hat{A}_2\right)\right]$$

ўзига қўшма операторларни қўйиш мумкин. $\hat{A}_1$ ва $\hat{A}_2$ операторларнинг эрмитлик шартидан $\hat{A}$ ва $\hat{B}$ операторларнинг эрмитлиги келиб чиқади:

$$\hat{A} = 2\hat{F}_1 \Rightarrow \hat{A}^+ = \hat{A}\ ;\ \hat{B} = -2\hat{F}_2 \Rightarrow \hat{B}^+ = \hat{B}\,.$$

Мустақил ишлаш учун масалалар

1. Қуйдаги операторлар очиб ёзилсин:

а) $(\frac{d}{dx} + \frac{d}{dy})^2$; б) $(\frac{d}{dx} - \frac{1}{x})^2$; с) $(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x})^2$; д) $(x^2\frac{d}{dx})^2$.

2. Қуйдаги коммутаторлар очилсин:

а) $\left[xy, \frac{d}{dx}\right]$; б) $\left[x^2, \frac{d}{dx}\right]$; с) $\left[\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right]$;

ҳамда Гамилтон оператори

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$ учун д) $[H,x] = -\frac{ih}{m}\hat{P}_x$ е) $\left[\hat{P}_x, \hat{H}\right] = -ih\frac{\partial U(x)}{\partial x}$

г) $\left[f(x), \hat{H}\right] = (2ih\frac{df}{dx}\hat{P}_x + h^2\frac{d^2f}{dx^2})$ ўринли эканлиги исботлансин.

9. Қуйдаги коммутация қоидалари ўринли эканлиги исботлансин:

а) $\left[\hat{L}_x, \hat{L}_z\right] = -ih\hat{L}_y$ б) $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_z\right] = 0$ с) $\left[\hat{L}_z, x\right] = ihy$ (бу ерда $\hat{L}^2 = \hat{L}_x{}^2 + \hat{L}_y{}^2 + \hat{L}_z{}^2$ ва $\left[\hat{A}^2, \hat{B}\right] = \hat{A}\left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{A}$ тенгликдан фойдаланилсин)

4. Қуйидаги операторларнинг қайси бири эрмит оператори ҳисобланади.

а) $\frac{d}{d\phi}$; б) $i\frac{d}{d\phi}$; с) $\left[x, \frac{d}{dx}\right]$; д) $\left[x, i\frac{d}{dx}\right]$

5. Қуйидаги операторлар

а) $\frac{d}{d\varphi}$; б) $-i\frac{d}{d\varphi}$; с) $-\frac{d}{d\varphi} + m$: д) $-ih\frac{\partial}{\partial\varphi} + a\sin\varphi$ нинг хусусий қийматлари ва хусусий функциялари аниқлансин.

10. Агар $-\frac{d^2}{dx^2}+x^2$ операторининг хусусий функцияси $\psi(x)=xe^{-x/2}$, $\hat{T}=\frac{\hat{p}_x^{\,2}}{2m}$ операторники $\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{n}x$ эканлиги маълум бўлса, уларга тегишли хусусий қийматлар топилсин.

IV-БОБ
ФИЗИК КАТТАЛИКЛАРНИНГ ЎРТАЧА ҚИЙМАТИ

4.1. Физик катталикларнинг ўртача қиймати

Квант механикасининг постулатлари ҳамда қонуниятларининг эҳтимолий характерини ифода этишда, табиий равишда, эҳтимолиёт назариясининг атамалари ва таърифларидан кенг фойдаланамиз. Бинобарин, қуйида биз эҳтимоллар назариясининг айрим элементлари устида қисқача тўхталиб ўтамиз. Масалан, x_1 ва x_2 қийматлар қабул қилувчи ихтиёрий *x* катталикни ўлчашга уриниб кўрайлик. Бунда x ни N марта ўлчаш натижасида x_1 қиймат N_1 марта, x_2 эса N_2 марта чиқсин. У ҳолда N_1/N ва N_2/N нисбатлар x_1, x_2 ларнинг *ўлчаниш частоталари* дейилади. Табиийки, бу ўлчаниш частоталари тасодифий характерга эга бўлади. Бундай тасодифийлик содир бўлмаслиги учун x_1, x_2 ларнинг ўлчаниш натижаларининг эҳтимолияти тушунчасидан фойдаланамиз

$$\omega_1 = \lim_{N\to\infty}\frac{N_1}{N}, \quad \omega_2 = \lim_{N\to\infty}\frac{N_2}{N}.$$

Бу ерда $\omega_1+\omega_2=1$, чунки $N_1 + N_2 = N$; x катталикни N марта ўлчаш натижасида топиладиган арифметик ўртача қиймат

$$\overline{x}_n = \frac{1}{N}(x_1N_1 + x_2N_2).$$

ҳам тасодифийликдан ҳоли бўлмайди. Шунинг учун x катталикнинг математик кутилиши тушунчасидан фойдаланамиз, яъни

$$\overline{x} = \lim_{N\to\infty}\ \overline{x}\,N = x_1\omega_1 + x_2\omega_2.$$

Агар ўлчашлар натижаси x_1, x_2 бўлмасдан $x_1, x_2, ..., x_n$ лар бўлса, у ҳолда

$$\overline{x} = \sum_n \omega_n x_n; \quad \sum_n \omega_n = 1. \tag{4.1}$$

бўлади. Агар x катталик $-\infty, +\infty$ оралиғидаги узлуксиз қийматларини қабул қилса, эҳтимолият зичлиги $\omega(x)$ тушунчаси киритилади. x нинг алоҳида қийматларининг ўлчаниш эҳтимолият x катталикнинг $x', x'+\Delta x'$ оралиғида ўлчаниш эҳтимолияти $\omega_x\Delta x$ билан алмаштирилади. У ҳолда (4.1) қуйидагича ёзилади

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x\omega(x)dx; \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x\omega(x) = 1.$$

Худди шу йўл билан исталган $f(x)$ функциянинг ўртача қиймати

$$\overline{f} = \int f(x)\ \omega(x)\,dx.$$

ёзилади. Шуларга кўра, агар координаталар қийматларининг эҳтимолли зичлиги берилган бўлса, бу координаталар функцияларининг ўртача қийматларини ҳисоблаш мумкин

$$\overline{x}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x,t)|^2\,dx,$$

$$\overline{f}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f\,|\psi(x,t)|^2\,dx.$$

ёки уч ўлчамли кўринишда

$$\overline{F}(t) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} F(x,y,z)\,|\psi(x,y,z,t)|^2\,dxdydz. \qquad (4.2)$$

Охирги формулалар кванто-механик қонуниятларнинг ўзига хос хусусиятини акс эттиради: классик механикада зарранинг фазодаги ўрнини вақтнинг функцияси тариқасида ифода этиш мумкин бўлса, унинг эҳтимолиятинигина ҳисоблашимиз мумкин. Кванто-механик катталикларга 1-постулатга кўра операторлар мос келгани учун охирги икки формулаларни умумлаштириб ёзамиз

$$\overline{L} = \int \psi^{*}\hat{L}\ \psi\,d\tau \qquad (4.3)$$

Бу формула ёрдамида L оператор билан ифодаланувчи исталган L механик катталикнинг ўртача қиймати ҳисобланади. Энди биз (4.2) ва (4.3) формулаларнинг бир-бирига мувофиқлигини кўрсатамиз. Бунинг учун L операторнинг хусусий функциялари бўйича ёзилган

$$\psi(x) = \sum C_m \psi_m^{*}(x), \qquad \psi^{*}(x) = \sum C^{*}_n \psi_n^{*}(x)$$

ёйилмалардан фойдаланамиз. У ҳолда (4.2) ни шундай қайта ёзишимиз мумкин

$$\bar{L}=\int(\sum C_n{}^*\psi_n{}^*\hat{L}\sum C_m\psi_m)d\tau=\sum\sum C_n{}^*C_m\int\psi^*{}_n\hat{L}\psi_m d\tau=\sum\sum C^*{}_nC_m\lambda_m\int\psi_n{}^*\psi_m d\tau=$$
$$=\sum\sum C_n{}^*C_m\lambda_m\delta_{nm}=\sum|C_m|^2\lambda_m=\sum\omega_m\lambda_m$$

Агар система ҳолатига L операторнинг хусусий функцияларидан бири мос келса

$$\bar{L}=\lambda_m\int\psi_m{}^*\psi_m d\tau$$

бўлади. Ҳақиқатдан, оператор хусусий функцияси ва хусусий қиймати таърифига асосан

$$\hat{L}\psi_m=\lambda_m\psi_m$$

бўлади. Бу тенгликни чап томондан ψ_n^* га кўпайтириб, унинг барча ўзгариш соҳаси бўйича интегралласак қуйидагини топамиз

$$\bar{L}=\lambda_m=\frac{\int\psi_n^*\hat{L}\psi_m d\tau}{\int\psi_n^*\psi_m d\tau}=\int\psi_n^*\hat{L}\psi_m d\tau \qquad (4.4)$$

Бундан, агар хусусий функциялар ортонормаллашган бўлса, L катталикни ψ_n ҳолатда ўлчаш натижасида ҳамма вақт λ_n қийматга тенг бўлади. Шунинг учун (4.1) га асосан L катталикнинг ихтиёрий ψ ҳолатдаги ўртача қийматини қуйидагича аниқлаш мумкин

$$\bar{L}=\frac{\int\psi^*\hat{L}\psi d\tau}{\int\psi^*\psi d\tau}$$

бу ерда ψ функциянинг нормаллашган бўлиши шарт эмас. Шундай қилиб чиқарилган муносабатлар физик катталиклар ўртача қийматини ва уларнинг ўлчаниш натижаларининг эҳтимолиятини ҳисоблаш имкониятини беради.

4.2. Ўртача катталикнинг вақт бўйича ўзгариши. Пуассон квант қавслари

Ихтиёрий A оператор хусусий қийматининг ўртачаси бу оператор орқали қуйидагича боғланганлигини биламиз

$$\bar{A}=\int\psi^*(x,t)\,\hat{A}\,\psi(x,t)dx \qquad (4.5)$$

Берилган $\bar{A}$ динамик катталик вақт бўйича ўзгараётган бўлса ва унинг бу ўзгариш қонунини топиш талаб қилинса, биз (4.5) ни вақт бўйича дифференциаллаймиз

$$\frac{dA}{dt}=\frac{d}{dt}\int\psi^*(x,t)\hat{A}\psi(x,t)dx=\int\left\{\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi+\psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi+\psi^*\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\}dx$$

Шредингернинг вақтга боғлиқ тенгламасини ёзамиз

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi,$$

унинг комплекс қўшмаси

$$-ih\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\hat{H}^*\psi^*.$$

У ҳолда

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i}{h}\hat{H}\psi,\qquad \frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\frac{i}{h}\hat{H}^*\psi^*$$

деб ёза оламиз ва

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=\int\left\{\frac{i}{h}\hat{H}^*\psi^*\hat{A}\psi+\psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi-\frac{i}{h}\psi^*\hat{A}\hat{H}\psi\right\}dx \qquad (4.6)$$

ни ҳосил қила оламиз. Гамилтон оператори H нинг эрмитлик хоссасидан

$$\int\psi^*\hat{H}\psi\,dx=\int\psi\hat{H}^*\psi^*dx$$

фойдаланиб қуйидаги муносабатни ҳосил қиламиз

$$\int\hat{H}^*\psi^*\hat{A}\psi\,dx=\int\hat{H}^*\psi^*(\hat{A}\psi)dx=\int\psi^*\hat{H}(\hat{A}\psi)\,dx=\int\psi^*(\hat{H}\hat{A})\psi\,dx$$

У ҳолда (4.6) тенглама қуйидаги содда кўринишга келади

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=\int\psi^*\left\{\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{ih}(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H})\right\}\psi dx=\int\psi^*\left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{ih}[HA-AH]\right)\psi\,dx=$$

$$= \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \left\{ \hat{H}, \hat{A} \right\} \right) \psi \, dx = \frac{\partial \overline{A}}{\partial t} + \left\{ \hat{H}, \hat{A} \right\}$$

Бу ердаги ифода

$$\left\{ \hat{H}, \hat{A} \right\} \equiv \frac{1}{ih} \left[\hat{H}, \hat{A} \right] = \frac{1}{ih} (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H})$$

Пуассоннинг квант қавси деб аталади. Классик механикада ҳам Пуассон қавслари

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

мавжуд бўлиб, унинг ёрдамида Гамилтоннинг каноник тенгламалари ва ҳаракат интегралларини келтириб чиқариш мумкин. Шундай қилиб исталган A операторнинг вақт бўйича ўзгариш қонуни

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \left\{ \hat{H}, \hat{A} \right\}$$

кўринишда берилади. Агар A вақтга ошкор боғлиқ бўлмаса, $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$ бўлади ва у қуйидаги

$$\frac{dA}{dt} = \left\{ \hat{H}, \hat{A} \right\} \tag{4.7}$$

шаклни олади.

4.3. Ҳаракат интеграллари. Эренфест теоремалари

Ҳаракат интеграли. (4.7) дан кўринадики, исталган A оператор хусусий қийматининг вақт бўйича сақланиши (ёки A катталикнинг ҳаракат интеграли бўлиши) учун бу катталикка тўғри келувчи оператор A ва Гамилтон оператори H ўзаро коммутатив бўлмоғи зарур

$$\left\{ \hat{H}, \hat{A} \right\} = 0,$$

$$\frac{dA}{dt} = 0, \text{ бундан } A = \text{const}.$$

Ҳаракат тенгламаси. Энди биз квант механикасининг ҳаракат тенгламаларини келтириб чиқарамиз. Бунинг учун зарранинг бир ўлчамли

ҳаракатлари билан чекланамиз ва x ҳамда p_x операторларнинг вақт бўйича ўзгариш қонунларини чиқарамиз. Бу операторлар вақтнинг ошкормас функцияси бўлганлиги учун

$$\frac{\partial x}{\partial t}=0, \qquad \frac{\partial p_x}{\partial t}=0$$

тенгликлари бажарилади ва шу сабабдан

$$\frac{dx}{dt}=\left\{\ \hat{H},x\ \right\}, \qquad \frac{dp_x}{dt}=\left\{\ \hat{H},\hat{p}_x\ \right\}$$

тенгликларга эга бўламиз. Бизда умумий ҳолда

$$H=\frac{p_x}{2m}+U(x)$$

бўлганидан

$$\left\{\hat{H},x\right\}=\frac{1}{ih}\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+U(x),x\right]=\frac{1}{ih}\left[\frac{\hat{p}_x{}^2}{2m},x\right]=\frac{1}{ih}\frac{1}{2m}(\hat{p}_x{}^2x-x\hat{p}_x{}^2)=\frac{1}{2imh}(2ih\hat{p}_x)=\frac{\hat{p}_x}{m},$$

$$\left\{\ \hat{p}_x,\hat{H}\right\}=\frac{1}{ih}\left[\hat{p}_x,\frac{\hat{p}_x{}^2}{2m}+U(x)\right]=\frac{1}{ih}\left[\ \hat{p}_x,U(x)\right]=-\frac{\partial U(x)}{\partial x}$$

эканлигини топамиз ва (3.27) ўрнига

$$\frac{dx}{dt}=\frac{p_x}{m},\ \frac{dp_x}{dt}=-\frac{\partial U(x)}{\partial x} \tag{4.8}$$

оператор тенгликларга эга бўламиз. Ўртача катталиклар тўғрисидаги теоремага кўра (4.8) ни қуйидагича ёза оламиз

$$\int\psi^{\bullet}\frac{dx}{dt}\psi dx=\int\psi^{\bullet}\frac{\hat{p}_x}{m}\psi dx,\ \int\psi^{\bullet}\frac{d\hat{p}_x}{dt}\psi dx=\int\psi^{\bullet}\left(-\frac{\partial U(x)}{\partial x}\right)\psi dx \tag{4.9}$$

(4.8) тенгламалар эса (4.9) га кўра

$$\frac{d\overline{x}}{dt}=\frac{\overline{p}_x}{m}, \qquad \frac{d\overline{p}_x}{dt}=-\frac{\partial\overline{U}}{\partial x} \tag{4.10}$$

Агар (4.9) муносабатда иштирок этувчи ўзгарувчилар оператор катталиклар бўлса, (4.10) да уларга тўғри келувчи катталикларнинг ўртача қийматлари

иштирок этади. Шунга кўра Эренфест теоремаларига қуйидагича таъриф беришимиз мумкин. *Квант механикасидаги ҳаракат тенгламалари классик физикадаги тенгламаларга ўхшаш бўлади, фақат бу ерда классик механикадаги физик катталикларнинг ўртача қийматлари иштирок этади.* Ҳаракат қонунига кўра

$$a)\ \frac{\partial A}{\partial t}=0 \text{ бўлса;}$$

$$b)\ \left\{\hat{H},\hat{A}\right\}=0 \text{ бўлса;}$$

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

бўлар эди. Бундан $A=\text{const}$, яъни A катталикнинг вақт бўйича ўзгармаслиги (сақланиши) келиб чиқади. Бундай ҳолда A сақланувчан катталик ёки *ҳаракат интеграли* дейилади. Агар $\left\{\hat{H},\hat{A}\right\}=0$ бўлиш хоссасига эътибор қилсак, A катталикнинг ҳаракат интеграли бўлиши H нинг кўринишига ёки зарра ҳаракат характерига боғлиқ бўлади ва шу туфайли турлича ҳаракат интеграллари мавжуд бўлади:

1. Зарра эркин ҳаракат қилганида унинг импулси ҳаракат интеграли ҳисобланади. Эркин ҳаракат учун $H=\frac{p_x^{\ 2}}{2m}$ (чунки $U(x)=0$), $A=p_x$

$$\frac{dp_x}{dt}=\left\{\frac{\hat{p}_x^{\ 2}}{2m},\hat{p}_x\right\}=\frac{1}{2mih}\left[\hat{p}_x^{\ 2},\hat{p}_x\right]=0,\ \ p_x=\text{const}$$

2. Система ёпиқ бўлганда $\frac{\partial H}{\partial t}=\frac{\partial E}{\partial t}=0$ бўлади ва

$$\frac{dE}{dt}=\left\{\hat{H},\hat{H}\right\}=0,\quad E=\text{const}$$

Берилган ҳолда зарра энергияси ҳаракат интеграли ҳисобланади.

3. Зарра марказий майдонда ($U(r)$ бўлган потенциал майдонда) ҳаракат қилганида зарра импулс моменти сақланувчан ҳисобланади. Ҳақиқатдан, $\frac{\partial L}{\partial t}=0$ ва

$$\frac{dL^2}{dt}=\left\{\hat{H},\hat{L}^2\right\}=\frac{1}{ih}\left[-\frac{h^2}{2m}\nabla^2(\theta,\varphi)+U(r),\text{-}h^2\nabla^2(\theta,\varphi)\right]=0,$$

$$L^2=\text{const},L_z=\text{const}$$

эканлиги келиб чиқади. Зарра импулси, энергияси ва импулс моментининг

ҳаракат интеграли бўлиши фазо ва вақтнинг хоссалари билан боғлиқ бўлади. Импулснинг сақланиши фазонинг бир жинслиги, энергиянинг сақланиши вақтининг биржинслиги, импулс моментининг сақланиши эса фазонинг изотроплиги билан бевосита боғланган бўлади.

4.4. Физик катталикларни ўлчаш

Фараз қилайлик, квант тизим ихтиёрий Ψ ҳолатда жойлашган бўлсин ва ушбу ҳолатга мос F катталикни ўлчаш талаб қилинган бўлсин. Агар Ψ функция $\hat{F}$ операторнинг хусусий қийматларига ўзаро мос бўлса, яъни қуйидаги тенглик

$$\Psi_n, \quad (\hat{F}\Psi_n = F_n \Psi_n),$$

ўринли бўлади. Бу эса F физик катталикнинг Ψ ҳолатда аниқ F_n қийматларга эга эканлигини англатади. Ушбу фикримизни исботлаш учун Ψ тўлқин функцияни системанинг тўлиқ $\{\Psi_n\}$ тўлқин функциялари (умумлашган Фурье қатори) бўйича қаторга ёямиз

$$\Psi(x) = \sum_n C_n \Psi_n(x) \tag{4.11}$$

Бу ерда Ψ_n - F_n хусусий қийматларга мос келувчи $\hat{F}$ операторнинг хусусий функциясидан иборатдир. Энди (4.11) қаторни $\overline{F}$ ўртача қиймат ифодаси учун ёзиб оламиз

$$\overline{F} = \int \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx = \sum_{n,m} C_m^* C_n \int \Psi_m^* \hat{F} \Psi_n dx .$$

$\{\Psi_n\}$ функцияни ортонормаллашган функция деб ҳисоблаймиз. У ҳолда $\overline{F}$ нинг ифодасини қуйидагича ёзиш мумкин

$$\overline{F} = \sum_n |C_n|^2 F_n . \tag{4.12}$$

Нормаллаштириш шарти $\int \Psi^* \Psi \, dx = 1$ дан фойдаланиб қуйидагини натижани оламиз

$$\sum_n |C_n|^2 = 1 . \tag{4.13}$$

Эҳтимолият назариясидан бизга маълумки, агар P_n тасодифий катталик F нинг F_n қийматларни қабул қилиш эҳтимоллиги бўлса, у ҳолда ўртача қиймат учун қуйидаги формула ўринли бўлади

$$\overline{F} = \sum_n F_n P_n ,$$

Бундан ташқари тўлиқ эҳтимолиятлар йиғиндиси ушбу шартни қаноатлантиради $\sum_n P_n = 1$. Охирги тенгликларни бир бири билан ўзаро тенглаштириб қуйидаги формулани оламиз

$$P_n = |C_n|^2 . \qquad (4.14)$$

Бу ерда C_n катталик эҳтимолият амплитудаси деб аталади.

Агар F катталик узлуксиз ўзгарса ($\hat{F}$ операторнинг хусусий қийматлар тўплами узлуксиз спектрни ташкил этади), у ҳолда (4.13) формула интеграл орқали берилади

$$\Psi(x) = \int dF\, C_F \Psi_F(x) ,$$

Бу ерда $\hat{F}\Psi_F = F\Psi_F$. Бинобарин, охирги интегралда тўлқин функция қуйидаги нормаллаштириш шартини қаноатлантиради

$$\int \Psi_{F'}{}^* \Psi_F \, dx = \delta(F - F'),$$

$$\overline{F} = \int dF\, F\, |C_F|^2 ,$$

$$1 = \int dF\, |C_F|^2 .$$

Демак, $|C_F|^2 dF$ - ифода это биз ўлчаётган Ψ ҳолатдаги F катталикнинг $(F, F + dF)$. ораликда топилиш эҳтимолиятини тавсифлар экан.

4.5. Турли физик катталикларни бир вақтнинг ўзида ўлчаш шартлари

Координатаси аниқ қийматларга эга бўлган заррачанинг ҳолатини кўриб ўтамиз. Фараз қилайлик, бу ҳолат қуйидаги тўлқин функция орқали берилган бўлсин

$$\Psi_{x'}(x) = \delta(x - x') \qquad (4.15)$$

($\delta(x - x')$ - δ - Диракнинг дельта функцияси, ёки $\hat{x}\Psi_{x'}(x) = x'\Psi_{x'}(x)$).

(4.15) тўлқин функция орқали ифодаланаётган ҳолатдаги импульснинг қабул қиладиган қийматларини топамиз. p_x импульс орқали ифодаланувчи заррачанинг ҳолати қуйидаги тенглама орқали берилади

$$\hat{p}_x \Psi_{p_x}(x) = p_x \Psi_{p_x}(x); \qquad \hat{p}_x = -ih\frac{\partial}{\partial x}.$$

Бу тенгламанинг ечими ясси тўлқиндан иборат

$$\Psi_{p_x}(x) = c\, e^{\frac{i p_x x}{\hbar}}. \tag{4.16}$$

Охирги ечимни $\delta(x - x')$ орқали ёзиб оламиз

$$\delta(x - x') = \int dp_x\, C_{p_x} e^{i\frac{p_x x}{\hbar}}; \qquad C_{p_x} = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-i\frac{p_x x'}{\hbar}}.$$

Тўлқин функциянинг $\left|C_{p_x}\right|^2 dp_x$ эҳтимолият интерпретацияси шуни англатадики, импульснинг $x-$ташкил этувчиси $(p_x, p_x + dp_x)$ ораликдагина аниқланиши мумкин. (4.15) тенглик билан тавсифланувчи $x-$ нинг ҳолати учун импульс ҳар қандай ихтиёрий қийматларни қабул қилиши мумкин, яъни у ноаниқ. Бу изоҳ шуни кўрсатадики, шундай ҳолатлар мавжудки, бу ҳолатларга мос келувчи заррача импульси ва координатаси бир вақтнинг ўзида аниқ қийматлар қабул қилиши мумкин экан.

Фараз қилайлик бизга иккита физик катталик F ва G берилган бўлсин, Бу физик катталикларни ўлчаш учун уларга мос келувчи тўлқин функциялар бир вақтнинг ўзида $\hat{F}$ ва $\hat{G}$ операторларнинг хусусий функцияси бўлмоғи лозим. Бу операторларнинг хусусий қийматлари учун тенгламани қуйидагича ёзамиз

$$\hat{F}\Psi_F = F\Psi_F, \qquad \hat{G}\Psi_G = G\Psi_G.$$

Умумий ҳолда $\Psi_G \neq \Psi_F$ бўлади. Физик катталиклар F ва G фақатгина $\Psi_G = \Psi_F$ ҳолатдагина бир хил қийматлар кабул қилиши мумкин, яъни бир вақтнинг ўзида ўлчаниши мумкин. Бу ҳолат эса $\hat{F}$ ва $\hat{G}$ операторларнинг бир хил умумий хусусий функцияга эга бўлиши шарти бажарилгандагина содир бўлади. Бундай умумлашган хусусий функцияни $\{\Psi_F\}$ деб олсак, қуйидаги муносабат бажарилиши лозим

$$\hat{G}\hat{F}\Psi_F = \hat{G}F\Psi_F = GF\Psi_F,$$
$$\hat{F}\hat{G}\Psi_F = \hat{F}G\Psi_F = FG\Psi_F$$

Бу тенгламалардан кўриниб турибдики, ҳар қандай Ψ_F функция учун

$$(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\Psi_F = 0 .$$

бажарилади. Демак, ушбу шарт фақатгина $\{\Psi_F\}$ функция $\hat{F}$ ва $\hat{G}$ операторларнинг бир хил умумлашган хусусий функцияси бўлиши билан изоҳланади, яъни

$$\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = 0 .$$

Бу ердан шундай умумий хулоса келиб чиқади: иккита ихтиёрий физик катталикларнинг бир вақтнинг ўзида ўлчаш учун уларнинг операторлари ўзаро коммутатив бўлиши шарт экан.

4.6. Ноаниқлик муносабати

Ноаниқлик принципи иккита физик катталикни ўлчашга маълум чегаравий шарт қўяди. Мана шу чегаравий шартни кўриб ўтамиз. Фараз қилайлик, ўзаро нокоммутатив бўлган ихтиёрий иккита физик каттали берилган бўлсин

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = i\hat{C} \qquad (4.17)$$

$\hat{A}$ ва $\hat{B}$ операторлар эрмит операторлар ва у ҳолда $\hat{C}$ оператор ҳам эрмит ҳисобланади

$$\left[i\hat{C}\right]^+ = -i\hat{C}^+ = -i\hat{C} .$$

Бу ерда i кўпайтма ўзаро қўшма эрмитлик хоссасини ифодалаш учун киритилган. Энди Ψ ҳолатга тўғри келувчи физик катталикнинг дисперсиясига нисбатан чегараларни топамиз. Бизга қуйидаги тенгликлар берилган бўлсин

$$\begin{aligned} \Delta\hat{A} &= \hat{A} - \overline{A} \\ \Delta\hat{B} &= \hat{B} - \overline{B} \end{aligned} .$$

Фараз қилайлик, берилган операторларнинг ўртачай қиймати нолга тенг бўлсин. Бунга эришиши учун мос ҳолдаги координата системаларини танлаймиз. У ҳолда

$$\Delta\hat{A} = \hat{A}$$
$$\Delta\hat{B} = \hat{B}$$

Ψ тўлқин функция билан ифодаланувчи бу катталикларнинг дисперсиясининг квадрати

$$\Delta A^2 = \left\langle \Psi \middle| \Delta\hat{A}^2 \Psi \right\rangle$$

тенгликни қаноатлантиради. Бу тенгликка нисбатан қуйидаги

$$\left\langle \Psi \middle| \hat{A}\left(\hat{B}\Psi\right) \right\rangle = \left\langle \hat{A}^{+}\Psi \middle| \hat{B}\Psi \right\rangle$$

алмаштиришни амалга оширамиз.У ҳолда

$$\Delta A^2 = \left\langle \Delta\hat{A}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle = \left\| \Delta\hat{A}\Psi \right\|^2 .$$

(4.16) ифодадан фойдаланиб (4.17) тенгламани қуйидагича ёзиш мумкин

$$\left[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B} \right] = i\hat{C}$$

Ушбу учбурчак $\|f\| \cdot \|\varphi\| \geq \left| \langle f | \varphi \rangle \right|$ тенгсизлигиданфойдаланиб

$$f = \Delta\hat{A}\Psi, \ \varphi = \Delta\hat{B}\Psi .$$

Бинобарин,

$$\left\| \Delta\hat{B}\Psi \right\| \cdot \left\| \Delta\hat{A}\Psi \right\| \geq \left| \left\langle \Delta\hat{B}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle \right| .$$

Охирги тенгламада ўнг томондаги мавҳум ҳадларни ажратиб оламиз

$$\operatorname{Im} a = \frac{1}{2}\left(a - a^*\right).$$

Энди комплекс қўшма ҳадларни ажратиб оламиз

$$\left\langle \Delta\hat{B}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle :$$

$$\left(\left\langle \Delta\hat{B}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle\right)^* = \left(\int \left(\Delta\hat{B}\Psi\right)^* \Delta\hat{A}\Psi d\vec{r}\right)^* = \int \Delta\hat{B}\Psi \left(\Delta\hat{A}\Psi\right)^* d\vec{r} = \int \left(\Delta\hat{A}\Psi\right)^* \Delta\hat{B}\Psi d\vec{r} = \left\langle \Delta\hat{A}\Psi \middle| \Delta\hat{B}\Psi \right\rangle$$

,

$$\left(\left\langle \Delta\hat{B}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle\right)^* = \left\langle \Delta\hat{A}\Psi \middle| \Delta\hat{B}\Psi \right\rangle. \qquad (4.18)$$

Охирги тенгликнинг ўнг томонига $|a| \geq |\mathrm{Im}\, a|$ тенгсизликни қўллаб ва кераксиз ҳадларни ташлаб юбориб, қуйидагини ҳосил қиламиз

$$\left\|\Delta\hat{B}\Psi\right\| \cdot \left\|\Delta\hat{A}\Psi\right\| \geq \left|\left\langle \Delta\hat{B}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle\right| \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \Delta\hat{B}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle - \left\langle \Delta\hat{A}\Psi \middle| \Delta\hat{B}\Psi \right\rangle\right|. \qquad (4.19)$$

(4.19) тенгсизликнинг ўнг томонини қуйидагича ёзиб оламиз

$$\frac{1}{2}\left|\left\langle \Delta\hat{B}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle - \left\langle \Delta\hat{A}\Psi \middle| \Delta\hat{B}\Psi \right\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|\int \left(\Delta\hat{B}\Psi\right)^* \Delta\hat{A}\Psi d\vec{r} - \int \left(\Delta\hat{A}\Psi\right)^* \Delta\hat{B}\Psi d\vec{r}\right|.$$

Ушбу $\int \left(\hat{F}\varphi_1\right)^* \varphi_2 d\vec{r} = \int \varphi_1^* \left(\hat{F}\varphi_2\right) d\vec{r}$ муносабатдан фойдаланиб

$$\frac{1}{2}\left|\int \left(\Delta\hat{B}\Psi\right)^* \Delta\hat{A}\Psi d\vec{r} - \int \left(\Delta\hat{A}\Psi\right)^* \Delta\hat{B}\Psi d\vec{r}\right| = \frac{1}{2}\left|\int \Psi^* \Delta\hat{B}\left(\Delta\hat{A}\Psi\right) d\vec{r} - \int \Psi^* \Delta\hat{A}\left(\Delta\hat{B}\Psi\right) d\vec{r}\right| =$$

$$= \frac{1}{2}\left|\int \Psi^* \Delta\hat{B}\left(\Delta\hat{A}\Psi\right) - \Delta\hat{A}\left(\Delta\hat{B}\Psi\right) d\vec{r}\right| = \frac{1}{2}\left|\int \Psi^* \left(\Delta\hat{B}\Delta\hat{A} - \Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\right)\Psi d\vec{r}\right| =$$

$$= \frac{1}{2}\left|\int \Psi^* \left[\Delta\hat{B}, \Delta\hat{A}\right]\Psi d\vec{r}\right| = \frac{1}{2}\left\langle \Psi \middle| i\hat{C}\Psi \right\rangle.$$

Шундай қилиб (4.19) тенгсизликни ушбу тарзда ёзамиз

$$\left\|\Delta\hat{B}\Psi\right\| \cdot \left\|\Delta\hat{A}\Psi\right\| \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \Delta\hat{B}\Psi \middle| \Delta\hat{A}\Psi \right\rangle - \left\langle \Delta\hat{A}\Psi \middle| \Delta\hat{B}\Psi \right\rangle\right|$$

Агар $\Delta A^2 = \left\|\Delta\hat{A}\Psi\right\|^2$ и $\Delta B^2 = \left\|\Delta\hat{B}\Psi\right\|^2$ эканлигини ҳисобга олсак

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\left\langle \Psi \middle| i\hat{C}\Psi \right\rangle\right|$$

тенгсизлик ҳосил бўлади. Олинган тенгсизлик ихтиёрий квант физик катталиклар учун ноаниқлик муносабатини тавсифлайди.

Назорат саволлари:

1. Ўртача қиймат квант механикасида қандай аниқланади?
2. Ўртача қийматнинг вақт бўйича ўзгариш қонунини ёзинг.
3. Физик катталикнинг ҳаракат интеграли бўлиши учун бу катталикка қандай шартлар юкланади?
4. Пуассоннинг квант қавслари унинг классик қавсларидан қандай фарқ қилади?
5. Эренфест теоремасининг таърифини айтинг.

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 Масала. Асосий ҳолатда жойлашган водород атомидаги электрон учун а) $< r >$, б) $< r^2 >$, ҳисоблансин.

Ечиш : Водород атомининг асосий ҳолатини аниқловчи функция

$$\psi_0(r)=(\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a}}$$

кўринишида берилади. Ўртача қиймат формуласидаги ҳажм элементини қуйдагича ёзишга тўғри келади: $d\tau = 4\pi r^2 dr$, чунки $\psi_0(r)$ да бурчакларга боғланиш мавжуд эмас

а) $$<r>=\frac{4\pi}{\pi a^3}\int_0^{¥}(e^{\frac{-r}{a}})^* r e^{\frac{-r}{a}} r^2 dr=\frac{4}{a^3}\int_0^{¥} e^{\frac{-2r}{a}} r^3 dr$$

$\frac{2r}{a} = x$ алмаштириш ўтказиб , $\int_0^{\infty} e^{-x} x^n dx = n!$ жадвал интегралига кўра осонлик билан топамиз

$$<r>=\frac{4\pi}{a^3}\left(\frac{a}{2}\right)^4\int_0^{¥} e^{-x} x^3 dx=\frac{a}{4}3!=\frac{3}{2}a$$

б) Худди шундай йўл билан

$$<r^2>=\frac{4}{a^3}\left(\frac{a}{5}\right)^5\int_0^{¥} e^{-x} x^4 dx=\frac{a}{8}4!=3a^2$$

ни топамиз.

2 Масала. Чизиқли гармоник осциллятор функцияси

$$\psi(x)=\frac{2x}{x_0\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right\}$$

берилса $< E >$ ҳисоблансин ва осциллятор учун квант сонининг қиймати топилсин, бу ерда $x_0 = \sqrt{\frac{h}{m\omega}}$.

Ечиш: Ўртача қиймат формуласига кўра ёза оламиз

$$<E>=\int \psi^*(x)\hat{H}\,\psi(x)\,dx$$

Бу ерда

$$\hat{H}=-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2}{2}x^2$$

Кўринадики <E> ни ҳисоблаш учун $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\psi''(x)$ ҳосилани ҳисоблашимиз керак. Қулайлик учун $C=\frac{2}{x_0\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}$ белги киритамиз. У ҳолда

$$\psi'(x)=C\frac{d}{dx}\left(xe^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}\right)=Ce^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}\left[1-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right]$$

$$\psi''(x)=C\frac{d}{dx}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}\left[1-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right]=Ce^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}\left[-\left(1-\frac{x^2}{x_0^2}\right)\frac{x}{x_0^2}-\frac{2x}{x_0^2}\right]$$

ҳамда

$$<E>=C^2\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}\left[\frac{h^2}{2m}\left(\frac{3x}{x_0^2}-\frac{x^3}{x_0^4}\right)+\frac{m\omega^2}{2}x^2\right]e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}dx=C^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}\left[\frac{h^2}{2m}\left(\frac{3x^2}{x_0^2}-\frac{x^4}{x_0^2}\right)+\frac{m\omega^2}{2}x^4\right]dx=$$

$$=C^2\frac{3h^2}{2mx_0}\int_{-y}^{y}x^2e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}dx-c^2\frac{h^2}{2mx_0^4}\int_{-y}^{y}x^4e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}dx+\frac{m\omega^2}{2}x^2C^2\int_{-y}^{y}x^4e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}dx=C^2\frac{3h^2}{2mx_0^2}x_0^3\int_{-y}^{y}y^2e^{-y^2}dy-$$

$$-C^2\frac{h^2}{2mx_0^4}x_0^5\int_{-y}^{y}y^4e^{-y^2}dy+\frac{m\omega^2}{2}C^2x_0^5\int_{-Y}^{y}y^4e^{-y^2}dy=C^2\left[\frac{3h^2x_0}{2m}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right]=\frac{3h^2x_0}{2\times 2m}\sqrt{\pi}\frac{4}{2x_0^3\sqrt{\pi}}=\frac{3h^2}{2mx_0^2}=$$

$$\frac{3h^2}{2m}\frac{m\omega}{h}=\frac{3}{2}D\omega$$

Шундай қилиб $<E>=\frac{2}{3}h\omega$ осциллятор энергияси умумий ҳолда $E_n=h\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ формула орқали аниқланганлиги учун n=1 бўлади.

3 Масала. Зарра ҳолати $\psi(x)=Ae^{-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x}$ тўлқин функцияси билан ифодаланган бўлса , зарра учун $<x>$, $<p_x>$, $<(\Delta x)^2>$, $<(\Delta p_x)^2>$ ларнинг қийматлари ҳисоблансин ва аниқмаслик муносабати текшириб кўрилсин (шунингдек А коэффициент ҳам топилсин).

Ечиш: Аввало $\psi(x)$ функциянинг нормаллик шартидан А коэффициентни топамиз

$$1=\int\psi^*(x)\psi(x)dx=A^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{x^2}{a^2}}dx=Aa^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}dy=A^2a\sqrt{\pi}$$

Бундан

$$A^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}, \; A = \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}}$$

$< x >= \int \psi^*(x)\, x\psi(x)dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} x dx = 0$, $< x >= 0$ (чунки интеграл тоқ интегралдир).

$$< p_x >= \int \psi^*(x)\hat{p}_x\psi(x)dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2a^2}-ik_0x}(-i\hbar)\frac{d}{dx}e^{-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x}dx =$$

$$= A^2 i\hbar k_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}}(-\frac{x}{a^2}+ik_0)dx = A^2\hbar k_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}}dx = A^2\hbar k_0 a\sqrt{\pi} = \hbar k_0$$

$$(\Delta x)^2 = (x - < x >)^2 = x^2$$

$$(\Delta p_x)^2 = (p_x - < p_x >)^2 = (p_x - hk_0)^2$$

бўлганидан

$$< (\Delta x)^2 >= \int \psi^*(x)x^2\psi(x)dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} x^2 dx = A^2 a^3 \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{a^2}{2};$$

$$< (\Delta p_x)^2 >= \int \psi^*(x)(\hat{p}_x - hk_0)^2\psi(x)dx = \int \psi^*(x)\hat{p}_x{}^2\psi(x)dx -$$

$$-2hk_0 \int \psi^*(x)\psi(x)dx + h^2k_0{}^2 \int \psi^*(x)\psi(x)dx \Rightarrow$$

($\hat{p}_x$ оператори эрмит оператори бўлганлиги учун)

$$\Rightarrow \int (\hat{p}_x\psi)(\hat{p}_x\psi)^* dx - 2hk_0 < p_x > + h^2k_0{}^2 = \int \left|(\hat{p}_x\psi)\right|^2 dx - h^2k_0{}^2 =$$

$$= a^2h^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left|(-\frac{x}{a^2}+ik)\right|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}}dx - hk_0{}^2 =$$

$$= A^2h^2 \frac{1}{a^4} a^3 \frac{\sqrt{\pi}}{2} + hk_0{}^2 = \frac{h}{2a^2}$$

Демак, $<(\Delta p_x)^2> = \frac{h}{2a^2}$

У ҳолда $< (\Delta x)^2 >< (\Delta p_x)^2 >= \frac{a^2}{2}\frac{h^2}{2a^2} = \frac{h^2}{4}$ эканлигини топамиз. Шундай қилиб, $< (\Delta x)^2 >, < (\Delta p_x)^2 >$ лар учун Гейзенбергнинг аниқмаслик ифодалари бажарилишини кўрамиз.

4 Масала. Ёпиқ система учун а) импулсининг сақланиш қонуни фазонинг биржинслиги; б) импулс моментининг сақланиш қонуни фазонинг изотроплиги билан боғлиқ эканлиги исботлансин .

Ечиш: а) фазонинг бир жинслилик хоссаси шундан иборатки, ёпиқ системани бир бутунлигича параллел силжитганда бу система хоссаси ўзгармай қолади. Система хоссаси квант механикада Гамилътон оператори орқали ифодаланганлиги учун фазонинг бир жинслилик хоссаси Гамилътон операторининг ихтиёрий масофага системани параллел кўчиришга нисбатан ўзгармай қолишида кўринади. Исталган чекли силжиш чексиз кичик силжишлар йиғиндиси тариқасида ифодаланиши мумкин бўлганидан, чексиз кичик силжиш $\delta\vec{a}$ натижасида зарра координатаси $\vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{a}$ га ўзгаради. У ҳолда силжишдан кейинги ҳолат тўлқин функцияси $\psi'(\vec{r} + \delta\vec{a})$ ни Тейлор қаторига ёйиб, дастлабки икки ҳад билан чегаралансак

$$\psi(\vec{r}')=\psi'(\vec{r}+\delta\vec{a}) = \psi(\vec{r})+\delta\vec{a}\nabla\psi(\vec{r})=(1+\delta\vec{a}\nabla)\psi(\vec{r})=\hat{T}_{\delta r}\psi(r)$$

Бу ерда $\hat{T}_{\delta r} = 1 + \delta\vec{a}\nabla$ чексиз кичик силжиш оператори дейилади. Гамилътон оператори $\hat{H}$ нинг ихтиёрий чексиз кичик силжишга нисбатан ўзгармаслиги (инвариантлиги) $\hat{T}_{\delta r}$ операторнинг $\hat{H}$ оператор билан ўзаро коммутатив бўлишини талаб қилади

$$\left[\hat{T}_{\delta r}, \hat{H}\right] = \left[1 + \delta\vec{a}\nabla, \hat{H}\right] = 0 \qquad (1)$$

$\hat{H}$ оператори 1 сони билан албатта коммутация қилишади. Демак,

$$\left[\hat{P}, \hat{H}\right] = \hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P} = 0$$

(1) ни деб ёзиш мумкин бўлади. Бу ерда ∇ оператори $-i\hbar$ аниқлигида импулс операторидир. Охирги тенглик эса ёпиқ система учун зарра импулъсининг ҳаракат интеграли эканлигини бевосита кўрсатади;

б) фазонинг изотропик (барча йўналишлариниг эквивалентлиги) ёпиқ система хоссаларининг ихтиёрий бурчакка бурилишига нисбатан ўзгармас бўлишида намоён бўлади. Олдинги ҳолда кўрганимиздек, $\delta\varphi$ бурчакка чексиз кичик бурилишини $\delta\vec{\varphi}$ билан белгиласак, зарра кординатаси $\vec{r} \to \vec{r}'$ га ўтади , яни $\vec{r}' = \vec{r} + \left[\delta\vec{\varphi}\,\vec{r}\right]$, у ҳолда

$$\hat{L}_{\delta\phi} = 1 + \delta\varphi\left[\vec{r}\nabla\right],$$

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \left[\delta\phi \cdot \vec{r}\right]) = (1 + \delta\phi\left[\vec{r}\,\nabla\right])\,\psi(\vec{r}) = \hat{L}_{\delta\phi}\psi(\vec{r})$$

$\delta\phi$ бурчакка чексиз кичик буриш оператори дейилади . Биз бу сафар

$$\left[\hat{L}_{\delta\phi}, \hat{H}\right] = \left[1 + \delta\vec{\varphi}[\vec{r}\nabla], \hat{H}\right] = 0 \qquad (2)$$

бўлиши кераклигини кўрамиз. Бу ерда ҳам $[\vec{r}\nabla]-(-i\hbar)$ аниқликда импулс моменти оператори бўлганлиги учун (2) тенглик

$$[\hat{L},\hat{H}]=0$$

бўлади. Бундан

$$\hat{L}\hat{H}=\hat{H}\hat{L}$$

Бу эса импулс моментининг ёпиқ система учун ҳаракат интеграли бўлишини кўрсатади.

Мустақил ишлаш учун масалалар

1. Ёпиқ система учун энергиянинг сақланиш қонуни вақтнинг биржинслилиги билан боғланганлигини исботланг.

2. Агар электромагнит майдонда ҳаракат қилувчи зарядланган зарра учун Гамилтон оператори

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2+e\varphi$$

(бу ерда $\varphi,\vec{A}$-электростатик потенциал ва вектор потенциал) кўринишда бўлса, бу зарра учун ҳаракат тенгламаси ёзилсин .

3. Қандай шарт бажарилганда импулс моментининг квадтати $\hat{L}^2$ ва унинг проексияси $(\hat{L}_x)$ бирвақтнинг ўзида ҳаракат интеграллари ҳисобланади?

V-БОБ
ТЎЛҚИН ТЕНГЛАМАСИНИНГ КВАНТ ТИЗИМЛАРГА ТАДБИҚИ

3.1. Водород атоми учун Шредингер тенгламаси.

Бор назарияси янги квант қонуниятларни тушунишда катта қадам бўлди. У микродунё физикаси олдида пайдо бўлган атом нурланиши билан боғлиқ бўлган бутун бир катта масалани ечди ва шу билан бирга классик физика қонуниятларини атом ҳодисаларига қўллаш мумкин эмаслигини, атом ҳодисаларида квант қонунларнинг ролини кўрсатди. Лекин бошиданоқ Бор назарияси жиддий камчиликлардан ҳоли эмаслиги аён бўлди. У ярим классик, ярим квант назария эди. Бор назариясининг дастлабки ютуқларини эътиборга олган ҳолда, унинг бир қатор муаммоларни ҳал қила олмаганлигини айтиб ўтиш ҳам жоиздир. Бор назарияси қуйидаги муаммоларни ҳал қила олмади:

1. Нима учун ўтишлар фақат берилган энергетик сатҳлар орасида бажарилади-ю, ҳоҳлаганида эмас?
2. Нима учун электронлар электромагнит нурланиш чиқармайди ва спиралсимон ҳаракат қилиб ядрога қулаб тушмайди?
3. Мураккаб атомлар, хусусан гелий ва литий спектрининг табиати қандай?

Квант механикасида тўлқин функция тушунчаларидан фойдаланган Эрвин Шрёдингер атом тузилишининг тугал назариясини яратиш имконига эга бўлди. Шредингер назариясини тушуниш учун энг оддий структурага эга бўлган водород атомини кўриб ўтамиз. Квант механикасининг энг катта ютуқларидан бири бу оддий атомлар спектрини ва кимёвий элементларнинг даврийлигини тушунтириб беришида бўлди. Водород атомини тўла тавсифлаш учун иккала зарранинг - электрон ва протоннинг ҳаракатини эътиборга олиш зарур. Биз протонни электронга нисбатан жуда оғир зарра деб, унинг ҳаракатини ҳисобга олмаймиз ва протон атомнинг марказида турибди деб фараз қиламиз. Иккинчидан, электроннинг спинини инобатга олмаймиз. Бошқача айтганда, Шредингернинг норелятивистик тенгламаларидан фойдаланамиз. Юқорида айтилган тахминлар асосида атом фазосининг у ёки бу нуқтасида электроннинг қайд қилиниши (кузатилиши) амплитудаси ҳолат ва вақт функцияси сифатида қаралади. t-вақт моментида x, y, z нуқтада электронни қайд қилиниш амплитудасини $\psi(x,y,z,t)$ деб белгилайлик (3.1а-расм). Квант механикаси қонунларига биноан, бу амплитуданинг вақт бўйича ўзгариш тезлиги, шу функцияга таъсир этаётган Гамилтон операторини беради. Аввалдан биламизки,

Э.Шредингер
(1887-1961)

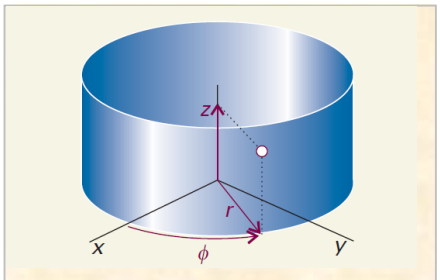
$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \qquad (3.1)$$

бунда

$$\hat{H}=-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r}) \qquad (3.2)$$

бу ерда m - электрон массаси, $U(\vec{r})$ - протоннинг электростатик майдонидаги электроннинг потенциал энергияси. Кулон майдонидаги электроннинг потенциал энергияси

$$U(r)=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (2.36)$$



3.1а- расм

Бунда е - электрон заряди ва $\varepsilon_0=8{,}85\times10^{-12}Ф\times м^{-1}$ - муҳитнинг электр сингдирувчанлиги доимийси. Квант механикаси нуқтаи назаридан электрон тўлқинлар йиғиндисидан ташкил топган система бўлиб, у Кулон майдонининг потенциал ўраси билан чегараланган. Бундай қараш, ўрада рухсат этилган тўлқинлар системасининг тўплами мавжудлиги ва улардан ҳар бири бўлган энергиянинг бирор мумкин бўлган қийматига мос келади деган фикрга олиб келади. Бу ҳолда тўлқин тенгламасини уч ўлчовли кўринишда ёзишга тўғри келади. Бундай қарашда Ψ тўлқин функция

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \qquad (3.3)$$

тенгликни қаноатлантириши керак. Биз аниқ энергияга эга бўлган ҳолатни излаганимиз учун ечимни

$$\psi(\hat{r},t)=\exp\left(-\frac{i}{h}Et\right)\psi(\vec{r}) \qquad (3.4)$$

кўринишда ёзамиз. У ҳолда $\psi(\hat{r})$ функция

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi=\left(E+\frac{e^2}{r}\right)\psi \qquad (3.5)$$

тенгламанинг ечими бўлиши керак. Водород атоми стационар ҳолатда бўлгани учун Шредингернинг вақтга боғлиқ бўлмаган тенгламасидан фойдаланиш маъқул. Тенгламадан кўриниб турибдики, Лаплас оператори ва Ψ функция *x, y, z* га боғлиқ, аммо потенциал энергия U(r) *x, y, z* нинг эмас, балки r масофанинг функциясидир. Потенциал энергия фақат r га боғлиқ бўлгани учун (3.5) тенгламани қутбий координаталар системасида ечамиз. Тўғри бурчакли координаталар системасида Лаплас оператори

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

Масала симметрияга эга бўлгани учун, энг қулай координаталар системаси сферик системадир. Бундай система 3.1-расмда тасвирланган. Сферик координаталар бўлиб $\vec{r}$ - радиус вектор, θ - қутбий бурчак ва φ -азимутал бурчак хизмат қилади. Сферик координаталар системасидан тўғри бурчакли координаталарга ўтиш формуласи

$$x=r\ \sin\theta\ \cos\phi,$$
$$y=r\ \sin\theta\ \sin\phi,$$
$$z=r\ \cos\phi.$$

бунда $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ координата бошидан P нуқтага ўтказилган радиус векторнинг узунлиги. $\theta=\arccos\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$ радиус-вектор билан z ўқ ташкил қилган (қутбий) бурчак. $\phi=\mathrm{arctg}\left(\frac{y}{x}\right)$ радиус-векторнинг (xy) текислигига проекциясининг x ўқи билан ташкил қилган (азимутал) бурчаги. Математик алмаштиришлар ёрдамида Лаплас операторини сферик координаталарда ифодаласак, оралиқ $f(\vec{r})=f(r,\theta,\phi)$ функция учун

$$\nabla^2 f(r,\theta,\phi)=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf)+\frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\phi^2}\right\}$$

тенгликни ёзиш мумкин. Шундай қилиб, сферик координаталар системасида $\psi(r,\theta,\phi)$ функцияни қаноатлантирувчи стационар Шрёдингер тенгламаси

$$-\frac{h^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right]+\left(-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi\right)=E\psi$$

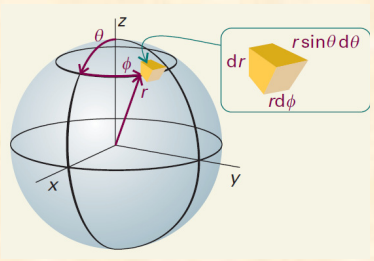
кўринишга эга. Шундай қилиб тўлқин функция энди r, θ ва φ га боғлиқ, яъни

$$\psi=\psi(r,\theta,\phi) \qquad (3.6)$$

$x = r\ \sin\theta\ \cos\phi,$

$y = r\ \sin\theta\ \sin\phi,$

$z = r\ \cos\phi.$



3.1б- расм

Умуман олганда, тўлқин функция r ва θ, φ бурчакларга боғлиқ, лекин тўлқин функция махсус ҳолларда бурчакка боғлиқ бўлмаслиги ҳам мумкин (3.1б-расм). Агар тўлқин функция бурчакка боғлиқ бўлмаса, бу ҳолат ҳаракат миқдори моментининг барча компоненталарининг нолга тенглигини билдиради. Натижада тўлқин функциянинг тўла ҳаракат миқдори моменти нолга тенг бўлиб, бу ҳолат S-ҳолат дейилади. Охирги тенгламанинг қулай томони уни учта тенглик орқали ёзиш мумкинлигидир. Бунинг учун охирги тенгламани учта функция кўпайтмаси тарзида ифодалаймиз

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \qquad (3.7)$$

Бу ерда $R(r)-\theta$ ва φ нинг ўзгармас қийматида Ψ-функциянинг радиус вектори бўйича ўзгаришини характерлайди. $\Theta(\theta)-r$ ва φ нинг ўзгармас қийматида марказий майдон сфераси меридиани бўйлаб тўлқин функция Ψ нинг зенит бурчаги θ га боғлиқ ўзгаришини тасвирлайди. $\Phi(\varphi)-r$ ва θ нинг ўзгармас қийматида Ψ нинг мазкур сфера параллели бўйлаб ўзгарувчи азимут бурчаги φ га боғлиқ ўзгаришини характерлайди. (3.7) ифодани (3.6) тенгламага қўямиз ва қуйидагини оламиз

$$\theta\Phi\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{R\theta}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\frac{\Phi R}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\theta}{d\theta}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)R\,\theta\Phi=0 \qquad (3.8)$$

(3.8) ни Ψ=RθΦ га бўлиб r га боғлик ифодаларни θ ёки φ га боғлиқ бўлган ифодалардан алоҳида ёзиб олишга имкон беради. Натижада фақат r га боғлиқ бўлган радиал қисм ва фақат θ ва φ га боғлиқ бўлган бурчак қисмларни ажратиш мумкин бўлади

$$R\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{\Phi}{\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\frac{\theta}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\theta}{d\theta}\right)+\frac{2mr^2}{h^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=0\,.$$

Охирги тенгликнинг ҳар бирини l(l+1) кўринишдаги доимийликка тенглайлик

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=l(l+1)\ R$$

ва

$$\frac{1}{\Phi\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+\frac{1}{\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\theta}{d\theta}\right)=l(l+1) \qquad (3.9)$$

ларни ҳосил қиламиз. Шунингдек (3.9) ни иккита бир-бирига боғлиқ бўлмаган тенглама кўринишида ёзиш мумкин. Бунинг учун (3.9) ни $\sin^2\theta$ га кўпайтириб, гуруҳлаб тенглик кўринишига келтирамиз

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=l(l+1)\sin^2\theta-\frac{\sin\theta}{\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\theta}{d\theta}\right) \qquad (3.10)$$

ва ҳосил бўлган тенгликнинг икки томонини бир ўзгармасга m_l^2 га тенг бўлган ҳолдагина ўринлидир

$$\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}-\frac{1}{\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\theta}{d\theta}\right)=l(l+1) \qquad (3.11)$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}+m_l^2\Phi=0\ . \qquad (3.12)$$

Шундай қилиб, Шредингер тенгламасини учта оддий дифференциал тенгламаларга ажратдик.

Радиал тенглама. Тўлқин функциянинг радиусга боғлиқлигини тавсифлаш учун

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2mr^2}{h^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)R=l(l+1)R \qquad (3.13)$$

радиал тенгламадан фойдаланамиз. Бу тенгламанинг ечими $L_{n,l}(r)$ – Лягерр полиномлари кўринишида изланади. Муфассал математик амалларни бажариб ўтирмасдан, биз радиал хусусий функцияларни қуйидаги кўринишда ёзамиз

$$R_{n,l} = \exp(-nr) r^{l} L_{n,l}(r) \tag{3.14}$$

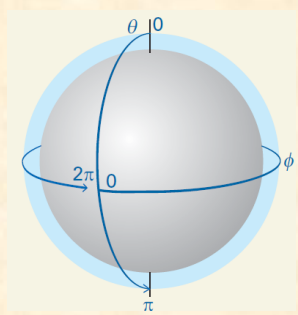
бунда n-бош квант сон нолдан фарқли исталган бутун сон; l орбитал квант сон бўлиб бошқа тенгламалардан олинади. Лагерр полиномлари хоссаларига асосан (1) нинг ечими n≥l+1 ҳолатлар учун мавжуд. Бунда бош квант сон n=1,2,3.. қийматлар қабул қилади; орбитал квант сон $l=0, 1, 2\ldots, (n-1)$; магнит квант сон $m_l=0, \pm1, \pm2., \pm l$; қийматлар қабул қилади.

Азимутал тенглама ва унинг ечими. Юқорида ёзилган тенгламалар ичида энг соддаси бу азимутал тўлқин тенгламасидир. Бу тенглама системанинг z ўқи атрофида айлангандаги тўлқин функция ҳолатини тасвирлайди. Бу тенглама иккита хақиқий ва битта мавҳум ечимга эга. Иккинчи тартибли ҳосилали азимутал тўлқин тенглама

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l^2\Phi = 0 \tag{3.15}$$

қуйидаги ечимларга эга

$$\begin{aligned} \Phi &= A\sin m_l\phi, \\ \Phi &= A\cos m_l\phi, \\ \Phi &= A\exp(im_l\phi). \end{aligned} \tag{3.16}$$



3.1в- расм

Агар атом z ўқи атрофида тўла айланса, у ҳолда Φ нинг ечими унинг дастлабки қийматига тенг бўлади, чунки φ-бурчак ўзининг дастлабки ҳолатига ўтади. $m_l\varphi$ катталик 2π га каррали ўзгаради (3.1в-расм). (3.16)

функция бу шартни қаноатлантиради. φ радианларда ўлчанганлиги учун m_l– катталик бутун сонлар қабул қилиши лозим. m_l ни нолга тенглиги ва тескари томонга айланганлиги ҳам ҳисобга олсак m_l нинг қабул қилиши мумкин бўлган қийматлари қуйидагилардир

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3\ldots; \qquad (3.17)$$

Квант механикасида аввал айтилган таърифларга кўра (3.17) даги m_l нинг квадрати хусусий қиймат бўлиб, (3.16) даги функциялар хусусий функциялар дейилади. m_l –доимийлик квант механикасида магнит квант сони деб аталади.

Қутбий тўлқин функция. Қутбий бурчак θ учун ёзилган

$$\frac{m_l^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\theta\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\theta}{d\theta}\right) = l(l+1)$$

дифференциал тенглама мураккаб ечимга эга. Шу сабабли унинг ечими

$$\theta(\theta) \approx R_{l,ml}(\cos\theta)$$

кўринишда эканлигини кўрсатамиз. $R_{l,ml}(\cos\theta)$ - Лежандрнинг бирлашган полиноми дейилади. Бу полином $\cos\theta$ га l ва m_l каби иккита доимийликка боғлиқ. m_l квант сони фақат мусбат ва манфий бутун қийматларга, шунингдек нол қийматга эга бщлиши мумкин. Қутбий бурчакнинг θ билан π орасида ўзгаришини инобатга олиб, шунингдек Лежандр полиномининг хоссаларига асосан l катталик фақат бутун сонлар қабул қилиши мумкин. Натижада l учун қуйидаги шарт бажарилади

$$l=0,\ 1,\ 2\ldots \quad m_l=0,\ \pm1,\ \pm2.,\ \pm l,\ldots$$

l нинг қиймати m_l абсолют қийматига тенг ёки ундан катта бўлиши мумкин. Шунинг учун

агар l=0 бўлса, $m_l = 0$

агар l=1 бўлса, $m_l = 0$ ёки ±1

агар l=2 бўлса, $m_l=0$ ёки ±1, ±2 ва ҳоказо бўлиши мумкин.

Умуман олганда l нинг ҳар бир берилган қиймати учун 2l+1 та мумкин бўлган ечим мавжуд. Бу ҳолни шундай таърифлаш мумкин: l нинг берилган қийматига мос келувчи ҳолат m_l га нисбатан (2l+1) карра айниган l нинг берилган қийматига мос келган (2l+1), энергиянинг хусусий қийматлари ўзаро тенг бўлса, бундай ҳолат *айниган ҳолат* дейилади. Ташқи таъсир натижасида бу хусусий қиймат ўзгарса, у ҳолда айниш йўқолади ва ҳосил бўлган *ҳолат айнимаган* дейилади. Агар водород атомини магнит майдонига

жойлаштирсак, m_l га нисбатан айнишни йўқотиш мумкин. Шу сабабга кўра m_l ни магнит *квант сони* деб айтилади.

3.2. Шредингер тенгламасининг эркин зарралар учун тадбиқи.

Агар зарра эркин бўлиб, унга ҳеч қандай ташқи кучлар таъсир этмаётган бўлса, унинг потенциал энергияси нолга (U=0) тенг бўлиб, тўлиқ энергияси унинг кинетик энергиясидангина иборат бўлади. Масалани соддалаштириш учун зарра x ўққа параллел ҳолда ҳаракатланмоқда деб оламиз. Унинг координаталаридан олинган хусусий ҳосилалар нолга тенг бўлиб, Лаплас операторида битта ҳад қолади

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Бу ҳолда Шредингер тенгламаси соддалашиб, қуйидаги кўринишни олади

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{h^2}W\psi = 0 \qquad (3.18)$$

(3.18) кўринишдаги дифференциал тенгламанинг хусусий ечими ясси тўлқин тенглама кўринишида бўлади

$$\psi(x,t) = A\sin(\omega t - kx) \qquad (3.19)$$

Бунга ишонч ҳосил қилиш учун (3.19) ифодани икки марта дифференциаллаб (3.18) га қўйиб кўрамиз

$$-k^2 À\sin(\omega t - k\tilde{o}) + \frac{2m}{\hbar^2}W\sin(\omega t - k\tilde{o}) = 0$$

бундан

$$k = \frac{1}{h}\sqrt{2mW} \qquad (3.20)$$

эканлигини топамиз, $\sqrt{2mW} = P$ бўлгани учун

$$k = \frac{p}{h} \qquad (3.21)$$

келиб чиқади. Кўриниб турибдики, ҳосил қилинган бу ифода де-Бройл формуласининг ўзгинасидир. Бу Шредингер тенгламасидан де-Бройл формуласи келиб чиқишини билдирмайди. Аслида бунинг тескариси бўлиб,

Шредингер, ўзида де-Бройл тўлқинини мужассамлаштирган тенгламани ҳосил қилган. (3.20) тенгликни бошқача кўринишда ҳам ёзиш мумкин

$$W=\frac{h^2k^2}{(2m)}=\frac{P_x^2}{(2m)} \qquad (3.22)$$

(3.22) дан кўринадики, эркин зарранинг энергияси ҳар қандай қийматни қабул қила олиши мумкин. Яъни, унинг энергиясининг спектри узлуксиздир. Бу тўлқин сони k нинг ва зарранинг импулси p_x нинг узлуксиз ҳолда ўзгаришидан келиб чиқади. Шундай қилиб, эркин зарра квант механикасида ясси монохроматик де-Бройл тўлқини (3.21) билан ифодаланади. Бундай заррани фазонинг ҳар қандай нуқтасида топилиш эҳтимоллиги бир хил ва вақтга боғлиқ бўлмай, амплитуданинг квадратига пропорционалдир

$$|\psi|^2=\psi\cdot\psi^*=\grave{A}^2$$

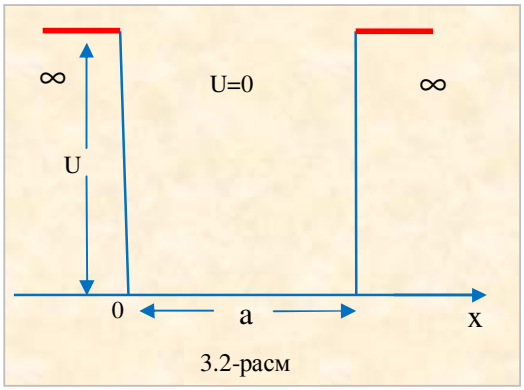
Шредингер тенгламаси эркин зарранинг энергиясига ҳеч қандай чегара қўймайди. Яъни, унинг энергияси квантланмайди, у ҳар қандай қийматни қабул қилиши мумкин. Агар зарра боғланган бўлса, унинг энергияси квантланиши мумкин. Масалан, атомдаги электрон ядрога боғланган бўлгани учун унинг энергияси узлукли қийматларни қабул қилади, яъни квантланади.

Чексиз чуқур потенциал ўрадаги зарра. Зарра кенглиги *a* бўлган чексиз чуқур потенциал ўрада ҳаракатланаётган бўлсин. Ўранинг деворлари чексиз баланд бўлгани учун заррача ундан ташқарига чиқа олмайди. Унинг координатаси $0\le x\le a$ қийматларни қабул қилиши мумкин. Зарра ўранинг деворларига урилиб, ундан қайтиши натижасида деворлар орасида тўғри чизиқли траектория бўйлаб ҳаракат қилиши мумкин. Зарранинг бу ўрадаги потенциал энергияси манфий ва ческиздир (U=∞). Агар электрон ўрадан чиққан тақдирда ҳам, унинг потенциал энергияси нол бўлиб, у эркин заррага айланади. Шундай қилиб, *a* кенгликдаги чексиз чуқур потенциал ўрадаги зарранинг потенциал энергияси учун

$$U(x)=\begin{cases}-\infty, & x<0\\ 0, & 0\le x\le a\\ \infty, & x>a\end{cases}$$

шартни ёзиш мумкин. Бундай потенциал ўранинг графиги 3.2-расмда кўрсатилган. Бу ўрада ҳаракатланаётган *m* – массали микрозарра учун Шредингер тенгламаси қуйидаги кўринишда ёзилади

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{h^2}(W-U)\Psi=0$$



3.2-расм

Ўранинг деворлари чексиз баланд бўлгани учун зарра ўрадан ташқарига чиқа олмайди. Шунинг учун заррани ўрадан ташқарида бўлиш эҳтимоллиги нолга тенг. Ўранинг четларида x=0 ва x=a бўлганда тўлқин функция ҳам нолга айланади. Яъни, чегаравий шарт ψ(x)=ψ(a)=0 бўлади. Ўранинг ичидаги зарра учун Шредингер тенгламаси

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+k^2\Psi=0 \qquad (3.23)$$

кўринишда бўлади. Бу ерда

$$k^2=\frac{2mW}{h^2}$$

(3.23) кўринишдаги дифференциал тенгламанинг умумий ечими

$$\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$$

тенгликдан иборат бўлади. Агар юқоридаги чегаравий шартдан ψ(0)=0 бўлиши учун B=0 эканлигини ҳисобга олсак, (3.23) тенгламанинг ечими

$$\psi(x)=A\sin kx \qquad (3.24)$$

бўлади, x=a эканлигини эътиборга олсак, (2.52) ифода

$$\psi(a)=A\sin ka$$

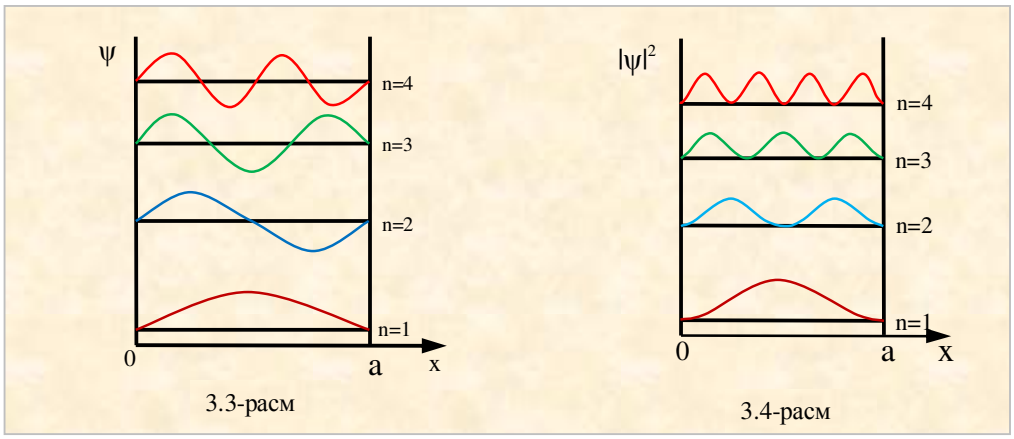
кўринишни олади. Юқоридаги чегаравий шарт, яъни ψ(a)=Asinka=0 бўлиши фақат ka =nπ (n=1,2,3,…) бўлганда бажарилади. Демак,

$$k = \frac{n\pi}{a} \qquad (3.24)$$

(3.24) ни (3.23) га қўйиб, зарранинг энергияси учун

$$W = \frac{n^2 h^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad (n=1,2,3,\ldots) \qquad (3.25)$$

ифодани топамиз. Бу ифодадан қуйидаги хулоса келиб чиқади: потенциал ўрадаги микрозарранинг энергияси ихтиёрий қийматларга эмас, балки қатор дискрет қийматларга эга бўлиши мумкин (3.3-расм). W нинг квантлашган бу



3.3-расм 3.4-расм

қийматларини *энергетик сатҳлар* деб, микрозарранинг энергетик сатҳини аниқловчи *n* сон эса *квант сон* деб аталади. Шундай қилиб, W нинг фақат (3.25) ифода билан аниқланувчи қийматларгина Шредингер тенгламасинг ечимлари бўлиши мумкин экан. Энергиянинг бу қийматларини W нинг *хусусий қийматлари деб*, тенгламанинг уларга мос келган ечимларини эса *масаланинг хусусий функциялари* деб аталади. Энди (3.25) дан фойдаланиб, қўшни $W_н$ ва W_{n+1} энергетик сатҳларнинг бир-биридан узоқлигини топайлик

$$\Delta W = W_{n+1} - W_n = \frac{\pi^2 h^2}{2ma^2}(2n+1). \qquad (3.26)$$

Бу ифодадан фойдалансак, кенглиги атом ўлчамига мос келувчи ($a \sim 10^{-10}$ m) потенциал ўрадаги электрон ($m_e \sim 10^{-30}$ кг) энергиясининг хусусий қийматлари учун

$$\Delta W \approx \frac{3{,}14^2 \cdot 1{,}05^2 \cdot 10^{-68}}{2 \cdot 10^{-30} 10^{-20}}(2n+1)\text{Ж} = 0{,}34 \cdot 10^2 (2n+1)\,\text{эВ}$$

эканлигини топамиз. Бу ҳолда энергетик сатҳларнинг дискретлиги жуда аниқ намоён бўлади. Бирор а $=10^{-2}$ м бўлган потенциал ўра учун, молекула массаси $\sim 10^{-26}$ кг деб ҳисобласак, у ҳолда $\Delta W=0{,}34\cdot 10^{-18}(2n+1)$ эВ ни ҳосил қиламиз. Бу ҳолда энергетик сатҳлар шунчалик зич жойлашган бўладики, уларни узлуксизга яқин деб ҳисобласа ҳам бўлади. Аслида, энергетик спектр фақат $a\to\infty$ дагина (W=0) узлуксиз қийматга эга бўлади. Энергетик сатҳларнинг жойлашуви ҳақида мулоҳаза қилиш учун (3.26) ни (3.25) га нисбатини олиб,

$$\frac{\Delta W}{W_{ï}}=\frac{2n+1}{n^2}$$

муносабатни ҳосил қиламиз. n нинг анча катта қийматларида каср суратидаги 1 ни ҳисобга олмаса ҳам бўлади, натижада $\Delta W/W_н\approx 2/n$ ҳосил бўлади. Демак, n катталашган сари ΔW нинг қиймати W_n га нисбатан кичиклашиб боради. Натижада энергетик сатҳлар бир-бири билан туташадиган даражада яқинлашиб кетади. Бошқача қилиб айтганда, квант сонининг катта қийматларида квант механикасининг хулосалари классик физикада олинган натижаларга мос келиши керак. Бу қоида Бор томонидан аниқланган бўлиб, уни *мослик принципи* деб аталади. Классик физика ўонунларига биноан, ўрадаги зарранинг барча ҳолатлари бир хил эҳтимолликда бўлади. Квант механикасида бу ҳодиса қуйидагича таҳлил қилинади. Шредингер тенгламасининг ечими, яъни н квант сонининг бизни қизиқтирувчи қийматлари учун тўлқин функцияларни топиб, $|\Psi|^2$ нинг графигини чизиш керак. 3.4-расмда $|\Psi|^2$ нинг х га боғлиқлик графиги *n* нинг турли қийматлари учун тасвирланган.

Расмдан кўринадики, n=1 ҳолатда заррани қайд қилиш эҳтимоллиги ўранинг ўртасида максимумга эришади. n=2 ҳолатда эса заррани ўра деворларига яқин нуқталарда ва ўранинг ўртасида топиб бўлмайди, чунки бу нуқталарда $|\Psi|^2=0$. Бу ҳолатда зарранинг қайд қилиш эҳтимоллиги ўранинг икки нуқтасида максимумга эришади. n=3 ҳолатда эса заррани қайд қилиш эҳтимоллиги учта максимумга эришади. n нинг анча катта қийматларида эҳтимоллик максимумларини характерловчи дўнгликлар ҳам ортиб боради, аммо бу дўнгликларнинг ҳаммаси $\Delta x=a$ кенгликда жойлашиши керак. n каттароқ бўлгани сари дўнгликлар бир-бири билан туташадиган даражада яқин жойлашади, яъни заррани қайд қилиш эҳтимолликлари бир хил бўлган нуқталар сони ортиб боради.

Гармоник осциллятор.

Классик ва квант назариясининг кўп масалаларини ечишда эластик кучга ўхшаш куч таъсирида тебранма ҳаракат қилувчи система модел сифатида фойдаланилади ва уни *чизиқли гармоник осциллятор деб аталади*.

Пружинали, физик ва математик маятниклар гармоник осцилляторларга мисол бўла олади. Гармоник осцилляторнинг потенциал энергияси

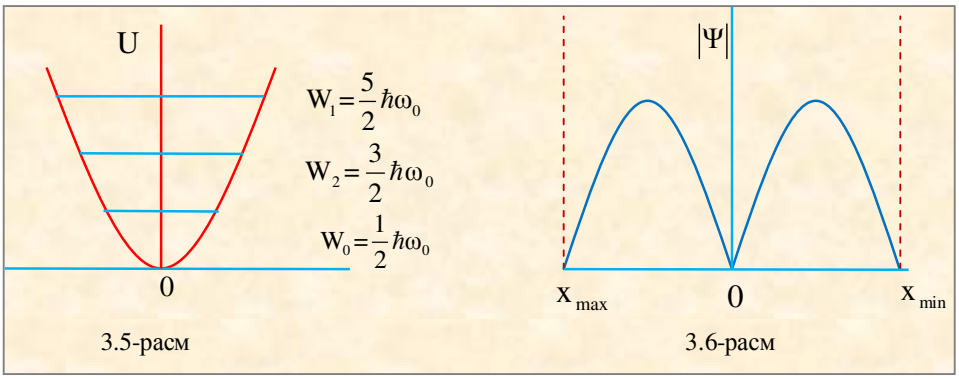
$$U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \qquad (3.27)$$

формула билан аниқланиши бизга маълум. Бу ерда ω_0 – осцилляторнинг хусусий частотаси, m – осцилляторнинг массаси. (3.27) боғланиш графиги параболадан ёки бошқача айтганда парабола шаклидаги «потенциал» ўрадан иборат бўлади. Осцилляторнинг тўлиқ энергияси уни потенциал ва кинетик энергияларининг йиғиндисига тенг ва у вақт ўтиши билан ўзгармайди

$$W = W_K + U = \frac{m\omega_0^2 A^2}{2}. \qquad (3.28)$$

Бу ифода энергиянинг сақланиш қонунини ифодалайди. Энергиянинг сақланиш қонунига кўра тўлиқ энергия осцилляторга берилган дастлабки энергияга тенг бўлади. Осцилляторнинг тўлиқ энергияси уни тебраниши давомида потенциал ва кинетик энергия орасида турлича тақсимланади. Агар 3.5-расмда кўрсатилган графикда тўлиқ энергияга мос жойдан горизонтал чизиқ ўтказсак, бу чизиқ координаталари x=±A бўлади, бу ерда A-осцилляторнинг тебраниш амплитудаси. Осциллятор –A, +A ораликдан чиқа олмайди. Агар у бу ораликдан чиқади десак, унинг потенциал энергияси тўлиқ энергиядан ҳам катта бўлиб, энергиянинг сақланиш қонуни бузилади. Демак, классик осциллятор чегараланган фазо соҳасида тебранади.

Квант механикада *чизиқли гармоник осциллятор-квант осциллятор деб аталади*. *Квант осцилляторга мисол қилиб*, кристалл панжара тугунида тебранма ҳаракат қилаётган атомни,



3.5-расм 3.6-расм

молекулани ва умуман олганда тебранма ҳаракат қилаётган ҳар қандай микрозаррани олиш мумкин. Квант осциллятори учун Шредингер тенгламаси қуйидагича ёзилади

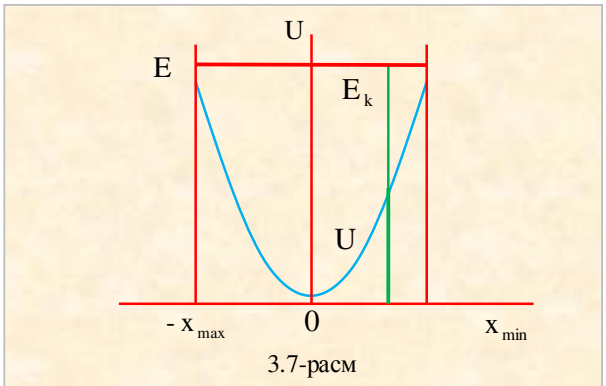
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{2m}{h^2}(W-\frac{m\omega_0^2x^2}{2})\psi=0. \qquad (3.29)$$

Бу ерда $U=\frac{m\omega_0^2x^2}{2}$ осцилляторнинг потенциал энергияси, W– осцилляторнинг тўлиқ энергияси. Дифференциал тенгламалар назариясидан маълумки, (3.27) кўринишдаги тенглама энергиянинг

$$W_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)h\omega_0\ , \quad (n=0,1,2,\ldots) \qquad (3.30)$$

бўладиган хусусий қийматларида ечимга эга. (3.30) формуладан кўринадики, квант осциллятор энергияси дискрет қийматларни қабул қила олади, яъни уни энергияси квантланади. Квант осцилляторнинг ҳам энг кичик энергияси вертикал деворли потенциал ўра ичидаги зарранинг энергиясига ўхшаб, нолдан катта бўлади. Осцилляторнинг бу энг кичик энергияси (3.30) дан n=0 бўлганда $W_0=\frac{h\omega_0}{2}$ бўлади. Квант осциллятор ҳақидаги масаланинг ечимидан классик физикага хос бўлмаган янги натижа келиб чиқади. Квант осциллятори сифатида қаралаётган зарра классик физика нуқтаи назаридан мумкин бўлмаган соҳада ҳам бўлиши мумкин. Классик нуқтаи назардан қараганда зарра (-A ва +A) оралиғидан чиқа олмаслиги керак. Аммо квант осциллятори парабола шаклидаги потенциал ўрадан ҳам ташқарига чиқиши мумкин. Квант осцилляторнинг координаталари x дан x+dx гача бўлган соҳада бўлиш эҳтимоллиги

$$W_{кв}(x)dx=\left|\psi_n(x)\right|^2dx$$



3.7-расм

ифода билан аниқланади. 3.6-расмда n=1 квант ҳолати учун квант механикасидаги эҳтимоллик зичликлари солиштирилган. Графикдан кўриниб турибдики, квант осциллятори классик физикага рухсат этилмаган соҳада ҳам бўлиши мумкин. Бу зарранинг тўлқин хусусиятидан, бевосита Шредингер тенгламасининг ечимидан келиб чиқади.

Назорат саволлари

1. Тўлқин функцияси Шредингер тенгламасининг ечими бўлиши учун қандай шартларни қаноатлантириш керак?
2. Тўлқин функцияси амплитудаси квадратининг моҳияти нима?
3. Стационар ҳолатлар учун Шредингер тенгламасини ёзинг ва изоҳланг.
4. Ностационар ҳолатлар учун Шредингер тенгламасини ёзинг ва тушунтиринг.
5. Шредингер тенгламасида зарранинг қайси хусусияти ҳисобга олинган?
6. Зарра қачон эркин ҳаракат қилади ва бундай ҳаракат учун Шредингер тенгламаси қандай кўринишда ёзилади?
7. Чизиқли гармоник осцилляторни қандай тушунасиз?

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1-Масал. Потенциал энергияси $U=\frac{1}{2}\left(k_1x^2+k_2y^2+k_3z^2\right)$ бўлган уч ўлчамли гармоник осцилятор энергетик сатҳлари топилсин.
Ечиш: Уч ўлчамли осцилятор учун Шредингер тенгламаси

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{1}{2}\left(k_1x^2+k_2ó^2+k_3z^2\right)\psi=E\psi \qquad (1)$$

кўринишда ёзилади. Бу тенгламада

$$\psi=\psi(x,y,z)=\psi_1(x)\,\psi_2(y)\,(\psi_3(z) \qquad (2)$$

ўзгарувчиларга ажратиш мумкин бўлади. Бу функцияни (1) га қўйиб,олинган тенгламанинг ҳар иккала тарафини (2) га бўламиз:

$$\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{\psi_1''}{\psi_1}+\frac{m\omega_1^2}{2}x^2\right)+\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{\psi_2''}{\psi_2}+\frac{m\omega_2^2}{2}y^2\right)+\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{\psi_3''}{\psi_3}+\frac{m\omega_3^2}{2}z^2\right)=E. \qquad (3)$$

Бу ерда $\omega_i=\sqrt{\frac{k_i}{m}}$. Тенгламада иштирок этаётган x,y,z ўзгарувчилар ўзаро боғлиқ бўлмаганлари учун ҳар бир қавс ичида жойлашган ифода мос равишда E_1,E_2,E_3 ларга тенг бўлади ва ечими ахтарилаётган уч ўлчамли масала бир ўлчамли масалага келади:

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\psi_1''}{\psi_1}+\frac{m\omega^2{}_1}{2}x^2=E_1.$$

Қолган ўзгарувчилар учун ҳам тенглама худди шунга ўхшаш бўлади ва $E=E_1+E_2+E_3$-уч ўлчамли осцилятор энергияси бир ўлчамли осцилятор энергиялари йиғиндисидан иборат бўлади. Ўлчамсиз ўзгарувчилар

$$\xi_1=\sqrt{\frac{m\omega_1}{h}}x,\ \xi_2=\sqrt{\frac{m\omega_2}{h}}y,\ \xi_3=\sqrt{\frac{m\omega_3}{h}}z$$

киритамиз ва масалани стандарт масалага айлантирамиз ҳамда бир ўлчамли осцилятор учун топилган ечимлардан фойдаланамиз

$$E_1=E_{n_1}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)h\omega_1.$$

У ҳолда умумий энергия

$$E(n_1,n_2,n_3)=E_{n_1}+E_{n_2}+E_{n_3}=h\left[\left(n_1+1/2\right)\omega_1+\left(n_2+1/2\right)\omega_2+\left(n_3+1/2\right)\omega_3\right].$$

Тенглама ечими эса

$$\psi(\xi_1,\xi_2,\xi_3)=C\exp\left(-\frac{\xi_1^{\,2}+\xi_2^{\,2}+\xi_3^{\,2}}{2}\right)H_{n_1}(\xi_1)\,H_{n_2}(\xi_2)\,H_{n_3}(\xi_3)$$

кўринишга эга бўлади.

2-Масала: Кучланганлиги $\vec{E}$ бўлган доимий электр майдонига киритилган бир ўлчамли гармоник осцилятор энергетик сатҳи ва тўлқин функцияси топилсин.

Ечиш: Берилган ҳолда гармоник осцилятор потенциал энергияси

$$U(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2-e\left|\vec{E}\right|x$$

кўринишда бўлади.Қуйидагича алмаштиришлар

$$x_1=x-\frac{e\left|\vec{E}\right|}{m\omega^2}\ ,\ \ E_1=E+\frac{e^2\left|E\right|^2}{2m\omega^2}$$

ёрдамида потенциал энергияни тўлиқ квадратга келтирамиз:

$$U(x_1)=\frac{m\omega^2}{2}x_1^{\,2}\,.$$

Агар $\xi=\sqrt{\frac{h}{m\omega^2}}x_1$ ўзгарувчи киритсак, Шредингер тенгламаси стандарт кўринишга келади

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\psi}{d\,x_1^2}+\frac{m\omega^2}{2}x_1^2\psi=E_1\psi\,.$$

Бу тенгламанинг ечими эса бизга осцилляторга бағишланган мавзуда батафсил берилган

$$E_n=(n+1/2)\,h\omega-\frac{e^2\left|\vec{E}\right|^2}{2m\omega^2},$$

$$\psi_n(\xi)=Ce^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi),\ H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}.$$

VI-БОБ
ЗАРРАЧАЛАРНИНГ ПОТЕНЦИАЛ ТЎСИҚДАН ЎТИШИ

6.1. Стационар ҳолатлар. Стационар ҳолатда жойлашган зарра учун эҳтимоллик зичлиги ҳамда токнинг эҳтимоллик зичлиги вақтга боғлиқ бўлмайди. Ҳақиқатдан, агар биз стационар ҳолат тўлқин функцияси

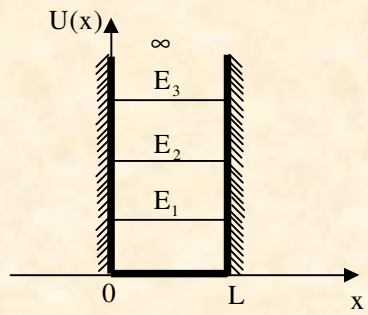
$$\psi(x,t)=\varphi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et},$$

эканлигини эсласак, эҳтимоллик зичлиги

$$\rho(x,t)=\left|\psi(x,t)\right|^2=\left|\varphi(x)e^{-\frac{i}{h}Et}\right|^2=\left|\varphi(x)\right|^2=\rho(x,0),$$

ва токнинг эҳтимоллик зичлиги

$$\vec{j}(x,t)=-\frac{i}{h}\left[\psi^*(x,t)\nabla\psi(x,t)-\psi(x,t)\nabla\psi^*(x,t)\right]=$$
$$=-\frac{ih}{2m}\left[\psi^*(x)\nabla\psi(x)-\psi(x)\nabla\psi^*(x)\right]=\vec{j}(x,0)$$



6.1-расм

кўринишларга эга эканлиги келиб чиқади. Биз квант механикасининг бир ўлчамли соҳада ҳамда стационар ҳолатда жойлашган заррача учун содда масалаларни кўриб ўтамиз. Ана шундай масала сифатида потенциал яшик ичидаги заррачанинг ҳаракатидир.

1.Потенциал яшик ичидаги заррачанинг ҳаракати

Потенциал яшик фазонинг чегаралланган соҳаси бўлиб, соҳа чегарасида заррага чексиз катта итарувчи куч таъсир этади (6.1-расм), соҳанинг қолган қисмида эса потенциал нолга тенг бўлади

$$U(x)=\begin{cases}0, & o<x<L.\\ \infty, & x<0. \quad x>L,\end{cases} \tag{6.1}$$

Бундай яшик ичида жойлашган зарра учун Шредингер тенгламаси ёзамиз

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0, \tag{6.2}$$

бу ерда $k^2=\frac{2mE}{h^2}$. Берилган тенгламанинг ечимини турғун тўлқин

$$\psi(x)=A\sin(kx+\delta) \tag{6.3}$$

шаклида излаймиз. Яшик чегараси $x=0;L$ нуқталарда $U(x)=\infty$ бўлгани учун бу нуқтада зарра ҳолати мавжуд бўлмайди, яъни

$$\Psi(x)\big|_{x=0;L}=0 \tag{6.4}$$

Шунинг учун $x=0$ бўлганда $A\sin\delta=0,\ \delta=0$ бўлади. Иккинчи чегара $(x=L)$ да эса

$$A\sin kL=0 \tag{6.5}$$

шарт бажарилади. Бу ерда $A\neq 0,\ k\neq 0,\ L\neq 0$ бўлгани учун

$$kL=n\pi, \qquad (n=1,2,3....) \tag{6.6}$$

тенгликни ҳосил қиламиз. Бу тенгликдан қуйидаги ифодаларни ҳосил қиламиз

$$k_n=\frac{\pi}{L}n \text{ ёки } E_n=\frac{1}{2m}\left(\frac{\pi h}{L}\right)n^2. \tag{6.7}$$

Агар потенциал яшик кенглиги атом масштаби тартибида, яъни $L\approx 10^{-10}m$ га яқин бўлса, у ҳолда бу яшикдаги электрон энергияси $E_n=37,3n^2$ эВ қийматга эга бўлади. Охирги тенгликлардан фойдаланиб, ҳар бир ҳолат учун заррачанинг энергетик қийматларини ҳисоблашимиз мумкин

$$\begin{aligned} &n=1 && E_1=37,3\ eV;\\ &n=2 && E_2=37,3\times 4=149,2\,eV;\\ &n=3 && E_3=37,3\times 9=335,7\,eV. \end{aligned} \tag{6.8}$$

Ушбу энергияларга мос келадиган тўлқин функциялар

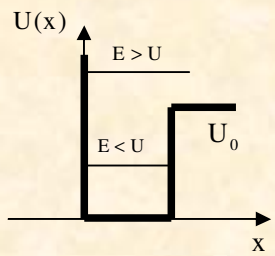
$$\psi_n(x)=A\sin\frac{n\pi}{L}x, \qquad A=\sqrt{\frac{2}{L}}. \tag{6.9}$$

орқали топилади ва

$$\begin{aligned}\psi_2(x)&=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi}{L}x,\\ \psi_3(x)&=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{3\pi}{L}x,\\ \psi_1(x)&=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi}{L}x.\end{aligned} \tag{6.10}$$

бўлади. Кўриш мумкинки, яшик учун унинг кенглиги бўйлаб бутун ярим тўлқин

$$L=n\frac{\lambda}{2}x, \qquad (n=1,2,3.....). \tag{6.11}$$



6.2-расм

жойлашган бўлар экан. Бу эса яшик ичида турғун тўлқинлар ҳосил бўлиш шарти ҳисобланади. Шу жойда классик механика ва квант механикасида яшикда жойлашган зарра ҳолати ўртасидаги муҳим фарққа эътиборни қаратамиз (6.2-расм). Агар мумтоз механика бўйича бундай зарра нолинчи энергияга эга бўлиши мумкин бўлса, квант механикасида зарранинг энг минимал энергияси $E_1=37{,}3\,eV$ бўлади ва ундан кам қийматга эга бўла олмайди. Биз қараб чиққан бу потенциал яшик ҳисобланади. Фараз қилайлик, потенциал яшик деворлари чекли бўлсин, яъни

$$U(x)=\begin{cases}U_0, & x<0.\quad x>L,\\ 0, & o<x<L.\end{cases} \tag{6.12}$$

ва унда E энергияли зарра жойлашган бўлсин. Бундай зарра учун Шредингер

$$\hat{H}\psi(x)=E\psi(x) \qquad (6.13)$$

тенгламасини ечишимиз керак бўлади. Олдинги мавзудан маълумки, $0 < x < L$ ораликда бу тенгламанинг ечими

$$\psi_1(x)=A\sin kx, \qquad (6.14)$$

$$\psi_1(x)=A\cos kx. \qquad (6.15)$$

кўринишида берилади. Биз аввал (6.15) ечимни танлаймиз. Тенгламанинг $x < 0$ ёки $x > L$ соҳадаги кўриниши

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\gamma^2\psi=0; \qquad \gamma^2=\frac{2m}{h^2}(U_0-E), \qquad (6.16)$$

бўлади ва унинг ечими

$$\psi_2=e^{-\gamma x}, \qquad (6.17)$$

ёки

$$\psi_2=e^{\gamma x}, \qquad (6.18)$$

кўринишда бўлади. Бизда $\gamma > 0$ (чунки $U_0 > E$) бўлганлиги учун бу ечимлардан бири

$$e^{\gamma x}\Big|_{x\to\infty} \to \infty$$

бўлади ва функциянинг чекланганлик шартини қаноатлантирмайди. Шунинг учун (6.18) ечим

$$\psi_2=C\,e^{-\gamma x},$$

(6.15) ва (6.18) ечимлар $x = L$ чегарада узлуксиз равишда бири иккинчисига ўтиши лозим бўлганидан бу чегарада

$$\psi_1(L)=\psi_2(L),$$
$$\psi_1'(L)=\psi_2'(L),$$

чегаравий шартлар бажарилади. Бу шартлардан

$$B\cos kL = C\,e^{-\gamma L},$$
$$-kB\sin kL = -\gamma C\,r^{-\lambda L},$$

тенгликларни оламиз. Бу тенгликлар чап ва ўнг томонларини ўзаро мос равишда бўлсак

$$\operatorname{ctg} kL = \gamma \tag{6.19}$$

транцендент тенгламага эга бўламиз. (6.19) га қуйидаги

$$k^2 = \frac{2mE}{h^2}, \gamma^2 = \frac{2m}{h^2}(U_0 - E)$$

катталикларнинг қийматларни қўйиб

$$\operatorname{tg} kL = \frac{\lambda}{L}\sqrt{\frac{U_0 - E}{E}} = \sqrt{\frac{U_0}{E}} - 1 \tag{6.20}$$

тенгламани топамиз. Агар $kL = y,\ y_0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$ белгилашлар киритсак, (6.20) тенглама қуйидагича ёзилади:

$$\operatorname{tg} y = \sqrt{\frac{y_0^2}{y^2} - 1}.$$

Бу тенгламанинг ечими график равишда тасвирланади. Лекин тангенс функция билан ишлаш мураккаброқ бўлгани учун бу функциядан синус функцияга ўтамиз

$$\sin y = \frac{\operatorname{tg} y}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 y}} = \sqrt{1 - \frac{y^2}{y_0^2}} \tag{6.21}$$

(6.21) – тенглама илдизларини топиш учун дастлаб электрон учун параметр y_0 нинг қийматини баҳолаймиз. Олдинги мавзуда кўрганимиздек $L \approx 10^{-10}$ м, $m \approx 9\cdot 10^{-31}$ кг, $U_0 = 800$ эВ деб олайлик. У ҳолда

$$y_0 = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}L = \sqrt{2\cdot 9\cdot 10^{-31}\cdot(800\cdot 1.6\cdot 10^{-19}}\cdot\frac{10^{-10}}{1.05\cdot 10^{-34}} = 7.27$$

Бизда (6.21) тенглама $z = \sin y$ синусоидадан ва $z = \sqrt{1 - \frac{y^2}{y_0^2}}$ тўғри чизиқдан

иборат бўлади. Уларнинг графиклари расмда кўрсатилган (6.3-расм). Бу чизиқлар (синусиоид ва тўғри чизиқ) нинг кесишув нуқталари y_1, y_3, y_5 лар (6.21) тенглама илдизлари бўлади ва $y_1 = 1{,}38$; $y_3 = 4{,}11$; $y_5 = 6{,}69$ қийматларга эга бўлишади. Агар биз $k = \frac{y}{L}$ ва $E_n = \frac{(hk)^2}{2m}$ эканлигини ҳисобга олсак, энергия учун E_1=288 эВ, E_3=256 эВ, E_5=678 эВ қийматларга эга бўламиз. Агар биз $0 < x < L$ оралиқда ечимни кўринишида,

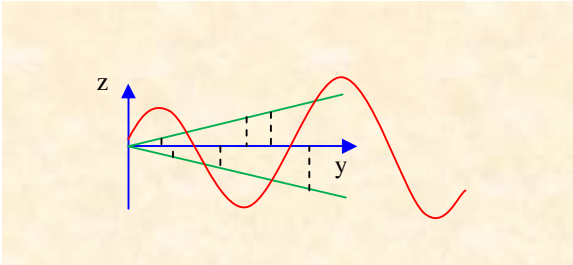
$$\Psi_1(x)=A \sin kx \tag{6.22}$$

танлаб олганимизда эди, у ҳолда (85) тенглама

$$\operatorname{ctg} y = -\sqrt{\frac{U_0}{E} - 1}.$$

кўринишда ёки

$$\operatorname{ctg} y = \sqrt{\frac{y^2}{y_0^{\,2}} - 1} \tag{6.23}$$



6.3-расм

кўринишда ёзилган ва бу тенгламанинг илдизлари $y_2 = 2{,}75$; $y_4 = 5{,}44$ (бу ҳолда ҳам $y_0 = 7{,}27$ деб олинганда) қийматларга эга бўлар эди. Бу эса энергия учун $E_2 = 115$ эВ, E_4=447 эВ демакдир. Шундай қилиб, потенциал яшик чуқурлиги $U_0 = 800$ эВ, кенглиги $L \approx 10^{-10}$ м бўлганда унда ҳаракат қилаётган электрон қуйидаги дискрет қатордаги энергияларга эга бўлган бўлар экан

$$E_1 = 228 \text{ эВ}, E_2 = 115 \text{ эВ}, E_3 = 256 \text{ эВ}, E_4 = 447 \text{ эВ}, E_5 = 678 \text{ эВ}.$$

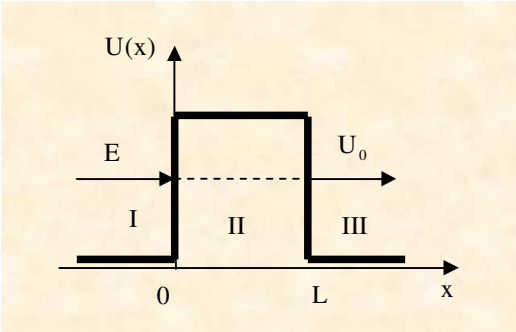
Тубсиз потенциал яшикда эса берилган шартлар бажарилганда энергия қийматлари

$$E_1 = 37{,}3 \text{ эВ}, E_2 = 149{,}2 \text{ эВ}, E_3 = 335{,}7 \text{ эВ}, E_4 = 596{,}8 \text{ эВ}, E_5 = 932{,}5 \text{ эВ}$$

га тенг бўлган бўлар эди. Бундан кўринадики, энергияларнинг дастлабки қийматлари бир-бирига яқин бўлиб, юқори энергетик сатҳларда электрон чекли чуқурликдаги потенциал яшикда чексиз чуқурликдаги потенциал яшикдагига нисбатан кичикроқ энергияларга эга бўлар экан.

6.2. Туннел эффекти

Агар энергияси E бўлган зарра $U(x)$ потенциал майдонга тушаётган ва $E < U(x)$ бўлса, бу майдон берилган зарра учун потенциал тўсиқ вазифасини ўтайди. Классик механика нуқтаи назардан фазонинг $x > x_1$ соҳаси берилган зарра ҳаракатини тақиқловчи соҳа ҳисобланади, яъни зарра $x = x_1$ нуқтагача ҳаракат қилиши мумкин ва $U(x)$ майдон таъсирида орқага қайтиб кетади. Квант механикаси нуқтаи назаридан эса берилган зарранинг $x = x_1$ нуқтасидан қайтиши мумкинлигидан ташқари бу майдон ичига сингиб кириб, $x = x_2$ нуқтасидан қайтиши, шунингдек бу нуқта орқали ўтиб, майдондан чиқиб кетиши ҳам мумкин. Зарра учун $E < U(x)$ тенгсизлик бажарилганда ҳам унинг берилган майдондан ўтиши зарранинг потенциал тўсиқдан ўтиши ёки *туннел самараси* дейилади. Бу самарани қуйидаги тўғри бурчакли потенциал тўсиқ



6.4-расм

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & 0 < x < L, \\ 0, & 0 < x, L. \end{cases}$$

мисолида батафсил қараб чиқамиз. Берилган масала учун Шредингер тенгламаси

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (6.24)$$

ни ечиш учун зарра ҳаракати соҳасини 3 та соҳага бўламиз (6.4-расм): 1-соҳа $x<0$ бўлган соҳа, 2-соҳа $0<x<L$, 3-соҳа $x>L$. Бу соҳаларда Гамилтон оператори

$$\hat{H}=\begin{cases}-\dfrac{h^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}, & (x<0)\\ -\dfrac{h^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+U_0, & (0<x<L)\\ -\dfrac{h^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}, & (x>L)\end{cases} \tag{6.25}$$

ёки Шредингер тенгламаси бу соҳаларда қуйидаги кўринишга келади

$$\begin{aligned}&\psi_I''+k^2\psi_I=0,\\ &\psi_{II}''+\gamma^2\psi_{II}=0,\\ &\psi_{III}''-k^2\psi_{III}=0.\end{aligned} \tag{6.26}$$

Бу ерда

$$\psi''=\frac{d^2\psi}{dx^2}, \qquad k^2=\frac{2mE}{h^2}=\frac{2m}{h^2}(U_0-E).$$

Агар тенгламалар ечимларини $e^{i\alpha x}$ кўринишда ахтарсак, осонлик билан $\alpha=\pm k,\ \pm i\gamma$ эканлигини топамиз ва бу тенгламаларнинг ечимлари қуйидагича кўринишга эга бўладилар

$$\begin{aligned}&\psi_1(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx},\\ &\psi_{1I}(x)=Ce^{-\gamma x}+Ne^{\gamma x},\\ &\psi_{1II}(x)=Me^{ikx}+Fe^{-ikx}.\end{aligned} \tag{6.27}$$

Бу ерда A,B,C,N,M,F коэффициентлари тўлқинлар амплитудаси A,C,M лар билан боғлиқ тўлқинлар x нинг мусбат йўналишида тарқалаётган, B,N,F лар билан боғланганлари тескари йўналишда тарқалаётган (тўсиқ қирраларидан қайтадиган) тўлқинлар ҳисобланади. Агар $x>L$ соҳада тўлқинни қайтарувчи сирт (ёки майдон) йўқлигини ҳисобга олсак, F=0 бўлади. Потенциал майдон $x=0$ ва $x=L$ нуқталарда сакраб ўзгарсада, бу нуқталарда (6.27) ечимлар узлуксиз шартларини қаноатлантириши шарт

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$
$$\psi_I'(0) = \psi_{II}'(0)$$
$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \qquad (6.28)$$
$$\psi_I'(L) = \psi_{II}'(L)$$

Бу шартлар бизга (6.27) ечимлардаги коэффицентларини топиш имкониятини беради. Коэффициентлари аниқлаш биз учун қуйидаги сабаб туфайли зарур. Агар зарралар оқими бир қисми ҳақиқатдан ҳам потенциал тўсиқ орқали ўтса ва бундай ўтиш эҳтимолини D деб белгиласак, бу эҳтимолият D тўсиқдан ўтаётган тўлқин эҳтимолияти зичлиги каби аниқланади, яъни D тўсиққа тушаётган тўлқин интенсивлигининг қандай қисми бу тўсиқдан ўтишини кўрсатади. Демак,

$$D = \frac{j_{óò}}{j_{nei}},$$

бу ерда

$$j_{óò} = -\frac{ih}{2m}\left(\psi_{III}^{*}\nabla\psi_{III} - \psi_{III}\nabla\psi_{III}^{*}\right) = -\frac{ih}{2m}2ik\,|M|^2 = \frac{P}{m}|M|^2;$$
$$j_{òóø} = -\frac{ih}{2m}\left(\psi_{I}^{*}\nabla\psi_{I} - \psi_{I}\nabla\psi_{I}^{*}\right) = \frac{P}{m}|A|^2 .$$

Демак,

$$D = \left|\frac{M^2}{A^2}\right|. \qquad (6.29)$$

орқали топилар экан. Шунинг учун ҳам (6.28) чегаравий шартлар асосида (6.27) ечимлардан $\frac{M}{A}$ нисбатни топамиз. (6.28) шарт асосида (6.27) дан топамиз

$$\begin{cases} A + B = C + N \\ A - B = -\frac{\gamma}{ik}(C - N). \end{cases} \qquad (6.30)$$

(6.28) шарт асосида эса (6.27) дан

$$\begin{cases} Ce^{-\gamma L} + Ne^{\gamma L} = Me^{ikL}, \\ Ce^{-\gamma L} + Ne^{\gamma L} = -\frac{ik}{\gamma}Me^{ikL} \end{cases} \qquad (6.31)$$

Агар (6.30) дан

$$A=\frac{1}{2}\left[C-\left(1-\frac{\gamma}{ik}N\left(1+\frac{\gamma}{ik}\right)\right)\right]=\frac{1}{2ik}\left[C(ik-\gamma+M(ik+\gamma)\right] \qquad (6.32)$$

ни топсак, (6.31) дан

$$\begin{cases} C=\dfrac{e^{ikl+\gamma L}M}{2\gamma}(\gamma-ik), \\ N=\dfrac{e^{ikl-\gamma L}M}{2\gamma}(\gamma+ik). \end{cases} \qquad (6.33)$$

ларни топамиз ва (6.33) асосида (6.32) дан

$$A=\frac{Me^{ikL}}{4ik\gamma}\left[e^{-\gamma L}(\gamma+ik)^2-e^{\gamma L}(\gamma-ik)^2\right]$$

Бундан

$$\left|\frac{M}{A}\right|^2=\frac{16k^2\gamma^2}{|e^{-\gamma L}(\gamma+ik)^2-e^{\gamma L}(\gamma-ik)^2|^2}. \qquad (6.34)$$

Агар $E \ll U_0$ бўлса, яъни $\gamma L \gg 1$ деб ҳисобланса (6.34) нинг махражини $\sim (k^2+\gamma^2)^2 e^{2\gamma L}$ га пропорционал деб ҳисоблаш мумкин бўлади ва

$$D \approx \frac{16k^2\gamma^2}{(k^2+\gamma^2)^2}e^{-2\gamma L}=D_0e^{-2\gamma L}.$$

Бу ерда

$$D_0 \approx \frac{16k^2\gamma^2}{(k^2+\gamma^2)^2}=\frac{16(U_0E)}{U_0^2}.$$

Шундай қилиб, тўғри бурчакли потенциал тўсиқдан зарранинг ўтиш эҳтимоли (ёки тўсиқнинг тиниқлик коэффициенти)

$$D \approx D_0e^{-2\gamma L}=D_0e^{-\frac{2}{h}\sqrt{2m(U_0-E)}L}$$

формула билан аниқланади. Бир неча мисолни қарайлик. Мисол учун электронлар оқими энергиялари фарқлари $U_0-E=1$ эВ=$1{,}6*10^{-19}$Ж, кенглиги a) $L=1A^0$; b) $L=5A^0$; c) $L=10A^0$ бўлган тўсиққа тушаётган

бўлсин. У ҳолда

$$a)\ \beta=\frac{2}{h}\sqrt{2m(U_0-E)}\,L=\frac{2}{1,05\cdot10^{-34}}\sqrt{2\cdot9,1\cdot10^{-31}\cdot1,6\cdot10^{-19}}\cdot10^{-10}=1,045;$$

$$D\approx e^{-\beta}=e^{-1,045}\approx0,29$$

Бу дегани агар тўсиққа 100 электрон тушаётган бўлса шунинг 29 донаси тўсиқдан ўтади деган хулоса келиб чиқади.

b) $\beta=5,2;\ D\approx e^{-5,2}=0,005$ га тенг бўлади ва тушаётган 1000 та электронлардан фақатгина 5 таси тўсиқ орқали ўта олади. Берилган ҳолда тўсиқнинг тиниқлик коэффициенти кичик бўлсада, ҳар ҳолда зарраларнинг тўсиқдан ўтиши мавжуд бўлади.

c) $\beta=10,45;\ D\approx e^{-10,45}=4,54\cdot10^{-8}$ Бу ҳолда электронлар оқими тўсиқдан деярлик ўтмайди десак бўлади. Бу мисоллардан кўрамизки, тўсиқ кенглиги оша борган сари зарраларнинг тўсиқдан ўтиш эҳтимоли тез камайиб борар экан. Ҳисоб натижаларини классик механика ва квант механикаси нуқтаи назаридан таҳлил қиладиган бўлсак, I - соҳадан энергияси $E<U_0$ бўлган потенциал тўсиққа зарраларнинг тушиб, III - соҳага уларнинг бир қисмининг ўтиши классик механика нуқтаи назаридан мумкин эмас, чунки берилган ҳолда зарра энергиясининг сақланиш қонуни бузилган бўлар эди. Квант механикаси нуқтаи назардан буни тушуниш қийин эмас, чунки Гейзенбергнинг аниқмаслик муносабатларига биноан зарра координатаси ва импулсини бир вақтнинг ўзида аниқ ўлчаб бўлмайди. Зарраларнинг тўсиқдан ўтиши вақтида асосий ролни E ва $U(x)$ катталиклар ўйнайди. $E=E(p),\ U=U(x)$ бўлганидан E ва $U(x)$ ларни ҳам бир вақтнинг ўзида аниқ қийматларини ўлчаб бўлмайди. Заррани III - соҳада кузатиш мумкин деган сўз унинг координатасини аниқ ўлчаш деган сўздир. Зарра координатасини ўлчаш вақтида эса уни ўлчовчи асбоб зарра ҳолатига шундай таъсир қилиши ва бу таъсир натижасида унга шундай қўшимча энергия берилиши мумкинки, натижада II - соҳада $E<U_0$ тенгсизлик бузилиб, $E\geq U_0$ бўлиши эҳтимоли пайдо бўлади. Энди потенциал тўсиқ ихтиёрий кўринишга эга бўлганда тўсиқнинг тиниқлик коэффициенти

$$D\approx D_0e^{-\frac{2}{h}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[U(x)-E]}dx} \qquad (6.35)$$

кўринишда ифодаланади. Бу ерда x_1,x_2 нуқталар зарранинг $U(x)$ потенциал тўсиққа кириш ва ундан чиқиш нуқталари $E=U(x)\big|_{x=x_{1,2}}$ тенглигидан

топилади. Квант механикасида туннел самарасининг мавжудлиги ядроларнинг α - емирилишида, электр майдонга киритилган қаттиқ жисмлар сиртидан электронларнинг ажралиб чиқиши («совуқ эмиссия» ҳодисаси) ҳодисаларида тўла ўз тасдиғини топган.

6.3. Чизиқли гармоник осциллятор.

Ўзининг мувозанат ҳолати атрофида квазиэластик куч $F_x = -kx$ таъсири остида кичик амплитуда билан тебранма ҳаракат қилувчи заррача чизиқли гармоник осциллятор деб аталади. Бу заррача

$$U(x) = -\int F dx = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \qquad (6.36)$$

потенциал энергияга эга бўлиб, у $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ бурчакли частота билан тебранма ҳаракатда бўлади; бу ерда k - қайишқоқлик коэффициенти. Гармоник осциллятор учун Шредингер тенгламаси

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi = E\psi \qquad (6.37)$$

нинг ечимини топамиз. Тенгламада $\varsigma = \frac{x}{x_0}$, $x_0 = \sqrt{\frac{h}{m\omega}}$ алмаштириш олиб

$$\Psi''(\varsigma) + (\lambda - \varsigma^2)\Psi(\zeta) = 0 \qquad (6.38)$$

ни ҳосил қиламиз, бу ерда $\lambda = \frac{2E}{h\omega}$ - доимий катталик. Охирги тенгламани интеграллаш мақсадида дастлаб ς жуда катта бўлгандаги чегаравий ҳолни кўрамиз. У ҳолда $\varsigma \gg \lambda$ тенгсизлик ўринли бўлиб, (6.38) ни қуйидагича ёзиб оламиз

$$\Psi''(\varsigma) - \varsigma^2 \Psi = 0 \qquad (6.39)$$

Бу тенгламанинг умумий ечимини $\Psi(\varsigma) = e^{-\frac{\varsigma^2}{2}}$ шаклида қабул қиламиз. Қаралаётган чегаравий ҳолни ҳисобга олиб, (6.38) нинг ечимини

$$\Psi(\varsigma) = \exp\left(\frac{-\varsigma^2}{2}\right) f(\varsigma) \qquad (6.40)$$

кўринишида ахтарамиз ва қуйидаги тенгликларга эга бўламиз

$$\Psi'(\varsigma)=\left[-\varsigma f(\varsigma)+f'(\varsigma)\right]e^{-\frac{\varsigma^2}{2}};$$
$$\Psi''(\varsigma)=\left[-f(\varsigma)-\varsigma f'(\varsigma)+\varsigma^2 f(\varsigma)+f''(\varsigma)-\varsigma f'(\varsigma)\right]e^{-\frac{\varsigma^2}{2}} \tag{6.41}$$

$\Psi''(\varsigma)$ ни (3) тенгламага қўямиз ва унинг ҳар иккала тарафини $e^{-\frac{\varsigma^2}{2}}$ га бўлиб юборамиз. Бинобарин,

$$f''(\varsigma)-2\varsigma f(\varsigma)+(\lambda-1)f(\varsigma)=0 \tag{6.42}$$

(6.42) тенгламанинг ечимини қуйидаги қатор кўринишида тасаввур қиламиз

$$f(\varsigma)=\sum_{k=0} a_k \varsigma^k \tag{6.43}$$

ва уни яна (6.42) ифодага қўямиз

$$\sum_{k=0} a_k\left[k(k-1)\varsigma^{k-2}-(2k+1-\lambda)\varsigma^k\right]=0 \tag{6.44}$$

Ўзгарувчи ς нинг бир хил даражали ҳадларини гуруҳлаштириш мақсадида йиғинди индексини алмаштириш натижасида

$$\sum_{k=0} \varsigma^k\left[a_{k+2}(k+2)(k+1)-a_k(2k+1-\lambda)\right]=0 \tag{6.45}$$

қаторга эга бўламиз. (6.45) тенгликда $\varsigma^k \neq 0$ бўлгани учун

$$a_{k+2}=\frac{(2k+1-\lambda)}{(k+2)(k+1)}a_k \tag{6.46}$$

кўринишидаги реккурент муносабатни оламиз. (11) муносабат a_k ни a_{k+2} билан боғлайди. Худди шундай a_{k+1} коэффициентни a_{k+3} коэффициент билан ва ҳ.з. боғлаш мумкин. Шунинг учун (8) қатор билан аниқланувчи бир-бирига боғлиқ бўлмаган иккита ечимга эга бўламиз. Ечимларнинг бири ς нинг жуфт даражалари қатнашган коэффициентларни ўзаро боғласа, иккинчи ечим ς нинг тоқ даражалари иштирок этувчи коэффициентларни боғлайди. (6.46) муносабатдан кўринадики, биз қайд қилган қаторлардан бирини бирор n - нчи ҳадда узамиз ва бу ҳад $k=n$ ҳад бўлсин. У ҳолда $a_{n+2}=0$ бўлади, бунинг учун эса

$$\lambda = 2n + 1 \qquad (6.47)$$

шарт бажарилиши талаб этилади. (6.47) муносабатга λ нинг қийматини қўйиб қуйидагини топамиз

$$E_n = h\omega(n + 1/2) \qquad (n = 0, 1, 2, ...) \qquad (6.48)$$

Бор назариясидан фарқли ўлароқ, бу ерда нолинчи энергия $(n = 0)$ нолга тенг бўлмайди ва $E_0 = \frac{h\omega}{2}$ га тенг бўлади. Чизиқли гармоник осциллятор учун Шредингер тенгламасининг ечимини - тўлқин функция кўринишида қуйидагича ёзамиз

$$\Psi_n(\varsigma) = N_n e^{-\frac{\varsigma^2}{2}} H_n(\varsigma) \qquad (6.49)$$

Бу ерда N_n – нормаллаштирувчи коэффициент, $H_n(\varsigma)$ – Чебишев-Эрмит кўпҳади. Бу кўпҳад қуйидаги кўринишда ёзилади

$$H_n(\varsigma) = (-1)^n e^{\varsigma^2/2} \frac{d^n}{d\varsigma^n} e^{-\varsigma^2/2} \qquad (6.50)$$

Қуйида биз осциллятор энергияси, тўлқин функцияси, Чебишев-Эрмит кўпҳади, нормаллаштирувчи коэффициентлар қийматларини келтирамиз

n	$E_n = h\omega(n+1/2)$	$H_n(\varsigma)$	$\Psi_n(\varsigma)$	N_n
0	$\frac{1}{2}h\omega$	1	$N_0 e^{-\frac{\varsigma^2}{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}x_0}}$
1	$\frac{3}{2}h\omega$	2ς	$N_1 \cdot 2\varsigma e^{-\frac{\varsigma^2}{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{4\sqrt{\pi}x_0}}$
2	$\frac{5}{2}h\omega$	$4\varsigma^2 - 2$	$N_2 \cdot (4\varsigma^2 - 2)e^{-\frac{\varsigma^2}{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{8\sqrt{\pi}x_0}}$

Осцилляторнинг юқорида келтирилган ҳолатларидаги бурилиш нуқталари $(E_n = U(\varsigma) = \frac{h\omega}{2}\varsigma^2)$ қуйидагича бўлади

$n = 0$	$\frac{h\omega}{2} = \frac{h\omega}{2}\varsigma$	$\varsigma_1 = -1, \varsigma_2 = +1$
$n = 2$	$\frac{3\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}\varsigma^2$	$\varsigma_{1,2} = \pm\sqrt{3}$
$n = 3$	$\frac{5\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar\omega}{2}\varsigma^2$	$\varsigma_{1,2} = \pm\sqrt{5}$

Юқорида келтирилган натижалардан кўрамизки, осцилляторнинг энг минимал энергияси $E_{min} = \frac{h\omega}{2}$ бўлади ва ундан кам қийматга эга бўла олмайди. Ҳақиқатдан, $x = 0$ осциллятор координатаси аниқ десак, аниқсизлик муносабатига кўра унинг импулси, яъни энергияси нолга тенг бўла олмайди.

Назорат саволлари

1. Стационар ҳолатлар учун Шредингер тенгламасини ёзинг ва изоҳланг.
2. Ностационар ҳолатлар учун Шредингер тенгламасини ёзинг ва тушунтиринг.
3. Шредингер тенгламасида зарранинг қайси хусусияти ҳисобга олинган?
4. Зарра қачон эркин ҳаракат қилади ва бундай ҳаракат учун Шредингер тенгламаси қандай кўринишда ёзилади?
5. Чизиқли гармоник осцилляторни қандай тушунасиз?

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 Масала. Массаси m, энергияси $E>0$ бўлган зарра

$$U(x)=\begin{cases}0, x<0, & x>a\\ -U_0, & 0<x<a\end{cases}$$

майдонда ҳаракат қилса, бу майдоннинг тиниқлик D ва қайтариш коэффициенти R ҳисоблансин.

Ечиш: Масала шартига кўра яшик расмини чизиб, зарра ҳаракат соҳасини 3та соҳага ажратамиз: I-соҳа $x<0$ бўлган соҳа, II-соҳа $0<x<a$, III-соҳа $x>a$ бўлган соҳа. Бу соҳаларда Шредингер тенгламасини ёзамиз

$$\begin{aligned}\psi_1''+k_1^2\psi_1=0,\\ \psi_2''+k_2^2\psi_2=0,\\ \psi_3''+k_3^2\psi_3=0.\end{aligned} \qquad (1)$$

Бу ерда

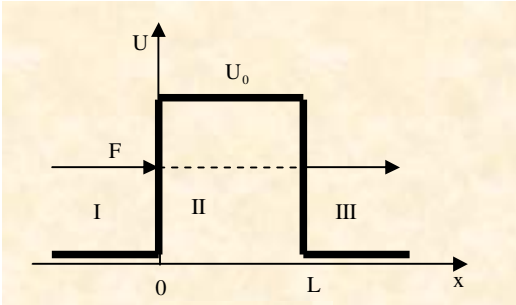
$$\psi''=\frac{d^2\psi}{dx^2}$$

$$k_1^2=\frac{2mE}{h^2}$$

$$k_2^2=\frac{2mE}{h^2}(E+U_0)$$

тенглама ечимини $e^{i\alpha x}$ кўринишда ахтарамиз ва $\alpha=\pm k_1, k_2$ эканлигини топамиз. У ҳолда (1)-тенглама ечимлари мос равишда қуйидагича бўлади:

$$\begin{aligned}\psi_1=A_1e^{ik_1x}+B_1e^{-ik_1x}\\ \psi_2=A_2e^{ik_2x}+B_2e^{-ik_2x}\\ \psi_3=A_3e^{ik_1x}\end{aligned} \qquad (2)$$



1-расм

Бу ерда A_1, A_2, A_3 мос равишда I,II,III-соҳаларга тушаётган тўлқинлар ампилитудалари, B_1, B_2 – -қайтаётган тўлқин ампилитудалари. III-соҳада қайтарувчи майдон бўлмаганлиги учун $B_3 = 0$ бўлади ва шунинг учун (2)-да қайтарувчи тўлқинни ёзмадик. Шундай қилиб, биз 3та соҳанинг ҳар бири учун Шредингер тенгламасининг ечимларини топдик. Энди бу ечимларни биз қараётган соҳалар чегарасида ($x=0$, $x=a$ нуқталарда) шундай бир-бирига "тикишимиз" керакки, ψ - функция фазонинг барча қисмларида узлуксиз бўлиб қолсин.Бунинг учун қуйидаги чегаравий шартларни бажарилиши лозим бўлади, $x=0$ нуқтада

$$\psi_1(0)=\psi_2(0), \qquad \psi_1'(0)=\psi_2'(0) \tag{3}$$

$(x=a)$ нуқтада эса

$$\psi_2(a)=\psi_3(a), \psi_2'(a)=\psi_3'(a) \tag{4}$$

(3), (4)- шартлар асосида (1)-тенгламалардан топамиз

$$\begin{cases} A_1+B_1=A_2+B_2 \\ A_1-B_1=\dfrac{k_2}{k_1}(A_2-B_2) \end{cases} \tag{5}$$

$$\begin{cases} A_2e^{ik_2a}-B_2e^{-ik_2a}=\dfrac{k_2}{k_1}A_3e^{ik_1a} \\ A_2e^{ik_2a}+B_2e^{-ik_2a}=A_3e^{ik_1a} \end{cases} \tag{6}$$

(5)-дан

$$A_1=\frac{1}{2k_1}[(k_1+k_2)A_2+(k_1-k_2)B_2] \tag{7}$$

(6)-дан

$$\begin{cases} A_2 = \dfrac{A_3}{2k_2}(k_1+k_2)e^{i(k_1-k_2)a} \\ B_2 = \dfrac{A_3}{2k_2}(k_2-k_1)e^{i(k_1+k_2)a} \end{cases} \tag{8}$$

(8)-ни (7)-га қўямиз

$$A_1 = \frac{A_3}{4k_1k_2}e^{ik_1a}\left[(k_1+k_2)^2e^{ik_2a}-(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}\right] \tag{9}$$

Потенциал майдоннинг тиниқлик коэффициенти $D = \dfrac{j_y}{j_T}$ орқали топилгани учун

$$j_y = \frac{i}{2m}(\psi_3\frac{\partial\psi_3^*}{\partial x} - \psi_3^*\frac{\partial\psi_3}{\partial x}) = \frac{k_1}{m}|A_3|^2$$

потенциал тўсиқдан ўтаётган зарралар оқимининг зичиги

$$j_T = \frac{i}{2m}(\psi_1\frac{\partial\psi_1^*}{\partial x} - \psi_1^*\frac{\partial\psi_1}{\partial x}) = \frac{k_1}{m}|A_1|^2$$

-потенциал тўсиққа тушаётган зарралар оқими зичлигини осонлик билан топамиз, яъни у $D = \left|\dfrac{A_3}{A_1}\right|^2$ каби ҳисобланади. У ҳолда

$$D = \frac{16k_1^2k_2^2}{\left|(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a}-(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}\right|^2}$$

Бу касирнинг махражини ҳисоблаймиз

$$\left|(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a}-(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}\right|^2 = \left[(k_1+k_2)^2e^{ik_2a}-(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}\right]\times$$
$$\times\left[(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a}-(k_1-k_2)^2e^{ik_2a}\right] = (k_1+k_2)^4+(k_1-k_2)^4-(k_1-k_2)^2(k_1+k_2)^2e^{2ik_2a}-$$
$$-(k_1+k_2)^2(k_1-k_2)^2e^{-2ik_2a} = 2(k_1^4+6k_1^2k_2^2+k_2^4)-(k_1^2-k_2^2)^2(e^{2ik_2a}+e^{-2ik_2a}) =$$
$$= 2(k_1^4+6k_1^2k_2^2+k_2^4)-(k_1^2-k_2^2)2\cos 2k_2a = 2(k_1^4+k_2^4)(1-\cos 2k_2a)+4k_1^2-$$
$$-k_2^2(3+\cos 2k_2a) = 4(k_1^4+k_2^4)\sin^2 k_2a+8k_1^2k_2^2\cos^2 k_2a+8k_1^2k_2^2 =$$
$$= 4(k_1^4-k_2^4)\sin^2 k_2a+16k_1^2k_2^2-8k_1^2k_2^2\sin^2 k_2a = 4(k_1^2-k_2^2)^2\sin k_2a+16k_1^2k_2^2$$

У ҳолда

$$D=\frac{16k_1^2k_2^2}{16k_1^2k_2^2+4(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2k_2a}=\frac{1}{1+\frac{1}{4}\frac{(k_1^2-k_2^2)^2}{k_1^2k_2^2}\sin^2k_2a}$$

$$\frac{(k_1^2-k_2^2)^2}{4k_1^2k_2^2}=\frac{\left[\frac{2mE}{h^2}-\frac{2m}{h}(E+U_0)\right]^2}{4\frac{2mE}{h^2}\frac{2m}{h^2}(E+U_0)}=\frac{U_0^2}{4E(E+U_0)}$$

Демак,

$$D=\left[1+\frac{U_0^2}{4E(E+U_0)}\sin^2k_2a\right]^{-1}$$

Тиниқлик коэффициенти D ва R ўртасидаги $D+R=1$ боғланишдан

$$R=1-D=1-\frac{1}{1+\frac{U_0\sin^2k_2a}{4E(E+U_0)}}=\left[1+\frac{4E(E+U_0)}{U_0\sin^2k_2a}\right]^{-1}$$

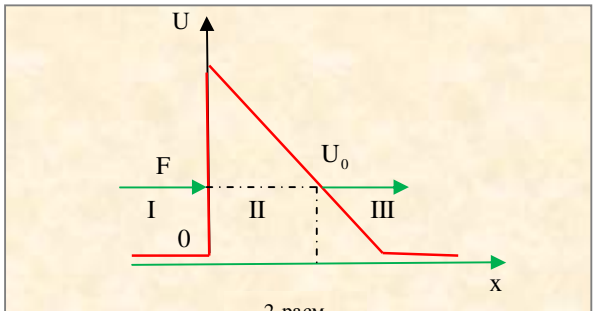
Энергияси $k_2a=n\pi$ $(n=1,2,3...)$ шартларни қаноатлантирувчи зарралар учун потенциал яшик мутлақо тиниқ ҳисобланади, яъни $D=1, R=0$ бўлади.

4 Масала. Массаси m, энергияси E бўлган зарранинг

а) $U(x)=U_0\left(1-\frac{x}{a}\right)$, $\left(E=\frac{1}{2}U_0\right)$.

б) $U(x)=U_0\left(1-\frac{x^2}{a^2}\right)$, $\left(E=\frac{2}{3}U_0\right)$.

потенциал тўсиқдан ўтиш эҳтимоли ҳисоблансин.



2-расм

Ечиш: Потенциал майдон берилганига қараб уларнинг чизмаларини чизамиз.

$$U(x)=U_0\left(1-\frac{x}{a}\right)$$

$$U(x)=U_0\left(1-\frac{x^2}{a^2}\right)$$

Ҳар иккала ҳолда ҳам зарранинг потенциал тўсиқдан ўтиш эҳтимоляти

$$D=D_0 e^{-\frac{2}{h}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[U(x)-E]}dx} \qquad (1)$$

формуладаги

$$I=\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\left\{2m(U(x)-E)\right\}^{\frac{1}{2}}dx \qquad (2)$$

интегрални ҳисоблаш орқали топилади. Бу интегралдаги x_1, x_2 нуқталар зарранинг потентсиал тўсиққа кириш ва ундан чиқиш нуқталари ҳисобланади ва улар $U(x)=E$ тенгликдан аниқланади:

$$x_1=-a\sqrt{\frac{(U_0-E)}{U_0}}, \quad x_2=a\sqrt{\frac{(U_0-E)}{U_0}}.$$

бўлади. Энди (2)-интегрални ҳисоблаймиз.

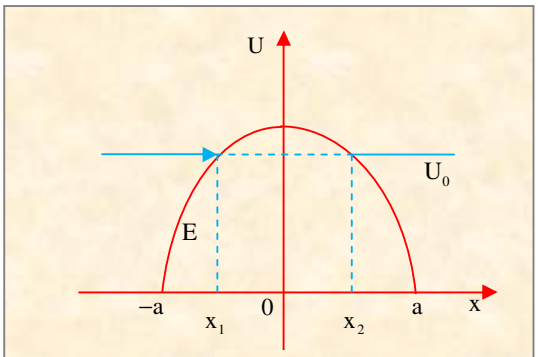
$$I=\frac{2}{h}\sqrt{2m}\int\sqrt{U_0\left(1-\frac{x}{a}\right)-E}dx=\frac{2}{h}\sqrt{2m(U_0-E)}\times\int\sqrt{1-\frac{U_0}{U_0-E}\frac{x}{a}}dx=$$

а) $$=\frac{2}{h}\sqrt{2m(U_0-E)}\left[-\frac{2}{3}\frac{U_0-E}{U_0}a\left(1-\frac{U_0}{U_0-E}\frac{x}{a}\right)^{3/2}\right]\Big|_0^{a\sqrt{1-\frac{E}{U_0}}}=\frac{4a}{3h}\left(\frac{U_0-E}{U_0}\right)\sqrt{2m(U_0-E)}=$$

$$=\frac{4\sqrt{2m}a}{3hU_0}(U_0-E)^{3/2}=\frac{2\sqrt{mU_0}}{3h}a;$$

б) $$I=\frac{2}{h}\sqrt{2m}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{U_0\left(1-\frac{x^2}{a^2}\right)-E}dx=\frac{2}{h}\sqrt{2m(U_0-E)}\times\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{1-\frac{U_0}{(U_0-E)}\frac{x^2}{a^2}}dx$$

Қуйидагича алмаштириш ўтказамиз:



2-расм

$$\frac{U_0}{(U_0-E)}\frac{x^2}{a^2}=\sin^2 t,\ \text{бундан}\ x^2=a^2\frac{U_0-E}{U_0}\sin^2 t\,,$$

$$dx=a\sqrt{\frac{U_0-E}{U_0}}\cos t dt$$

Янги t ўзгарувчида интеграл чегараларини топамиз:

$$-a\sqrt{\frac{U_0-E}{U_0}}=a\sqrt{\frac{U_0}{U_0-E}}\sin t_1,$$

Бундан $\sin t_1=-1$ ёки $t_1=-\frac{\pi}{2}$

$$a\sqrt{\frac{U_0-E}{U_0}}=a\sqrt{\frac{U_0-E}{U_0}}\sin t_2,\qquad t_2=\frac{\pi}{2}$$

У ҳолда бизнинг интеграл:

$$I=\frac{2}{h}\sqrt{2m(U_0-E)}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{1-\sin^2 t}\sqrt{\frac{U_0-E}{U_0}}\cos t\,dt=\frac{a}{h}(U_0-E)\sqrt{\frac{2m}{U_0}\left(\frac{\pi}{2}+\frac{\pi}{2}\right)}=\frac{a\pi}{h}(U_0-E)\sqrt{\frac{2m}{U_0}}.$$

Шундай қилиб,

$$D=D_0\exp\left[-\frac{a\pi}{h}(U_0-E)\sqrt{\frac{2m}{U_0}}\right]=D_0\exp\left[-\frac{a\pi}{3h}\sqrt{\frac{2m}{U_0}}\right]$$

Чизиқли гармоник осциллятор. Нолинчи энергия.

1 масала. Потенциал энергияси $U=\frac{1}{2}\left(k_1x^2+k_2ó^2+k_3z^2\right)$ бўлган уч ўлчамли гармоник осциллятор энергетик сатҳлари топилсин.

Ечиш: Уч ўлчамли оссилятор учун Шредингер тенгламаси

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{1}{2}\left(k_1x^2+k_2y^2+k_3z^2\right)\psi=E\psi \qquad (1)$$

кўринишда ёзилади. Бу тенгламада

$$\psi=\psi(x,ó,z)=\psi_1(x)\psi_2(ó)(\psi_3(z) \qquad (2)$$

ўзгарувчиларга ажратиш мумкин бўлади. Бу функцияни (1) га қўйиб, олинган тенгламанинг ҳар иккала тарафини (2) га бўламиз

$$\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{\psi_1''}{\psi_1}+\frac{m\omega^2{}_1}{2}x^2\right)+\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{\psi_2''}{\psi_2}+\frac{m\omega_2{}^2}{2}y^2\right)+\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{\psi_3''}{\psi_3}+\frac{m\omega^2{}_3}{2}z^2\right)=E \qquad (3)$$

Бу ерда $\omega_i=\sqrt{\frac{k_i}{m}}$. Тенгламада иштирок этаётган $x, ó, z$ ўзгарувчилар ўзаро боғлиқ бўлмаганлари учун ҳар бир қавс ичида жойлашган ифода мос равишда E_1, E_2, E_3 ларга тенг бўлишади ва ечими ахтарилаётган уч ўлчамли масала бир ўлчамли масалага келади

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{\psi_1''}{\psi_1}+\frac{m\omega^2{}_1}{2}x^2=E_1$$

Қолган ўзгарувчилар учун ҳам тенглама худди шунга ўхшаш бўлади ва $E=E_1+E_2+E_3$ - уч ўлчамли осциллятор энергияси бир ўлчамли осциллятор энергиялари йиғиндисидан иборат бўлади. Ўлчамсиз ўзгарувчилар

$$\xi_1=\sqrt{\frac{m\omega_1}{h}}x,\ \xi_2=\sqrt{\frac{m\omega_2}{h}}y,\ \xi_3=\sqrt{\frac{m\omega_3}{h}}z$$

киритамиз ва масалани стандарт (маъруза матнида келтирилгандек) масалага айлантирамиз ҳамда бир ўлчамли осциллятор учун топилган ечимлардан фойдаланамиз

$$E_1=E_{n_1}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)h\omega_1$$

У ҳолда умумий энергия

$$E(n_1,n_2,n_3)=E_{n_1}+E_{n_2}+E_{n_3}=h\left[\left(n_1+1/2\right)\omega_1+\left(n_2+1/2\right)\omega_2+\left(n_3+1/2\right)\omega_3\right]$$

Тенглама ечими эса

$$\psi(\xi_1,\xi_2,\xi_3)=C\exp\left(-\frac{\xi_1^{\,2}+\xi_2^{\,2}+\xi_3^{\,2}}{2}\right)H_{n_1}(\xi_1)H_{n_2}(\xi_2)H_{n_3}(\xi_3)$$

кўринишга эга бўлади.

Мустақил ишлаш учун масалалар.

1.Чизиқли ўлчами $a \sim 10^{-10}$ м бўлган потенциал қутида зарра $n = 2$ ҳолатдан $n = 1$ ҳолатга ўтганда нурланадиган фотон тўлқин узунлиги, энергияси топилсин.

2.Чизиқли ўлчами $a \sim 10^{-10}$ м бўлган потенциал қутида жойлашган зарра энергиясини
$n = 1$, $n = 2$ ҳолатларда эВ ларда ҳисобланг.

3.Чексиз чуқур ўрада зарра ҳолати

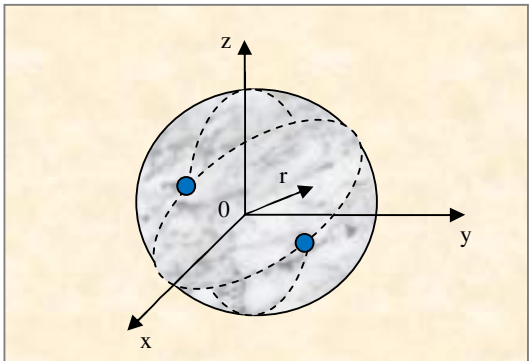
$$\psi_n(x)=A\sin\frac{n\pi}{a}x$$

тўлқин функцияси билан тавсифланса, $n=2$ ҳолат учун зарра кинетик энергиясининг ўртача қиймати ҳисоблансин.

VII - БОБ
МАРКАЗИЙ СИММЕТРИК МАЙДОНДА ЗАРРА ҲАРАКАТИ

7.1. Тўлқин функциясини ўзгарувчиларга ажратиш.

Зарранинг ҳолат функцияси ва энергияси унинг қандай майдонда ҳаракат қилишига боғлиқдир. Марказий-симметрик ўлчамли потенциал майдондаги ҳаракатни қараймиз. Биз биламизки, марказий майдонда ўзаро таъсирлашувчи зарралар ўртасидаги куч фақатгина бу зарралар ўртасидаги масофагагина боғлиқ бўлади. Одатда бундай майдонни бирор марказ ҳосил қилиб, у ана шу марказга нисбатан симметрик бўлади. Масалан, водород атомида мавжуд бўлган Кулон майдони ана шундай майдон ҳисобланади. Бундай майдонларда зарра ҳаракатини квант механикасида ўрганиш атом шакли-шамойилини, унинг ўлчами, тўлқин функцияси ва атомдаги электрон энергияларини топишда муҳим аҳамиятга эгадир. Майдон марказий симметрияга эга бўлганлигидан заррачанинг ҳаракат тенгламаси



1.13-расм

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{h^2}[E - U(r)]\psi = 0. \qquad (7.1)$$

ни сферик координаталар системасида ифодалашга тўғри келади

$$x = r\sin\theta\cdot\cos\phi,$$
$$y = r\sin\theta\cdot\sin\phi,$$
$$z = r\cos\theta.$$

Бу координата системасида ∇^2 оператори

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\phi}^2 \qquad (7.2)$$

каби ёзилади. Бу ерда

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2\partial}{r\partial r},$$
$$\nabla_\theta^2 = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{7.3}$$

берилган ҳолда (7.1) тенглама

$$\left[\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\phi}^2\right]\Psi(r,\theta,\phi) + k^2(r)\Psi(r,\theta,\phi) = 0. \tag{7.4}$$

кўринишда ёзилади. Бу ерда

$$k^2(r) = \frac{2m}{h^2}(E - U(r)). \tag{7.5}$$

доимий катталик. (7.4) тенгламани ўзгарувчиларга ажратиш усули билан ечамиз

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y(\theta,\phi). \tag{7.6}$$

Бу ерда $R = R(r)$ - радиал функция, $Y = Y(\theta,\phi)$ - шар функцияси ҳисобланади. (7.6) асосида (7.4) ни қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин

$$\frac{\nabla_{\theta,\phi}^2 Y(\theta,\phi)}{Y(\theta,\phi)} = -\frac{r^2\nabla_r^2 R(r)}{R(r)} - k^2(r)\,. \tag{7.7}$$

Бу тенгламанинг чап томони фақат (θ,ϕ) нинг, ўнг томони эса r ўзгарувчининг функцияси бўлганидан ҳамда (r,θ,ϕ) лар ўзаро боғлиқ бўлмаган ўзгарувчилар бўлганидан (7.7) тенглик ўринли бўлиши учун унинг чап ва ўнг томонлари бир хил доимийликка (масалан λ га) тенг бўлиши лозим. У ҳолда (7.7) иккита ўзаро боғлиқ бўлмаган тенгламалар системасини ташкил этади

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[k^2(r) - \frac{\lambda}{r^2}R(r)\right] = 0, \tag{7.8}$$

$$\nabla_{\theta,\phi} Y(\theta,\phi) - \lambda Y(\theta,\phi) = 0. \tag{7.9}$$

Бу тенгламаларнинг ҳар бирини алоҳида ечиш мумкин. Бунинг учун (7.9) нинг ечимини қуйидагича излаймиз

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) = 0.$$

ва бир-бирига ўзаро боғлиқ бўлмаган иккита тенглама ҳосил қиламиз

$$\nabla_\theta^2\Theta(\theta) + \left[\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta(\theta) = 0, \qquad (7.10)$$

$$\nabla_\phi^2\Phi(\phi) + m^2\Phi(\phi)) = 0. \qquad (7.11)$$

бу ерда m - доимий кааталик. $\nabla_\phi{}^2 \equiv \frac{d^2}{d\phi^2}$ бўлганидан (7.11) нинг ечимини осонлик билан топамиз

$$\Phi(\phi) = \exp(im\phi). \qquad (7.12)$$

(7.12) ифода (7.11) нинг хусусий ечим бўлиши учун узлуксиз, чекли, бир қийматли функция бўлиши керак. Бу ўзгарувчи ϕ, $(\theta - 2\pi)$ оралиғида ўзгаргани учун (7.12) нинг бир қийматли бўлиш шарти қуйидагича бўлади

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi).$$

Бу шарт бажарилиши учун

$$e^{im2\pi} = \cos\ 2\pi m + i\sin 2\pi m = 1$$

бўлиши ҳамда

$$\cos\ 2\pi m = 1$$

тенглик ўринли эканлигини топамиз. Бу ерда катталик

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ...$$

қийматларни қабул қилади. Демак, (7.9) тенгламани ўзгарувчиларга ажратишда ҳосил бўладиган доимий сон m дискрет қатордаги қийматларни қабул қилар экан. Бу сон *магнит квант сони* деб айтилади. Шундай қилиб, φ ўзгарувчи бўйича Шредингер тенгламасининг нормаллашган хусусий функцияси

$$\Phi_m(\phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\exp(im\phi) \qquad (7.13)$$

кўринишга эга бўлар экан.

7.2. Лежандр полиноми. Радиал ва бурчакли тақсимланишлар

Энди (7.10) тенгламанинг ечимини ахтарамиз. Қулайлик учун $x = \cos\theta$ белгилаш киритиб, (7.10) тенгламани

$$\frac{d}{d\theta}\left[(1-x^2)\frac{d\theta}{dx}\right]+\left(\theta-\frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta=0 \qquad (7.14)$$

кўринишга келтирамиз. Бу тенгламанинг ечимини

$$\Theta=(1-x^2)^{\frac{m}{2}}f(x) \qquad (7.15)$$

кўринишида ахтарамиз. (7.15) функциянинг махсус нуқталарга эга бўлмаслиги учун $m \geq 0$ ва $x=\pm 1$ бўлиши зарур. (7.15) ни (7.14) га қўямиз

$$(1-x^2)\frac{d^2f}{dx^2}-2x(m+1)\frac{df}{dx}+[\lambda-m(m+1)]f=0. \qquad (7.16)$$

Охирги тенгламанинг ечимини қуйидаги даражали кўпҳад тариқасида излаймиз

$$f(x)=\sum_{v=0}^{\infty}a_v x^v. \qquad (7.17)$$

(7.17) ни (7.16) га қўйиб, қуйидаги кўпҳадни оламиз

$$\sum_{v=0}^{\infty}\left\{v(v-1)a_v x^2+[\lambda-(v+m)(v+m+1)]a_v x^v\right\}=0. \qquad (7.18)$$

Математика курсидан маълумки, (7.16) дифференциал тенгламанинг ечими (7.17) кўринишдаги кўпҳад бўлиши учун (7.18) кўринишидаги алгебраик тенгламада бир хил даражали x номаълумлар олдидаги коэффицентларнинг алгебраик йиғиндиси нолга тенг бўлиши шарт. Биз бу шартни v -даражали x^v -нинг олдидаги коэффициентлар учун ёзайлик

$$\sum_{v=0}^{\infty}\left\{(v+2)(v+1)a_{v+1}-[(v+m)(v+m-1)]a_v\right\}x^v=0. \qquad (7.19)$$

Демак, шартга кўра (7.19) даги коэффициентлар нолга тенг бўлиши керак

$$(v+2)(v+1)a_{v+2}-[(v+m)(v+m-1)]a_v=0.$$

Бундан

$$a_{\nu+2} = \frac{(\nu+m)(\nu+m-1)}{(\nu+2)(\nu+1)} a_\nu. \qquad (7.20)$$

рекуррент формула келиб чиқади. Бу муносабат ёрдамида агар a_ν коэффициент маълум бўлса, $a_{\nu+2}$ коэффициентни, ўз навбатида $a_{\nu+2}$ ёрдамида $a_{\nu+4}$ ни, $a_{\nu+4}$ ёрдамида $a_{\nu+r}$ ва ҳоказо коэффициентларни аниқлаш мумкин бўлади. Бундан кўринадики, (7.20) коэффициентлар ν нинг ортиши билан ортиб бораверади. Демак, (7.17) ечим ҳам чексиз ортади. Аммо Шредингер тенгламасининг ечими чекли бўлиши лозим. Демак, (7.17) ҳам чекли бўлиши керак, шунинг учун (7.20) қаторни қандайдир ҳаддан бошлаб узиш лозим бўлади. Ана шундай ҳаднинг тартиб рақами $\nu=\nu_r$ бўлсин. У ҳолда узиш шарти қуйидагича бўлади: $a_\nu \neq 0$, аммо $a_{\nu+2} = 0$ бўлади. Охирги тенгликнинг бажарилиши учун (7.20) каср суратининг нолга тенг бўлишлиги, яъни

$$\ell(\ell+1) - \lambda = 0$$

етарлидир. Бу ерда $\ell=\nu_r+m$ - *орбитал квант сон* деб юритилади. Демак,

$$\lambda = \ell(\ell+1)$$

бўлганида (16) тенглама чекли ечимга эга бўлади. Бизда

$$\nu_r = 0, 1, 2, 3, ...$$

қийматларни олиши мумкин. Агар $m \geq 0$ эканлигини ҳисобга олсак,

$$\ell = 0, 1, 2, 3, ...$$

дискрет қийматларни олади. Бизда $\nu_r = 0$ дан бошлаб қиймат қабул қилгани учун m квант соннинг максимал қиймати m=1 бўлиб, умумий ҳолда эса $m_l \leq 1$ бўлади. Қатори қандайдир ҳаддан бошлаб узиладиган кўпҳад *полином* дейилади. (7.17) қаторни (7.20) шартни ҳисобга олиб полином кўринишда қуйидагича ёзиш мумкин

$$f(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l. \qquad (7.21)$$

Бу натижа m=0 бўлганида Лежандр полиноми

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l. \qquad (7.22)$$

га ўтади. (7.21) ни (7.15) га қўйсак,

$$\Theta_l^m(\theta) = C_l^m P_l^m(x), \qquad P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} f(x). \tag{7.23}$$

Лежандрнинг *бирлашган полиноми* деб аталади. Бу ердаги C_l^m коэффициентлар

$$\int_0^{2\pi} |\Theta_\theta|^2 \sin\theta \, d\theta = 1,$$

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

нормаллик шартидан топилади

$$C_l^m = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}.$$

Шундай қилиб, Шредингер тенгламасининг $\Theta(\theta)$ ечими учун

$$\Theta_l^m(x) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(x). \tag{7.24}$$

ифодага эга бўламиз. У ҳолда шар функцияси

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}. \tag{7.25}$$

(7.25) да иштирок этувчи функциялар учун ортонормаллик шартлари қуйидагича бўлади

$$(Y_l^m)^* Y_l^m d\Omega = \delta_{ll}\delta_{mm}, \;\; d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi;$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(m-m)\phi} d\phi = \delta_{mm},$$

$$\int_0^{\pi} (P_l^m)^* P_l^m \sin\theta \, d\theta = \frac{2}{2\ell+1}.$$

Агар квант сон $m<0$ қийматлари қабул қилса, (7.25) ечим

$$Y_l^m(\theta,\phi) = (-1)^m Y_l^{|m|}(\theta,\phi).$$

кўринишида ёзилади. Кўрсатиш мумкинки (7.25) функция зарра импулс моменти квадрати

$$L^2 = L_x{}^2 + L_y{}^2 + L_z{}^2$$

нинг хусусий функцияси ҳисобланади, чунки сферик координата системасида

$$\hat{L}^2 = -h^2\nabla^2{}_{\theta,\phi}$$

кўринишидаги оператор ҳисобланади. Шунинг учун

$$-h^2\nabla^2_{\theta\phi}Y_l^m(\theta,\phi) = h^2\lambda Y_l^m(\theta,\phi).$$

тенглик ўринли бўлади, бу ерда $\lambda=\ell(\ell+1)$ ёки бошқача ёзсак,

$$\hat{L}^2Y(\theta,\varphi) = h^2\ell(\ell+1)Y(\theta,\varphi)$$

бўлади. Демак, ℓ квант сон L^2 оператор олиши мумкин бўлган сонларнинг квантланган қийматларини ифода этади ва *орбитал квант сон* дейилади. Квант сон m эса L операторнинг бирор ўққа нисбатан проекциясини квантлайди

$$\hat{L}_zY(\theta,\varphi) = mhY(\theta,\varphi),$$

ёки

$$\hat{L}_z\Phi_m(\varphi) = mh\Phi_m(\varphi).$$

Назорат саволлари:

1. Марказий симметрик майдон деб қандай майдонга айтамиз?
2. Тўлқин функцияни ўзгарувчиларга ажратишга нима имконият беради?
3. Даврий бўлган ва даврий бўлмаган ҳаракатларнинг юзага келиш сабаби нимада?
4. Лежандр полиномининг хоссалари қандай?
5. Орбитал квант сонининг турли қийматлари учун электрон булутлари шаклларини кўрсатинг
6. Водород атомининг потенциал энергияси қандай ёзилади?
7. Радиал функция учун Шредингер тенгламасини ёзинг.
8. Шредингер тенгламасининг водород атоми учун умумий ечимини ёзинг.
9. Электроннинг радиал ва бурчакли тақсимланиш эгриликларини турли ҳолатлар учун чизинг.

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 масала. Квазиклассик яқинлашувда $U(r)=-\frac{e^2}{r}$ потенциал майдонда ҳаракат қилаётган зарра энергетик сатҳи аниқлансин.

Ечиш. Берилган потенциал майдон марказий симметрияга эга бўлгани учун зарра импулс моменти сақланувчан катталик бўлади ва Шредингер тенгламаси бу зарра учун

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2dR}{rdr}+\left\{\frac{2m}{h^2}\left[E+\frac{e^2}{r}-\frac{h^2l(l+1)}{2mr^2}\right]\right\}R=0 \qquad (1)$$

кўринишда ёзилади. Бу ерда $\{.....\}$ қавс ичида жойлашган ифода $\frac{p^2(r)}{h^2}$ га тенг бўлади, яъни

$$p^2(r)=2m\left[E+\frac{e^2}{r}-\frac{h^2l(l+1)}{2mr^2}\right].$$

У ҳолда Бор-Зоммерфелднинг квантлаш шарти қуйидагича ёзилади

$$\int_{r_1}^{r_2}p(r)dr=\pi h\left(n_r+\frac{1}{2}\right), \qquad (n_r=0,1,2,....) \qquad (2)$$

Бу ерда r_1, r_2-лар зарранинг майдонда бурилиш нуқталари ва $r_2>r_1$ бўлади. Тортишув майдонида зарра энергияси E эса мусбат ва манфий қийматларга эга бўлиши мумкин. Кўрсатиш мумкинки, (1) даги $\ell(\ell+1)$ ҳади ўрнига $\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2$ ни ёзиб бўлади. Агар $q(r)=\frac{p(r)}{h}$ алмаштириш ўтказсак, E ўрнига |E| ни олсак, (2)-дан ёза оламиз

$$q^2(r)=\frac{2m}{h^2}\left[-|E|+\frac{e^2}{r}-\frac{h^2\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2}{2mr^2}\right]=-k^2+\frac{2}{ar}-\frac{\lambda^2}{r^2} \qquad (3)$$

Бу ерда $k^2=\frac{2m|E|}{h^2}$, $a=\frac{h^2}{me^2}\approx 0{,}53A$ - Бор буйича 1-радиус, $\lambda=\ell+\frac{1}{2}$. Зарранинг майдондаги бурилиш нуқталари $q^2(r)=0$ шартидан аниқланади

$$-k^2+\frac{2}{ra}-\frac{\lambda^2}{r^2}=0$$

ёки

$$r^2-\frac{2}{ak^2}r+\frac{\lambda^2}{k^2}=0$$

Бундан

$$r_1=\frac{1}{ak^2}\left[1-\sqrt{1-(\lambda ak)^2}\right],\qquad r_2=\frac{1}{ak^2}\left[1+\sqrt{1-(\lambda ak)^2}\right],$$

у ҳолда (3)-ни r_1, r_2-лар орқали қуйидагича ёзиш мумкин бўлади:

$$q^2(r)=\frac{k^2}{r^2}\left(r-r_1\right)\left(r_2-r\right).$$

Шунинг учун (2)-квантлаш шартини

$$k\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\left(r-r_1\right)\left(r_2-r\right)}\frac{dr}{r}=\pi(n_r+\frac{1}{2}) \qquad (4)$$

кўринишида ёза оламиз. (4)-интегрални уч босқичда ҳисоблаймиз. Дастлаб, бу интегралда

$$r=\frac{1}{2}\left(r_2-r_1\right)x+\frac{1}{2}\left(r_1+r_2\right)$$

алмаштиришни ўтказамиз. У ҳолда

$$\left(r-r_1\right)\left(r_2-r\right)=\frac{1}{2}\left(r_2-r_1\right)\sqrt{\left(1+x\right)\left(1-x\right)}=\frac{1}{2}\left(r_2-r_1\right)(1+x)\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}$$

$$\frac{dr}{r}=\frac{dx}{(x+1)+\frac{2}{r_2/(r_1-1)}}$$

ва (4)-интеграл қуйидагича ёзилади

$$\frac{k}{2}\left(r_2-r_1\right)\int(1+x)\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}\frac{dx}{(x+1)+\frac{2r_1}{r_2-r_1}}=\pi\left(n_r+\frac{1}{2}\right) \qquad (5)$$

Иккинчи босқичда $y=\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}$, $p^2=\frac{r_2}{r_1}$ алмаштиришларни ўтказамиз. У ҳолда

$$x=\frac{1-y^2}{1+y^2}, \qquad dx=-\frac{4ydy}{(1+y^2)^2}, \qquad \frac{dx}{(1+x)+\frac{2}{p^2-1}}=\frac{2(p^2-1)ydy}{(1+y^2)(y^2+p^2)}$$

бўлади ва (5)-интеграл ўрнида оламиз

$$f(y)\Big|_{y=ip}=\frac{y^2(y-ip)}{(y^2+1)^2(y^2+p^2)}=\frac{y^2(y-ip)}{(y^2+1)^2(y-ip)(y+ip)}=k\frac{(r_2-r_1)^2}{r_1}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{y^2dy}{(y^2+1)(y^2+p^2)}=\pi\left(n_r+\frac{1}{2}\right)$$

(6)

Охирги интеграл y=i ($y^2+1=0$ дан) - иккинчи тартибли қутб, y=ip ($y^2+p^2=0$ дан) - биринчи тартибли қутб нуқталарга эга бўлгани учун улар чегирма ёрдамида ечилади. Агар интеграл остидаги ифодани

$$f(y)=\frac{y^2}{(y^2+1)^2(y^2+p^2)}$$

деб белгиласак, чегирма тўғрисидаги теоремага асосан

$$\int f(y)\,dy=2\pi i\left[\,f(y)\Big|_{y=ip}+f(y)\Big|_{y=i}\right]$$

ва

$$f(a)=\frac{1}{m-1}\frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}}\left[f(z)(z-a)^m\right]_{z=a}$$

бўлгани учун

1)

$$f(y)\Big|_{y=ip}=\frac{y^2(y-ip)}{(y^2+1)^2(y^2+p^2)}=\frac{y^2(y-ip)}{(y^2+1)^2(y-ip)(y+ip)}=\frac{y^2}{(y^2+1)^2(y+ip)}=\frac{(ip)^2}{(ip)^2+(ip+ip)}=\frac{ip}{2(i-p^2)^2}$$

2)

$$f(y)\Big|_{y=i}=\frac{dy^2(y-i)2}{dy(y^2+1)^2(y^2+p^2)}=\frac{dy^2(y-i)^2}{dy\left[(y-i)(y+i)\right]^2(y^2+p^2)}=\frac{d}{dy}\frac{y^2}{(y+i)^2(y^2+p^2)}\frac{2y}{(y+i)^2(y^2+p^2)}\Bigg|_{y=i}-$$

$$\frac{(y)^2\left[2(y+i)(y^2+p^2)+(y+i)^2 2y\right]}{(y+i)^4(y^2+p^2)^2}\Bigg|_{y=i}=\frac{2i}{(2i)^2(p^2-1)}-\frac{i^2\left[4i(p^2-1)+(2i)^2 2i\right]}{(2i)^4(p^2-1)^2}=-i\frac{p^2+1}{4(p^2-1)^2}$$

Демак,

$$\int f(y)dy=2\pi i\left[\frac{ip}{2(1-p^2)^2}-\frac{i(p^2+1)}{4(1-p^2)^2}\right]=\frac{\pi}{2}\frac{\left(\sqrt{\frac{r_2}{r_1}}-1\right)^2 r_1^2}{\left(r_2-r_1\right)^2}$$

Шундай қилиб, (6)-нинг ўрнида

$$\frac{k\pi}{2}\left(\sqrt{\frac{r_2}{r_1}}-1\right)^2 r_1=\pi\left(n_r+\frac{1}{2}\right) \qquad (7)$$

ҳосил бўлади. Агар $\lambda ka=t$ деб олсак, (7)-ни қуйидагича ёза оламиз

$$\frac{\lambda}{2t}\left[1-\sqrt{1-t^2}\right]\left(\sqrt{\frac{1+\sqrt{1-t^2}}{1-\sqrt{1-t^2}}}-1\right)^2=n_r+\frac{1}{2}$$

ёки

$$\lambda\frac{1-t}{t}=n_r+\frac{1}{2}.$$

Бундан

$$t=\frac{\lambda}{n_r+\lambda+\frac{1}{2}}$$

ёки

$$ka=\frac{1}{n_r+\lambda+\frac{1}{2}}$$

бўлади. Агар k,a,λ -лар ўрнига уларнинг ифодаларини қўйсак,

$$E=-\frac{me^4}{2h^2}\frac{1}{\left(n_r+\lambda+\frac{1}{2}\right)^2}$$

ва $n_r+\ell+1=n$ (бу ерда n -бош квант сон) эканлигини ҳисобга олсак, Кулон майдонида ҳаракат қилувчи электрон тўлиқ энергияси учун тўғри формулани оламиз:

$$E_n=-\frac{me^4}{2h^2n^2}.$$

Мустақил ишлаш учун масалалар

1.Марказий симметрияга эга бўлган майдон заррачанинг ҳаракат тенгламаси

$$\nabla^2\psi+\frac{2m}{h^2}[E-U(r)]\psi=0.$$

ни сферик координаталар тизимида тасвирлаб беринг.

2. Ушбу

$$\frac{\nabla^2_{\theta,\phi} Y(\theta,\phi)}{Y(\theta,\phi)} = -\frac{r^2\nabla^2_r R(r)}{R(r)} - k^2(r)$$

тенгламани кўпайтувчиларга ажратиб ёзинг.
3. Магнит квант сони деб нимага айтилади? Унинг қабул қиладиган сонли қийматларини келтиринг.

VIII-БОБ
ВОДОРОД МОЛЕКУЛАСИНИНГ КВАНТ НАЗАРИЯСИ

8.1. Водород молекуласи

Молекуланинг квант назарияси кўп электронли атом квант назариясига ўхшасада, улар бир-бирларидан фарқ ҳам қилади. Агар атом кўп электронли, бир марказли система бўлса, молекула кўп электронли ва кўп марказли системадир. Ана шу фарқнинг ўзи молекула масаласини ечишда математик нуқтаи назаридан масаланинг қўйилишини тубдан ўзгартириб юборади ва янгидан-янги усуллардан фойдаланишни тақозо этади. Биз кўп электронли системаларнинг энг содда вакили бўлган *гелий атоми* масаласини ечишда қанчалик қийинчиликларнинг пайдо бўлганлигини кўрган эдик, ваҳоланки бу атомда иккитагина электрон ва битта ядро мавжуд эди. Агар молекулалар ичида энг соддаси бўлган водород молекуласини қарамоқчи бўлсак, у гелий атомидан электронлар сони, ядросининг заряди билан эмас, ядро сонининг иккита бўлиши билангина фарқ қилади, холос. Шунга қарамасдан водород молекуласи масаласи шунчалик мураккабки, у ҳозирги кунгача аниқ эчимга эга эмас. Ўйлаймизки, бу масаланинг етарли даражада математик жиҳатдан мураккаблиги масала ечимини аниқ топиш имкониятини бермайди. Шу сабабдан бу масалани ечишда турли тақрибий усуллардан фойдаланишга тўғри келади.

Молекулалар масаласини қараб чиқишда, аввало, нейтрал атомларни молекулага бирлаштириб турувчи кучларнинг табиати қандайлиги қизиқтиради. Атомларни молекулага бирлаштирувчи боғланиш *кимёвий боғланиш* деб айтилади ва улар икки турда бўлади: ионли боғланиш ва ковалент (атомли) боғланиш. Ионли боғланиш шу билан характерланадики, қутбли эритувчиларда бу молекулалар эриганида улар ионлар ҳосил қилишади. Энг оддий мисол қилиб NaCl молекуласини келтириш мумкин. Бу молекула ҳосил бўлишининг қўполроқ схемаси қуйидагичадир: Na атоми ташқи қатламида битта заиф боғланган валент электронга эга бўлса, Cl атомида аргоннинг турғун электрон қатламининг ҳосил бўлиши учун битта электрон етишмайди. Бу икки атомлар бир-бирларига яқинлашсалар Na нинг электрони Cl атоми томонидан тутиб олинади, натижада пайдо бўладиган Na^{+}, Cl^{-} ионлари бир-бирларини кулон электростатик кучлари таъсирида тутиб туришади.

Лекин ионли боғланиш механизми ёрдамида бир хил атомлардан ташкил топган N_2, O_2, H_2 ва ҳ.з. молекулаларни асло тушунтириб бўлмайди. Бу муаммонинг ечими электрон қатламлари бутунлай тўлган атомлар бир-бирларига «сингиб боришга», қўпол қилиб айтганда «туташиб кетишга» тиш-тирноғи билан қаршилик кўрсатиш хоссасида намоён бўлади. Агар молекулага бирлашувчи икки атом ташқи қатламлари электронлар билан тўлмаган бўлса, бу электронлар шундай ягона системани ҳосил қиладики, уларнинг энергияси фақатгина ядролар орасидаги масофагагина боғлиқ бўлиб қолади. Шунга кўра, бирлашган электрон системаси минимал қиймат

қабул қиладиган стационар ҳолатни аниқлаб, атомлар ўртасида юзага келадиган боғланишнинг турғунлигини ўрганиш лозим бўлади.
Шундай қилиб, қатламлари электронлар билан тўлиқ тўлмаган атомлар валентликка эга бўлар экан. Молекуланинг тўлиқ электрон системаси электронлар билан тўлган қобиқ характеристикасига эга бўлганда валентлик тўйинади. Тўйинган валентликка эга бўлган молекулалар ташқи қатлами электронлар билан тўлган атомлар каби хоссага эга бўлади. Бундай электронли системалар магнит моменти нолга тенг бўлади. Демак, кимёвий жиҳатдан турғун бўлган моддалар (молекулалар) парамагнит хоссага эга бўлмайди. Ҳақиқатда, ковалент боғланишли молекулалар парамагнит бўлмаган моддалардир. Ковалент боғланишли энг содда молекула водород молекуласидир. Биз ана шу молекуланинг квант назариясини қараб чиқамиз.
Биламизки, водород молекуласи иккита электрон ва иккита ядродан ташкил топган. Лекин ядронинг таркибини ташкил этган протон масса жиҳатидан электрон массасидан қарийб 2000 марта каттадир. Шунинг учун протонниг инерция марказига нисбатан ҳаракати электронлар ҳаракатига қараганда анча суст ҳисобланади. Демак, биз протонлар ҳаракатини ҳисобга олмасдан, уларни тинч турибди деб фараз қилиб, фақат электронлар ҳаракатини ўрганамиз. Бундай яқинлашув *адиабатик яқинлашув* деб аталади. Айнан ушбу яқинлашувда водород молекуласи масаласи Борн ва Оппенгеймерлар томонидан биринчи марта қараб чиқилган. Биз 1927 йил Гайтлер-Лондонлар томонидан берилган назария асосида водород молекуласи назариясини қараб чиқамиз. Бу назарияда водород молекуласи қўзғолиш назарияси усули ёрдамида таҳлил этилади.

Фараз қилайликки, иккита водород атоми бир-биридан етарлича узоқ масофада жойлашган бўлсин. Унда 1 электрон а ядро билан «боғланган» ва бу ядродан $\vec{r}_1$ радиус-векторли масофада жойлашган, 2 электрон эса b ядрога боғланиб, ундан $\vec{r}_2$ радиус-векторли масофада жойлашган бўлсин. Бундай системанинг тўлқин функцияси электронлар ҳолат функциялари кўпайтмаси орқали қуйидагича ифодаланади

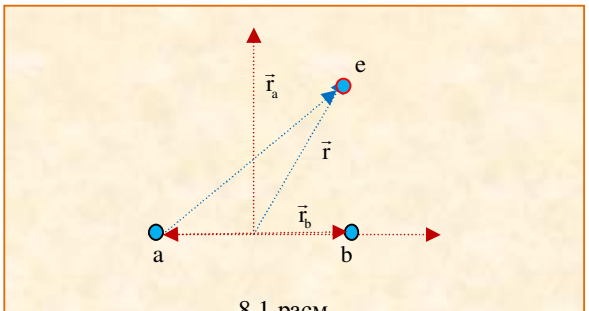
$$\psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1)\,\psi_b(\vec{r}_2) \tag{8.1}$$

Бу ердаги $\psi_a(\vec{r}_1), \psi_b(\vec{r}_2)$ функциялар асосий ҳолатда жойлашган водород атомлари функциялари ҳисобланади ва улар

$$\psi_a(\vec{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_1}{a}} \quad , \psi_b(\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r_2}{a}} \tag{8.2}$$

кўринишга эга бўлган функциялардир. Бу функцияларнинг ҳар бири нормаллашган функциялардир

$$\int \left|\psi_a(\vec{r}_1)\right|^2 d\vartheta \;=\; \int \left|\psi_b(\vec{r}_2)\right|^2 d\vartheta = 1 \tag{8.3}$$



8.1-расм

Электронлар айнан ўхшаш зарралар бўлгани учун, биринчи электроннинг энди *b* ядро қошида, иккинчи электроннинг эса *a* ядро қошида жойлашиши ҳам мумкин бўлади (8.1 – расм). Лекин олдин ҳам уқдириб ўтганимиз каби, электронларнинг бундай ўрин алмашувига нисбатан молекуланинг умумий энергияси ўзгармай қолади. Берилган ҳолда система ҳолат функцияси

$$\psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2) \tag{8.4}$$

бўлади.

8.2. Водород атоми сатҳининг нозик структураси

Водород атоми ядросининг кулон майдонида электрон ҳаракатини Шредингер тенгламаси ёрдамида ўрганиш энергиянинг квантланган қийматлари учун

$$E_n = -\frac{me^4}{2h^2n^2} \tag{8.5}$$

формулани беришини кўрган эдик. Бу формула натижалари тажриба натижаларига мос келсада, энергиянинг нолинчи яқинлашувидаги қийматини ифода этади, чунки водород атоми спектрида кузатиладиган нозик структурани тушунтира олмайди. Бунга сабаб Шредингер назариясида электрон массасининг тезлигига боғлиқ бўлишлиги ва унинг спини туфайли юзага келадиган релятивистик эффектлар ҳисобга олинмайди. Клейн-Гордон назарияси релятивистик назария бўлганлигидан водородсимон атомлар энергияси (8.5) формуладагидек фақат бош квант сон n га боғлиқ бўлиб қолмасдан, шунингдек орбитал квант сон l га ҳам боғлиқ бўлар эди ва атом спектрида нозик структура мавжудлигини кўрсатиб берар эди

$$E_{nl} = -\frac{me^4}{2h^2n^2}Z^2\left[1+\frac{\alpha^2Z^2}{n^2}\left(\frac{n}{1+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right] \quad . \qquad (8.6)$$

Клейн-Гордон тенгламаси зарра спинини ҳисобга олмайди ва шу туфайли водород атоми спектридаги нозик структурани тўғри тушунтира олмайди. Дирак тенгламаси доирасида водород атоми энергиясидаги нозик структурани тушунтириш учун унинг тенгламасини ядронинг кулон майдонида ҳаракат қилувчи электрон учун ечишга тўғри келади. Лекин масала ечими анча мураккаб бўлганидан Клейн-Гордон тенгламаси доирасида ҳисобланган (8.6) формулани берилган ҳол учун умумлаштириш билан чегараланамиз. (8.6) формула электрон спинини ҳисобга олмагани, Дирак ҳолида эса спин ҳисобга олинганлиги сабабли (8.6) да орбитал квант сони *l* ни тўлиқ момент квант сони j га алмаштириб ёзамиз

$$E_{nj} = -\frac{me^4}{2h^2n^2}Z^2\left[1+\frac{\alpha^2Z^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right] \quad . \qquad (8.7)$$

Бу формула водород атомидаги (Z=1) электроннинг атом термларининг нозик структурасини ҳисобга олувчи энергиясини ифода этади. Ундан кўринадики, бош квант сони n бўлган ҳар бир сатҳнинг квант сон j нинг олиши мумкин бўлган қийматларича сатҳларга ажралиб кетади. Сатҳларнинг ажралиши сатҳлар энергиясига нусбатан $\alpha^2 = \left(\frac{1}{137}\right)^2$ тартибда бўлади. Мисол тариқасида $n = 2,\ \ j = 1/2$ (водород атомининг $2^2S_{1/2}$, $2^2P_{1/2}$ ҳолатлари) сатҳ ва $n = 2,\ j = 3/2$ (водороднинг $2^2P_{3/2}$ ҳолати) сатҳ ўртасидаги ажралишни қарайлик. (8.7) формуладан

$$\Delta E = E_{2,3/2} - E_{2,1/2} = \frac{\alpha^2|E_2|}{(2n)} \approx 4,5\cdot 10^{-5}\,\text{эВ},$$

бу ерда $|E_2| = me^4/2h^2\cdot(1/4)$ - нозик структурани ҳисобга олмайдиган $n = 2$ сатҳнинг энергияси. Частоталарда ΔE ни ҳисобласак

$$\Delta\nu = \frac{\Delta\omega}{2\pi} = \frac{\Delta E}{2\pi h} = 1,10^4\ \text{Мгц}.$$

Тажриба натижалари (8.7) формула берадиган натижаларга тўла мос келади. Демак, (8.7) формула бўйича водород атомида электрон энергияси фақат n, j квант сонларига боғлиқ бўлганлиги туфайли $2^2S_{1/2}, 2^2P_{1/2}$ сатҳлар энергияси бир-бирига тенг бўлади. Нуқтавий ядронинг кулон майдонида ҳаракат қилувчи электрон учун Дирак назарияси бош квант сон n ва тўлиқ момент квант сони j нинг бир хил қийматларида (лекин орбитал квант сон $l = j \pm 1/2$ бўйича турли қийматларни олиши мумкин) энергетик сатҳларнинг турланганлигини кўрсатади. Масалан, $2S_{1/2}$ $(n = 2, j = 1/2, l = 0)$ ва $2P_{1/2}$ $(n = 2, j = 1/2, l = 1)$ ҳолатлар бир хил энергияга эга бўлади. Аммо Бальмер серияси чизиқларини синчковлик билан ўтказилган спектроскопик текширишлар водород атоми $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$ энергетик сатҳларнинг бир хил бўлишлигини шубҳа остига олди. Дирак назариясидан келиб чиқадиган нозик структура катталигига нисбатан тажрибада ўлчанган катталик камроқ эканлиги маълум бўлди. Назария ва тажриба натижалари ўртасидаги бундай фарқни $2S_{1/2}$ сатҳнинг $2P_{1/2}$ сатҳга нисбатан тахминан 1000 Мгц юқорида жойлашган деб қаралганда тушунтириш мумкин бўлган. Лекин спектрал чизиқларда кузатиладиган допплерча кенгайиш тажриба натижасининг аниқлик даражасини камайтирганлиги туфайли бу сатҳларда кузатилган силжишни шубҳа остига қўйган.

Ўтган асрнинг эллигинчи йилларида радиоспектроскопия усулларининг шиддат билан ривожланиши 1947 йилда Лемб ва Резерфордларга $2S_{1/2}, 2P_{1/2}$ сатҳлар энергиясини ўлчаш имкониятини берди. Улар $2S_{1/2}$ ҳолатнинг ўзига хос хусусиятидан фойдаландилар. Бу ҳолат метастабил ҳолат ҳисобланади, яъни бу ҳолатдан энергетик жиҳатдан пастроқ жойлашган $1S_{1/2}$ ҳолатга диполли ўтиш танлаш қоидаси ($\Delta l = \pm 1$) га кўра таъқиқланган бўлади (берилган ҳолда эса $\Delta l = 0$). Лемб ва Резерфордлар томонидан ўтказилган тажрибалар шуни исботладики, $2S_{1/2}$ ва $2P_{1/2}$ сатҳлар, Дирак назарияси кўрсатганидек, бир-бирига мос тушмас экан. Бу сатҳлар ўртасида частоталар бўйича фарқ 1058 Мгц ни ташкил этар экан. Шундай қилиб, релятивистик назария ва тажриба орасида четланиш мавжуд бўлар экан. Бу четланиш миқдор жиҳатидан жуда кичик бўлади: $2P_{1/2}$ ва $2P_{3/2}$ сатҳлари орасидаги интервалнинг ўзи нозик структура ҳисобланади, $2S_{1/2}$ ва $2P_{1/2}$ сатҳлар орасидаги масофа эса тахминан ўн марта кўрсатилган интервалдан кичик бўлади.

Бундай четланишни таҳлил қилиш шуни кўрсатадики, атомлардаги электрон энергетик сатҳларнинг Лемб ва Резерфорд тажрибаларида кузатилган бундай силжиши электроннинг *вакуум флуктуацияси* билан ўзаро таъсири натижаси ҳисобланар экан. Демак, вакуумни бирор нарсаси йўқ бўлган муҳит деб тушунмаслик керак. Вакуум амалда аниқ физик хоссага эга бўлиб, унинг бундай хоссалари жумладан *Лемб-Резерфорд* тажрибаларида намоён бўлади. Вакуумнинг физик хоссалари фотон ва

бошқа зарраларнинг виртуал туғилиши ва ютилишига асосланган бўлади. Шу сабабдан нафақат электромагнит вакууми тўғрисида, шунингдек бошқа зарралар вакууми тўғрисида ҳам гапириш мумкин бўлади. Жумладан, Дирак назариясида биз кўриб ўтган манфий энергияли ҳолатни, яъни электронлар фонини, электрон-позитрон вакууми деб тушунмоқ керак бўлади. Турли зарралар вакууми ҳозирги замон квант майдонлар назариясида жуда муҳим рол ўйнайди. Зарралар вакууми туфайли зарраларнинг бир-бирлари билан ўзаро таъсирлари амалга ошади. Масалан, Кулон қонуни бўйича электромагнит ўзаро таъсир электромагнит вакууми ёрдамида амалга ошади. Электр зарядлари виртуал фотонлар билан алмашишлари натижасида улар ўртасида ўзаро таъсир кучи юзага келади. Виртуал фотонлар билан алмашиниш бир заряд томонидан фотоннинг нурлантирилишига, иккинчи заряд томонидан бу фотоннинг ютилишига олиб келади. Натижада фотонлар билан бундай алмашиниш вакуумнинг нолинчи ҳолатининг ўзгаришига ва электромагнит ўзаро таъсирнинг пайдо бўлишига олиб келади.

Назорат саволлари:

1. Кимёвий боғланиш турларини айтинг.
2. Ковалент боғланишни қандай назария тушинтира олади?
3. Алмашув интеграли кулон интегралидан қандай фарқ қилади?
4. Спинларнинг қандай ориентатсиясида турғун водород молекуласи ҳосил бўлади?
5. Нозик структура нима, унинг доиймийсининг сон қиймати нимага тенг.

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1-масала. Водород атомидаги электрон тўртинчи энергетик сатҳдан иккинчисига ўтди. Нурланган фотоннинг энергияси аниқлансин.

Берилган: $\frac{n_1 = 2, n_2 = 4}{Å \sim ?}$

Ечиш: Фотон энергиясини аниқлаш учун водородсимон ионларни сериал формулаларидан фойдаланамиз

$$\frac{1}{\lambda} = RZ^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \qquad (1)$$

бу ерда λ – фотоннинг тўлқин узунлиги: Р – Ридберг доимийси: Z – ядро зарядининг нисбий бирлиги (Z=1да формула водород сериясига мос келувчи формулага айланади), n_1 – электрон ўтган орбита номери: n_2 – электроннинг бошланғич ҳолатдаги орбита номери (n_1 ва n_2 асосий квант сонлар). Фотон энергияси Е қуйидагича аниқланади

$$Å = \frac{hc}{\lambda}.$$

(1) формулани чап ва ўнг томонини «hc»га кўпайтириб фотон энергиясини аниқлаш формуласини топамиз

$$E = Rhcz^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right).$$

Ионизациялаш энергияси $Å_i = R\,h\,c$ эканлигини ҳисобга олиб

$$E = E_i z^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

ҳисоблашни бажарамиз. E_i =13,6 эВ (жадвалда берилади); z=1; n_1=2; n_2=4;

$$E = 13,6 \cdot 1^2\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2}\right) \text{ эВ} = 13,6\frac{3}{16}\text{eV} = 2,55 \text{ эВ}\cdot$$

2-Масала. Водород атоми иккинчи энергетик (n=2) сатҳининг электрон спин-орбитал ўзаро таъсирида ажралиши – нозик структураси ҳисоблансин.

Ечиш. Бош квант сон n=2 бўлгани учун орбитал квант сон l=0,1 қийматларга эга бўлади, *l* нинг бу қийматларида j квант сони эса l=0

бўлганда j=1/2, l=1 бўлганда эса $j = l \pm 1/2 = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ бўлади. Спин-орбитал ўзаро таъсир ҳисобга олинмаганда n=2 учун энергия (Z=1)

$$E_2 = Z^2 E_2(H) \cong -\frac{13,69}{4} \text{эВ} = -3,4 \text{ эВ}$$

бўлади ва $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$, $2P_{3/2}$ термлар барчаси $-3,4$ эВ энергияга эга бўлади. Ўзаро таъсир ҳисобга олинганда

$$(j = 1/2): \qquad E_{2,1/2} = E_2\left[1 + \frac{\alpha^2}{4}\left(2 - \frac{3}{4}\right)\right] = E_2\left(1 + \frac{5\alpha^2}{16}\right)$$

$$(j = 3/2): \qquad E_{2,3/2} = E_2\left[1 + \frac{\alpha^2}{4}\left(1 - \frac{3}{4}\right)\right] = E_2\left(1 + \frac{\alpha^2}{16}\right)$$

бўлади ва ажралиш кенглиги

$$\Delta E = E_{2,1/2} - E_{2,3/2} = \alpha^2 |E_2| \left(\frac{5}{16} - \frac{1}{16}\right) = \frac{\alpha^2 |E_2|}{4} \Rightarrow$$

$$\left(\alpha^2 = \frac{1}{137^2} = \frac{1}{18769} = 5,3 \cdot 10^{-5}\right) \Rightarrow \frac{5,3}{4} |3,4\text{эВ}| \cdot 10^{-5} = 4,5 \cdot 10^{-5} \text{эВ}$$

$$\Delta E = 4,5 \cdot 10^{-5} \text{эВ}.$$

Частоталар бирлигида бу кенглик $\Delta E = h\Delta v$ бундан

$$\Delta v = \frac{\Delta E}{h} = \frac{4,5 \cdot 10^{-5}}{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 6,25 \cdot 10^{18} \text{с}} = \frac{4,5}{4,2} \cdot 10^{10} \text{Гц} = 1,10 \cdot 10^4 \text{МГц}.$$

Бу натижа тажриба натижасига тўла мос келади. Лекин шуни айтиш керакки, Диракнинг нозик структура формуласи $2^2S_{1/2}, 2^2P_{1/2}$ термларнинг ҳам ўз навбатида ажралишини тушунтира олмайди. Лемб-Резерфорд тажрибаси эса бу термларнинг нозик структураси мавжуд эканлигини ва унинг кийматининг 1058 Мгц га тенг бўлишини курсатади.

Мустақил ишлаш учун масалалар

1.Икки электронли система асосий ҳолатда жойлашган бўлса, унинг мумкин бўлган термлари ёзилсин.

2.Агар L=3, S=3/2 га тенг бўлса, термлар сони нечта бўлади?

3. $S_{1/2}$ термнинг мултиплетлиги нечага тенг?

4.Гунд қоидаларидан фойдаланиб, p^3, p^7, d^2, d^8 конфигурацияли атом асосий ҳолат терми ёзилсин.

IX-БОБ
ТАСАВВУРЛАР НАЗАРИЯСИ ЭЛЕМЕНТЛАРИ

9.1. Ҳолатлар тасаввури.

Физик системанинг ҳолатини тўлқин функцияси ёрдамида аниқлаймиз, лекин тўлқин функциясини ўлчаш иборасини қўллаш мақсадга мувофиқ эмас. Унинг ўрнига одатда механик катталиклар ўлчанади. Агар системани аниқловчи катталик сифатида L катталик (масалан, р-импулс) танлаб олинса, у ҳолда тўлқин функцияси ва операторлар "L"-тасаввурида берилган деб тушунилади. Фараз қилайлик, тўлқин функцияси $\psi(x)$ "x"-тасаввурида берилган бўлсин. Бундан ташқари, бу тасаввурда оператор $\hat{L} = \hat{L}(-ih\frac{\partial}{\partial x}, x)$ ва унинг хусусий функцияси $\psi(x, L)$ маълум бўлсин. У ҳолда ҳар қандай ихтиёрий функцияни хусусий функция бўйича қаторга ёйиш мумкин

$$\psi(x)=\int C(L)\psi(x,L)dL. \qquad (9.1)$$

Бу ерда ўз навбатида $\psi(x)$ функция орқали ифодаланувчи ёйилма коэффициенти $C(L)$ қуйидаги кўринишда ёзилади

$$C(L) = \int \psi^*(x, L)\,\psi(x)\,dx \qquad (9.2)$$

ҳамда у "L" – тасаввурдаги тўлқин функцияси ҳисобланади. Агар L катталик сифатида энергияни олсак, (9.1) ёйилма қуйидагича ёзилади

$$\psi(x)=\sum C_n\psi_n(x). \qquad (9.3)$$

Бу ерда $\psi_n(x)=\psi_1,\psi_2,.....$лар Гамилтон операторининг хусусий қийматлари ҳисобланган $E_1, E_2,....$ларга тегишли бўлган хусусий функциялар; коэффициентлар тўплами C_n эса

$$C_n = \int \psi^*_n(x)\,\psi(x)\,dx \qquad (9.4)$$

"E"-тасаввурдаги тўлқин функцияси ҳисобланади.

Операторлар тасаввури. Энди биз $L(x)$ операторни "E"– тасаввурида қарайлик. Фараз қилайлик, координата тасаввурида қуйидаги оператор тенглик берилган бўлсин

$$u(x) = \hat{L}\upsilon. \qquad (9.5)$$

Бу ерда u ва υ функцияларни Гамилтон оператори хусусий функцияси $\psi_n(x)$ лар бўйича қаторга ёйиш мумкин

$$u=\sum b_n \psi_n(x), \tag{9.6}$$

$$\upsilon=\sum a_m \psi_m(x). \tag{9.7}$$

(9.6)-(9.7) ларни (9.5) га қўйиб, кейин чап томондан $\psi_k^*(x)$ га кўпайтириб ва интеграллаб, (9.5) нинг ўрнига қуйидаги муносабатни оламиз

$$b_k=\sum L_{kn} a_n. \tag{9.8}$$

Бу ерда

$$L_{kn}=\int \psi_k^*(x)\hat{L}\psi_n(x)\,dx \tag{9.9}$$

сонлар тўплами-матрица ҳисобланади ва “E”- тасаввуридаги оператор дейилади. У қуйидаги кўринишда ёзилади

$$L(E)=\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{13} & \dots \\ L_{21} & L_{22} & L_{23} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

<u>*Теорема.*</u> Ҳар қандай оператор ўзининг хусусий тасаввурида диагонал матрицадир. Бу теореманинг исботи тариқасида Гамилтон операторини оламиз ва уни "E"-тасаввурида ёзамиз

$$H_{mn}=\int \psi_m^*(x)\hat{H}\psi_n(x)\,dx=E_n\int \psi_m^*(x)\psi_n(x)\,dx=E_n\delta_{mn}=\begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0\dots \\ 0 & E_2 & 0\dots \\ .. & .. & \dots \end{pmatrix}. \tag{9.10}$$

Демак, H оператор ўзининг хусусий тасаввури бўлган "E" - тасаввурида диагонал матрица экан. Бу матрицанинг диагонал элементлари бўлиб, H операторнинг хусусий қийматлари ҳисобланади.

<u>*1-таъриф*</u>. Бирлик матрица деб диагонал элементлари бирга тенг бўлиб, қолган барча элементлари нолга тенг бўлган матрицага айтилади ва у δ билан белгиланади

$$\delta=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Барча тасаввурда бирлик матрица бирликлигича қолаверади, чунки исталган ортогонал функциялар системаси учун қуйидаги шарт ўринли бўлади

$$\delta_{mn} = \sum \psi_m^* (x)\psi_n(x)dx .$$

2-таъриф. Комплекс қўшма матрица $\hat{L}^*$ деб L матрицанинг барча элементлари ўрнига уларнинг комплекс қўшмалари олинган матрицага айтилади

$$L_{nm}^* = (L^*)_{mn}. \qquad (9.11)$$

3-таъриф. Транспозицияланган матрица $\tilde{L}$ деб L матрицанинг сатри устунига алмаштирилиб ёзилган матрицага айтилади

$$(\tilde{L})_{mn} = L_{nm}. \qquad (9.12)$$

4-таъриф. Ўзига қўшма (эрмит) матрица $\hat{L}^+$ деб L матрицани транспозициялаб, кейин комплекс қўшмаси олинганда дастлабки матрицага тенг бўлган матрицага айтилади

$$L^+ = (L^+)_{mn} = (\tilde{L}^*)_{mn} = L_{nm}^* = L. \qquad (9.13)$$

Эрмит операторга ҳамма вақт ўзига қўшма матрица мос келади. Ҳақиқатдан

$$L_{mn} = \int \psi_m^*(x)\hat{L}\psi_n(x)\,dx = \int \psi_n(x)\left(\hat{L}\psi_m(x)\right)^* dx = L_{nm}^* .$$

5-таъриф. Икки матрица йиғиндиси (айирмаси) га бу матрицалар мос элементлари йиғиндиси (айирмаси) дан иборат матрица мос келади

$$L_{mn} = M_{mn} + N_{mn}. \qquad (9.14)$$

6-таъриф. Иккита матрица кўпайтмаси деб, кўпайтувчи биринчи матрица сатр элементларини иккинчи кўпайтувчи матрица устун элементларига мос равишда кўпайтириб, олинган йиғиндисига айтилади

$$L_{mn} = \sum_k M_{mk} N_{kn}. \qquad (9.15)$$

Матрицаларни кўпайтиришнинг бу қоидалари берилган оператор матрица элементларини тузиш қоидасига мос келишини кўрсатамиз. Операторлар кўпайтмаси $L = MN$ ни қуйидагича ёзиш мумкин

$$\hat{L}\psi=(\hat{M}\hat{N})\psi$$

Фараз қилайликки,

$$\hat{N}\psi=\phi,\ \hat{M}\phi=\chi,\ \hat{L}\psi=\chi$$

бўлсин. У ҳолда ψ,χ,φ ларни ортонормаллашган функциялар системаси бўйича қаторга ёйиб ёзишимиз мумкин

$$\psi=\sum b_n\psi_n,\qquad \chi=\sum d_n\psi_m,\qquad \phi=\sum a_k\psi_k. \tag{9.16}$$

ва ёйилмаган коэффицентлар учун эса қуйидагиларни оламиз

$$a_k=\sum_n N_{kn}b_n,\qquad d_m=\sum_k M_{mk}a_k,\qquad d_m=\sum_n L_{mk}b_n\ . \tag{9.17}$$

Охирги тенгламалар системасини ечиб қуйидагини топамиз

$$d_m=\sum_n\sum_k M_{mk}N_{kn}b_n \text{ ёки } L_{mn}=\sum M_{mk}N_{kn}\ .$$

<u>*Изох.*</u> M ва N матрицалар бирининг сатрлар сони иккинчисининг устунлар сонига тенг бўлгандагина кўпайтириш мумкин, холос.
<u>*7-таъриф.*</u> Матрица диагонал элементлари йиғиндиси унинг *шпури ёки изи* дейилади

$$\mathrm{Sp}\,L=\sum_n L_{nn}.$$

<u>*8-таъриф.*</u> Агар L матрицага тескари бўлган L^{-1} матрица тузиш мумкин бўлса, L матрица *сингуляр бўлмаган матрица* дейилади

$$LL^{-1}=L^{-1}L=1.$$

<u>*9-таъриф.*</u> Агар S матрица учун $S^{+}=S^{-1}$ муносабат ўринли бўлгани учун бу тасаввурда тўлқин функциялари ҳам матрица кўринишида берилади

$$a=\begin{pmatrix} a_1\\ a_2\\ \dots\\ a_n\end{pmatrix},\ b=\begin{pmatrix} b_1\\ b_2\\ \dots\\ b_n\end{pmatrix}\ .$$

У ҳолда $u=\hat{L}\upsilon$ оператор муносабат

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{1n} \\ L_{21} & L_{22} & L_{2n} \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix}.$$

кўринишдаги матрица муносабатига айланади. Агар бирор тасаввурда тўлқин функция

$$\psi = \begin{pmatrix} a_1 \dots & \dots & \dots \\ a_2 \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_n \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

кўринишидаги матрица бўлса, унга қўшма функция

$$\psi^+ = \begin{pmatrix} a_1^* & a_1^* & \dots & a_n^* \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

кўринишида ёзилади.

9.2. Унитар алмаштиришлар.

Бирор L операторни "F"– ва "p"– тасаввурларда қарайлик. Агар F ва p операторларнинг хусусий функцияларини мос равишда φ ва ψ функциялар билан белгиласак, L операторга мос равишда қуйидаги матрицалар тўғри келади

$$L_{mn} = \int \varphi_m^* \hat{L} \varphi_n d\tau \ , \ L_{lq} = \int \varphi_l^* L \psi_q d\tau . \qquad (9.18)$$

Бу матрица элементларида иштирок этувчи φ ва ψ хусусий функцияларнинг ўзаро боғланишини топамиз. Бунинг учун бу функцияларнинг бирини иккинчиси орқали қаторга ёямиз, яъни

$$\psi_k = \sum S_{lk} f_l . \qquad (9.19)$$

Бу ёйилма коэффиценти ўз навбатида

$$S_{lk} = \int \phi^{\bullet}{}_{l} \psi_k d\tau \qquad (9.20)$$

кўринишдаги матрицадан иборатдир. Бу матрица оператор тасаввурини ўзгартирувчи (берилган ҳолда "F"-тасаввурни “p”–тасаввурга ўтказувчи) матрица ҳисобланади ва у S–матрица деб юритилади. Бу матрица қуйидаги хоссаларга эга бўлади:

1. Қаралаётган φ ва ψ хусусий функциялар ортонормаллашган функциялар системасини ташкил этганлиги учун қуйидагини ёза оламиз

$$\int \psi_m^* \psi_k d\tau = \sum\sum S_{im}^* S_{ik} \int \phi_i^* \phi_i d\tau = \sum\sum S_{lm}^* S_{ik} S_{li} = \sum S_{lm}^* S_{lk} = \sum (S^+)_{ml} S_{lk} = \delta_{mk}$$

ёки матрица шаклида

$$S^+ S = 1. \qquad (9.21)$$

Бундан

$$S^+ = S^-. \qquad (9.22)$$

Демак, унитар матрица эрмит матрицаси эмас экан, чунки у эрмит матрицаси ҳисобланганда эди, унинг учун $S^+ = S$ тенглик ўринли бўлган бўлур эди. S–матрица ҳар хил тасаввурда берилган иккита матрицаларни қуйидаги қонун билан бир-бирига боғлайди

$$L' = S^+ L S. \qquad (9.23)$$

Ҳақиқатдан,

$$L'_{lq} = \int \psi_l^* L \psi_q d\tau = \sum\sum S_{ml}^* L_{mn} S_{nq} = \sum (S^+)_{lm} L_{mn} S_{nq}.$$

2. Биз биламизки, агар бирор ихтиёрий функция χ берилган бўлса, бу функцияни ортонормаллашган функциялар системаси φ ва ψ лар орқали қаторга ёйиш мумкин

3.

$$\chi = \sum C_n f_n = \sum C'_m \psi_m. \qquad (9.24)$$

C – матрица ёрдамида (9.24) даги C_n ва C'_m коэффициентларни бир-бирига боғлаш мумкин. Агар биз (9.2) ни ҳисобга олсак,

$$\sum C'_m \psi_m = \sum\sum C'_m S_{nm} \varphi_n = \sum C_n \varphi_n \qquad (9.25)$$

бўлади, яъни

$$C_n = \sum S_{nm} C'_m \tag{9.26}$$

ёки матрица кўринишда

$$C = SC'. \tag{9.27}$$

Худди шу йўл билан (9.27) га тескари боғланишнинг

$$C' = S^+ C \tag{9.28}$$

ўринли эканлигини кўрсатиш мумкин. Биз қуйидаги унитар алмаштиришнинг айрим муҳим хоссаларини қайд қилиб ўтамиз.

1. Унитар алмаштиришлар функциянинг нормаллик шартини ўзгартирмайди.
2. Унитар алмаштиришлар матрицаларнинг эрмитлик шартини ўзгартирмайди, яъни агар алмаштиришгача $L = L^+$ тенглик ўринли бўлса, алмаштиришдан кейин ҳам $L' = L''$ тенглик ўринли бўлиб қолаверади.
3. Унитар алмаштиришлар матрицали тенгламалар кўринишини ўзгартирмайди, яъни алмаштиришгача $F + D = R$, $F \cdot D = P$ бўлса, алмаштиришдан кейин $F' + D' = R'$, $F' \cdot D' = P'$ бўлади.
4. Унитар алмаштиришлар матрицалар хусусий қийматларини ўзгартирмайди

$$D_{mn} = D\delta_{mn} = S^+ DS\delta_{mn} = D'\delta_{mn}.$$

5. Унитар алмаштиришлар матрица изини ўзгартирмайди

$$\mathrm{Sp}\ F' = \sum_n F'_{nm} = \mathrm{Sp}\, F.$$

6. Унитар алмаштиришлар матрица аниқловчисини ўзгартирмайди

$$\det F = \det F'.$$

Назорат саволлари:

1. Ҳолатларни бир тасаввурдан иккинчи тасаввурга ўтказувчи формулани ёзинг?
2. Операторларни турли тасаввурларда қандай ёзиш мумкин?
3. Энергия оператори ўзининг хусусий тасаввурида қандай ёзилади?
4. Унитар алмаштиришлар қандай шартларни қаноатлантиради?

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 Масала. $\hat{x}=x$, $\hat{p}_x=-ih\frac{d}{dx}$ операторлар импульс тасаввурида ёзилсин.

Ечиш: "p"-тасаввурида $\hat{x}$ операторнинг матрицаси

$$x_{p'p}=\int\psi^*_{p'}(x)x\psi_p(x)dx \qquad (1)$$

Бу ерда

$$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}e^{\frac{i}{h}px}$$

$\hat{p}$ операторининг хусусий функциясидир

$$x_{p'p}=\frac{1}{2\pi h}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{i}{h}p'x}xe^{\frac{i}{h}px}dx=\frac{1}{2\pi h}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{h}(p-p')x}dx=\frac{1}{2\pi h}\left(-\frac{h}{i}\right)\frac{\partial}{\partial p'}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{h}(p-p')}dx=$$

$$=\frac{\partial}{\partial p'}\left(\frac{1}{2\pi h}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{h}(p-p')x}dx\right)=ih\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p-p')$$

(1) -га асосан

$$C(p)=\int ih\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p-p')a(p')=ih\frac{da(p)}{dp}.$$

Бундан $C(p)=xa(p)$ га асосан $\hat{x}=ih\frac{d}{dp}$; $\hat{p}$ оператори учун эса $\hat{p}\psi_p(x)=p\psi_p(x)$ бўлганидан

$$p_{p'p}=\int\psi_{p'}^*(x)\hat{p}\psi_p(x)dx=p\int\psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)dp=p\delta(p-p')$$

(1)-га асосан

$$C(p')=\int p\delta(p-p')a(p)dp=p'a(p'),$$

яъни $\hat{p}(p)=p$ бўлади.

2 масала. $[\hat{p}_x,\hat{x}]$ коммутатор натижасининг барча тасаввурларда бир хил бўлишлиги исботлансин.

Ечиш: Берилган коммутаторни а) "x"– тасаввурда, б) "p"– тасаввурда очайлик:

а) $\hat{p}_x=-ih\frac{d}{dx}, \hat{x}=x$ бўлгани учун

$$[\hat{p}_x,\hat{x}]=\left[-ih\frac{d}{dx},x\right]=-ih\left[\frac{d}{dx},x\right]=-ih\left[\frac{d}{dx}x-x\frac{d}{dx}\right]=-ih\left(1+x\frac{d}{dx}-x\frac{d}{dx}\right)=-ih\,.$$

б) $\hat{p}_x=p_x$, $\hat{x}=ih\frac{d}{dx}$ бўлганидан

$$[\hat{p}_x,\hat{x}]\psi(p_x)=\left[p_x,ih\frac{d}{dx}\right]\psi(p_x)=ih\left(p_x\frac{d}{dp_x}-\frac{d}{dp_x}p_x\right)\psi(p_x)=-ih\psi(p_x)\,.$$

$$[\hat{p}_x,\hat{x}]=-ih\,.$$

Демак, ҳар қандай операторлар коммутаторлари бу операторларнинг қайси тасаввурда берилишига боғлиқ бўлмас экан.

3 масала. Гармоник осциллятор асосий ҳолати

$$\psi(x)=Ae^{-\alpha x^2}$$

(бу ерда $A=\sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}$) функция билан ифодаланса, эҳтимолиятнинг импулъс бўйича тақсимланиши ҳисоблансин.

Ечиш: Гармоник осциллятор импулсининг $p, p+dp$ интервалда топилиш эҳтимолияти $dW(p)=|C(p)|^2$ формула орқали топилади. $C(p)$ эса қуйидаги ифода орқали топилади

$$C(p)=\int\psi(x)\psi_p^*(x)dx=A\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int e^{-\alpha x^2}e^{-\frac{i}{h}px}dx=\frac{A}{\sqrt{2\pi h}}\int e^{-\left(\alpha x^2+\frac{i}{h}px\right)}dx\,.$$

Охирги интегрални Пуассон интеграли кўриинишига келтириш учун ундаги е даражасидаги функцияни тўлиқ квадрат кўринишга келтирамиз

$$\alpha x^2+\frac{i}{h}px=\alpha\left(x^2+\frac{i}{\alpha h}px\right)=\alpha\left[\left(x+\frac{ip}{2\alpha h}\right)^2+\frac{p^2}{4\alpha^2h^2}\right].$$

У ҳолда

$$C(p)=\frac{A}{\sqrt{2\pi h}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha\left(x+\frac{ip}{2\alpha h}\right)^2}e^{-\frac{\alpha p^2}{4\alpha^2h^2}}dx=\frac{A}{\sqrt{2\pi h}}e^{-\frac{p^2}{4\alpha h^2}}\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}dy=\frac{A}{\sqrt{2h\alpha}}e^{-\frac{p^2}{4\alpha h^2}}$$

Ва

$$dW(p)=|C(p)|^2dp=\frac{A^2}{2h\alpha}e^{-\frac{p^2}{2\alpha^2h^2}}=\frac{1}{\pi h}e^{-\frac{p^2}{2\alpha^2h^2}}$$

4 Масала. Зарра $U(x)=\alpha x$ кўринишидаги бир жинсли потенциал майдонда жойлашса, энергия операторининг хусусий функциялари ва хусусий қийматлари "p"-тасаввурида топилсин.

Ечиш: агар энергия оператори $\hat{H}$ "x"-тасаввурида

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^{\,2}}{2m}+U(x)=\frac{\hat{p}_x^{\,2}}{2m}+\alpha x$$

кўринишда ёзилса, "p"- тасаввурда $\hat{p}_x^{\,2}=p_x^{\,2}$, $\hat{x}=ih\dfrac{d}{dp_x}$ бўлгани учун

$$\hat{H}=\frac{p_x^{\,2}}{2m}+ih\alpha\frac{d}{dp_x}$$

тариқасида ёзилади. Хусусий функциялар ва хусусий қийматлар эса бу тасаввурда

$$\left(\frac{p_x^{\,2}}{2m}+ih\alpha\frac{d}{dp_x}\right)C(p)=EC(p)$$

тенгламадан топилади. Бундан

$$ih\alpha\frac{dC(p)}{dp}=\left(E-\frac{p_x^{\,2}}{2m}\right)C(p)$$

ёки

$$\frac{dC(p)}{dp}=-\frac{i}{\alpha h}\left(E-\frac{p_x^{\,2}}{2m}\right)dp_x\,.$$

Бу тенгламанинг ечими осонлик билан топилади

$$C(p)=Ae^{-\frac{i}{\alpha h}\left(E-\frac{p_x^{\,2}}{6m}\right)p_x}\,.$$

Бундан кўрамизки, $C(p_x)$ функциянинг чеклилиги хусусий қиймати E нинг исталган ҳақиқий қийматларида бажарилади. Демак, берилган майдонда осциллятор энергияси узлуксиз бўлади. $C(p_x)$ функциянинг нормаллик

$$\int C_E^{\,*}(p_x)C_{E'}(p_x)dE=\delta(E-E')$$

шартидан A коэффициентни топамиз: $A=\frac{1}{(2\pi\alpha h)^{1/2}}$. Шудай қилиб, $U(x)=\alpha\hat{x}$ майдонда ҳаракат қилаётган зарра тўлиқ энергия операторининг "p"-тасаввурдаги хусусий функцияси

$$C(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha h}}e^{-\frac{i}{\alpha h}\left(E-\frac{p_x^2}{6m}\right)p_x},$$

хусусий қиймати эса $-\infty<E<\infty$ бўлар экан (ялпи спектрга эга бўлади).

5 Масала. Ясси ротатор $\psi(\varphi)=\frac{2}{\sqrt{3\pi}}\sin^2\varphi$ тўлқин функцияси билан ифодаланувчи ҳолатда бўлса, тўлқин функциясини "L_z"- тасаввурида топинг ва $<L_z>,<L_z^2>$ ларни ҳисобланг.

Ечиш: $\hat{L}_z$-импульс моментининг z - компонентаси. Бу катталикка тўғри келувчи оператор сферик координата системасида $\hat{L}_z=-ih\frac{\partial}{\partial\varphi}$ кўринишга эга бўлади ва осонлик билан унинг хусусий функцияларини топамиз

$$\hat{L}_x\psi_{L_z}(\varphi)=L_z\psi_{L_z}(\varphi)\Rightarrow -ih\frac{\partial\psi_{L_z}(\varphi)}{\partial\varphi}=L_z\psi_{L_z}(\varphi)$$

Бу тенгламанинг ечими юқорида кўрганимиздек

$$\psi_{L_z}(\varphi)=Ae^{\frac{i}{\hbar}L_z\varphi}$$

ва бир қийматлилик шарти $\psi_{L_z}(\varphi)=\psi_{L_z}(\varphi+2\pi)$ дан

$$\frac{L_z}{h}=m,(m=0,\pm1,\pm2,...)$$

ҳамда $\psi_{L_z}(\varphi)=Ae^{im\varphi}$ эканлигини топамиз. (Бу ерда $A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ эканлигини исботланг). Энди биз "L_z"- тасаввуридаги функцияни $\psi(L_z)$ десак, шартга кўра

$$\psi(L_z)=\int\psi(\varphi)\psi_{L_z}{}^*(\varphi)d\varphi=\frac{2}{\sqrt{3\pi}}\frac{I}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{2\pi}\sin^2\varphi e^{-im\varphi}d\varphi=$$

$$=\frac{2}{\pi\sqrt{6}}\int_0^{2\pi}\frac{1-\cos 2\varphi}{2}e^{-im\varphi}d\varphi=\frac{1}{\pi\sqrt{6}}\int_0^{2\pi}\left[1-\frac{e^{i2\varphi}+e^{-i2\varphi}}{2}\right]e^{-im\varphi}d\varphi=$$

$$=\frac{1}{\pi\sqrt{6}}\int_0^{2\pi}\left[e^{i0\varphi}-\frac{1}{2}(e^{i2\varphi}+e^{-i2\varphi})\right]e^{-im\varphi}d\varphi=\frac{1}{\pi\sqrt{6}}\left[\int_0^{2\pi}e^{i(0-m)\varphi}d\varphi-\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}e^{i(2-m)\varphi}d\varphi-\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}e^{-i(2+m)\varphi}d\varphi\right]=$$

$$=\frac{2}{\sqrt{6}}\left[\delta_{0,m}-\frac{1}{2}\left(\delta_{2,m}+\delta_{-2,m}\right)\right]$$

Агар

а) m=0 бўлса $\psi(L_z)=\frac{2}{\sqrt{6}}$. У ҳолда $L_z=0$ бўлиш эҳтимолият зичлиги

$$\rho(m=0)=\left|\psi(L_z)\right|^2=\frac{2}{3}$$

б) m=2 бўлса, $\psi(L_z)=-\frac{1}{\sqrt{6}}, L_z=2h, \rho(m=2)=\frac{1}{6}$

с) m=-2 бўлса, $\psi(L_z)=-\frac{1}{\sqrt{6}}, L_z=-2h, \rho(m=-2)=\frac{1}{6}$ ва m=0,2,-2 ҳолатларда бўлиш эҳтимолият зичлиги

$$\rho=\sum_m\rho(m)=\rho(m=0)+\rho(m=2)+\rho(m=-2)=\frac{2}{3}+\frac{1}{6}+\frac{1}{6}=1$$

бўлади. Энди $<L_z>,<L_z{}^2>$ ларни ҳисоблаймиз.

$$<L_z>=\sum_m L_z\left|\psi(L_z)\right|^2=0\cdot\frac{2}{3}+2h\frac{1}{6}-2h\frac{1}{6}=0,$$

$$<L_z{}^2>=\sum_m L_z{}^2\left|\psi(L_z)\right|^2=0\cdot\frac{2}{3}+4h^2\frac{1}{6}+4h^2\frac{1}{6}=\frac{4}{3}h^2.$$

6 Масала. Координата тасаввуридаги импульс операторининг хусусий функциясини топинг

Ечиш. Импульс оператори

$$\hat{p}=-h\nabla\hat{I}\equiv-ih\nabla. \qquad (1)$$

Декарт координаталар системасида

$$p=-ih\nabla,\ \nabla=i\frac{\partial}{\partial x}+j\frac{\partial}{\partial y}+k\frac{\partial}{\partial z}\equiv\sum_{k=1}^{3}e_k\nabla_k \qquad (2)$$

кўринишга эга. Импульс $\hat{p}$ операторини учта коммутатив операторларнинг йиғиндиси сифатида ёзамиз

$$\hat{\mathbf{r}} = \sum_{k=1}^{3} \hat{r}_k \mathbf{e}_k,\ \left\{\hat{r}_i, \hat{r}_j\right\} = \hat{0}, \hat{r}_k \equiv r_k \in (-\infty, +\infty)$$
$$r_1 \equiv x,\ \mathbf{e}_1 \equiv \mathbf{i};\ r_2 \equiv y,\ \mathbf{e}_2 \equiv \mathbf{j};\ r_3 \equiv z,\ \mathbf{e}_3 \equiv \mathbf{k}. \tag{3}$$

У ҳолда

$$\hat{p}\psi(r;p) = p\psi(r;p);\ a \equiv \sum_{k=1}^{3} a_k e_k;\ a \equiv r,p,$$
$$\psi(r;p) = \prod_{k=1}^{3} \psi(r_k; p_k),\ r_k \in (-\infty, +\infty). \tag{4}$$

Охирги тенгламаларни қуйидаги бир жинсли системага келтирамиз $k=(1,2,3)$

$$\hat{p}_k \psi(r_k; p_k) = p_k \psi(r_k; p_k);\ p_k = -ih\nabla_k,\ \nabla_k \equiv \frac{\partial}{\partial r_k},$$

У ҳолда, импульс операторининг хусусий функцияси учун

$$\psi_{p_k} \equiv \psi(r_k; p_k) = c_k \exp\left(\frac{i}{h} p_k r_k\right),\quad p_k \in \mathbb{R} \tag{5}$$

c_k доимий параметр нормаллаштириш

$$\delta\left(p_k - p_k'\right) = c^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p_k r_k} e^{\frac{i}{\hbar} p_k' r_k} dr_k$$

Шартидан топилади. Интеграл остида қуйидаги $r_k \cong h\xi$ алмаштириш олиб

$$\delta(-p) = \delta(p) = hc_k^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip\xi} d\xi,\ p \equiv p_k' - p_k,$$

ёки

$$\delta(p) = hc_k^2 2\pi\delta(p) \Rightarrow h2\pi c_k^2 = 1.$$

c_k параметрни в (5) қўйиб

$$\psi(r_k;p_k)\equiv h^{-\frac{1}{2}}\exp\left(\frac{i}{h}p_k r_k\right);\ k=1,2,3;\ h\equiv 2\pi h,$$

Хусусий функция учун

$$\psi_{\vec{p}}(r)\equiv\psi(r;p)=h^{-\frac{3}{2}}\exp\left(\frac{i}{h}p\cdot r\right),\quad \left(r_k,p_k\in\mathbb{R},\ \ k=1,2,3\right). \tag{7}$$

Формулани ҳосил қиламиз. Импульс оператори хусусий функцияси учун ушбу нормаллаштириш шарти бажарилади

$$\left(\psi_{\mathbf{p}_1},\psi_{\mathbf{p}_2}\right)=\delta\left(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2\right). \tag{8}$$

Бу ерда 1 ва 2 индекслар $\mathbf{p}_1$ ва $\mathbf{p}_2$ импульсларнинг мос координаталардаги проекцияларини ифодалайди

7 Масала. Декарт ва сферик координаталарда $\hat{L}_z$ операторнинг кўриниши координата тасаввурида ёзилсин.

Ечиш: а) Декарт координатасида $\hat{L}_z$ операторнинг кўриниши

$$\hat{L}_3=\hat{r}_1\hat{p}_2-\hat{r}_2\hat{p}_1\Rightarrow\hat{L}_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x=ih\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right). \tag{1}$$

б) Декарт координатасидан (x,y,z) сферик (r,θ,φ) координатага ўтиш формулаларидан фойдаланамиз

$$\begin{aligned}&x=r\sin\theta\cos\varphi,\ \ y=r\sin\theta\sin\varphi,\ \ z=r\cos\theta,\\&r\in[0,+\infty],\ \theta\in[0,\pi],\ \varphi\in[0,2\pi],\end{aligned} \tag{2}$$

$$r=\left(x^2+y^2+z^2\right)^{1/2},\ \theta=\arccos\left(\frac{z}{r}\right),\ \ \varphi=\operatorname{arctg}\left(\frac{y}{x}\right). \tag{3}$$

$\partial/\partial x$ ва $\partial/\partial y$ операторлар учун ўтиш формуласи

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

Олинган натижаларни (1) га қўйиб

$$\hat{L}_z=ih\left[\left(y\frac{\partial r}{\partial x}-x\frac{\partial r}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial r}+\left(y\frac{\partial\theta}{\partial x}-x\frac{\partial\theta}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial\theta}+\left(y\frac{\partial\varphi}{\partial x}-x\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]. \tag{4}$$

(3) формулаларга асосан

$$\frac{\partial r}{\partial x}=\frac{x}{r},\ \frac{\partial r}{\partial y}=\frac{y}{r},\ \frac{\partial \theta}{\partial x}=\frac{xz}{\rho r^2},\ \frac{\partial \theta}{\partial y}=\frac{yz}{\rho r^2};\ \frac{\partial \varphi}{\partial x}=-\frac{y}{\rho^2},\ \frac{\partial \varphi}{\partial y}=\frac{x}{\rho^2};$$
$$y\frac{\partial r}{\partial x}-x\frac{\partial r}{\partial y}=0;\ \ y\frac{\partial \theta}{\partial x}-x\frac{\partial \theta}{\partial y}=0;\ y\frac{\partial \varphi}{\partial x}-x\frac{\partial \varphi}{\partial y}=-1;\ \rho^2\equiv x^2+y^2. \tag{5}$$

(5) ни (4) формулага қўйиб $\hat{L}_z$ операторнинг сферик координатадаги кўринишини ҳосил қиламиз

$$\hat{L}_z=-ih\frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Мустақил ишлаш учун масалалар

1. Агар бирор оператор қайси бир тасаввурда

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

кўринишдаги матрица ёрдамида берилган бўлса, унинг хусусий функцияси ва хусусий қиймати топилсин.

2. «x»-тасаввурида берилган тўлқин функцияни

а) «p»-тасаввурида; б) «E»- тасаввурида ёзинг.

3. $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]$ коммутаторнинг исталган тасаввурларда бир хил натижага эга эканлиги исботланг.

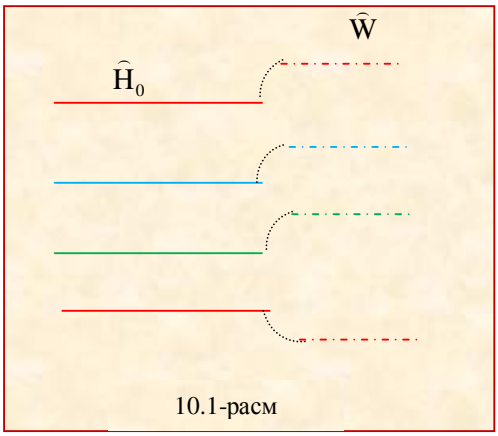
4. Гармоник осциллятор ҳолати

$\Psi(x)=Ae^{-\lambda r^2}$ тўлқин функцияси билан тавсифланса «p»-тасаввурида бу функциянинг ифодаланишни аниқланг ва импулс бўйича эҳтимоллар тақсимотини ҳисобланг.

X-БОБ
ҚЎЗҒОЛИШ НАЗАРИЯСИ

10.1. Дискрет спектр учун қўзғолиш назарияси

Шредингер тенгламаси жуда кам сондаги масалалар учунгина аниқ ечимга эга бўлади. Масалан, чизиқли гармоник осциллятор, водород атоми масаласи шундай масалалар жумласига киради. Микро зарралар тўлқин функцияларини ва энергияларини хисоблашда квант механикасида турли тақрибий усуллардан фойдаланилади. Шундай усуллардан бири бўлган *қўзғолиш назарияси* усули билан танишиб чиқамиз. Бу усулнинг маъноси шундан иборатки, кўп ҳолларда масала ечилганида тенгламада



10.1-расм

турли тартибдаги катталиклар иштирок этади. Бу катталиклар ичида кичик тартибдаги катталиклар ҳам бўлиши мумкин. Агар бундай кичик тартибдаги катталиклар ташлаб кетилса, берилган масала соддалашиб, аниқ ечимга эга бўлган масала ҳолига келади. Биз қараб чиқмоқчи бўлган бу усулда, биринчи навбатда соддалаштирилган масаланинг аниқ ечими, кейин эса соддалаштириш пайтида ташлаб кетилган кичик тартибдаги катталикларнинг аниқ ечимга қўшадиган тузатмаларини топиш лозим бўлади. Қўзголиш назарияси квант механикаси ривожида муҳим рол ўйнайди ва кўплаб назарий ҳамда амалий масалаларнинг аниқ ечимини топишда катта аҳамиятга эга. Қаралаётган системанинг қўзғотувчи вақтга боғлиқ бўлиши ёки боғлиқ бўлмаслигига қараб қўзғолиш назарияси стационар ва ностационар назарияларга бўлинади. Биз ҳар икки ҳолда қўзғолиш назарияси берадиган тузатмаларни ҳисоблаймиз.

Турланмаган ҳолатлар ҳоли. Фараз қилайлик, Шредингер тенгламасининг аниқ ечими мавжуд бўлмаган система (уни қўзғолган система деб атаймиз) стационар ҳолатда жойлашган бўлсин ва Шредингер тенгламаси

$$\hat{H}\Psi=E\Psi \qquad (10.1)$$

кўринишда ёзилсин. Система қўзғолмаган ҳолатда (10.1) тенглама

$$\hat{H}^0\Psi_n^0=E_n^0\Psi_n^0 \qquad (10.2)$$

аниқ ечимга эга. Демак $\hat{H}^0$, $\hat{H}$ - қўзғолмаган ва қўзғолган системалар учун Гамилтон операторлари. Бу операторлар бир бири билан қуйидаги тенглик асосида боғланган

$$\hat{H}=\hat{H}^0+\hat{W} \ . \qquad (10.3)$$

Бу ерда $\hat{W}$ системани қўзғотувчи оператор ҳисобланади (10.1-расм). Агар $\hat{W}$ = 0 бўлса, система қўзғолмаган ҳолатда бўлади ва (10.1) тенглама автоматик равишда ечими мавжуд тенглама (10.2) га айланади. Ҳозир (10.1) тенгламанинг ечимини ахтармасдан, уни энергия тасаввурида – “E” тасаввурида ёзайлик. Бунинг учун (10.1) даги Ψ – функцияни $\hat{H}^0$ операторнинг хусусий функцияси Ψ_n^0 бўйича қаторга ёйиб ёзамиз

$$\Psi=\sum_n c_n\Psi_n^0 \qquad (10.4)$$

ва уни (10.3) ни ҳисобга олган ҳолда (10.1) га қўямиз

$$(\hat{H}^0+\hat{W})\sum_n c_n\Psi_n^0=E\sum_n c_n\Psi_n^0 \ . \qquad (10.5)$$

Охирги тенгламани чап томондан Ψ_m^{0*} га кўпайтириб, x координата бўйича интеграллаймиз

$$\sum_n c_n\int\Psi_m^{0*}(\hat{H}^0+\hat{W})\Psi_n^0dx=E\sum_n c_n\int\Psi_m^{0*}\Psi_n^0dx \qquad (10.6)$$

(10.6) да хусусий функцияларнинг ортонормал

$$\Psi_m^{0*}\Psi_n^0dx=\delta_{mn}, \quad \hat{H}^0\Psi_n^0= E_n^0\Psi_n^0$$

эканлигини ҳисобга олиб қуйидаги

$$\sum_n c_n(E_n^0\delta_{mn}+\hat{W}_{mn})c_n=Ec_n \qquad (10.7)$$

тенгламага эга бўламиз. Бу ерда

$$\hat{W}_{mn}=\int\Psi_m^0\hat{W}\Psi_n^0dx \ . \qquad (10.8)$$

$\hat{W}$ операторнинг қўзғолмаган система тўлқин функциялари бўйича олинган *матрица элементлари* дейилади. Энди биз (10.7) га қўзғолиш назарияси усулини қўллаймиз. Аввало биз $\hat{W}$ ни, яъни $\hat{W}_{mn}$ ни биринчи тартибли кичик катталик деб ҳисоблаб (10.7) даги E ва c ларни кетма-кет яқинлашишдаги катталиклар йиғиндиси кўринишида ёзамиз

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + ...,$$
$$c = c^{(0)} + c^{(1)} + c^{(2)} + ... \qquad (10.9)$$

Бу ерда (0,1,2,3,…) лар яқинлашув тартибини кўрсатади ва мос равишда 1-чи, 2- чи ва ҳоказо тартибдаги кичик катталиклар ҳисобланади. Энди биз (10.9) ни ҳисобга олган ҳолда (10.7) тенгламани кетма-кет яқинлашувларда ёза оламиз

$$(E_n^0 - E^{(0)})c_m^{(0)} - (E^{(1)} - \hat{W}_{mm})c_m^{(0)} + (E_m^0 - E^{(0)})c_m^{(1)} + \sum_{mn} W_{mn} c_n^{(0)} + (E_m^0 - E^{(0)})c_m^{(2)} +$$
$$(\hat{W}_{mm} - E^{(1)})c_m^{(1)} + \sum_{mn} W_{mn} c_n^{(1)} + ... = 0. \qquad (10.10)$$

(10) тенглама чап томонидаги нолинчи яқинлашувдаги, кейинги уч ҳад 1 - яқинлашувдаги ва учинчи ҳад 2 - яқинлашувдаги (10.7) тенгламанинг кўринишлари ҳисобланади. (10.7) тенгламанинг (10.10) кўринишдаги тасвири шу тенгламани кетма-кет яқинлашувлар усули билан осон ечилиш имкониятини беради. Агар бизни 0 - яқинлашувдаги ечим қизиқтирса (10.10) нинг биринчи ҳади билан чегараланамиз

$$(E_n^0 - E^{(0)})c_m^0 = 0 \ , \qquad (10.11)$$

бу ерда m = 1,2,3,…, к, қийматларини қабул қилади. Бизни $\hat{W}$ қўзғолиш таъсирида E_k^0 сатҳ ва Ψ_k^0 функциянинг қандай ўзгариши қизиқтиради. Шунинг учун (10.11) ни

$$(E_m^0 - E_k^{(0)})c_m^{(0)} = 0$$

кўринишда ёзамиз. Агар к = m бўлса

$$E_k^{(0)} = E_k^0, \ c_m^{(0)}$$

бўлади. Агар к≠m бўлса

$$E_k^{(0)} \neq E_k^0, \quad c_m^{(0)} = 0$$

бўлади. Демак 0 – яқинлашувдан биз $c_m^{(0)}=\delta_{mk}$ эканлигини топамиз ва ундан келгуси яқинлашувда фойдаланамиз. У ҳолда (10.10) дан 1- яқинлашувда

$$(E_k^{(1)}-W_{mm})\delta_{mk}+(E_m^0-E_k^{(0)})c_m^{(1)}+\sum_{mn}W_{mn}\delta_{nk}=0. \qquad (10.12)$$

тенгламага эга бўламиз. Агар к=m бўлса (10.12) дан $E_k^{(1)}-W_{kk}=0$ эканлигини топамиз. Бундан

$$E_k^{(1)}=W_{kk}=\int\Psi_k^{0*}\hat{W}\Psi_k^0dx \qquad (10.13)$$

яъни E^0 га 1- яқинлашувда тузатма $\hat{W}$ операторнинг қўзғолмаган ҳолат функциялари бўйича олинган матрицанинг диагонал элементларига тенг бўлишини кўрамиз. Агар к≠m бўлса (10.12) дан

$$\left(E_m^0-E_k^{(0)}\right)c_m^{(1)}+W_{kk}=0 \qquad (10.14)$$

эканлигини топамиз. Энди “Е” тасаввурдаги тўлқин функцияга қўйиладиган тузатмани ёзамиз

$$c_m^{(1)}=\frac{W_{kk}}{E_k^{(0)}-E_m^0}. \qquad (10.15)$$

Шундай қилиб (10.7) нинг 1- яқинлашувдаги ечимлари

$$\Psi^{(1)}=\Psi_k^{(1)}+\sum\left(\frac{W_{mk}}{E_k^{(0)}}-E_m^0\right)\Psi_m^0,$$
$$E^{(1)}=E_k^{(1)}+W_{kk}, \qquad (10.16)$$

кўринишда бўлади. (10.16) даги тузатмалар 1- тартибдаги катталиклар ҳамма тартиби жиҳатидан

$$\left(\frac{W_{mk}}{E_k^{(0)}}-E_m^0\right)\Psi_m^0\approx\Psi_k^0,$$

бўлганидан

$$|W_{mk}|=E_k^{(0)}-E_m^0|$$

тенгликнинг ўринли бўлишини кўрамиз. Бу тенглик берилган масалани ечишда қўзғолиш назариясининг қўлланиш чегараси (шарти) ни кўрсатади.

Турланган ҳолатлар ҳоли. Агар системада икки ва ундан ортиқ ҳолатлар бир хил энергияга эга бўлсалар бундай ҳолатлар *турланган ҳолатлар* дейилади. Қўзғолмаган система учун Шредингер тенгламаси

$$\hat{H}^0\Psi^0_{n\alpha} = E^0_n\Psi^0_{n\alpha} \qquad (10.17)$$

кўринишда бўлади. Бу ерда n = 1,2,3,…; α = 1,2,3,…f; демак энергиянинг битта қийматида f та функция тўғри келмоқда. Шунинг учун f ҳолатларнинг турланиш даражасини кўрсатади. Қўзғолган система учун ёзилган Шредингер тенгламаси

$$(\hat{H}+\hat{W})\Psi = E\Psi \qquad (10.18)$$

даги Ψ ни $\Psi^0_{\tau\alpha}$ бўйича қаторга ёйиб ёзамиз

$$\Psi = \sum_{n,\alpha-1} c_{\tau\alpha}\Psi^0_{\tau\alpha}$$

ва уни (10.18) га қўйиб ҳосил бўлган тенгламани чап томонидан $\Psi^{0*}_{m\beta}$ га кўпайтирамиз ва интеграллаймиз

$$\sum_n c_{n\alpha}\int \Psi^{0*}_{m\beta}(\hat{H}^0+\hat{W})\Psi^0_{n\alpha}dx = E\sum_n c_{n\alpha}\int \Psi^{0*}_{m\beta}\Psi^0_{n\alpha}dx\,. \qquad (10.19)$$

Бу ерда турланган функциялар учун ортонормаллик шарти қуйидагича бўлади

$$\int \Psi^{0*}_{m\beta}\hat{W}\,\Psi^0_{n\alpha}dx = \delta_{nm}\delta_{\alpha\beta}\ .$$

У ҳолда (10.12) тенглама матрица шаклида қуйидагича ёзилади

$$(E^{(1)}_m - W_{m\beta} - E_{n\alpha})c_{m\alpha} + \sum W_{mn}c_{n\alpha} = 0. \qquad (10.20)$$

Бу ерда

$$W_{m\beta,n\alpha} = \int \Psi^{0*}_{m\beta}\hat{W}\Psi^0_{n\alpha}dx.$$

Биз энди $E^0_к$ га яқин ва қўзғолган системанинг $E_к$ квант сатҳини ва унга хос хусусий функциялар $\Psi_{к\alpha}$ ни топайлик. Бу масалани энергия учун биринчи яқинлашувда, функция учун эса 0 – яқинлашувда ечамиз. Турланиш бўлмаганда кўрдикки 0 – яқинлашувда функция қўзғолмаган ҳолдаги функцияга тенг бўлади. Шунга кўра 0 - яқинлашувда $c^0_{k\alpha} = 1$, аммо қолган

барча функциялар нолга тенг бўлар эди. Турланиш мавжуд бўлганда бундай ҳолат содир бўлмайди, чунки 0- яқинлашувда ($\hat{W} = 0$ бўлганда) (10.20) дан

$$\left(E_k^0 - E\right)c_{k\alpha} = 0$$

эканлигини топамиз. Бундан $E = E_k^0$ учун $c_{k\alpha}^0 \neq 0$ яъни, $E^0_к$ тегишли барча $c_{к\alpha}$ функциялар (уларнинг сони $\beta = 1,2,3,\ldots,f$ та бўлсин) нолга тенг бўлмайди. Шунинг учун $E^0_к$ га тегишли функциялар учун нолинчи яқинлашувда

$$\begin{aligned} c_{k\alpha} &= c_{k\alpha}^0, \qquad \alpha = 1,2,3,\ldots,f, \\ c_{n\alpha}^0 &= 0, \qquad (n \neq k) \end{aligned} \tag{10.21}$$

деб ёзишга тўғри келади. Шунга кўра (10.20) тенгламани қуйидагича ёза оламиз

$$(E_k^0 - W_{k\beta,k\beta} - E)c_{k\beta}^0 + \sum W_{k\beta,k\beta} c_{k\alpha}^0 = 0. \tag{10.22}$$

(10.22) ни соддароқ кўринишда ёзиш учун

$$(E_k^0 - W_{k\beta,k\beta} - E) = W_{\beta\beta}, \qquad c_{k\beta}^0 = c_\beta^0$$

деб белгилаймиз ҳамда (10.22) ни

$$(E_k^0 + W_{\beta\beta} - E)c_\beta^0 + \sum_{\alpha^1\beta}^{f} W_{\beta\alpha} c_\alpha^0 = 0 \tag{10.23}$$

кўринишда алгебраик тенгламалар системасига келамиз. (10.23) тенгламанинг нолдан фарқли ечимга эга бўлиши учун унинг коэффициентларидан ташкил топган қуйидаги аниқловчи нолга тенг бўлмоғи керак

$$\left.\begin{matrix} E_k^0 + W_{11} - E & W_{12} & W_{13} \ldots\ldots\ldots\ldots W_{1f} \\ W_{12} & E_k^0 + W_{22} - E & W_{23} \ldots\ldots\ldots\ldots W_{2f} \\ W_{1f} & W_{f2} & W_{f3} \ldots\ldots\ldots\ldots E_k^0 + W_{ff} - E \end{matrix}\right\} \tag{10.24}$$

Бу ерда E_f даражали алгебраик тенглама ҳисобланади ва f та илдизларга эга бўлади

$$E=E_{k1}+E_{k2}+E_{k3},....,E_{kf} \qquad (10.25)$$

Қўзғолиш назарияси усулида қўзғатувчи таъсир $\hat{W}$ кичик деб қаралганидан унга тўғри келувчи $W_{\beta\alpha}$ матрица элементлари ҳам кичик катталик ҳисобланади. Шу сабаб (10.25) илдизлар бир-биридан жуда кам фарқ қилади. Демак биз қуйидаги ҳулосага келамиз: турланган ҳолатларга эга бўлган система қўзғатилса турланган сатҳ (E_k^0) бир неча бир-бирига яқин жойлашган сатҳларга ажратиб кетади. Агар (10.25) илдизлар барчаси бир-биридан фарқ қилсалар қўзғолиш системадаги турланишни тўлиқ йўқотади. Агар қаралаётган илдизларнинг айримлари ўзаро тенг бўлиб қолса, турланиш қисми йўқотилган деб ҳисобланади. (10.25) илдизларни бирга бир (10.23) тенгламаларга ёйиб ҳар бир илдизга тўғри келувчи $c_\beta^{(0)}$ амплитудаларини топамиз. Турланган системада қўзғолиш назариясининг қандай ишлаши водород атоми учун Штаркнинг чизиқли эффекти мисолида қараб чиқамиз.

10.2. Штарк эффекти

Бир жинсли электр майдонига киритилган водород атомининг иккинчи энергетик сатҳининг турланишини ҳисоблайлик. Электрон спини ҳисобга олинмаганда сатҳ (n=2) нинг турланиш даражаси водород атоми учун $n^2=4$ га тенг бўлади. Демак атомнинг турланиш даражаси 4 га тенг, яъни E_k^0 энергиялик 4 та ҳолат мавжуд бўлади.

Агар $\varepsilon=E_2^0-E$ белгилаш киритсак, олдинги мавзуда келтирилган детерминант ўрнига

$$\begin{vmatrix} \varepsilon+W_{11} & W_{12} & W_{13} & W_{14} \\ W_{21} & \varepsilon+W_{22} & W_{23} & W_{24} \\ W_{31} & W_{32} & \varepsilon+W_{33} & W_{34} \\ W_{41} & W_{42} & W_{43} & \varepsilon+W_{44} \end{vmatrix}=0 \qquad (10.26)$$

аниқловчига эга бўламиз. Бу аниқловчида иштирок этувчи W операторининг матрица элементларининг барчаси ҳам нолдан фарқли бўла олмайди, чунки Φ_m^0 функция таркибига кирувчи $e^{im\varphi}$, $P_\ell^m(\cos\theta)$ функциялар учун маълум танлаш қоидалари мавжуддир: $\Delta\ell=\pm1, \Delta m=0,\pm1.$ Ана шу танлаш қоидалари фақатгина $W_{13}=W_{31}\neq0,$ қолган барча матрица элементларининг нолга тенг бўлишини кўрсатади. У ҳолда бизнинг аниқловчимиз анча содда ҳолга келади

$$\begin{vmatrix} \varepsilon & 0 & W_{13} & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ W_{31} & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{44} \end{vmatrix} = 0 .$$

Бу аниқловчини иккита икки қаторли матрицага ажратиш мумкин бўлади

$$\begin{vmatrix} \varepsilon & W_{13} \\ W_{13} & \varepsilon \end{vmatrix} = 0 , \qquad \begin{vmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{vmatrix} = 0 .$$

Бу аниқловчиларни очиб чиқиб, ε нинг қуйидаги илдизларини топамиз

$$\varepsilon_1 = W_{13},\ \varepsilon_2 = -W_{13},\ \varepsilon_2 = \varepsilon_4 = 0$$

ёки

$$E_1 = E_2^{\ 0} - W_{13},\ E_3 = E_2^{\ 0} + W_{13},\quad E_2 = E_4 = E_2^{\ 0} .$$

Демак кўринадики, ташқи электр майдонида водород атомининг 4 марта турланган иккинчи энергетик сатҳи 3 та сатҳга ажралиб кетар экан. Шунга қарамасдан электр майдони таъсиридан олдинги сатҳ ўзининг турланишини қисман сақлаб қолар экан, энди турланиш сони иккига тенг бўлар экан. Электр майдони таъсиридан кейинги сатҳлар энергияларини ва уларга тегишли тўлқин функцияларни топамиз. Энергиянинг ҳар бир илдизига тўғри келадиган тўлқин функцияни топиш учун бу илдиз қийматларини олдинма-кейин Шредингер тенгламасига қўйиб чиқамиз. Бу тенглама қуйидагича ёзилади

$$\left(E_2^0 - E\right)\tilde{N}_1^{(0)} + W_{13}\tilde{N}_3^{(0)} = 0 .$$

Агар бу тенгламага $E=E_1=E_2^{\ 0}-W_{13}$ илдизни қўйсак,

$$\left(E_2^{\ 0}-E_2^{\ 0}+W_{13}\right)C_1^{(0)}+W_{13}C_3^{(0)}=0 .$$

Бундан эса

$$C_1^{(0)}=-C_3^{(0)}$$

бўлишини топамиз. Демак, бу илдизга мос келувчи тўлқин функция $\Phi_1^{\ 0}, \Phi_3^{\ 0}$ функцияларнинг антисимметрик комбинацияларидан иборат бўлади

$$\Phi_{E_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Phi_1{}^0 - \Phi_3{}^0\right).$$

Худди шундай

$$\Phi_{E_3} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Phi_1{}^0 + \Phi_3{}^0\right).$$

Энди W_{13} матрица элементини ҳисоблаймиз

$$W_{13} = W_{31} = \int \Phi_1^{0*}\widehat{W}\Phi_3^0\,dv = \frac{e\varepsilon\sqrt{3}}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{12}}\frac{1}{a^3}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} e^{-p/2a}\left(1-\frac{1}{2a}\right)\frac{e^{-r/2a}}{r}\frac{r}{2a}p^2dp$$
$$\sin\theta d\theta d\phi = \frac{eEa}{12}\int_0^\infty e^{-x}\left(1-\frac{x}{2}\right)x^4dx = -3eEa.$$

Биз бу ерда $e = r\cos\theta\int_0^\infty x^n e^{-x}dx = n!$ эканлигини ҳисобга олдик ва $x = \frac{r}{a}$ алмаштириш киритдик. Демак турланган $E_2^0 = \frac{ph}{4}$ сатҳ бир жинсли электр майдон таъсирида

$$E_1 = -\frac{ph}{4} - 3e\varepsilon a,$$
$$E_3 = -\frac{ph}{4} + 3e\varepsilon a,$$
$$E_4 = -\frac{ph}{4}$$

сатҳларга ажралар экан. Натижада $E_2^0 \to E_1^0$ ўтишга тегишли бўлган а – спектрал чизиқ ўрнида $E_2, E_4 \to E_1^0$, $E_1 \to E_1^0, E_3 \to E_1^0$ ўтишларга тегишли бўлган а, с, б – чизиқларни оламиз. Электр майдонида энергетик сатҳларнинг ажралиш кенглиги $\Delta E = E_3 - E_1$ баҳолаш ҳам мумкин. Бу кенглик катталиги

$$\Delta E = 6\,э\varepsilon a \approx 3\cdot 10^{-8}\ \text{эВ}$$

бундан кўринадики, ҳатто $\varepsilon \approx 10^4$ в/см бўлганида $\Delta E = 3\cdot 10^{-4}$ эВ катталикдаги кичик қийматга эга бўлади, ваҳоланки $E_2^0 - E_1^0 \approx 10$ эВ.. Энди энергиянинг топилган илдизларига мос келувчи тўлқин функциясини топамиз. Бунинг учун дастлаб $E_1 = E_2^0 - 3e\varepsilon a$ ни 0 – нчи яқинлашувда ёзиб оламиз

$$(E_1^0 - E_2^0 + 3e\varepsilon a)c_1^{(0)} - 3e\varepsilon a\,c_3^{(0)} = 0.$$

Бундан $c_1^{(0)} = c_3^{(0)}$. демак E_1 қийматига мос келувчи функция

$$\psi = \sum c^{(0)} \psi_{na}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1^0 + \Phi_3^0). \qquad (10.27)$$

Қўзғолмаган ҳолдаги водород атоми Φ_1^0 ва Φ_3^0 функцияларнинг симметрик комбинациясидан ташкил топар экан. (10.27) да қавс олдидаги $1/\sqrt{2}$ коэффициент Ψ ни нормаллаштирувчи коэффицентдир. Ҳақиқатан

$$\int |\psi|^2 \, d\nu = \frac{1}{2}\int |\Phi_1^0|^2 \, d\nu + \frac{1}{2}\int |\Phi_3^0|^2 \, d\nu + \frac{2}{\sqrt{2}}\int \Phi_1^{0*} + \Phi_3^0 d\nu = 1.$$

$$\int |\Phi_1^0|^2 \, d\nu = \int |\Phi_3^0|^2 \, d\nu = 1, \quad \int \Phi_1^{0*}\Phi_3^0 d\nu = 0.$$

Шу йўл билан E_3 ва $E_2 = E_4$ илдизларга мос келувчи функциялар топилади

$$\Phi_{E_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1^0 - \Phi_3^0), \qquad \Psi = (\Phi_2^0, \Phi_3^0).$$

$E_{2,4} = E_2^0$ га тегишли ҳолатлар Φ_2^0, Φ_4^0 функциялар бўлиб бу ҳолатнинг икки марта турланганлигини кўрсатади. Энди олинган натижаларни физикавий нуқтаи назардан қараб чиқайлик. Электр майдони билан водород атоми ўзининг дипол моменти орқали ўзаро таъсирга келгани учун бу майдонда ҳосил бўладиган қўшимча энергия

$$\Delta E = -(\vec{p}\,\vec{E}) = E\varepsilon a \cos\gamma.$$

Бу ерда γ бурчак $-\vec{p}$ ва $\vec{E}$ орасидаги бурчак. Бундан

$$\Delta E = \begin{cases} eEa_0, \ \gamma = 0, \ \vec{p} \uparrow\uparrow \vec{E} \\ 0, \quad \gamma = \dfrac{\pi}{2}, \ \vec{p} \perp \vec{E} \\ -eEa_0, \ \gamma = \pi, \ \vec{p} \uparrow\downarrow \vec{E} \end{cases}$$

эканлиги маълум бўлади. Демак ҳосил бўладиган қўшимча энергия дипол моментининг ташқи электр майдони йўналишига нисбатан ориентациясига боғлиқ бўлар экан. Ушбу натижа Штарк эффектининг моҳиятини ташкил этади.

Назорат саволлари:

1. Биринчи яқинлашувда энергия ва функцияга қўшиладиган тузатма қандай ёзилади?
2. Кетма-кет яқинлашиш усулининг моҳиятини айтинг.
3. Штаркнинг чизиқли ва квадратик эффекти орасида қандай фарқ бор?
4. Тўлқин функция учун биринчи яқинлашувдаги формулани ёзинг?
5. Биринчи яқинлашувда энергия ва функцияга қўшиладиган тузатма қандай ёзилади?

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 масала. m массали зарра кенглиги a га тенг бўлган чексиз чуқур потенциал ўрада жойлашганида унга

$$\hat{w}(x) = \hat{w}_0 \cos\frac{2\pi}{a}x$$

майдон таъсир этса, зарра энергиясига биринчи яқинлашувда тузатма топилсин.

Ечиш. Чексиз чуқур потенциал ўрада жойлашган зарра ҳолати

$$\Psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

тўлқин функция билан ифодаланишини биламиз. Бу функцияни қўзғолмаган система функцияси деб олиб,

$$\prec n|\hat{w}|m \succ = \int \Psi_n^0(x)\hat{w}\Psi_m^0(x)dx$$

интегралини ҳисоблаш билан $E^{(1)}$ ни топамиз

$$\prec n|\hat{w}|m \succ = \frac{2}{a}w_0\int \sin\frac{n\pi}{a}x\cos\frac{2\pi}{a}x\sin\frac{m\pi}{a}xdx = \frac{2w_0}{a}\frac{1}{2}\int_0^a\left[\cos\frac{(n-m)\pi}{a} - \cos\frac{(n+m)\pi}{a}\right]\cos\frac{2\pi}{a}dx =$$

$$= \frac{w_0}{a}\left[\int_0^a \frac{1}{4}\left(e^{\frac{i(n-m)\pi}{a}x} + e^{-\frac{i(n-m)\pi}{a}x}\right)\left(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x}\right)dx\right] - \left[\int_0^a \frac{1}{4}\left(e^{\frac{i(n+m)\pi}{a}x} + e^{-\frac{i(n+m)\pi}{a}x}\right)\left(e^{i\frac{2\pi}{a}x} + e^{-i\frac{2\pi}{a}x}\right)dx\right] =$$

$$= \frac{w_0}{4a}\left[\int_0^a\left(e^{\frac{i(n-m+2)\pi}{a}x} + e^{-\frac{i(n-m-2)\pi}{a}x} + e^{\frac{i(n-m-2)\pi}{a}x} + e^{-\frac{i(n-m+2)\pi}{a}x} - e^{\frac{i(n+m+2)\pi}{a}x} + e^{-\frac{i(n+m-2)\pi}{a}x} + e^{\frac{i(n+m-2)\pi}{a}x} + e^{-\frac{i(n+m+2)\pi}{a}x}\right)\right]dx =$$

$$= \frac{w_0}{4a}\left[\left(\delta_{n,m-2} + \delta_{n,m+2} + \delta_{n,m+2} + \delta_{n,m-2}\right) - \left(\delta_{n,-m-2} + \delta_{n,-m+2} + \delta_{n,-m+2} + \delta_{n,-m-2}\right)\right]a =$$

$$= \frac{w_0}{4a}\left[2\delta_{n,m+2} + 2\delta_{n,m-2} - 2\left(\delta_{n,-m-2} + 2\delta_{n,-m+2}\right)\right] = \frac{w_0}{2}\left[\left(\delta_{n,m+2} + \delta_{n,m-2}\right) - \left(\delta_{n,-m-2} + 2\delta_{n,-m+2}\right)\right]$$

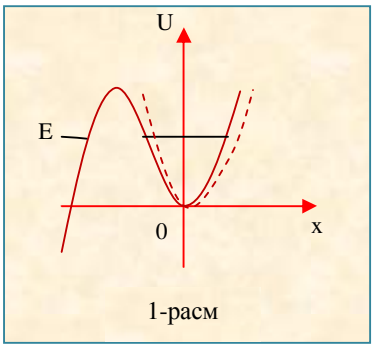
$$\delta_{n,m+2} + \delta_{n,-m-2} = 2\delta_{n,m+2}$$
$$\delta_{n,m-2} - \delta_{n,-m+2} = 2\delta_{n,m-2}$$

бўлгани учун

$$\prec n|\hat{w}|m \succ = w_0\left(\delta_{n,m-2} + \delta_{n,m+2}\right)$$

бўлади. Биринчи яқинлашувда энергияга тузатма $E^{(1)} = \prec n|\hat{w}|n \succ$ орқали топилгани учун ва $\delta_{n,m\pm 2} = 0$ бўлганидан $E^{(1)} = 0$ бўлади, яъни $w(x) = w_0\cos\frac{2\pi}{a}x$ ташқи майдон биринчи яқинлашувда система энергиясини ўзгартирмайди.

2 масала. Қўзғолиш назариясининг биринчи ва иккинчи яқинлашувида



1-расм

$$U(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2+\varepsilon x^3 \qquad (1)$$

потенциал майдонда ҳаракат қилаётган зарра (ангармоник осциллятор) энергиясига тузатмалар топилсин.

Ечиш: Биламизки, чизиқли гармоник осциллятор ҳолида зарра $U(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2$ потенциал майдонда ҳаракат қилар эди ва унинг тўлиқ энергияси (1-расм)

$$H_n=E_n^0=h\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

бўлар эди. Масаланинг шартига кўра, ғалаёнлантирувчи оператор бўлиб $\hat{w}=\varepsilon x^3$ ҳисобланади. Қўзғолиш назариясининг биринчи яқинлашувида энергияга тузатма

$$E_n^{(1)}=\prec n|\,w\,|n\succ=\varepsilon\int\left|\Psi_n^0\right|^2x^3dx=0$$

бўлади. Иккинчи яқинлашувдаги тузатма эса

$$E_n^{(1)}=\sum_{n\neq k}\frac{\left|\prec n|\,w\,|k\succ\right|^2}{E_n^0-E_k^0}\ , \qquad (2)$$

бу ерда

$$\prec n|\,w\,|k\succ=\varepsilon\prec n|\,x^3\,|k\succ=\varepsilon\sum_l\prec n|\,x^2|l\succ\prec l\,|\,x\,|k\succ \qquad (3)$$

1 - даги машқда кўрганимиздек,

$$\prec n|\,x\,|n-1\succ=\sqrt{\frac{hn}{2m\omega}}\,,\qquad \prec n|\,x\,|n+1\succ=\sqrt{\frac{hn}{2m\omega}(n+1)}$$

ёки бошқача ёзсак

$$\prec l\,|\,x\,|k\succ=\sqrt{\frac{h}{2m\omega}}\left(\sqrt{l}\delta_{l,k+1}+\sqrt{l+1}\delta_{k,l+1}\right) \qquad (4)$$

Худди шундай

$$\prec n\left|x^2\right|l\succ=\sum_p\prec n\left|x\right|p\succ\prec p\left|x\right|l\succ=\frac{h}{2m\omega}\sum_p\left(\sqrt{n}\delta_{n,p+1}+\sqrt{n+1}\delta_{p,n+1}\right)\left(\sqrt{p}\delta_{p,l+1}+\sqrt{p+1}\delta_{l,p+1}\right)=$$

$$=\frac{h}{2m\omega}\sum_p\left(\sqrt{n}\delta_{n-1,p}+\sqrt{n+1}\delta_{n+1,p}\right)\left(\sqrt{p}\delta_{p,l+1}+\sqrt{p+1}\delta_{p,l-1}\right)=\frac{h}{2m\omega}\sum_p\left(\sqrt{n}\delta_{n-1,p}+\sqrt{n+1}\delta_{n+1,p}\right)\left(\sqrt{l+1}\delta_{p,l+1}+\sqrt{l}\delta_{p,l-1}\right)=$$

$$=\frac{h}{2m\omega}\left[\sqrt{n(l+1)}\sum_p\delta_{n-1,p}\delta_{p,l+1}+\sqrt{nl}\sum_p\delta_{n-1,p}\delta_{p,l-1}+\sqrt{(n+1)(l+1)}\sum_p\delta_{n+1,p}\delta_{p,l+1}+\sqrt{(n+1)l}\sum_p\delta_{n+1,p}\delta_{p,l-1}\right]$$

Бу ердаги $\sum_p$ лар қуйидагича ўзгартирилади

а) $\sqrt{n(l+1)}\sum_p\delta_{n-1,p}\delta_{p,l+1}=\sqrt{n(l+1)}\delta_{n-1,l+1}=\sqrt{n(n-1)}\delta_{n,l+2}$

б) $\sqrt{nl}\sum_p\delta_{n-1,p}\delta_{p,l-1}=\sqrt{nl}\delta_{n,l}=n\delta_{n,l}$

в) $\sqrt{(n+1)(l+1)}\sum_p\delta_{n+1,p}\delta_{p,l+1}=\sqrt{(n+1)(l+1)}\delta_{n+1,p}\delta_{p,l+1}=(n+1)\delta_{n,l}$

г)

$$\sqrt{(n+1)l}\sum_p\delta_{n+1,p}\delta_{p,l-1}=\sqrt{(n+1)l}\delta_{n+1,l-1}=\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n+1,l-1}=\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n,l-2}$$

.

Шундай қилиб ёза оламиз

$$\prec n\left|x\right|^2 l\succ=\frac{h}{2m\omega}\left[\sqrt{n(n-1)}\delta_{n,l+2}+2(n+1)\delta_{n,l}+\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n,l-2}\right].$$

У ҳолда

$$\prec n\left|x^3\right|k\succ=\sum_l\prec n\left|x^2\right|l\succ\prec l\left|x\right|k\succ=$$

$$=\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^{3/2}\sum_l\left[\sqrt{n(n-1)}\delta_{n,l+2}+2(n+1)\delta_{n,l}+\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n,l+2}\right]\left[\sqrt{l}\delta_{l,k+1}+\sqrt{l}\delta_{l,k-1}\right]=$$

$$=\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^{3/2}\left[\sqrt{n(n-1)}l\sum_l\delta_{n-2,l}\delta_{l,k+1}+\sqrt{n(n-1)}k\sum_l\delta_{n-2,l}\delta_{l,k-1}+(2n+1)\sqrt{l}\sum_l\delta_{n,l}\delta_{l,k+1}+\right.$$

$$\left.+(2n+1)\sqrt{k}\sum_l\delta_{n,l}\delta_{l,k-1}+\sqrt{(n+1)(n+2)}l\sum_l\delta_{n-2,l}\delta_{l,k+1}+\sqrt{(n+1)(n+2)k}\sum_l\delta_{n-2,l}\delta_{l,k-1}=\right.$$

$$=\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^{3/2}\left[\sqrt{n(n-1)(n-2)}\delta_{n-2,k+1}+(n-1)\sqrt{n}\delta_{n,k+1}+(2n+1)\sqrt{n}\delta_{n,k+1}+\right.$$

$$\left.+(2n+1)\sqrt{n+1}\delta_{n,k-1}+\sqrt{(n+1)(n+2)^2}\delta_{n,k-1}+\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{n,k-3}\right]=$$

$$=\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^{3/2}\left[\sqrt{n(n-1)(n-2)}\delta_{n,k+3}+3n^{3/2}\delta_{n,k+1}+\right.$$

$$\left.+(2n+1+n+2)\sqrt{n+1}\delta_{n,k-1}+\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{n,k-3}\right]=$$

$$=\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^{3/2}\left[\sqrt{n(n-1)(n-2)}\delta_{n,k+3}+3n^{3/2}\delta_{n,k+1}++3(n+1)^{3/2}\delta_{n,k-1}+\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{n,k-3}\right]$$

Бу ерда $\delta_{\alpha\beta}=1$ (фақат $\alpha=\beta$ бўлгандагина) бўлгани учун $k=n\pm1,\ n\pm3$ қийматларидагина $\prec n\left|x^3\right|k\succ\neq 0$ бўлади. Демак,

$$E^{(2)}=\varepsilon\sum\frac{\left|\prec n|w|k\succ\right|^2}{E_n^0-E_k^0}=\varepsilon^2\left\{\frac{\left|\prec n|w|n-3\succ\right|^2}{E_n^0-E_{n-3}^0}+\frac{\left|\prec n|w|n+3\succ\right|^2}{E_n^0-E_{n+3}^0}+\frac{\left|\prec n|w|n-1\succ\right|^2}{E_n^0-E_{n-1}^0}+\frac{\left|\prec n|w|n+1\succ\right|^2}{E_n^0-E_{n+1}^0}\right\}$$

Бу ерда

$$E_n^0-E_{n-3}^0=h\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-h\omega\left(n-\frac{5}{2}\right)=3h\omega;$$

$$E_n^0-E_{n+3}^0=h\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-h\omega\left(n+\frac{7}{2}\right)=-3h\omega;$$

$$E_n^0-E_{n-1}^0=h\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-h\omega\left(n-\frac{1}{2}\right)=h\omega;$$

$$E_n^0-E_{n+1}^0=h\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-h\omega\left(n-\frac{3}{2}\right)=-h\omega;$$

бўлганлиги учун

$$E^{(2)}=\varepsilon^2\left\{\frac{\left|\prec n\left|x^3\right|n-3\succ\right|^2}{3h\omega}-\frac{\left|\prec n\left|x\ \right|n+3\succ\right|^2}{3h\omega}+\frac{\left|\prec n\left|x^3\right|n-1\succ\right|^2}{h\omega}-\frac{\left|\prec n\left|x^3\right|n+1\succ\right|^2}{h\omega}\right\}=$$

$$=\frac{\varepsilon^2}{h\omega}\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^3\left[n(n-1)(n-2)-(n+1)(n+2)(n+3)+27n^3-27(n+1)^3\right]=-30\frac{\varepsilon^2}{h\omega}\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^3\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right)$$

Демак, иккинчи яқинлашувда осциллятор энергияси

$$E_n=h\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-30\frac{\varepsilon^2}{h\omega}\left(\frac{h}{2m\omega}\right)^3\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right)$$

тенглик орқали аниқланади. У ҳолда ушбу яқинлашувда

$$\hat{H}_1^0\Psi_1^0(r_1)=E_1^0\Psi_1^0(r_1)$$
$$\hat{H}_2^0\Psi_2^0(r_2)=E_2^0\Psi_2^0(r_2)$$

тенгламаларга эга бўламиз ва $E^0=E_1^0+E_2^0$ бўлади. $\hat{w}=0$ бўлганда гелий атоми ядро заряди Ze бўлган иккита водород атомидан иборат бўлади. Шунинг учун

$$E_1^0 = E_2^0 = -Z^2 \frac{me^4}{2h^2} = -Z^2 Ry .$$

Бу ерда

$$Ry = \frac{me^4}{2h^2} = 13,59 \text{ эВ} . \qquad (7)$$

$\hat{w} \neq 0$ бўлганда энергияга топиладиган биринчи тузатма

$$E^{(1)} = \int \Psi^{0*}(r_1, r_2)\, \hat{w}\, \Psi^0(r_1, r_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 == e^2 \int \left|\Psi^0(r_1, r_2)^2\right| \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|} \quad . \qquad (8)$$

Бу ерда $\Psi_1^0(r_1), \Psi_2^0(r_2)$ водород атоми функциялари бўлгани учун

$$\Psi^0(r_1, r_2) = Ae^{-\frac{Z}{a}(r_1 + r_2)}, \left(A = \frac{Z^3}{\pi a^3} \right).$$

У ҳолда

$$E^{(1)} = (eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1 + r_2)} \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|} .$$

Бу ерда

$$\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right| = \sqrt{r_1^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta + r_2^2},$$

θ эса $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ – радиус – векторлар орасидаги бурчак бўлгани учун

$$E^{(1)} = (eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} d\vec{r}_1 \frac{r_2^2 dr_2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi}{\sqrt{r_1^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta + r_2^2}} = 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} d\vec{r}_1 r_2^2 dr_2 \int \frac{d(-\cos\theta)}{\sqrt{r_1^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta + r_2^2}} =$$

$$= 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} r_2^2 dr_2 \frac{1}{r_1 r_2} (\sqrt{r_1^2 + 2r_1 r_2 + r_2^2} - \sqrt{r_1^2 - 2r_1 r_2 + r_2^2}) =$$

$$= 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} \frac{d\vec{r}_1}{r_1 r_2} \left[(r_1 + r_2) - \begin{Bmatrix} (r_1 - r_2), & \text{агар} & r_1 >> r_2 \\ (r_2 - r_1), & \text{агар} & r_1 << r_2 \end{Bmatrix} \right] r_2^2 dr_2 =$$

$$= 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} d\vec{r}_1 \left[\begin{Bmatrix} \frac{2}{r_1}, & \text{агар} & (r_1 > r_2) \\ \frac{2}{r_1}, & \text{агар} & (r_1 < r_2) \end{Bmatrix} \right] r_2^2 dr_2 =$$

$$= 16\pi(eA)^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2Z}{a}r_2} r_2^2 dr_2 \left[\frac{1}{r_2} \int_0^{r_2} e^{-\frac{2Z}{a}r_1} r_1^2 dr_1 + \int_{r_2}^\infty e^{-\frac{2Z}{a}r_1} r_1 dr_1 \right] = \rightarrow$$

$$= 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} \frac{d\vec{r}_1}{r_1 r_2} \left[(r_1 + r_2) - \begin{Bmatrix} (r_1 - r_2), & \text{агар} & r_1 >> r_2 \\ (r_2 - r_1), & \text{агар} & r_1 << r_2 \end{Bmatrix} \right] r_2^2 dr_2 =$$

$$= 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} d\vec{r}_1 \left[\begin{Bmatrix} \frac{2}{r_1}, & \text{агар} & (r_1 > r_2) \\ \frac{2}{r_1}, & \text{агар} & (r_1 < r_2) \end{Bmatrix} \right] r_2^2 dr_2 =$$

$$= 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} r_2^2 dr_2 \frac{1}{r_1 r_2} (\sqrt{r_1^2 + 2r_1 r_2 + r_2^2} - \sqrt{r_1^2 - 2r_1 r_2 + r_2^2}) =$$

$$= 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} \frac{d\vec{r}_1}{r_1 r_2} \left[(r_1 + r_2) - \begin{Bmatrix} (r_1 - r_2), & \text{агар} & r_1 >> r_2 \\ (r_2 - r_1), & \text{агар} & r_1 << r_2 \end{Bmatrix} \right] r_2^2 dr_2 =$$

$$= 2\pi(eA)^2 \int e^{-\frac{2Z}{a}(r_1+r_2)} d\vec{r}_1 \left[\begin{Bmatrix} \frac{2}{r_1}, & \text{агар} & (r_1 > r_2) \\ \frac{2}{r_1}, & \text{агар} & (r_1 < r_2) \end{Bmatrix} \right] r_2^2 dr_2 =$$

$$= 16\pi(eA)^2 \int_0^\infty e^{-\frac{2Z}{a}r_2} r_2^2 dr_2 \left[\frac{1}{r_2} \int_0^{r_2} e^{-\frac{2Z}{a}r_1} r_1^2 dr_1 + \int_{r_2}^\infty e^{-\frac{2Z}{a}r_1} r_1 dr_1 \right] = \rightarrow$$

Бу ердаги интегралларни алоҳида бўлаклаб интеграллаймиз

$$\frac{1}{r_2}\int_0^{r_2} e^{-\frac{2Z}{a}r_1} r_1^2 dr_1 = -e^{-\frac{2Z}{a}r_2} r_1^2 dr_1 \left[\frac{a}{2Z}r_2 + 2\left(\frac{a}{2Z}\right)^2 + 2\left(\frac{a}{2z}\right)^3 \frac{1}{r_2}\right] +$$

$$+\frac{2}{r_2}\left(\frac{a}{2Z}\right)^3 \int_{r_2}^{\infty} e^{-\frac{2Z}{a}r_1} r_1 dr_1 = -e^{-\frac{2Z}{a}r_{21}} \left[\frac{a}{2Z}r_2 + \left(\frac{a}{2Z}\right)^2\right]$$

$$\to = 16\,(e\pi A)^2 \left\{-\frac{a}{2Z}\int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r_2^3 d\,r_2 - 2\left(\frac{a}{2Z}\right)^2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r^2{}_2\, dr_2 - 2\left(\frac{a}{2Z}\right)^3 \int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r^2{}_2 dr_2 + \right\}$$

$$-\frac{a}{2Z}\int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r_2^3 dr_2 - 2(\frac{a}{2Z})^2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r_2^2 dr_2 - + \frac{2}{r_2}\left(\frac{a}{2Z}\right)^3 \int_{r_2}^{\infty} e^{-\frac{2Z}{a}r_1} r_1 dr_1 = -e^{-\frac{2Z}{a}r_{21}} \left[\frac{a}{2Z}r_2 + \left(\frac{a}{2Z}\right)^2\right]$$

$$\to = 16\,(e\pi A)^2 \left\{-\frac{a}{2Z}\int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r_2^3 d\,r_2 - 2\left(\frac{a}{2Z}\right)^2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r^2{}_2\, dr_2 - 2\left(\frac{a}{2Z}\right)^3 \int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r^2{}_2 dr_2 + \right\}$$

$$-\frac{a}{2Z}\int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r_2^3 dr_2 - 2(\frac{a}{2Z})^2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r_2^2 dr_2 -$$

$$+2\left(\frac{a}{2Z}\right)^3 \int_0^{\infty} e^{-\frac{2Z}{a}r_2} r_2\, dr_2 + \left(\frac{a}{2Z}\right)^2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r^3{}_2\, dr_2 + \left(\frac{a}{2Z}\right)^2 \int_0^{\infty} e^{-\frac{4Z}{a}r_2} r^2{}_2\, dr_2 =$$

$$= 16(e\pi A)^2 \left\{-\frac{a}{2Z}\left(\frac{a}{4Z}\right)^4 3! - 2\left(\frac{a}{2Z}\right)^2 \left(\frac{a}{4Z}\right)^3 2! - 2\left(\frac{a}{2Z}\right)^3 \left(\frac{a}{4Z}\right)^2 + \right.$$

$$\left. +2\left(\frac{a}{2Z}\right)^3 \left(\frac{a}{2Z}\right)^2 + \frac{a}{2z}\left(\frac{a}{4Z}\right)^4 3! + \left(\frac{a}{2Z}\right)^2 \left(\frac{a}{4Z}\right)^3 2!\right\} =$$

$$= 16(e\pi A)^2 \left(\frac{a}{2Z}\right)^5 \left[-\frac{3}{8} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 2 + \frac{3}{8} + \frac{1}{4}\right] = \frac{5}{4} 16(e\pi A)^2 \left(\frac{a}{2Z}\right)^5 =$$

$$= 5 \cdot 4\pi^2 \frac{Z^6 e^2 a^5}{\pi^2 a^6 32 Z^5} = \frac{5}{8} Z \frac{me^4}{h^2} = \frac{5}{4} ZRy.$$

Шундай қилиб, тузатма

$$E^{(1)} = \frac{5}{4} ZRy = \frac{5}{4} \cdot 2 \cdot 13,59 эВ = 2,5 \cdot 13,59\ эВ = 33,97 эВ \qquad (Z = 2).$$

Бу яқинлашувда гелий атоми энергияси эса

$$\vec{A} = 0, \quad \varphi = -\frac{Ze}{r}$$

бўлади. Бу энергиянинг экспериментал қиймати -78,98 эВ бўлгани учун назарий натижанинг экспериментдан фарқи $\Delta E = |78,98 - 74,74|$ эВ=4,24эВ. Демак, назариянинг хатоси 5,39% ни ташкил этади.

3 Масала. Водород атоми z-ўқи бўйлаб йўналган бир жинсли электр майдонга киритилган бўлса, бу майдонда атом иккинчи сатҳининг (n=2) ажралиши ҳисоблансин.

Ечиш. Электрон спини ҳисобга олинмаганда n-инчи энергетик сатҳнинг турланиш даражаси n^2 га тенг бўлади. Шунинг учун атомнинг n=2 сатҳи k=4 марта турланган бўлади. Водород атомининг тўлқин функцияси

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

бўлганлиги учун турланган ҳолатларга тўғри келувчи функциялар қуйидагича бўлади:

$$n=2, \qquad \ell=0, \qquad m=0, \qquad \Psi_{200}^0 = R_{20}(r)P_0^0(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \Phi_1^0,$$

$$n=2, \qquad \ell=1, \qquad m=1, \qquad \Psi_{211}^0 = R_{21}(r)P_1^1(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\varphi} = \Phi_2^0,$$

$$n=2, \qquad \ell=1, \qquad m=0, \qquad \Psi_{210}^0 = R_{21}(r)P_1^0(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}} = \Phi_3^0,$$

$$n=2, \qquad \ell=1, \qquad m=-1, \qquad \Psi_{21-1}^0 = R_{21}(r)P_1^{-1}(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\varphi} = \Phi_4^0,$$

бу ерда

$$R_{20}(r) = \frac{e^{-\frac{r}{2a}}}{\sqrt{a^3}}\left(1-\frac{r}{2a}\right), \qquad R_{21}(r) = \frac{re^{-\frac{r}{2a}}}{2a\sqrt{6a^3}},$$

$$P_0^0(\cos\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}}: \qquad P_1^{\pm1}(\cos\theta) = \pm\sqrt{\frac{3}{4}}\sin\theta;$$

$$P_1^0(\cos\theta) = \pm\sqrt{\frac{3}{4}}\cos\theta.$$

Назариядан маълумки, турланиш даражаси 4 га тенг бўлган n=2 сатҳ учун биринчи яқинлашувдаги тузатма

$$\begin{vmatrix} E^{(1)}-w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & E^{(1)}-w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & E^{(1)}-w_{13} & w_{13} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} & E^{(1)}-w_{14} \end{vmatrix} = 0$$

детерминантдан топилади. Бу ерда

$$w_{\alpha\beta} = <\alpha|\hat{w}|\beta> = \int \Phi_\alpha^{0*}\,\hat{w}\,\Phi_\beta^0 d\tau \qquad (\alpha,\beta,=1,2,3,4).$$

Бу матрица элементларидан фақатгина $<1|\hat{w}|3>=<3|\hat{w}|1>\neq 0$ бўлади ва қолганларининг барчаси эса нолга тенг бўлади, чунки Φ_2^0 функцияларда иштирок этувчи $e^{im\varphi}$ функция учун нормаллик шарти

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = \delta_{mm'} 2\pi$$

бўлади. Водород атоми электронининг ташқи электр майдони ε да олган қўшимча энергияси $e\varepsilon z$ ни ғалаёнлантирувчи энергия $w = e\varepsilon z = e\varepsilon r\cos\theta$ тариқасида оламиз. У ҳолда

$$<1|\hat{w}|3>=<3|\hat{w}|1>=\int \Phi_1^{0*} e\varepsilon\, r\cos\theta\, \Phi_3^0 d\tau =$$

$$= e\varepsilon \int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R_{20}(r) P_0^0(\cos\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R_{21}(r) P_1^0(\cos\theta) 2\pi r^2 dr \sin\theta\, d\theta =$$

$$= e\varepsilon \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{3}{4}} \frac{1}{2a\sqrt{6a^3}} \int_0^{00} e^{-\frac{r}{a}} r^4 \left(1 - \frac{r}{2a}\right) dr \int_0 \cos^2\theta \sin\theta d\theta =$$

$$= \frac{e\varepsilon}{8a^4} \frac{2}{3} \left[\int_0^{\infty} e^{-\frac{r}{a}} r^4 dr - \frac{1}{2a} \int_0^{\infty} e^{-\frac{r}{a}} r^4 dr \right] = \frac{e\varepsilon}{12a^4} \left[a^5 4! - \frac{1}{2a} a^5 5! \right] =$$

$$= \frac{e\varepsilon}{12a^4} a^5 (24 - 60) = -3ae\varepsilon .$$

Демак, детерминантимиз

$$\begin{vmatrix} E^{(1)} & 0 & -3ae\varepsilon & 0 \\ 0 & E^{(1)} & 0 & 0 \\ -3ae\varepsilon & 0 & E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

ёки

$$\begin{vmatrix} E^{(1)} & -3ae\varepsilon \\ -3ae\varepsilon & E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \qquad \begin{vmatrix} E^{(1)} & 0 \\ 0 & E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

кўринишга келади ва бу детерминантлардан топамиз

$$E_{1,3}^{(1)} = \pm 3ae\varepsilon, \qquad E_{2,4}^{(1)} = 0$$

Бизда $E^{(1)} = E - E_2^0$ бўлганидан

$$E_{1,3} = E_2^0 \pm 3ae\varepsilon, \qquad E_2 = E_4 = E_2^0$$

Демак, ғалаёнланмаган (электр майдони бўлмаганда) атом энергетик сатҳи E_2^0 бўлган бўлса, майдонга киритилганда бу сатҳ 3 та сатҳга бўлинар экан. Буни схематик равишда қуйидагича кўрсатиш мумкин

$$\frac{E_2^0}{(\varepsilon = 0)} \Leftrightarrow \left\{ \begin{matrix} \text{сатх} \\ 4\,\text{марта} \\ \text{турланган} \end{matrix} \right\} \quad \rightarrow \quad \frac{E_2^0}{(\varepsilon \neq 0)} \Leftrightarrow \left\{ \begin{matrix} E_2^0 + 3ae\varepsilon \\ E_2^0\left(2\ \text{марта турланган}\right) \\ E_2^0 - 3ae\varepsilon \end{matrix} \right.$$

4 Масала. Иккита айнан ўхшаш зарралар U(r) майдонда ҳаракат қилишади ва улар ўртасидаги ўзаро таъсир потенциали W га тенг. Бу зарралар ҳар бири учун Шредингер тенгламасининг ечими маълум деб ҳисоблаб, икки зарралар системаси учун бу тенгламанинг ечими топилсин.
Ечиш. Ҳар бир зарра учун Шредингер тенгламаси

$$H_1^0\Psi_1^0\left(r_1\right) = E_1^0\Psi_1^0\left(r_1\right), \qquad H_2^0\Psi_2^0\left(r_2\right) = E_2^0\Psi_2^0\left(r_2\right), \tag{1}$$

кўринишда ёзилса, улардан ташкил бўлган система учун

$$\widehat{H}\Psi\left(r_1, r_2\right) = E\Psi\left(r_1, r_2\right), \tag{2}$$

бу ерда

$$\hat{H} = \hat{H}_1^0 + \hat{H}_2^0 + \hat{w}.$$

Зарралар айнан ўхшаш бўлганлигидан

$$\Psi\left(r_1, r_2\right) = a\varphi_1 + b\varphi \tag{3}$$

тариқасида ёзилиши мумкин. Бу ерда

$$\varphi_1 = \Psi_1^0\left(r_1\right)\Psi_2^0\left(r_2\right), \qquad \varphi_2 = \Psi_1^0\left(r_2\right)\Psi_2^0\left(r_1\right) \tag{4}$$

(1)-ни эътиборга олиб, (3)-ни (4) га қўйиб ёзамиз

$$\widehat{H}\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right) = E\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right)$$

ёки

$$\left(\widehat{H}_1^0 + \widehat{H}_2^0 + \widehat{w}\right)\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right) = E\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right)$$

$$a\widehat{H}_1^0\varphi_1 + b\widehat{H}_1^0\varphi_2 + a\widehat{H}_2^0\varphi_1 + b\widehat{H}_2^0\varphi_2 + \omega\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right) = E\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right)$$

Бундан

$$a\varphi_1\left(E_1^0 + E_2^0\right) + b\varphi_2 + \left(E_1^0 + E_2^0\right) + \omega\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right) = E\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right)$$

ёки

$$\left(E_1^0 + E_2^0\right) - E)\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right) + \hat{w}\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right) = 0\,.$$

Агар $E_1^0 + E_2^0$ десак,

$$\left(\varepsilon + \hat{w}\right)\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right) = 0\,.$$

Бу тенгликни чап томондан $\varphi_{1,2}^*$ га кўпайтириб, интеграллаймиз:

$$\int \varphi_1^*\left(\varepsilon + \hat{w}\right)\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right)dr_1dr_2 = 0$$
$$\int \varphi_2^*\left(\varepsilon + \hat{w}\right)\left(a\varphi_1 + b\varphi_2\right)dr_1dr_2 = 0\,.$$

Очиб ёзсак,

$$a\int \varphi_1^*\varepsilon\varphi_1 dr_1dr_2 + b\int \varphi_1^*\varepsilon\varphi_2 dr_1dr_2 + + a\int \varphi_1^*\hat{w}\varphi_1 dr_1dr_2 + b\int \varphi_1^*\hat{w}\varphi_2 dr_1dr_2 = 0\,,$$
$$a\int \varphi_1^*\varepsilon\varphi_1 dr_1dr_2 + b\int \varphi_2^*\varepsilon\varphi_1 dr_1dr_2 + + a\int \varphi_2^*\hat{w}\varphi_1 dr_1dr_2 + b\int \varphi_2^*\hat{w}\varphi_2 dr_1dr_2 = 0$$

ёки

$$\left.\begin{array}{l} a\varepsilon + aw_{11} + bw_{12} = 0 \\ b\varepsilon + aw_{21} + bw_{22} = 0 \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} a\left(\varepsilon + w_{11}\right) + bw_{12} = 0 \\ aw_{21} + b\left(\varepsilon + w_{22}\right) = 0 \end{array}\right. \qquad (5)$$

Бу ерда

$$w_{11} = w_{22} = \int \varphi_{1,2}^*\hat{w}\varphi_{1,2}dr_1dr, \qquad w_{21} = w_{12} = \int \varphi_{2,1}^*\hat{w}\varphi_{1,2}dr_1dr$$

деб белгиладик ва

$$\int \varphi_1^* \varphi_1 dr_1 dr_2 = \int \varphi_2^* \varphi_2 dr_1 dr_2 = 1, \qquad \int \varphi_1^* \varphi_2 dr_1 dr_2 = 0$$

ортонормаллик шартини ҳисобга олдик. (5)-системанинг ечимга эга бўлиши учун

$$\begin{vmatrix} \varepsilon + w_{11} & w_{12} \\ w_{12} & \varepsilon + w_{11} \end{vmatrix} = 0 \qquad (6)$$

бўлиши шарт. (14)-дан $(\varepsilon + w_{11})^2 = w_{12}^2; \quad \varepsilon_{1,2} + w_{11} = \pm w_{12}$

Қуйидаги ҳолларни қараймиз.

1. $\varepsilon_1 + w_{11} = w_{12}; \qquad \varepsilon_1 = w_{12} - w_{11}$
2.

$\varepsilon = \varepsilon_1$ илдизни (5)-га қўямиз:

$$a(w_{12} - w_{11} + w_{11}) + bw_{12} = 0$$
$$a + b = 0 \Rightarrow a = -b$$

демак, бу илдизга тўғри келувчи функция

$$\Psi_{\varepsilon 1}(r_1, r_2) = a(\varphi_1 - \varphi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_2).$$

Бу ерда биз $\Psi_1^0(r_1)$, $\Psi_2^0(r_2)$ – функцияларнинг ортонормаллигини ҳисобга олдик.

3. $\varepsilon_2 + w_{11} = -w_{12}; \qquad \varepsilon_2 = -w_{12} - w_{11}$

(5)-дан:

$$a(-w_{12} - w_{11} + w_{11}) + bw_{12} = 0$$
$$-a + b = 0 \Rightarrow a = b,$$

ва функция

$$\Psi_{\varepsilon 1}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2).$$

Шундай қилиб, иккита айнан ўхшаш заррадан ташкил топган система учун Шредингер тенгламасининг ечимлари қуйидагича бўлар экан

$$E_1 = E_1^0 + E_2^0 + w_{11} - w_{12};$$

$$\Psi_{\varepsilon 1}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi_1^0(r_1)\Psi_2^0(r_2) - \Psi_1^0(r_2)\Psi_2^0(r_1)\right];$$

$$E_2 = E_1^0 + E_2^0 + w_{11} + w_{12};$$

$$\Psi_{\varepsilon 1}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi_1^0(r_1)\Psi_2^0(r_2) + \Psi_1^0(r_2)\Psi_2^0(r_1)\right].$$

Мустақил ишлаш учун масалалар

1. Чизиқли бўлмаган кучсиз боғланишли ясси осциллятор потенциал энергияси

$$U(x,y)=\frac{1}{2}m\omega^2(4x^2+y^2)+\alpha xy^2$$

бўлса, унинг уч қуйи сатҳларига биринчи яқинлашувда тузатмалар топилсин. Ғалаёнлантирувчи таъсир тариқасида αxy^2 олинсин.

2. Изотроп осциллятор потенциал энергияси

$$U(x,y)=\frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2)+\alpha xy^2$$

бўлса, унинг биринчи уйғонган ҳолат энергиясига 1-яқинлашувда тузатма ҳисоблансин. Сферик – симметрик майдонда ҳаракат қилувчи ва энергияси E_{n1}^0 спинсиз зарра OZ ўқи бўйича йўналган бир жинсли доимий магнит майдонига (кучланганлиги H) киритилган. 1-яқинлашувда энергия ва тўлқин функцияга тузатма топилсин.

3. Заряди q, частоталари $\omega_1=\omega_2=\omega_3$ бўлган уч ўлчамли гармоник осциллятор кучсиз магнит майдонида жойлашган. Қуйи энергетик сатҳи (n=1) нинг бу майдонда ажралиши аниқлансин.

4. Сферик-симметрик майдонда ҳаракат қилувчи ва энергияси E_{n1}^0 спинсиз зарра ўз-ўқи бўйича йўналган бир жинсли доимий магнит майдонига (кучланганлиги H) киритилган. 1-яқинлашувда энергия ва тўлқин функциясига тузатмалар топилсин.

XI-БОБ
КВАЗИКЛАССИК ЯҚИНЛАШУВ

11.1. Квазиклассик яқинлашувда тўлқин функция.

Агар зарранинг де Бройл тўлқин узунлиги берилган характерли ўлчамга нисбатан кичик бўлса, система ўзининг квазиклассик хусусиятларини намойиш эта бошлайди. Ушбу мавзуда системанинг – зарранинг «квазиклассик» хоссаларини янада батафсилроқ қараб чиқамиз. Бунинг учун Шредингер тенгламаси

$$\sum_a \frac{h^2}{2m_a}\Delta_a\psi+(E-U)\psi=0$$

да қуйидагича алмаштирув ўтказамиз

$$\psi=e^{\frac{i}{h}\sigma}$$

ва σ катталик учун қуйидаги тенгламани оламиз

$$\sum\frac{1}{2m_a}(\nabla_a\sigma)^2-\sum_a\frac{ih}{2m_a}\Delta_a\sigma=E-U \qquad (11.1)$$

Система ўзининг хоссаларига кўра деярли классик деб фараз қилинганлиги учун σ ни h даражалари бўйича қатор кўринишида ахтарамиз

$$\sigma=\sigma_0+\left(\frac{h}{i}\right)\sigma_1+\left(\frac{h}{i}\right)^2\sigma_2+..... \qquad (11.2)$$

Биз энг содда ҳолни - битта зарранинг бир ўлчамли ҳаракатини қараб чиқамиз. Бу ҳолда (11.1) тенглама

$$\frac{1}{2m}\sigma'^2-\frac{ih}{2m}\sigma''=E-U(x) \qquad (11.3)$$

кўринишига келади (бу ерда штрих x бўйича ҳосилани ифода этади). Биринчи яқинлашувда $\sigma=\sigma_0$ бўлади ва (11.3) да ħ ни ўз ичига олган ҳадлар тушиб қолади

$$\frac{1}{2m}\sigma_0'^2=E-U(x)$$

Бундан

$$\sigma_0=\pm\int\sqrt{2m\left[E-U(x)\right]}dx$$

эканлигини топамиз. Интеграл тагидаги ифода координатанинг функцияси бўлган зарранинг классик импулси p бўлиб ҳисобланади

$$\sigma_0 = \pm \int p\,dx \quad , \quad p = \sqrt{2m(E-U)} \tag{11.4}$$

тенгликка эга бўламиз. (11.3) тенгламани ёзишда қўлланилган яқинлашув бу тенглама чап томонида жойлашган иккинчи ҳаднинг биринчи ҳадга нисбатан кичик бўлганидагина тўғридир, яъни

$$h\left|\frac{\sigma''}{\sigma'^2}\right| << 1 \quad , \quad \left|\frac{d}{dx}\left(\frac{h}{\sigma'}\right)\right| << 1 \tag{11.5}$$

Биринчи яқинлашувда (11.4) га кўра $\sigma' = p$ ёки $\left|\frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{dx}\right| << 1$ бўлади. Бу ерда $\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\lambda}{2\pi}$, $\lambda(x) = \frac{2\pi h}{p(x)}$. - зарранинг де Бройл тўлқин узунлиги. Шундай қилиб биз «квазиклассиклик»нинг миқдорий шартини олдик - зарра тўлқин узунлиги системадаги характерли ўлчамга нисбатан жуда суст ўзгариши керак экан. Бу шарт бажарилмайдиган фазо соҳаларида юқоридаги формулалар нотўғри ҳисобланади. (11.5) шартни қайта бошқа кўринишда ёзишимиз мумкин, бунинг учун

$$\frac{dp}{dx} = \frac{d}{dx}\sqrt{2m(E-U)} = -\frac{m}{p}\frac{dU}{dx} = \frac{mF}{p}$$

эканлигини ҳисобга олиб, топамиз

$$\frac{mhF}{p^2} << 1 \tag{11.6}$$

бу ерда $F = -\frac{dU}{dx}$ - ташқи майдонда заррага таъсир этувчи классик куч. Кўрамизки, зарра импулсининг жуда кичик қийматларида квазиклассик яқинлашишни қўллаш мумкин бўлмайди. Айниқса, «бурилиш нуқталари» деб аталмиш нуқталари x_1 ва x_2 яқинида бу яқинлашишни мутлақо қўллаб бўлмайди (11.1-расм). Бурилиш нуқталари шундай нуқталарки, классик физика бўйича зарра бу нуқталарда тўхтаб, орқа томонга ҳаракат қилиб кетади ва $p(x) = 0$ бўлиб, бу шарт $E = U(x)$ тенгликдан келиб чиқади. Зарранинг де Бройл тўлқин узунлиги эса бу нуқталарда чексизликка интилади, яъни жуда кичик бўла олмайди. Энди биз (11.2) - қаторнинг

навбатдаги ҳади билан шуғулланамиз. ħ бўйича биринчи тартибли ҳадлар (11.3)-тенгламада қуйидагича бўлади

$$\sigma_0'\sigma_1'+\frac{\sigma_0''}{2}=0,$$

бундан

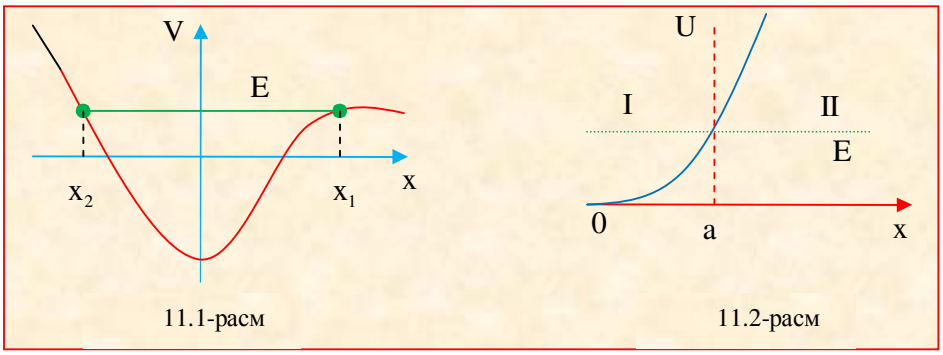
$$\sigma_1'=-\frac{\sigma_0''}{2\sigma_0'}=-\frac{p'}{2p}$$

Охирги тенгликни интеграллаб, топамиз

$$\sigma_1=-\frac{1}{2}\ln p \qquad (11.7)$$

Олинган натижани (11.1) тўлқин функцияга қўямиз

$$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{h}\int p\,dx\right)+\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{h}\int p\,dx\right) \qquad (11.8)$$



11.1-расм 11.2-расм

Юқори тартибдаги яқинлашувларда масаланинг ечимини ахтариб ўтирмаймиз. (11.8) даги тўлқин функцияда $1/\sqrt{p}$ кўпайтувчининг бўлишини тушуниш қийин эмас. Маълумки, заррани x, x+dx оралиғидаги нуқтада топиш эҳтимоли $|\psi|^2$ билан аниқланади, яъни бу эҳтимоллик 1/p га пропорционал бўлади. «Классик зарра» учун худди шуни кутиш мумкин эди, чунки классик ҳаракатда зарранинг dx кесмада бўлиш вақти зарра тезлигига (импулсига) тескари пропорционал бўлади. Фазонинг «классик кириб бора олмайдиган» қисмларида $E<U(x)$ бўлгани учун p(x) функция мавҳум ҳисобланади, (11.8) функциянинг даражалари эса ҳақиқий бўлади. Шунинг учун бу соҳаларда тўлқин функцияни қуйидагича ёзишга тўғри келади

$$\psi=\frac{C_1'}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{1}{h}\int|p|dx\right)+\frac{C_2'}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{1}{h}\int|p|dx\right). \qquad (11.9)$$

11.2. Квазиклассик яқинлашувда чегаравий шартлар.

Бизда x=a бурилиш нуқтаси бўлсин (демак, E=U(a) бўлади) ҳамда барча x>a нуқталарда U>E, яъни бурилиш нуқтасининг ўнг томони классик жиҳатдан кириб бўлмайдиган соҳа бўлсин. Зарранинг тўлқин функцияси ана шу соҳада сўнадиган функция бўлсин. Бурилиш нуқтасидан етарлича узоқда бу функция

$$\psi=\frac{C}{2\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{1}{h}\left|\int p\,dx\right|\right), \qquad (x>a). \qquad (11.10)$$

кўринишга эга бўлади. Бу функция (11.9) нинг биринчи ҳадига мос келади. Бурилиш нуқтасининг чап томонидаги тўлқин функция Шредингер тенгламасининг иккита ечими бўлган (11.8) нинг ҳақиқий комбинацияси тариқасида тасвирланиши зарур

$$\psi=\frac{C_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{h}\int_a^x p\,dx\right)\frac{C_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{h}\int_a^x p\,dx\right), \qquad (x<a) \qquad (11.11)$$

Бу комбинациядаги коэффициентларни аниқлаш учун тўлқин функциясининг (x-a) нинг мусбат қийматидан (x-a) нинг манфий қийматигача ўзгаришини кузатиш мумкин. Агар ψ ни формал равишда комплекс ўзгарувчи x нинг функцияси деб қараб, (x-a) нинг мусбат қийматидан (x-a) нинг манфий қийматига соҳанинг a нуқтасидан етарлича узоқ жойлашган ва унда квазиклассиклик шарти бажариладиган йўл билан ўтиш мумкин бўлади (11.2-расм). Дастлаб, (11.1) тўлқин функциянинг a нуқтани ўнгдан чапга айланиб ўтишда ўзгаришини кузатамиз. Тушунарли бўлиши учун (11.1) ни қайта ёзамиз

$$\psi(x)=\frac{C}{2}\left[2m(U-E)\right]^{-1/4}\exp\left(-\frac{\sqrt{2m}}{h}\int_a^x\sqrt{U-E}\,dx\right) \qquad (11.12)$$

Бундай ўтишда (11.12) функция (11.11) нинг иккинчи ҳадига ўтади, чунки барча бу йўл бўйлаб худди шу ҳад асосий ҳад ҳисобланади, биринчи ҳад эса юқори ярим текислик ичкарисида сўнувчи ҳад ҳисобланади. Ҳақиқатан, бу йўл билан x ўзгарганда Г(x)-E фаза фарқи (x-a) фаза фарқи билан бирликда π га ошиб ўзгарган бўлади. Натижада (11.12) функция (11.11) нинг иккинчи ҳадига $C_2=\frac{1}{2}C\exp(-i\pi/4)$ коэффициент билан ўтади. Шунинг учун x>a

бўлгандаги (11.10) функцияга x<a бўлгандаги қуйидаги функция мос келган бўлади

$$\psi=\frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{h}\int_a^x p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)=\frac{C}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{h}\int_a^x p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)\quad (x<a).$$

Агар классик жиҳатдан кириш мумкин бўлган соҳа чексиз юқори «потенциал девор» билан чекланган бўлса, x=a бўлганда тўлқин функция учун чегаравий шарт $\psi=0$ бўлиб ҳисобланади. Бу ҳолда квазиклассик яқинлашув то «девор»гача қўлланилади ва тўлқин функция

$$\psi=\frac{C}{\sqrt{p}}\sin\frac{1}{h}\int_a^x p\,dx\qquad (x<a),\quad \psi=0\quad (x>a)$$

11.3. Бор-Зоммерфелднинг квантлаш қоидаси.

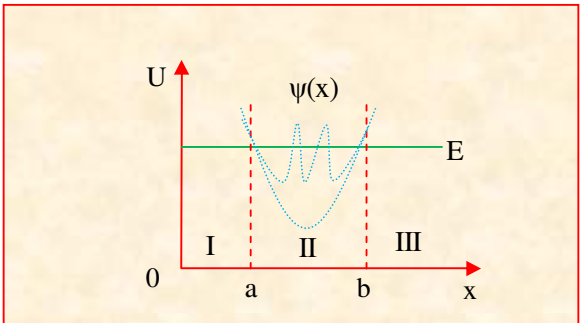
Олинган натижалар квазиклассик ҳолда квантланган энергетик сатҳларни аниқловчи шартни чиқаришга ёрдам беради. Бунинг учун потенциал чуқурликда зарранинг бир ўлчамли чекли ҳаракатини қараб чиқамиз; классик жиҳатдан кириш мумкин бўлган соҳа $b \le x \le a$ иккита бурилиш нуқтаси билан чекланган бўлсин. Чегаравий шарт x=b нуқтада

$$\psi=\frac{C}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{h}\int_b^x p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)$$

функцияга олиб келади. x=a нуқтадан чап томонда эса

$$\psi=\frac{C'}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{h}\int_x^a p\,dx+\frac{\pi}{4}\right)$$

функцияга олиб келади. Бу икки ифоданинг барча соҳа бўйича бир-бирига мос тушиши учун улар фазаларининг йиғиндиси π га нисбатан бутун ва каррали бўлади



11.3-расм

$$\frac{1}{h}\int_b^a p\,dx+\frac{\pi}{2}=(n+1)\pi, \qquad \int p\,dx=2\pi h\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Бу формула квазиклассик ҳолда зарра стационар ҳолатларини аниқловчи шарт ҳисобланиб, квант назариядаги Бор-Зоммерфелднинг квантлаш қоидасига мос келади (11.3 -расм).

Назорат саволлари

1. Зарра учун система ҳолати қачон классикка яқин бўлади?
2. Квазиклассик яқинлашувнинг қўлланиш шарти қандай?
3. Квазиклассик ҳолда тўлқин функцияга қандай чегаравий шартлар юкланади?
4. Бурилиш нуқталари деб қандай нуқталарга айтамиз?
5. Бор-Зоммерфелднинг квантлаш қоидасини ёзинг.

МАСАЛА ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 масала. Чизиқли гармоник осциллятор энергетик сатҳлари ҳисоблансин.

Ечиш. Бор-Зоммерфелд шартини ёзамиз

$$\int_{x_1}^{x_2} pdx=\pi h\left(n+\frac{1}{2}\right). \qquad (1)$$

Бу ерда

$$p=\sqrt{2m\left(E-\frac{m\omega^2}{2}x^2\right)}.$$

Бурилиш нуқталари ҳисобланган x_1,x_2 лар $E=U(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2$ тенгликдан топилади.

$$x_1=-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}, \qquad x_2=-\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}},$$

У ҳолда 1-интеграл

$$\int_{x_1}^{x_2} pdx=\int_{\sqrt{2E/m\omega^2}}^{-\sqrt{2E/m\omega^2}}\sqrt{2m(E-\frac{m\omega^2}{2}x^2)dx}=\sqrt{2mE}\int\sqrt{1-\frac{m\omega^2}{2E}x^2}dx \qquad (2)$$

$\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}x=\sin t$ деб белгиласак, 2-интеграл чегаралари $-\frac{\pi}{2}$ дан $\frac{\pi}{2}$ гача олинади ва

$$\int_{x_1}^{x_2} pdx=\sqrt{2mE}\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\pi/2\cos^2 tdt=\frac{E}{\omega}\left(t+\frac{1}{2}\sin 2t\right)\Bigg|_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}=\frac{E}{\omega}\pi$$

У ҳолда (1) дан топамиз:

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

2 масала. Энергияси E бўлган зарра

а) $U(x)=-U_0\left(1-\frac{x}{a}\right)$, **б)** $U(x)=-U_0 ch^{-2}\frac{x}{a}$

потенциал майдонларда ҳаракат қилса, унинг энергетик сатҳи топилсин.

Ечиш. Бор-Зоммерфелднинг квантлаш шартидаги интеграл чегараларини $E=U(x)$ тенглигидан ҳисоблаймиз

а) $$-U_0\left(1-\frac{x}{a}\right)=E, \qquad x_1=0, \qquad x_2=a\frac{U_0+E}{U_0}$$

б) $$E=U_0 ch^{-2}\frac{x}{a}, \quad ch^2\frac{x}{a}=\frac{U_0}{E}, \quad ch\frac{x}{a}=\pm\sqrt{\frac{U_0}{E}}, \quad x_{1,2}=\pm a\,arcch\sqrt{\frac{U_0}{E}}$$

Зарра импулсини содда кўринишга келтирамиз

а) $$p=\sqrt{2m(E-U)}=\sqrt{2m\left[E+U_0(1-\frac{x}{a})\right]}==\sqrt{2m}\times\sqrt{(E+U_0-U_0\frac{x}{a}}=$$
$$=\sqrt{2m(E+U_0)}\times\sqrt{1-\frac{U_0x}{E+U_0a}}$$

б) $$p=\sqrt{2m\left[E+U_0ch^{-2}\frac{x}{a}\right]}=\sqrt{2mE}\cdot\sqrt{1-\frac{U_0}{Ech^2\frac{x}{a}}}.$$

Ўзгарувчиларни алмаштирамиз

$$sh\frac{x}{a}=k\,sint, \quad \left(k=\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}\right)$$
$$ch^2\frac{x}{a}=1+sh^2\frac{x}{a}=1+k^2sin^2t$$

бўлгани учун

$$ch\frac{x}{a}=\sqrt{1+k^2sin^2t}.$$

У ҳолда

$$dx=\frac{ka\ cost\,dt}{ch\frac{x}{a}}=\frac{ka\,cost\,dt}{\sqrt{1+k^2sin^2t}}$$

ва

$$\sqrt{1-\frac{U_0}{Ech^2\frac{x}{a}}}=\sqrt{1-\frac{U_0}{E(1+k^2\sin^2 t)}}=\sqrt{\frac{1+k^2\sin^2 t-\frac{U_0}{E}}{1+k^2\sin^2 t}}=$$

$$=\sqrt{\frac{k^2\sin^2 t-\left(\frac{U_0}{E}-1\right)}{1+k^2\sin^2 t}}=\sqrt{\frac{-k^2(1-\sin^2 t)}{1+k^2\sin^2 t}}=\sqrt{-k^2}\,\frac{\cos t}{\sqrt{1+k^2\sin^2 t}}$$

.

Шундай қилиб, берилган ҳолда зарра импулси

$$p=\frac{\sqrt{-2mE}k\ \cos t}{\sqrt{1+k^2\sin^2 t}}.$$

Энди квантлаш шартидаги интегралларни ҳисоблаймиз

$$а)\int_{x_1}^{x_2} pdx=\sqrt{2m(U_0+E)}\int\sqrt{1-\frac{U_0}{E+U_0}\frac{x}{a}}dx=\sqrt{2m(U_0+E)}\left(-\frac{2U_0+E}{3U_0}a\right)\left(1-\frac{U_0x}{E+U_0a}\right)^{3/2}$$

$$\int_0^a\left(\frac{U_0+E}{U_0}\right)=\frac{2a}{3U_0}\sqrt{2m(U_0+E)}.$$

$$б)\int_{x_1}^{x_2} pdx=\sqrt{-2mE}k^2a\int_0^{\pi/2}\frac{\cos^2 tdt}{\sqrt{1+k^2\sin^2 t}}\sqrt{-2mE}a\frac{1}{2}\pi(\sqrt{1+k^2}-1)==-\frac{1}{2}\pi a\sqrt{-2mE}\left(\sqrt{\frac{U_0}{E}}-1\right)$$

$$=-\frac{\pi a}{2}\sqrt{2m}(\sqrt{-U_0}-\sqrt{-E}).$$

Квантлаш шартига кўра ёза оламиз

$$а)\quad \frac{2a}{3U_0}\sqrt{2m}(U_0+E)^{3/2}=\pi h^2\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Бу ердан топамиз

$$E_n=-U_0+\left[\frac{2U_0\pi h}{3a\sqrt{2m}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{3/2}.$$

$$б)\ б)\quad \frac{\pi a}{2}\sqrt{2m}(\sqrt{-U_0}-\sqrt{-E})=\pi h\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

Бундан қуйидагини топамиз

$$E_n=-\left[\sqrt{-U_0}-\frac{2h}{a\sqrt{2m}}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\right]^2.$$

3 Масала. Квазиклассик яқинлашувда $U(r) = -\frac{e^2}{r}$ потенциал майдонда ҳаракат қилаётган зарранинг энергетик сатҳи аниқлансин.

Ечиш. Берилган потенциал майдон марказий симметрияга эга бўлгани учун зарра импулс моменти сақланувчан катталик бўлади ва Шредингер тенгламаси бу зарра учун

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2dR}{rdr} + \left\{\frac{2m}{h^2}\left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{h^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]\right\} R = 0 \qquad (1)$$

кўринишда ёзилади. Бу ерда $\{.....\}$ қавс ичида жойлашган ифода $\frac{p^2(r)}{h^2}$ га тенг бўлади, яъни

$$p^2(r) = 2m\left[E + \frac{e^2}{r} - \frac{h^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]$$

У ҳолда Бор-Зоммерфелднинг квантлаш шарти қуйидагича ёзилади

$$\int_{r_1}^{r_2} p(r)dr = \pi h\left(n_r + \frac{1}{2}\right), \qquad \left(n_r = 0, 1, 2, ...\right) \qquad (2)$$

Бу ерда r_1, r_2 -лар зарранинг майдонда бурилиш нуқталари ва $r_2 > r_1$ бўлади. Тортишув майдонида зарра энергияси E эса мусбат ва манфий қийматларга эга бўлиши мумкин. Кўрсатиш мумкинки, (1) даги $\ell(\ell+1)$ ҳади ўрнига $\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2$ ни ёзиб бўлади. Агар $q(r)=\frac{p(r)}{h}$ алмаштириш ўтказсак, E ўрнига $|E|$ ни олсак, (2) ифодадан қуйидагини ёза оламиз

$$q^2(r) = \frac{2m}{h^2}\left[-|E| + \frac{e^2}{r} - \frac{h^2(\ell + \frac{1}{2})^2}{2mr^2}\right] = -k^2 + \frac{2}{ar} - \frac{\lambda^2}{r^2} \qquad (3)$$

Бу ерда $k^2 = \frac{2m|E|}{h^2}$, $a = \frac{h^2}{me^2} \approx 0,53A$ - Бор бўйича 1-радиус, $\lambda = \ell + \frac{1}{2}$.

Зарранинг майдондаги бурилиш нуқталари $q^2(r) = 0$ шартидан аниқланади:

$$-k^2 + \frac{2}{ra} - \frac{\lambda^2}{r^2} = 0$$

ёки

$$r^2 - \frac{2}{ak^2} r + \frac{\lambda^2}{k^2} = 0$$

Бундан

$$r_1 = \frac{1}{ak^2}\left[1 - \sqrt{1-(\lambda ak)^2}\right], \qquad r_2 = \frac{1}{ak^2}\left[1 + \sqrt{1-(\lambda ak)^2}\right],$$

у ҳолда (3)-ни r_1, r_2 -лар орқали қуйидагича ёзиш мумкин бўлади

$$q^2(r) = \frac{k^2}{r^2}(r - r_1)(r_2 - r)$$

Шунинг учун (2)-квантлаш шартини

$$k\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}\,\frac{dr}{r} = \pi\left(n_r + \frac{1}{2}\right) \tag{4}$$

кўринишида ёза оламиз. (4)-интегрални уч босқичда ҳисоблаймиз. Дастлаб, бу интегралда

$$r = \frac{1}{2}(r_2 - r_1)x + \frac{1}{2}(r_1 + r_2)$$

алмаштиришни ўтказамиз. У ҳолда

$$(r-r_1)(r_2-r) = \frac{1}{2}(r_2-r_1)\sqrt{(1+x)(1-x)} = \frac{1}{2}(r_2-r_1)(1+x)\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}$$

$$\frac{dr}{r} = \frac{dx}{(x+1) + \dfrac{2}{r_2/(r_1-1)}}$$

ва (4)-интеграл қуйидагича ёзилади

$$\frac{k}{2}(r_2-r_1)\int (1+x)\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}\,\frac{dx}{(x+1) + \dfrac{2r_1}{r_2-r_1}} = \pi\left(n_r + \frac{1}{2}\right) \tag{5}$$

Иккинчи босқичда $y = \sqrt{\dfrac{1-x}{1+x}}$, $p^2 = \dfrac{r_2}{r_1}$ алмаштиришларни ўтказамиз. У ҳолда

$$x = \frac{1-y^2}{1+y^2}, \qquad dx = -\frac{4ydy}{(1+y^2)^2}, \qquad \frac{dx}{(1+x) + \dfrac{2}{p^2-1}} = \frac{2(p^2-1)ydy}{(1+y^2)(y^2+p^2)}$$

бўлади ва (5)-интеграл ўрнида оламиз

$$k\frac{(r_2-r_1)^2}{r_1}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{y^2dy}{(y^2+1)(y^2+p^2)}=\pi\left(n_r+\frac{1}{2}\right) \qquad (6)$$

Охирги интеграл $y=i$ ($y^2+1=0$ дан)-иккинчи тартибли қутб, $y=ip$ ($y^2+p^2=0$ дан)-биринчи тартибли қутб нуқталарга эга бўлгани учун улар чигирма ёрдамида ечилади. Агар интеграл остидаги ифодани

$$f(y)=\frac{y^2}{(y^2+1)^2(y^2+p^2)}$$

деб белгиласак, чигирма тўғрисидаги теоремага асосан

$$\int f(y)\,dy=2\pi i\left[\,f(y)\big|_{y=ip}+\,f(y)\big|_{y=i}\right]$$

ва

$$f(a)=\frac{1}{m-1}\frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}}\quad\left[f(z)(z-a)^m\right]_{z=a}$$

бўлгани учун

$$1)\quad f(y)\big|_{y=ip}=\frac{y^2(y-ip)}{(y^2+1)^2(y^2+p^2)}=\frac{y^2(y-ip)}{(y^2+1)^2(y-ip)(y+ip)}=$$

$$=\frac{y^2}{(y^2+1)^2(y+ip)}=\frac{(ip)^2}{(ip)^2+(ip+ip)}=\frac{ip}{2(i-p^2)^2}$$

$$2)\quad f(y)\big|_{y=i}=\frac{dy^2(y-i)2}{dy(y^2+1)^2(y^2+p^2)}=\frac{dy^2(y-i)^2}{dy\left[(y-i)(y+i)\right]^2(y^2+p^2)}=$$

$$=\frac{d}{dy}\frac{y^2}{(y+i)^2(y^2+p^2)}\frac{2y}{(y+i)^2(y^2+p^2)}\Bigg|_{y=i}-$$

$$\frac{(y)^2\left[2(y+i)(y^2+p^2)+(y+i)^2 2y\right]}{(y+i)^4(y^2+p^2)^2}\Bigg|_{y=i}=$$

$$=\frac{2i}{(2i)^2(p^2-1)}-\frac{i^2\left[4i(p^2-1)+(2i)^2 2i\right]}{(2i)^4(p^2-1)^2}=-i\frac{p^2+1}{4(p^2-1)^2}.$$

Демак,

$$\int f(y)dy=2\pi i\left[\frac{ip}{2(1-p^2)^2}-\frac{i(p^2+1)}{4(1-p^2)^2}\right]=\frac{\pi}{2}\frac{\left(\sqrt{\frac{r_2}{r_1}}-1\right)^2 r_1^2}{\left(r_2-r_1\right)^2}.$$

Шундай қилиб, (6)-нинг ўрнида

$$\frac{k\pi}{2}\left(\sqrt{\frac{r_2}{r_1}}-1\right)^2 r_1=\pi\left(n_r+\frac{1}{2}\right) \qquad (7)$$

ҳосил бўлади. Агар $\lambda ka=t$ деб олсак, (7) - ни қуйидагича ёза оламиз

$$\frac{\lambda}{2t}\left[1-\sqrt{1-t^2}\right]\left(\sqrt{\frac{1+\sqrt{1-t^2}}{1-\sqrt{1-t^2}}}-1\right)^2=n_r+\frac{1}{2}$$

ёки

$$\lambda\frac{1-t}{t}=n_r+\frac{1}{2}.$$

Бундан

$$t=\frac{\lambda}{n_r+\lambda+\frac{1}{2}}$$

ёки

$$ka=\frac{1}{n_r+\lambda+\frac{1}{2}}$$

бўлади. Агар k,a,λ - лар ўрнига уларнинг ифодаларини қўйсак,

$$E=-\frac{me^4}{2h^2}\frac{1}{\left(n_r+\lambda+\frac{1}{2}\right)^2}$$

ва $n_r+\ell+1=n$ (бу ерда n -бош квант сон) эканлигини ҳисобга олсак, Кулон майдонида ҳаракат қилувчи электрон тўлиқ энергияси учун тўғри формулани оламиз

$$E_n=-\frac{me^4}{2h^2n^2}$$

Мустақил ишлаш учун масалалар

1.Ушбу тенгсизлик ниманинг шартини аниқлаб беради.

$$h\left|\frac{\sigma''}{\sigma'^2}\right|<<1\ ,\qquad \left|\frac{d}{dx}\left(\frac{h}{\sigma'}\right)\right|<<1$$

2. Қуйидаги

$$F=-\frac{dU}{dx}-$$

формула қандай майдондаги кучни ифодалайди.

3. Бор-Зоммерфелднинг квантлаш қоидасини тушунтириб беринг.
4. Қуйидаги

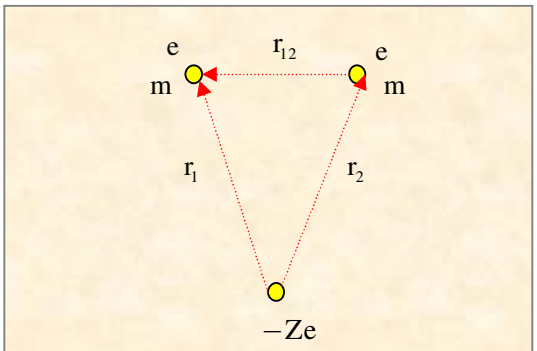
$$\frac{1}{h}\int_{b}^{a} p\,dx+\frac{\pi}{2}=(n+1)\pi, \qquad \int p\,dx=2\pi h\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

Формулалар нимани тавсифлайди.

XII-БОБ
ГЕЛИЙ АТОМИ НАЗАРИЯСИ

12.1. Гелий атомининг квант назарияси

Кўп электронли атомлар ичида Менделеев даврий системасининг энг кичик атоми бўлиб гелий атоми ҳисобланади. Гелий атомининг хусусиятларни тушунтиришда классик механика қонунлари ожизлик қилди. Ҳозирги замон квант механикаси олдида кўп электронли системалар масаласини қараб чиқишда, агар ҳисоблаш ишларидаги қийинчиликлар назарга олинмаса, амалда муҳим қийинчиликлар мавжуд эмас. Кўп электронли атом системаларининг классик механикада учрамайдиган асосий хусусиятлари шундан иборатки, электронлар бир-бирларига айнан ўхшаш бўладилар ва уларнинг спин хоссаси мавжуд бўлади.



12.1-расм

Бир электронли атомларда спин муҳим рол ўйнамайди, уни биринчи яқинлашишда ҳисобга олмаса ҳам бўлади. Шу сабабдан Бор назарияси бир электронли водородсимон атомларда содир бўладиган бир қанча ҳодисаларни муваффақият билан тушунтириб берган бўлсада, икки ва ундан ортиқ электронга эга бўлган системаларда юзага келадиган алмашинув жараёнларини ва спиннинг хусусиятларини тушунтиришга мутлақо ожиздир. Кўп электронли атомларда юзага келадиган ўзига хос кучларнинг туб маъноларини тушуниб етиш мақсадида гелий атоми масаласини қараб чиқамиз. Гелий атоми иккита электронга эга бўлиб, улар унинг ядроси атрофида ҳаракат қилади. Ядронинг массаси $m_я$ электрон массаси m_0 дан анча катта бўлгани учун ядронинг ҳаракатини ҳисобга олмаса ҳам бўлади. У ҳолда гелий атоми учун Гамильтон операторини

$$\hat{H} = \left(-\frac{h^2}{2m_0}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r_1}\right) + \left(-\frac{h^2}{2m_0} - \frac{Ze^2}{r_2}\right) + \left(\frac{e^2}{r_{12}}\right) \qquad (12.1)$$

кўринишда ёза оламиз. Бу ерда тенгликнинг ўнг тарафидаги биринчи ва иккинчи қавслар электронлар кинетик ва потенциал энергияларига, $\frac{e^2}{r_{12}}$ эса электронлар ўзаро тасир энергиясига тегишли, r_{12} - улар ўртасидаги масофа (12.1 – расм). Кўп электронли системалар учун Шредингер тенгламасининг аналитик ечими мавжуд эмас, аммо уни квант механикасининг тақрибий усулларидан фойдаланиб ечишга ҳаракат қиламиз. Қаралаётган системалар учун тақрибий усуллардан қўзғолиш назарияси ҳамда вариация усуллари кўпроқ ишлатилгани учун гелий атоми масаласини ушбу усуллар ёрдамида ечамиз. Қўзғолиш назариясига кўра, электронлар ўртасидаги ўзаро таъсирни қўзғотувчи таъсир деб оламиз ва (12.1) операторни

$$\hat{H} = \hat{H} + \hat{V} \qquad (12.2)$$

кўринишда ёзамиз. Бу ерда $\hat{V} = \frac{e^2}{r_{12}}$ ва

$$\hat{H}_0 = \left(-\frac{h^2}{2m_0}\nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1}\right) + \left(-\frac{h^2}{2m_0}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_2}\right) \qquad (12.3)$$

(12.3) қўзғолмаган ҳолат учун Гамилтон оператори. Қаралаётган усул назариясига кўра қўзғолмаган система учун Шредингер тенгламаси

$$\hat{H}_0\psi_0 = E_0\psi_0 \qquad (12.4)$$

нинг хусусий ечими ψ_0 ва хусусий қиймати E_0 маълум деб ҳисоблаймиз. (12.4) да $V = \frac{e^2}{r_{12}} = 0$ деб қаралгани учун, гелий атоми ядро заряди 2e бўлган иккита водород атомидан иборат болади. Агар гелий атомидаги биринчи электрон $\psi_n(r_1)$ ҳолатда, иккинчиси $\psi_m(r_2)$ ҳолатда жойлашса ва мос равишда E_n, E_m энергияларга эга бўлса, нолинчи яқинлашувда система

$$\psi_1^0 = \psi_n(r_1)\psi_m(r_2) \qquad (12.5)$$

тўлқин функцияси билан, $E = E_n + E_m$ энергия билан ифодаланади. Бу ерда электронлар ўртасидаги таъсир эътиборга олинмагани учун система ҳолат функциясини алоҳида электрон функциялари бўйича ўзгарувчиларга ажратиб ёздик. Электронлар айнан ўхшаш бўлганликларидан биринчи электрон $\psi_m(r_1)$ (E_m - энергияли) ҳолатда, иккинчи электрон эса $\psi_n(r_2)$ (E_n - энергияли) ҳолатда жойлашуви мумкин. У ҳолда

$$\psi_2^0=\psi_m(r_1)\psi_n(r_2) \qquad (12.6)$$

тўлқин функция ҳам система ҳолатини ифода этади. Ҳар иккала (12.5, 12.6) функциялар $\hat{H}_0$ операторнинг E_n+E_m энергияларга тегишли хусусий функциялари ҳисобланади

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\psi_1^0&=(E_n+E_m)\psi_1^0,\\ \hat{H}_0\psi_2^0&=(E_n+E_m)\psi_2^0.\end{aligned} \qquad (12.7)$$

Шундай қилиб, қўзғолмаган сустема $E^0=E_n+E_m$ энергияли (12.5, 12.6) функциялар билан ифодаланувчи иккита ҳолатга эга бўлади – ҳолатларнинг турланиши юзага келади. Ҳолатларнинг бундай турланиши *алмашинув турланиш* деб айтилади. Системанинг умумий функцияси турланиш функцияларининг суперпозициясидан иборат бўлади

$$\Phi(r_1,r_2)=C_1\psi_1^0+C_2\psi_2^0. \qquad (12.8)$$

Турланиш мавжуд бўлганда қўзғолиш назариясидан фойдаланиб, (12.8) даги C_1 ва C_2 амплитудалар учун қуйидаги бир жинсли тенгламаларга эга бўламиз

$$\begin{aligned}(E_{nm}^0+V_{11}-E)C_1+V_{12}C_2&=0,\\ V_{21}C_1+(E_{nm}^0+V_{22}-E)C_2&=0.\end{aligned} \qquad (12.9)$$

Бу ерда $E_{nm}^0=E_n+E_m$,

$$\begin{aligned}V_{11}=V_{22}&=\int\psi_1^{0*}\frac{e^2}{r_{12}}\psi_1^0\,d\vartheta_1\,d\vartheta_2=\int\psi_2^{0*}\frac{e^2}{r_{12}}\psi_2^0\,d\vartheta_1\,d\vartheta_2,\\ V_{12}=V_{21}&=\int\psi_1^{0*}\frac{e^2}{r_{12}}\psi_2^0\,d\vartheta_1\,d\vartheta_2=\int\psi_2^{0*}\frac{e^2}{r_{12}}\psi_1^0\,d\vartheta_1\,d\vartheta_2.\end{aligned} \qquad (12.10)$$

қўзғотувчи операторнинг матрица элементлари ҳисобланади, ва

$$\begin{aligned}d\vartheta_1&=dx_1dy_1dz_1,\\ d\vartheta_2&=dx_2dy_2dz_2\end{aligned}$$

(12.10) даги матрица элементларини $V_{11}=V_{22}=K$, $V_{12}=V_{21}=A$ орқали белгилаб, (12.9) тенгламалар системасининг нолга тенг бўлмаган ечими унинг коэффициентларидан ташкил топган детерминантнинг нолга тенг бўлиши зарурлиги тўғрисидаги теорема асосида ёза оламиз

$$\begin{vmatrix} K-\varepsilon & A \\ A & K-\varepsilon \end{vmatrix}=0. \qquad (12.11)$$

Бу ерда $\varepsilon=E-E^0_{nm}=E-(E_n+E_m)$. (12.11) ни очиб ёзамиз

$$(K-\varepsilon)^2-A^2=0,$$

бундан $\varepsilon = K \pm A$ эканлигини топамиз. Демак, $\varepsilon_1 = K + A$, $\varepsilon_2 = K - A$ илдизларга эга бўламиз. Шундай қилиб, электронлар ўртасидаги ўзаро таъсир кўзғолмаган системада мавжуд бўлган турланишни йўқотиб, система энергиясининг

$$E = E_n + E_m + K + A \quad \text{ва} \quad E = E_n + E_m + K - A$$

қийматларига олиб келади. Энди энергиянинг бундай қийматларига тўғри келувчи функцияларни топиш лозим. Бунинг учун энергиянинг ε_1, ε_2 қийматларини бирин-кетин (12.9) га қўямиз

$$\varepsilon = \varepsilon_1 = K + A$$

бўлганда

$$(K-\varepsilon_1)\, C_1 + A\, C_2 = 0, \qquad (12.12),$$
$$\varepsilon = \varepsilon_2 = K - A$$

бўлганда эса

$$A\, C_1 + (K-\varepsilon_2)\, C_2 = 0 \qquad (12.13)$$

эканлигини топамиз. Бу ерда (12.12) дан $C_1 = C_2$, (12.13) дан эса $C_1 = -C_2$ эканлиги келиб чиқади. Булардан

$$\hat{H}\Phi(r_1, r_2) = E\Phi(r_1, r_2) \qquad (12.14)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Шредингер тенгламасининг гелий атоми учун ечимларини топамиз

$$\Phi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^0 + \psi_2^0) \qquad (12.15)$$

симметрик функция энергиянинг

$$E_s = E_n + E_m + K + A \qquad (12.16)$$

қийматига,

$$\Phi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^0 - \psi_2^0) \qquad (12.17)$$

антисимметрик функция эса энергиянинг

$$E_a = E_n + E_m + K - A \qquad (12.18)$$

қийматига мос келади. Бу ерда $\frac{1}{\sqrt{2}}$ функцияларни нормаллаштирувчи коэффициент ҳисобланади. Чунки бу функциялар ортонормал функциялардир

$$\int \psi_1^{0*}\psi_1^0\, d\vartheta_1 d\vartheta_2 = \int \psi_2^{0*}\psi_2^0\, d\vartheta_1 d\vartheta_2 = 1, \quad \int \psi_1^{0*}\psi_2^0\, d\vartheta_1\, d\vartheta_2 = 0\,.$$

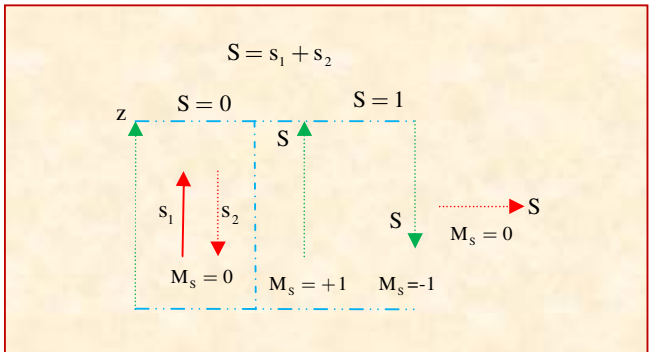
Биз гелий атоми учун Гамилтон операторини ёзганда электронлар спинларига тегишли бўлган ўзаро таъсирнинг кичик бўлганидан уни эътиборга олмаган эдик. Аммо кўп электронли системаларда электрон спинларининг муҳим роли мавжудлигини ҳисобга олмаслик ўринсиз бўлади. Шу сабабдан электрон спинини Шредингер тенгламаси

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

нинг хусусий функциясида ҳисобга оламиз

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{s}_1, \vec{s}_2)\,. \qquad (12.19)$$

Биз қараётган гелий атоми электронлардан ташкил топгани ва электронларнинг фермионлар эканлигини ҳисобга олсак, (12.19) функция антисимметрик функция билан ифодаланишини биламиз. Бундан ташқари, (12.19) функциядаги фазовий координаталар ва спин координаталар бир-бирига ўзаро боғлиқ бўлмаган ўзгарувчилар бўлганлиги учун бу функцияни ўзгарувчиларга ажратиб ёзиш мумкин бўлади



12.2-расм

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{s}_1,\vec{s}_2)=\Phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi(\vec{s}_1,\vec{s}_2) \text{ ёки } \Psi_a=\begin{Bmatrix}\Phi_a\ \chi_s\\ \Phi_s\ \chi_a\end{Bmatrix}. \qquad (12.20)$$

Бундан кўринадики, тўлқин функциясининг нафақат фазовий координаталарга тегишли қисмлари симметрик ва антисимметрик хоссага эга бўлади, шунингдек спин координаталарга тегишли функциялар ҳам худди шундай хоссаларга эга бўлади. Функциянинг спин ташкил этувчиси антисимметрик, яъни χ_a бўлганида атомда электрон спинлари қарама-қарши йўналган ва йиғинди спин нолга тенг бўлади. Аксинча, спин функция симметрик, яъни χ_s бўлганида йиғинди спин бирга тенг бўлади. Шундай қилиб, гелий атоми икки хил ҳолатда бўлишини кўрамиз: спини нолга тенг бўлган ҳолат – бу ҳолат *пара – гелий ҳолат* деб аталса, спини бирга тенг бўлган ҳолат эса *орто - гелий ҳолат* деб аталади (12.2-расм). Юқорида айтилганлардан хулоса қилиб, пара-электрон-гелийлар характеристикаларини ёза оламиз. Пара-гелий энергияси

$$E_{pg}=E_n+E_m+K+A,$$

унга мос келувчи ҳолат функцияси фазовий координата бўйича симметрик $\Phi_s=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^0+\psi_2^0)$, спин координата бўйича антисимметрик

$$\chi_a^*=S_{+1/2}(s_{z1})S_{-1/2}(s_{z2}),\ \ \chi_a^{**}=S_{-1/2}(s_{z1})S_{+1/2}(s_{z2}),\ \ \chi_a^{***}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_a^*-\chi_a^{**}),$$

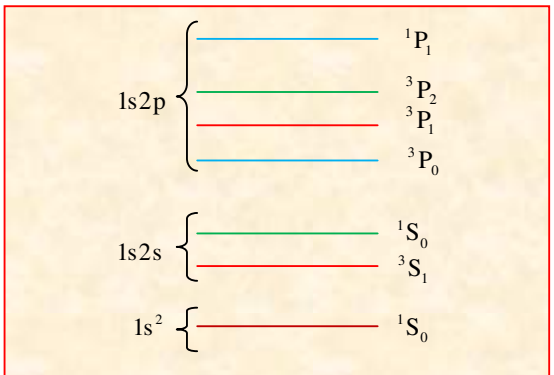
умумий спини s=0, мултиплет структураси – синглет бўлади. Орто-гелий энергияси

$$E_{og}=E_n+E_m+K-A,$$

унга фазовий координата бўйича $\Phi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{\,0} - \psi_2^{\,0})$, спин координата бўйича

$$\chi_s^{*} = S_{+1/2}(s_{z1})S_{+1/2}(s_{z2}),\ \chi_s^{**} = S_{-1/2}(s_{z1})S_{-1/2}(s_{z2}),\ \chi_s^{***} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_s^{\,*} + \chi_s^{\,**})$$

функциялар мос келади, умумий спини s=1, мултиплет структураси-триплет бўлади. Гелий атоми асосий ҳолатда пара-гелий ҳисобланиб, орто-гелий унинг уйғонган ҳолатига тўғри келади. Гелийнинг бу ҳолатлари ўртасидаги электрон фарқ $\Delta E = E_{pg} - E_{og} = 2A$ электрон бўлади. Биламизки, атом электрон сатҳлари *термлар* билан белгиланади. Термлар L, S, J квант сонлар тўплами $^{2S+1}L_J$ билан белгиланади. Бу ерда $2S+1$ термнинг мултиплетлигини кўрсатади (12.3-расм). Пара-гелий учун $^1S_0$, $^1P_1$,....термлар мумкин бўлса, орто-гелий учун $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$,... термлар мумкин бўлади. Пара-гелий учун $^3S_1$ терм мавжуд бўлмайди, чунки Паули принципи ундаги электрон конфигурация (1s,1s) да жойлашган икки электрон спинининг бир томонга йўналишини тақиқлайди. Гелий атомида пара-гелий ҳолатдан орто-гелий ҳолатига ўтиб туришлар кузатилмайди, чунки бундай ўтишлар спин ориентацияларининг ўзгаришини ва тўлқин функцияси координата қисми симметриясининг ўзгаришини талаб этади. Атом ҳолатида бундай тубдан ўзгаришлар фақатгина магнит ўзаро таъсирлар ҳисобига юзага келиши мумкин, лекин бундай ўзаро таъсирлар интенсивлиги гелий атомида жуда кучсиз ҳисобланади. Шу сабабдан табиатда гелий биз қайд қилган икки турдаги атомлар аралашмаси тариқасида учрайди.



12.3-расм

Орто-гелий атоми асосий ҳолатда нолдан фарқли магнит моментига эга бўлгани учун электрон хоссага эга бўлади, пара-гелий эса диамагнит ҳисобланади, чунки у асосий ҳолатида магнит хоссасини намоён этмайди. Гелийнинг бу икки тури спектрлари жиҳатидан ҳам фарқ қилишади, турли хил мултиплетликка эга бўлишини эса юқорида қайд қилган эдик. Энди пара-гелий ва орто-гелий энергиялари тўғрисида қисқача тўхталамиз. Юқорида кўрдикки, асосий ҳолатда пара-гелий энергияси орто-гелийникига нисбатан каттароқ бўлади, чунки пара-гелийнинг (1s, 1s) ҳолатида ундаги электронлар ўртасидаги масофа орто-гелийнинг (1s, 2s) ҳолатидаги электронлари орасидаги масофага нисбатан кичик бўлади ва шу сабабдан $\left(\frac{e^2}{r_{12}}\right)_{pg} \succ \left(\frac{e^2}{r_{12}}\right)_{og}$ эканлиги келиб чиқади.

12.2. Алмашинув энергияси

Гелий атоми масаласини қарар эканмиз, биз бу ерда фойдаланаётган «алмашув» атамасини фазо ва вақтда ҳолатлар ўртасида содир бўлаётган алмашув жараёни деб тўғридан-тўғри тушунмаслик керак. Бу квант механикасининг математик иборасига фақат кўргазмалилик бериш лозимлигидан ишлатилаётган атамадир, холос. Биз бу қараётган мавзуда қўзғотувчи оператор матрица элементлари ўрнида K, A интегралларини ишлатамиз

$$K=\int \psi_1^{0*}\frac{e^2}{r_{12}}\psi_1^{0}\,d\vartheta_1\,d\vartheta_2=\int \psi^*_n(r_1)\psi_m^*(r_2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi_n(r_1)\psi_m(r_{12})\,d\vartheta_1\,d\vartheta_2\,, \qquad (12.21)$$

$$.\,A=\int \psi_1^{0*}\frac{e^2}{r_{12}}\psi_2^{0}\,d\vartheta_1\,d\vartheta_2=\int \psi_n^*(r_1)\psi_m^*(r_2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi_n(r_2)\psi_m(r_1)\,d\vartheta_1\,d\vartheta_2\,. \qquad (12.22)$$

Бу ерда K - Кулон интеграли, A - алмашув интеграли деб юритилади. Ҳар иккала интеграллар гелий атомида электронларнинг кулон ўзаро тасирида юзага келадиган энергияга киритиладиган тузатмалар ҳисобланади. Бу интегралларнинг физик маъноларини ойдинлаштириш мақсадида уларга белгилашлар киритиб, бироз соддалаштирамиз

$$\rho_{nn}(r_1)=-e\left|\psi_n(r_1)\right|^2, \qquad \rho_{mm}(r_2)=-e\left|\psi_m(r_2)\right|^2 \qquad (12.23)$$

$$\rho_{mn}(r_1)=-e\,\psi_m(r_1)\,\psi_n(r_2)\,, \qquad \rho_{mn}^*(r_2)=-e\,\psi_m(r_2)\,\psi_n^*(r_1) \qquad (12.24)$$

(12.23) даги икки ҳад оддий физик маънога эга. Унинг биринчиси $\rho_{nn}(r_1)$ $\psi_n(r_1)$ ҳолатда жойлашган электрон томонидан r_1 нуқтада яратилган электр зарядининг ўртача зичлигини билдиради. Худди шундай $\rho_{mm}(r_2)$, $\psi_m(r_2)$ ҳолатдаги электроннинг r_2 нуқтада яратган электр зарядининг ўртача

зичлигидир. (12.24) даги $\rho_{mn}(r_1)$,$\rho_{mn}(r_2)$ катталиклар эса (12.23) даги катталиклар каби маънога эга бўлмайди. Улар ҳар бир электроннинг қисман $\psi_n(r_1)$ ҳолатда, қисман $\psi_m(r_2)$ ҳолатда бўлганида ҳосил қилган заряд зичликларидир. Биз бу катталикларни *алмашув зичликлари* деб атаймиз. Умумий ҳолда бу катталиклар комплекс бўлишлари ҳам мумкин, шунинг учун «заряд зичлиги» деб уларни аташимиз анча шартли бўлиб ҳисобланади. Киритилган (12.23-12.24) белгилашлар орқали (12.21-12.22) ларни қайта ёзамиз

$$K=\int\frac{\rho_{nn}(r_1)\rho_{mm}(r_2)}{r_{12}}d\vartheta_1\,d\vartheta_2,\quad A=\int\frac{\rho_{mn}(r_1)\rho_{mn}(r_2)}{r_{12}}d\vartheta_1\,d\vartheta_2 \qquad (12.25)$$

Бу ердаги K катталикнинг физик маъноси энди анча ойдинлашди: бу интеграл бири фазода ρ_{mm} зичлик билан тақсимланган, иккинчиси эса ρ_{mm} зичлик билан тақсимланган электронларнинг Кулон ўзаро таъсир энергиясидир. Бу ерда иккита нуқтавий зарядларнинг эмас, балки фазода заряди ёйилиб кетган, «булутсимон» икки электронларнинг ўзаро тасир энергияси деб тушунсак бўлади. (12.25) даги A катталик K каби маънога эга эмас. Бу катталикни ҳам фазода $\rho_{mn}(r_1),\rho_{mn}(r_2)$ зичлик билан тақсимланган икки заряднинг электростатик энергияси деб формал равишда ҳисоблаш мумкин, аммо бу ҳолда энди электронларнинг ҳар бири ўзаро таъсирлашаётган вақтда аниқ бир квант ҳолатда бўла олмайди, электронлар n квант ҳолатдан m ҳолатга ва аксинча ўтиб турадилар. Гўёки электронлар ҳолатларини алмаштириб туришади. Шу сабабли A *алмашинув энергияси* дейилади. Ҳолатлар ўртасидаги бундай алмашув жадаллигини аниқлаш учун зарраларнинг n, m ҳолатлар бўйича қатъий тақсимланган деб қараймиз ва бу ҳолатларга тўғри келувчи функцияларни қуйидагича стационар функциялар деб оламиз

$$\Phi_s=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1{}^0+\psi_2{}^0)\,e^{-\frac{i}{h}(E^0+K+A)t},\quad \Phi_a=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^0{}_1-\psi^0{}_2)\,e^{-\frac{i}{h}(E^0+K-A)t}. \qquad (12.26)$$

Бу ерда $E^0=E_n+E_m$. Қуйидагича алмаштириш ўтказамиз

$$\omega_0=\frac{E^0+K}{h},\quad \delta=\frac{A}{h}.$$

У ҳолда (12.26) даги функциялар суперпозицияси

$$\Phi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_s+\Phi_a)=\frac{1}{2}e^{-i\omega_0 t}\left\{\psi_1{}^0(e^{-i\delta t}+e^{i\delta t})+\psi_2{}^0(e^{-i\delta t}-e^{i\delta t})\right\} \qquad (12.27)$$

ёки

$$\Phi = C_1(t)\,\psi_1^{\,0} + C_2(t)\,\psi_2^{\,0} \qquad (12.28)$$

кўринишда бўлади. (12.28) да

$$C_1(t) = e^{-i\omega_0 t}\cos\delta t\ ,\ C_2(t) = e^{-i\omega_0 t}\sin\delta t\,. \qquad (12.29)$$

(12.29) даги амплитудалар модулларининг квадратлари, яъни $|C_1|^2 = w_1$,$|C_2|^2 = w_2$ мос равишда системанинг Ψ_1^0 (биринчи электроннинг n, иккинчи электроннинг эса m) ва (биринчи электроннинг m, иккинчи электроннинг n) ҳолатларда бўлиш эҳтимоллари ҳисобланади. Система эса узлуксиз равишда Ψ_1^0 ҳолатдан Ψ_2^0 ҳолатга ва аксинча ўтиб туради. Бундай ўтиш даври $\tau = \frac{1}{\delta} = \frac{h}{A}$ билан аниқланади. Бундан кўринадики, А катталик қанча катта бўлса, ҳолатлар ўртасидаги ўтишлар шунча жадал бўлади. Кулон интеграли электронлар ўзаро итаришувини ифода этгани учун у доимо мусбат ишорага эга бўлади. А нинг ишорасини аниқлаш учун қуйидагича фикр юритиб кўрамиз. Бу интегралга асосий салмоқни фазонинг шундай соҳалари қўшадики, қачонки у ерда электронлар ўртасидаги масофа нолга яқин бўлса, яъни электронлар координаталари бир-бирига мос тушса. Бундай ҳолатда электронлар функциялари бир-бирларини қоплаган бўлади ва интеграл ишораси мусбат аниқланган бўлади. Функцияларнинг бундай қопланиши бўлмаса, $A = 0$ бўлади. Келгусида вариация усулини қараб чиқамиз ва унинг ёрдамида гелий атомининг асосий ҳолат энергиясини ҳисоблаймиз. Гелий атоми учун қўзғолиш назарияси усули ва вариация усули натижаларини солиштириш мақсадида ҳозир биз стационар қўзғолиш назариясининг биринчи яқинлашувида гелий атоми қўполроқ бўлсада асосий ҳолат энергиясини ҳисоблаб чиқамиз. Фараз қилайлик, гелий атомидаги иккала электрон ҳам уйғонмаган - энг кичик энергияли ҳолатда, яъни $n = 1$ бўлган ҳолатда жойлашсин. Нолинчи яқинлашувда атом учун тўлқин функция заряди бўлган иккита водородсимон атомлар функциялари кўпайтмасига

$$\psi = \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2),$$

атом энергияси E_0 эса ана шундай водородсимон атомлар энергияси йиғиндисига тенг бўлади

$$E_0 = 2E_{1s}(Z=2) = -2\frac{Z^2}{2} = -4a.b = -4\frac{me^4}{h^2} = -4\times 27{,}18eV = -108{,}72eV\ .$$

Энди бу энергияга биринчи яқинлашувда тузатмани топамиз. Бу тузатма

$$E^{(1)}=V_{11}=\int \psi_{1s}^{*}(r_1)\psi_{1s}^{*}(r_2)\frac{1}{r_{12}}\psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)dv_1dv_2 \qquad (12.30)$$

формула билан ҳисобланади.

$$\psi=\psi_{1s}(r_1)\,\psi_{1s}(r_2)=\frac{Z^3}{\pi^2}e^{-Z(r_1+r_2)}\ . \qquad (12.31)$$

У ҳолда (12.30) интеграл

$$\left(dv_1 = r_1^2\, dr_1 \sin\theta_1 d\theta_1 d\varphi_1,\ dv_2 = r_2^2\, dr_2 \sin\theta_2\, d\theta_2\, d\varphi_1 \right)$$

$$E^{(1)}=\frac{Z^6}{\pi^2}\int_0^{¥} dr_1\int_0^{¥} dr_2\int_0^{2\pi} df_1\int_0^{2\pi} df_2\int_0^{\pi} d\theta_2\int_0^{\pi}\frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}}r_1^2r_2^2\sin\theta_2\ d\theta_1 \qquad (12.32)$$

бўлади. Бу ерда $r_{12}=\left|\vec{r}_1-\vec{r}_2\right|=\sqrt{r_1^2+r_2^2-2\vec{r}_1\vec{r}_2}=\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta_1}$ - атомдаги икки электрон ўрасидаги масофа. Энди (12.32) интегрални бирин-кетин ҳисоблаймиз

$$J=\int_0^{\pi}\frac{\sin\theta_1\, d\theta_1}{r_{12}}=\int_0^{\pi}\frac{\sin\theta_1\, d\theta_1}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta_1}}=-\int_1^{-1}\frac{dx}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2x}}=$$
$$\frac{1}{r_1r_2}\left\{\sqrt{r_1^2+r_2^2+2r_1r_2}-\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2}\right\}.$$

Охирги ҳад илдиздан чиқарилса (r_1-r_2) ёки (r_2-r_1) бўлиши мумкин, лекин ҳар иккала ҳолда ҳам натижа мусбат ишорали бўлмоғи керак. Шунинг учун

$$\left.\begin{matrix} r\succ r_2 \ \ \text{bo'lganda} \\ r\prec r_2 \ \ \text{bo'lganda}\end{matrix}\right\} J=\begin{cases}\dfrac{1}{r_1r_2}\left[(r_1+r_2)-(r_1-r_2)\right]=\dfrac{2}{r_1}\\ \dfrac{1}{r_1r_2}\left[(r_1+r_2)-(r_2-r_1)\right]=\dfrac{2}{r_2}\end{cases}$$

натижаларга эга бўламиз. (12.32) да r_2 бўйича интегрални

$$\int_0^{\infty} dr_2 \rightarrow \frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} dr_2+\frac{1}{r_2}\int_{r_2}^{\infty} dr_2$$

кўринишда иккига бўлиб ёзишга тўғри келади ва ахтарилаётган тузатма қуйидаги кўринишга эга бўлади

$$E^{(1)} = 16Z^6 \int_0^\infty e^{-2Zr_1} \left(\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-2Zr_2} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^\infty e^{-2Zr_2} r_2 dr_2 \right) r_1^2 dr_2 .$$

Бу ерда иштирок этаётган интеграллар ҳисоб натижалари қуйидагича

$$\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-2Zr_2} r_2^2 dr_2 = -\frac{e^{-2Zr_2}}{2Z} \left(r_1 + \frac{2}{2Z} + \frac{2}{4Z^2 r_1} \right) + \frac{2}{8Z^3 r_1};$$

$$\int_{r_1}^\infty e^{-2Zr_2} r_2 dr_2 = \frac{e^{-2Zr_2}}{2Z} \left(r_1 + \frac{1}{2Z} \right).$$

Натижада

$$E^{(1)} = 16z^6 \int_0^\infty e^{-2zr_1} \left[\frac{1}{4z^3 r_1} - \frac{e^{-2zr_1}}{4z^2} \left(1 + \frac{1}{zr_1} \right) \right] r_1^2 dr_2 =$$
$$= 4Z^4 \left[\int_0^\infty \frac{e^{-2Zr_1}}{Z} r_1 dr_1 - \int_0^\infty e^{-4Zr_1} \left(1 + \frac{1}{Zr_1} \right) r_1^2 dr_1 \right] = \frac{4Z^4}{4Z^3} \left(1 - \frac{1}{8} - \frac{1}{4} \right) = \frac{5}{8} Z. \qquad (12.33)$$

Демак, $E^{(1)} = \frac{5}{8} Z$. Шундай қилиб, биринчи яқинлашувда гелий атом энергияси

$$E = E_0 + E^{(1)} = -Z^2 + \frac{5}{8} Z = -Z\left(Z - \frac{5}{8} Z \right) = -2\left(2 - \frac{5}{8} \right) \text{a.b.} =$$
$$= -\frac{11}{4} \text{a.b.} = -\frac{11}{4} \cdot 27{,}18 \text{ eV} = -74{,}74 \text{ eV}.$$

Бу энергиянинг тажрибада ўлчанган қиймати $E_{таж}$=-78,66 эВ. Демак, назария ва тажриба натижалари орасидаги фарқ 3,82 эВ ни ташкил этади, ёки назария 4,86% хатоликка йўл қўяди.

12.3. Гелий атоми учун вариация усули

Кўп электронли системалар масаласини ечишда кенг қўлланиладиган тақрибий усуллардан яна бири бўлган *вариация усулини* кўриб ўтамиз. Гелий атоми мисолида берилган системанинг хусусий энергиясини вариация усули воситасида топишнинг моҳиятини қисқача баён этамиз. Бу масала энергиянинг ўртача қийматининг минимумини топишга асослангандир, яъни

$$\overline{H} = \int \psi^* \hat{H} \psi \, d\tau, \quad \delta\overline{H} = \delta \int \psi^* \hat{H} \psi \, d\tau = 0 \qquad (12.34)$$

Бу эрда $\delta\overline{H}$ - энергия ўртача қийматининг вариациясини ифода этади. Агар ушбу ҳол учун Шредингер тенгламасининг аниқ ечими мавжуд бўлса, у

вақтда $\overline{H}$ бу тенгламанинг хусусий қиймати ҳисобланган E нинг қийматига мос келади ва (12.34) интегрални ҳисоблаб ўтиришга ҳожат қолмайди. Лекин берилган масала учун Шредингер тенгламасининг ечими мавжуд бўлмаса (12.34) тенглама бу масалани маълум яқинлашишда ечиш имкониятини беради. Агар масаланинг тақрибий ечими маълум бўлса, у ҳолда Ψ нинг бу ечимини гамилтониан (12.34) га қўйиб, энергия ўртачасининг минимал қиймати ҳисобланади. Мабодо бизга Шредингер тенгламасининг тақрибий ечими ҳам маълум бўлмаса, масала моҳиятидан келиб чиққан ҳолда ечимни ифода этувчи ихтиёрий тўлқин функция танлаб олиниб, бу функция ўз ичига битта ёки бир неча параметрларни олиши мумкин бўлади. Шундай қилиб, шу параметр ёки параметрга боғлиқ бўлган энергиянинг экстремал қиймати (12.34) формула орқали ҳисобланади.

Ана шу усул воситасида ечиладиган гелий атоми масаласини қараб чиқайлик. Киритиладиган параметр тариқасида ядронинг ўзгарувчан зарядини олайлик, яъни, ядро атрофида ҳаракат қилаётган электронлар ўзаро бир-бирларини ядро электр таъсиридан тўсиб қолиши, натижада тўсилган электронга ядро таъсирининг камайиши мумкин деб фараз қиламиз. Шу мақсадда ядро заряди Ze ни $(Ze)\lambda$ га алмаштирамиз. Бу ерда λ биз киритаётган параметр бўлиб, у нолдан биргача, яъни $0 \le \lambda \le 1$ қийматларни қабул қилади. Бу ҳолда, гелийдаги электронлар ядронинг тўлиқ таъсирида бўлмасдан, унинг бироз камайган, яъни эффектив майдонида ҳаракат қилаётган бўлади. Энергиянинг минимал қийматини бу параметр орқали топиш билан биз ядронинг электронларга берадиган ҳақиқий майдонини ҳосил қилувчи эффектив зарядини баҳолай олган бўламиз. Бунинг учун Шредингер тенгламасининг тақрибий ечимини танлаб оламиз ва унда $Z \to Z\lambda$ алмаштириш ўтказамиз (биз атом бирлигида ҳисобларни бажарамиз ва Ze ни Z деб ёзамиз)

$$\psi(\lambda) = \frac{(Z\lambda)^3}{\pi} e^{-Z\lambda(r_1 + r_2)} \quad . \tag{12.35}$$

Ўзгарувчан зарядли (12.35) ечим мос келадиган гамилтониан ҳам ядронинг ўзгарувчан зарядига бўғлиқ бўлади. (12.35) ечим қўзғолмаган гелий атоми учун Шредингер тенгламасининг ечими бўлгани учун гамилтониан электронлар ўртасидаги ўзаро таъсирга боғлиқ бўлмайди

$$\hat{H}_0(\lambda) = -\frac{1}{2}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) - \frac{Z\lambda}{r_1} - \frac{Z\lambda}{r_2}. \tag{12.36}$$

Гелий атоми учун тўлиқ (ҳақиқий) гамилтониан эса электронлар ўртасидаги ўзаро таъсирни ҳам ўз ичига олади

$$\overline{H} = -\frac{1}{2}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \tag{12.37}$$

ва унинг ўртача қиймати эса (12.35) функция орқали ҳисобланади

$$\bar{H}=-\frac{(Z\lambda)^6}{\pi^2}\int\ldots\int e^{-Z\lambda(r_1+r_2)}\left[-\frac{1}{2}\left(\nabla_1^2+\nabla_2^2\right)-Z\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{1}{r_{12}}\right]\cdot e^{-Z\lambda(r_1+r_2)}dv_1dv_2 \qquad (12.38)$$

(12.37) даги тўлиқ гамилтонианга $Z\lambda\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)$ ни қўшамиз ва айирамиз

$$H=-\frac{1}{2}\left(\nabla_1^2+\nabla_2^2\right)-Z\lambda\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)-Z(1-\lambda)\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{1}{r_{12}} \qquad (12.39)$$

(12.39) нинг дастлабки икки ҳади қўзғолмаган гамилтониан ҳисобланади. Шунинг учун унинг ўртача қиймати қўзғолмаган тенглама ечимига мос келувчи хусусий қийматни - заряди Zλ бўлган водородсимон атом энергиясининг иккиланган қийматини беради. Шундай қилиб, тўлиқ гамилтониан ўртача қийматини ҳисоблашимиз учун (12.39) нинг охирги уч ҳадини ўз ичига олувчи қуйидаги интегралларни ҳисоблашимизга тўғри келади

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\hat{H}_0(\lambda)-Z(1-\lambda)\int_0^\infty\frac{e^{-2Z\lambda r_1}}{r_1}r_1^2dr_1\int_0^\pi\sin\theta_1d\theta_1\int_0^{2\pi}d\varphi_1\int_0^\infty e^{-2Z\lambda r_2}r_2^2dr_2\cdot\\ &\cdot\int_0^\pi\sin\theta_2d\theta_2\int_0^{2\pi}d\varphi_2\int_0^\infty e^{-2Z\lambda r_2}-Z(1-\lambda)\int_0^\infty\frac{e^{-2Z\lambda r_1}}{r_1}r_1^2dr_1\int_0^\pi\sin\theta_1d\theta_1\int_0^{2\pi}d\varphi_1\int_0^\infty\frac{e^{-2Z\lambda r_2}}{r^2}r_2^2dr_2\cdot\\ &\cdot\int_0^\pi\sin\theta_2d\theta_2\int_0^{2\pi}d\varphi_2+\int_0^\pi\int_0^\pi\sin\theta_1d\theta_1\sin\theta_2d\theta_2\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi}d\varphi_1d\varphi_2\int_0^\infty\frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{r_{12}}r_1^2dr_1r_2^2dr_2\end{aligned} \qquad (12.40)$$

(12.40) нинг дастлабки икки интеграли бир-бирига тенг. Бу интеграллар оддий ва

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r}r^ndr=\frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

типдаги интеграллардир. Шунинг учун

$$\begin{gathered}\int_0^\infty e^{-2Z\lambda r}rdr=\frac{1}{(2Z\lambda)^2};\quad\int_0^\infty e^{-2Z\lambda r}r^2dr=\frac{2}{(2Z\lambda)^3}\\ \int_0^\infty\frac{e^{-2Z\lambda(r_1+r_2)}}{r_{12}}r_1^2dr_1r_2^2dr_2=\frac{5}{8}Z\lambda\end{gathered}, \qquad (12.41)$$

(12.41) даги интеграл олдинги мавзуда ҳисобланган эди, бу ерда фақат $Z \to Z\lambda$ алмаштириш олинади, холос. Топилган барча интеграл қийматларини (12.40) қўйиб, $\bar{H}_0(\lambda)=-(Z\lambda)^2$ эканлигини ҳисобда олиб, топамиз

$$\bar{H}=-(Z\lambda)^2-2Z^2\lambda+2(Z\lambda)+\frac{5}{8}Z\lambda=(Z\lambda)^2-2Z^2\lambda+\frac{5}{8}Z\lambda \qquad (12.42)$$

(12.42) ни λ бўйича вариациялаймиз

$$\delta\bar{H}=2Z^2\lambda-2Z^2+\frac{5}{8}Z=0,$$

бундан

$$Z\lambda=Z-\frac{5}{16}$$

эканлигини топамиз. Бу қийматни (12.42) га қўямиз

$$\bar{H}=\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2-2Z\left(Z-\frac{5}{16}\right)+\frac{5}{8}\left(Z-\frac{5}{16}\right)=-\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2 a.b..$$

Гелий учун Z=2 бўлганидан

$$\bar{H}=\bar{E}=-\left(2-\frac{5}{16}\right)^2 \text{a.b.}=-\left(\frac{27}{16}\right)^2\cdot 27.18 \text{ эВ}=-77.42 \text{ эВ}.$$

Демак, вариация усули билан ҳисобланган қиймат қўзғолиш назарияси билан ҳисобланган қийматдан анча қулай бўлар экан. Бу ерда ҳисобланган $\bar{E}$ тажриба натижасидан 1,24 эВ га ёки $\sim 2\%$ га фарқ қилар экан.

Назорат саволари

1. Гелий атоми нега Бор назарияси ёрдамида тадқиқ қилиб бўлмайди?
2. Парагелий ва ортогелий ҳолатлар йиғиндиси спинлари нимага тенг?
3. Гелий атомини қандай усуллар билан тадқиқ қилинади?
4. Алмашув ва Кулон интеграллари нималари билан фарқ қилишади?

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 Масала. Ихтиёрий параметр тариқасида ядронинг тўлиқ бўлмаган заряди танлаб олиниб, гелий атоми энергиясининг энг кичик умумий қиймати топилсин.

Ечиш. Бизга маълумки, гелий атоми учун Шредингер тенгламасининг ечими

$$\Psi\left(r_1, r_2\right) = \frac{z^3}{\pi a^3} e^{-\frac{z}{a}(r_1 + r_2)} \tag{1}$$

кўринишда ёзилади. Бу ерда z гелий атомининг тартиб сони, $a = \frac{h^2}{me^2} \approx 0{,}53A^\circ -$ Бор бўйича водород атоми учун биринчи радиус. Вариация усули билан гелий атоми масаласини ечиш учун масала шартига асосан (1) -функцияга кирадиган параметр λ тариқасида ядронинг ўзгарувчи зарядини танлаб оламиз

$$ze \to ze\lambda \qquad \left(\text{ёки} \quad z \to z\lambda\right).$$

Бу ерда λ: 0 ва 1 оралиғида ўзгаради, яъни $0 \le \lambda \le 1$. Берилган ҳолда биз гелий атомидаги ҳар бир электронга ядронинг тўлиқ заряди эмас, балки бироз камайган заряди таъсир этади деб ҳисоблаган бўламиз. Шундай қилиб, синовчи функция тариқасида (1) - функцияни бироз ўзгартириб ёзамиз

$$\Psi\left(\lambda, r_1, r_2\right) = \frac{(z\lambda)^3}{\pi a^3} e^{-\frac{z\lambda}{a}(r_1 + r_2)} \tag{2}$$

Гелий атоми учун Гамилтон оператори қуйидагича ёзилади

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_{12}} \tag{3}$$

Бу ерда $-\frac{h^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)$ атомидаги электронлар кинетик энергияси, $ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$ уларнинг потенциал энергиялари, $\frac{e^2}{r_{12}}$- электронларнинг r_{12} масофадан туриб ўзаро таъсирига тўғри келувчи энергия. (2) - да шунга эътибор бериш керакки, z иштирок этган ҳадда λ параметри ёзилмаган, биз

бу параметрни фақат тўлқин функциясида ишлатамиз. Энди энергиянинг ўртача қийматини (2) - функция ёрдамида топамиз

$$< E(\lambda) >= \int \Psi^*(\lambda, r_1, r_2)\hat{H}(r_1, r_2)dr_1dr_2 = = \frac{(z\lambda)^6}{(\pi a^3)^2}\int e^{-\frac{z\lambda}{a}(r_1+r_2)}\left[-\frac{h^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-\right.$$

$$\left.-ze^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{r_{12}}\right]e^{-\frac{z\lambda}{a}(r_1+r_2)}dr_1dr_2 = \frac{(z\lambda)^6}{(\pi a^3)^2}\left\{-\frac{h^2}{2m}16\pi^2\left[\int_0^\infty\left|\nabla_1 e^{-\frac{z\lambda}{a}r_1}\right|^2 r_1^2dr_1\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_2}r_2^2dr_2+\right.\right.$$

$$\left.+\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_1}r_1^2dr_1\int_0^\infty\left|\nabla_2 e^{-\frac{z\lambda}{a}r_2}\right|^2 r_2^2dr_2\right]-16\pi^2ze^2\left[\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_1}r_1dr_1\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_2}r_2^2dr_2+\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_2}r_2\,dr_2\times\right.$$

$$\left.\left.\times\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_1}r^2{}_1dr_1\right]\right]+e^2 16\pi^2\int_0^\infty\frac{e^{-\frac{z\lambda}{a}(r_1+r_2)}}{r_{12}}r_1^2r_2^2dr_1dr_2\right\}$$

(3)-даги интегрални

$$\int_0^\infty e^{-\beta r}r^n dr = \frac{n!}{\beta^{n+1}}$$

асосида ҳисоблаймиз.

$$1)\ \int_0^\infty\left|\nabla_1 e^{-\frac{2\lambda}{a}r_1}\right|^2 r_1^2dr_1 = \left(\frac{2\lambda}{a}\right)^2\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_1}r_1^2dr_1 = \left(\frac{2\lambda}{a}\right)^2\frac{2}{\left(\frac{2z\lambda}{a}\right)^3} = \frac{a}{4z\lambda};$$

$$2\ \int_0^\infty\left|\nabla_2 e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_2}\right|^2 r_2^2dr_2 = \frac{a}{4z\lambda};$$

$$3)\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_1}r_1^2dr_1 = \int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_2}r_2^2dr_2 = \frac{2a^3}{(2z\lambda)^3} = \frac{a^3}{4(z\lambda)^3};$$

$$4)\int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_1}r_1dr_1 = \int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_2}r_2dr_2 = \frac{a^2}{4(z\lambda)^2};$$

$$5)\int_0^\infty\frac{1}{r_{12}}e^{-\frac{2z\lambda}{a}(r_1+r_2)}r_1^2r_2^2dr_1dr_2 = I;$$

Охирги интегрални қуйидагича ҳисоблаймиз. Бу ерда $r_{12} = \sqrt{(\vec{r}_1-\vec{r}_2)^2} = \sqrt{(\vec{r}_2-\vec{r}_1)^2}$ бўлгани учун $r_1 > r_2$ ёки $r_2 > r_1$ бўлган ҳоллар мавжуд бўлиши мумкин. Агар $r_1 > r_2$ бўлса, интегралдаги r_2 бўйича чегара 0 дан то r_1 гача ўзгариши мумкин ва $r_{12} = r_1$ деб олинади. Агар $r_2 > r_1$ бўлса, r_2 бўйича интегрални r_1 дан то ∞ гача олинади ва $r_{12} = r_2$ деб ҳисоблаш мумкин бўлади. Шундай қилиб,

$$I=\int_0^\infty \frac{1}{r_{12}} e^{-\frac{2z\lambda}{a}(r_1+r_2)} r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 = \int_0^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_1} r_1^2 dr_1 \left[\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_2} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^\infty e^{-\frac{2z\lambda}{a}r_2} r_2 dr_2 \right.$$

Ўрта қавс ичидаги интегралларни бўлаклаб интеграллаймиз. Гелий атоми учун z=2 бўлганидан

$$<E(\lambda)>=-\frac{4h^2}{ma^2}\lambda^2-\frac{8e^2}{a}\lambda+\frac{5e^2}{4a}\lambda==-\frac{4h^2}{ma^2}\lambda^2-\frac{27e^2}{4a}\lambda$$

$$\left.\frac{\partial <E(\lambda)>}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_0}=-\frac{3h^2}{ma^2}\lambda_0-\frac{27e^2}{4a}=0$$

.

Бундан $\lambda_0=-\frac{27mae^2}{32h^2}$ эканини топамиз. Буни $<E(\lambda)>|_{\lambda=\lambda_0}$ га қўйиб, $<E>_{min}$ ни топамиз

$$<E>_{min}=-\frac{4h^2}{ma^2}\left(\frac{27mae^2}{32h^2}\right)^2+\frac{27e^2}{4a}\left(\frac{27mae^2}{32h^2}\right)=-\left(\frac{27}{32}\right)^2(4-8)\frac{me^4}{h^2}=-2\cdot 4\left(\frac{27}{32}\right)^2\frac{me^4}{2h^2}=$$

$$=-8\cdot 0,7\cdot 13,6\ \text{эВ}=-76,16\ \text{эВ}$$

$$E_0^{экс}=-78,98\text{эВ},\qquad \Delta E=\left|E_0^{экс}-<E>_{min}\right|=2,82\text{эВ}.$$

Вариация усулидаги нисбий хато $\frac{\Delta E}{\left|E_0^{экс}\right|}100\%=3,57\%$ ни ташкил этар экан.

2 Масала. Гелий атоми ҳолати олдинги масалада қаралган

$$\Psi(\lambda,r_1,r_2)=\frac{(z\lambda)^3}{(\pi a^3)}\exp\left[-\frac{z\lambda}{a}(r_1+r_2)\right]$$

Тўлқин функция орқали ифодаланганда бу атом учун ионланиш энергиясини ҳисобланг.

Ечиш. Бир марта ионлашган гелий атоми He^+ учун Гамилтон оператори

$$\hat{H}=-\frac{h^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{ze^2}{r}$$

бўлади ва унинг учун хусусий қиймат водород атоми энергияси кўринишдаги формула билан аниқланади:

$$E_n = -\frac{z^2}{n^2}\frac{me^4}{2h^2} = -\frac{z^2}{n^2}Ry,$$

Бу ерда $Ry = \frac{me^4}{2h^2} = 13{,}59$эВ. Асосий ҳолат учун n=1 ва $E_1 = -z^2 Ry$ гелий иони учун $z=2$ бўлганида

$$E_1\left(He^+\right) = -4Ry$$

Агар биз олдинги масалада He атоми учун ҳисобланган $<E>_{min}$ қийматини эсга олсак:

$$<E>_{min}(He) = -76{,}16\text{эВ} = -5{,}60Ry$$

бўлар эди. У ҳолда He атомининг ионланиш энергияси

$$E_{ион} = \left|E_1\left(He^+\right) - <E>_{min}(He)\right| = 1{,}60Ry = 21{,}7\text{эВ}$$

га тенг бўлар экан.

Мустақил ишлаш учун масалалар

1. $U(x) = U_0 x^4$ потенциал майдонда ҳаракат қилаётган зарра ҳолати $\Psi(x,\lambda) = Ae^{-\frac{x^2}{2\lambda^2}}$ тақрибий функция билан ифодаланса, зарра энергиясининг энг кичик қиймати ҳисоблансин.
2. Уч ўлчамли осциллятор ҳолати

$$\Psi(x,\lambda) = A(1+\lambda r)e^{-\lambda r}$$

тақрибий функция билан ифодаланса, бу осциллятор энг қуйи сатҳи учун энергия қиймати топилсин.

XIII-БОБ
КЛЕЙН-ГОРДОН ТЕНГЛАМАСИ

13.1. Клейн-гордон тенгламаси

Атом ичкарисида содир бўладиган кўпгина ҳодисаларда, ҳатто электронларнинг кичик тезликларида ҳам релятивистик эффектларни ҳисобга олишга тўғри келади. Релятивистик табиатга эга бўлган ана шундай катталиклардан бири бўлиб спин ҳисобланади. Шунинг учун ҳам спин электронларнинг кичик тезликларида ҳам ҳисобга олиниши лозим. Кўпчилик атомларда электронлар тезлиги нисбатан кичик бўлади. Масалан, гелий атомида электронлар тезлиги ёруғлик тезлигининг тахминан 0,02 қисмига тенг бўлади. Лекин оғир атомларнинг ички қатламларидаги электронлар тезлиги анча катталиги туфайли, бундай ҳолатда электрон массасининг ўзгариши сезиларли даражага етади ва бу ўзгаришни эътиборга олишга тўғри келади.

Маълумки, нисбийлик принципи табиат ҳодисаларини ифода этувчи тенгламалардан уларнинг барча координата системаларда бир хил бўлишлигини талаб этади. Агар тенглама Галилей алмаштиришларига нисбатан ўз кўринишини ўзгартирмаса (инвариант бўлса), бу тенглама, албатта норелятивистик тенглама бўлади. Агарда у Лоренц координата алмаштиришларига нисбатан инвариант бўлса релятивистик тенглама ҳисобланади. Шредингер тенгламаси Галилей алмаштиришларига нисбатан инвариант, Лоренц алмаштиришларига нисбатан эса ноинвариант ҳисобланганлиги учун у норелятивистик тенглама бўлади. Бошқа томондан, релятивистик инвариант тенгламалар таркибига вақт ва координата бўйича ҳосилалар бир хил тартибда кирган бўлади. Шредингер тенгламасини қуйидагича ёзамиз

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi \ . \qquad (13.1)$$

Бу тенгламада вақт бўйича биринчи тартибли, фазовий координата бўйича иккинчи тартибли ҳосила кирганлигини кўрамиз. Иккинчи томондан, Шредингер тенгламаси зарра энергияси E ва импулси p ўртасидаги норелятивистик муносабат

$$E = \frac{p^2}{2m} + U \qquad (13.2)$$

асосида қурилгандир. Энергия ва импулс ўртасидаги релятивистик муносабат эса

$$E^2 = c^2p^2 + m_0{}^2c^4 \qquad (13.3)$$

кўринишга эга бўлади (бу ерда m_0 - зарранинг тинч массаси). Агар $E \to \hat{E} = ih\frac{\partial}{\partial t}$, $p \to \hat{p} = -ih\nabla$ эканлигини эсласак, (13.3) тенгликни

$$-h^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = (-c^2h^2\nabla^2 + m_0^2c^4)\psi \qquad (13.4)$$

шаклдаги тенглама тариқасида ёзса бўлади. (13.4) нинг ҳар иккала тарафини c^2h^2 га бўлиб, $k_0{}^2=(m_0c/h)^2$ белгилаш киритсак, у ҳолда

$$\nabla^2\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - k_0^2\psi = 0 \qquad (13.5)$$

ҳосил қиламиз. Бу тенгламанинг дастлабки икки ҳади Даламбернинг тўлқин тенгламасидаги ҳадларга мос келади. Даламбер тенгламасининг релятивистик инвариантлиги эса электродинамикадан маълум. (13.5) даги $k_0^2\Psi$ ҳад ҳам релятивистик хоссага эга, чунки $k_0^2 = \text{const}$ - скаляр катталикдир. Бу тенглама *Клейн-Гордон тенгламаси* деб аталади. Агар зарра электромагнит майдонда ҳаракат қилса, $E \to E - e\varphi$, $\vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ алмаштириш ўтказишга тўғри келади ва (13.5) тенглама қуйидаги кўринишни олади

$$\left\{\left(ih\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)^2 + c^2\left(ih\nabla + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - k_0{}^2\right\}\psi = 0. \qquad (13.6)$$

13.2. Узлуксизлик тенгламаси.

Клейн-Гордон тенгламасидан заряд ва ток зичликларини электромагнит майдон бўлмаган ҳолда ($\varphi = \vec{A} = 0$) топамиз. Шредингер тенгламасидагидек, бу ерда ҳам узлуксизлик тенгламасидан фойдаланмиз

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \text{div}\vec{j} = 0. \qquad (13.7)$$

Клейн-Гордон тенгламасини

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \nabla^2\psi - \frac{m_0{}^2c^2}{h^2}\psi$$

шаклда ёзиб, унинг қўшмасини оламиз

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi^+}{\partial t^2}=\nabla^2\psi^+-\frac{m_0^2c^2}{h^2}\psi^+ \ .$$

Чап томондан (13.2) ни ψ^+ га, (13.3) ни эса ψ га кўпайтириб, уларни бир-биридан айирсак

$$\frac{1}{c^2}\left(\psi^+\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}-\psi\frac{\partial^2\psi^+}{\partial t^2}\right)=\psi^+\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^+,$$

ёки

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\frac{\partial\psi^+}{\partial t}\right)=\nabla\left(\psi^+\nabla\psi-\psi\nabla\psi^+\right).$$

(13.5) да заряд зичлиги ва ток зичлиги учун қуйидаги белгилашларни киритамиз

$$\rho=\frac{ieh}{2m_0c^2}\left(\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\frac{\partial\psi^+}{\partial t}\right),$$
$$\vec{j}=\frac{eh}{2im_0}\left(\psi^+\nabla\psi-\psi\nabla\psi^+\right).$$

Демак, (13.1) узлуксизлик тенгламаси ўринли бўлганда, ундаги $r, \vec{j}$ лар (13.6, 13.7) кўринишга эга бўладилар. Агар (13.6) да $ih\frac{\partial}{\partial t}\to E$ алмаштириш ўтказсак

$$\rho=\frac{eE}{m_0c^2}\psi^+\psi \qquad (13.8)$$

шаклини олади ва норелятивистик яқинлашувда $E\approx m_0c^2$ бўлгани учун $\rho\approx e\psi^+\psi$ одатдаги Шредингер назариясидаги кўринишни олади. Шуни қайд қилиб ўтамизки, Клейн-Гордон тенгламаси электрон спинини ҳисобга олмайди. Шунинг учун бу тенглама спини нолга тенг бўлган зарраларнинг релятивистик тенгламаси ҳисобланади.

13.3. Водородсимон атомларнинг релятивистик назарияси

Водородсимон атомлар учун Клейн-Гордон тенгламасини кўриб чиқамиз. Бундай атомлардаги майдон сферик симметрияга эга бўлгани учун

$$\vec{A}=0,\quad \varphi=-\frac{Ze}{r}$$

бўлади ва Гамилтон оператори

$$\hat{H}_{K\text{-}G}=c\sqrt{\hat{p}^2+m_0{}^2c^2}-\frac{Ze^2}{r}$$

кўринишда берилади ва стационар ҳолатда жойлашган система учун Клейн-Гордон тенгламасини ёзамиз

$$\left[\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)^2+h^2c^2\nabla^2-m_0{}^2c^4\right]\psi=0\ .$$

Сферик координата системасида Лаплас операторини ёза оламиз

$$\nabla^2=\nabla_r{}^2+\frac{1}{r^2}\nabla^2{}_{\theta,\varphi}\,.$$

(13.2) даги функцияни ўзгартувчиларга ажратиб, уни қуйидаги шаклда ёзамиз

$$\psi=\frac{1}{r}u_\ell(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi),\quad \nabla_{\theta,\varphi}{}^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=-\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\ .$$

(13.4) ни ҳисобга олиб, (13.2) тенгламани қайта ёзамиз

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2Z\alpha E}{ch\,r}-\frac{\ell(\ell-1)-Z^2\alpha^2}{r^2}-\frac{m_0{}^2c^4-E^2}{c^2h^2}\right]u_\ell(r)=0.$$

Бу ерда $\alpha=1/137$ - нозик структура доимийси. (13.5) да алмаштиришлар ўтказамиз

$$\rho=\beta r,\quad \beta=\frac{\alpha E}{hc},\quad \varepsilon=\frac{E^2-m_0{}^2c^4}{h^2c^2}\ .$$

У ҳолда охирги тенглама

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\varepsilon-\frac{2Z}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)-\alpha^2Z^2}{\rho^2}\right)u_\ell(r)=0$$

кўринишга келади. Водородсимон атомлар ҳолидаги тенгламага келтириш учун (13.7) да қуйидагича алмаштириш ўтказамиз

$$\ell'(\ell'+1)=\ell(\ell+1)-\alpha^2Z^2=\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2Z^2-\frac{1}{4}.$$

Натижада (13.7) тенглама анча соддалашади ва водородсимон атомлар учун Шредингер тенгламасига келади

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2}+\varepsilon+\frac{2Z}{\rho}-\frac{\ell'(\ell'+1)}{\rho^2}\right)u_\ell(\rho)=0.$$

Аввал кўрганимиздек, бу тенгламанинг ечимини

$$u_\ell(\rho)=e^{-\gamma\rho}f_{\ell'}(\rho),\quad f_{\ell'}(\rho)=\rho^{\ell'+1}\sum_k a_k\rho^k$$

(бу ерда $\gamma=\sqrt{-\varepsilon}$) кўринишда ахтарамиз ва бизга маълум бўлган

$$2\gamma(n_r+\ell'+1)-2Z=0$$

тенгликка эга бўламиз. Бундан

$$n'=n_r+l'+1=n_r+\frac{1}{2}+\sqrt{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2Z^2}$$

Ёки

$$\gamma=\frac{Z}{n'},\ \gamma^2=\frac{Z}{n'}=-\varepsilon$$

эканлигини топамиз. Шундай қилиб, релятивистик яқинлашувда энергия учун

$$E_{nl}=m_0c^2\left\{\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{\left(n_r+\frac{1}{2}+\sqrt{\left(1+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2}\right)^2}\right]^{-\frac{1}{2}}-1\right\}$$

формулани ҳосил қиламиз. Бу формулани $Z^2\alpha^2$ бўйича қаторга ёйиб, дастлабки нолга айланмовчи икки ҳадни сақлаб қолган ҳолда энергия спектрини топамиз

$$E_{nl} = -\frac{me^4Z^2}{2h^2n^2}\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{1+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right]. \qquad (13.13)$$

(13.13) нинг биринчи ҳади норелятивистик назария доирасида водородсимон атом энергияси ҳисобланади, иккинчи ҳади эса нозик структура доимийси квадратига пропорционал бўлиб, энергияга релятивистик тузатмадир. Бу тузатма орбитал квант сонига боғлиқ бўлганидан, атомдаги бу квант сон бўйича турланиш олинади ва сатҳлар *n* та бир-бирига яқин сатҳларга ажралиб кетишини кўрамиз. Водород атомининг Балмер серияси $(Z=1,\ n=2,\ l=0,1)$ учун дублет ажралиш (13.13) га кўра

$$\Delta\omega=\frac{E_{21}-E_{20}}{h}=\frac{8}{3}\frac{m_0e^4}{h^3}\frac{\alpha^2}{16}$$

қийматга тенг бўлади. Нозик структуранинг бундай қийматини тажриба натижаси билан солиштириб кўрилса, назарий натижа тажриба натижасидан тахминан уч марта катта бўлар экан. Бундай четланишнинг асосий сабаби шундан иборатки, водород атомининг бу нозик структураси фақатгина электрон массасининг тезликка боғлиқ бўлишида бўлиб қолмасдан, шунингдек унинг спинига ҳам боғлиқ бўлишида ҳисобланади. Клейн-Гордон тенгламаси эса массанинг релятивистик ўзгаришини ҳисобга олсада, зарра спинини эътиборга олмайди, чунки бу тенглама спини нолга тенг бўлган зарралар ҳаракатини ифода этади. Демак, бу тенглама электрон учун тўла қонли тенглама бўла олмас экан.

13.4. Электрон спини

Шредингер назарияси атомда зарядланган электрон ҳаракати билан боғлиқ бўлган орбитал механик ва магнит моментларининг мавжуд бўлишини тушунтира олади, холос. Электрон механик моментини $\vec{L}=[\vec{r}\times\vec{p}]$ деб белгиласак, унинг магнит моменти $\vec{\mu}$ берилган $\vec{L}$ билан қуйидагича боғланган бўлади

$$\vec{\mu}=-\frac{e}{2m_0c}\vec{L}\ . \qquad (13.14)$$

Бу моментнинг z-ўқига проекцияси

$$\mu=-\frac{e}{2m_0c}L_z=-\frac{eh}{2m_0c}m=-\mu_b m \qquad (13.15)$$

бу ерда $\mu_b = \frac{eh}{2m_0c} \approx 9.3 \cdot 10^{-21}$ Эрг/гс - Бор магнетони; L_z=mh эканлиги ҳисобга олинди. (13.15) да орбитал магнит квант сон m орбитал квант сон ℓ нинг берилган қийматида $-\ell, -\ell+\ell, ..., \ell-1, \ell$ та ҳар хил қиймат қабул қилгани учун магнит момент μ_z фазода 2l+1 та ориентацияда бўлади (масалан, $\ell = 2$ бўлганида m=-2, -1, 0, 1, 2 қийматлар олади). Магнит моменти модулининг механик момент модулига нисбати $-\frac{e}{2m_0c}$ бирлигида

$$\frac{\mu}{L} = g_l\left(-\frac{e}{2m_0c}\right) \qquad (13.16)$$

гиромагнит нисбат дейилади ва g_l билан белгиланади. Берилган ҳолда $g_l = 1$ бўлади. Экспериментал тадқиқотлар Шредингер назариясининг натижалари ҳамма вақт ҳам эксперимент натижаларига мос кела бермаслигини кўрсатди. Жумладан, ишқорий металл атомлари спектрал чизиқларида мавжуд бўлган дублетлилик, Штерн-Герлах тажрибасида асосий ҳолатда жойлашган (демак, $\ell = 0,\ m = 0$) водород атоми дастаси бир жинсли бўлмаган магнит майдонидан ўтганда симметрик иккита дастага ажралиб кетиши кузатилган. Шундай тажрибалардан яна бири Эйнштейн - де Гааз тажрибаси бўлиб, агар унга тўхталадиган бўлсак, бу тажрибада кварц ипга осилган цилиндрик ферромагнит стержен кучланганлиги U бўлган магнит майдонига жойлаштирилади. Магнит майдон йўналиши қарама-қарши томонга ўзгартирилганда стерженнинг магнит моменти ҳам, албатта, ўзгаради. Бундай ўзгариш эса ўз навбатида стержен механик моментининг ҳам ўзгаришига олиб келади. Уни стержен ипига ўрнатилган кўзгунинг бурилишидан аниқлаш мумкин бўлади. Бурилиш бурчагини ўлчаш йўли билан μ_z/L_z нисбатнинг қийматини текширса бўлади. Тажриба натижалари (13.16) нисбат қийматининг

$$\frac{\mu_z}{L_z} = -\frac{e}{m_0c} \qquad (13.17)$$

тенг эканлигини кўрсатган. Шундай қилиб, Штерн-Герлах тажрибасида электрон магнит моменти проекцияси

$$\mu_z = \pm\mu_\sigma \qquad (13.18)$$

бўлса, Эйнштейн-де Гааз тажрибасида

$$\mu_z = -2\mu_\sigma m \qquad (13.19)$$

эканлиги келиб чиққан. Агар электрон магнит моменти унинг орбитал ҳаракати туфайли юзага келадиган бўлса, (13.19) формуладаги $m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ каби бутун қийматлар олиши керак эди. Лекин бундай ҳолда ҳар иккала тажриба натижалари бир-бирига мос келмаслигини кузатамиз. Уларни мос келтириш учун Уленбек ва Гаудшмитлар (13.19) даги $m = m_s = \pm\frac{1}{2}$ қиймат олиши керак деб тушунтирдилар. Унда (13.19) дан

$$\mu_z = -2\mu_\sigma m_s = \pm\mu_\sigma$$

эканлиги келиб чиқади. Электрон спини учун гиромагнит нисбат

$$\frac{\mu_Z}{S_Z} = g_s\left(-\frac{e}{2m_0c}\right) \qquad (13.20)$$

бўлади. Бу ерда $g_c=2$, S_z- электроннинг *хусусий механик моменти* деб айтилади. Шундай қилиб, Уленбек ва Гаудшмит фикрича, электрон орбитал моментларга эга бўлиши билан бир қаторда хусусий механик, демак, хусусий магнит моментига ҳам эга бўлади. Электроннинг бундай хоссаси унинг *спини* деб аталади. Бу гипотезага кўра электрон хусусий механик моменти $\frac{h}{2}$ га тенг ва

$$S_z = hm_s = \pm\frac{h}{2}.$$

Бунда m_s спин *магнит квант сон* дейилиб, у ҳар доим ярим бутун $(m_s = \pm\frac{1}{2})$ қийматлар қабул қилади. Бутун қийматлар қабул қилувчи (масалан, l ва m) квант сонларининг ярим бутун қийматлар қабул қилувчи m_s квант сонидан ўзларининг мумкин бўлган ҳолатлар сони билан фарқ қилади. Бутун сонлардаги квант сонларга тоқ сондаги ҳолатлар мос келса (масалан, m бўйича мумкин бўлган ҳолатлар 2l+1 та бўлганидан, l=0 да 1 та, l=1 да 3 та ва ҳ.з), ярим бутунли квант сонларга эса ҳамма вақт жуфт сондаги ҳолатлар (спин S нинг берилган қийматида m, 2s+1 та қиймат қабул қилади) ларни ифода этади (масалан, $S = \frac{1}{2}$ да 2 та, $S = \frac{3}{2}$ да 4 та ҳолат ва ҳ.з.). Шундай қилиб, электрон ҳолатини тўла ифодалаш учун янги -тўртинчи квант сони киритилади. Унинг классик ўхшатмаси йўқ. Спин зарранинг ички хусусиятига боғлиқ бўлган квант сонидир. Бошқа физик катталиклар каби спин ҳам ўз операторига эга. Спин ҳам реал физик катталик бўлганидан унинг оператори чизиқли ва эрмит хоссасига эга бўлади. Агар бу операторни $\hat{S}$ билан белгиласак, S_x, S_y, S_z лар унинг координата ўқларидаги

проекциялари бўлади. Электрон спини $h/2$ спин операторнинг хусусий қиймати бўлиб ҳисобланади. Шунинг учун бу оператор

$$\hat{S} = \frac{h}{2}\hat{\sigma} \tag{13.21}$$

кўринишда ёзилади. Бу ерда $\hat{\sigma}$ - *Паули матрицалари* ҳисобланади. У ҳолда $\hat{S}$ операторининг ташкил этувчилари

$$\hat{S}_x = \frac{h}{2}\hat{\sigma}_x, \quad \hat{S}_y = \frac{h}{2}\hat{\sigma}_y, \quad \hat{S}_z = \frac{h}{2}\hat{\sigma}_z. \tag{13.22}$$

Электрон учун спин оператори унинг орбитал механик моменти $\hat{L}$ га ўхшаш бўганидан, (13.22) компоненталар учун коммутация муносабатлари $\hat{L}$ оператор компоненталари ўртасида мавжуд бўлган коммутация муносабатлари каби бўлади

$$\begin{aligned} &\hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x = ih\hat{S}_z, \\ &\hat{S}_y\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{S}_y = ih\hat{S}_x, . \\ &\hat{S}_z\hat{S}_x - \hat{S}_x\hat{S}_z = ih\hat{S}_y \end{aligned} \tag{13.23}$$

У ҳолда (13.22) га асосан $\hat{\sigma}$-матрица компоненталари учун

$$\begin{aligned} &\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 2i\hat{\sigma}_z, \\ &\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = 2i\hat{\sigma}_x, \\ &\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z = 2i\hat{\sigma}_y \end{aligned} \tag{13.24}$$

муносабатлар ўринли бўлишини ҳамда бу матрицаларнинг ўзаро антикоммутатив эканликларини кўрамиз. Электрон спинининг Z - компонентаси $\pm\frac{h}{2}$, яъни иккита қийматга эга бўлгани учун $\hat{\sigma}$ матрицалар икки қаторли матрицалар ҳисобланади. Тасаввурлар назариясига кўра ҳар қандай оператор (масалан, $\hat{S}_z$) ўзининг хусусий тасаввурида (бу ерда “Z”-тасаввурида) диагонал матрица бўлганлиги учун

$$\hat{S}_z = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} 1...0 \\ 0-1 \end{pmatrix}$$

кўринишида берилади ва (13.22) га кўра

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1...0 \\ 0-1 \end{pmatrix} \qquad (13.25)$$

кўринишдаги диагонал матрица бўлади. У ҳолда (13.24) га асосан

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 01 \\ 10 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0-i \\ i....0 \end{pmatrix}. \qquad (13.26)$$

Спин оператори квадрати учун

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{h^2}{4}(\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) = h^2 S(S+1) = \frac{3}{4}h^2$$

тенглигидан $\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = 3, \hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1$ эканлигини топамиз. (13.25) ва (13.26) лардан Паули матрицаларининг ўзаро антикоммунатив хоссасини топамиз

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y &= -\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z &= -\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x &= -\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_y. \end{aligned} \qquad (13.27)$$

Спин операторларига икки қаторли матрицалар мос келгани учун уларнинг хусусий функциялари ҳам икки қаторли матрица ҳисобланади

$$\hat{S}_z \Psi = S_z \Psi.$$

Бу эрда $S_z = \pm\frac{h}{2}, ..\hat{S}_z$ оператори хусусий қиймати, Ψ эса унинг хусусий функцияси

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

$S_z = \frac{h}{2}$ хусусий қийматга мос келувчи хусусий функция

$$\Psi_{\frac{h}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$S_z = -\frac{h}{2}$ га тегишли хусусий функция

$$\Psi_{-\frac{h}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

кўринишда ёзилади. Мисол тариқасида $\hat{S}_x = \frac{h}{2}\hat{\sigma}_x$ нинг хусусий функцияси ва хусусий қийматини топайлик. Шартга кўра

$$\hat{S}_x \Psi = S_x \Psi \text{ ёки } \frac{h}{2}\begin{pmatrix} 01 \\ 10 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_x\Psi_1 \\ S_x\Psi_2 \end{pmatrix}.$$

Бу ердан

$$\left.\begin{aligned} S_x\Psi_1 - \frac{h}{2}\Psi_2 = 0 \\ \frac{h}{2}\Psi_1 - S_x\Psi_2 = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (13.28)$$

тенгликларни топамиз. Бу тенгламаларнинг ечими (13.28) нинг коэффициентларидан ташкил топган детерминантнинг нолга тенг

$$\begin{vmatrix} S_{x....} & -\frac{h}{2} \\ \frac{h}{2}... & -S_x \end{vmatrix} = 0$$

бўлганида мавжуд бўлишини биламиз. Бундан $S_x^2 = \frac{h^2}{4}$ ёки $S_z = \pm\frac{h}{2}$ эканлиги келиб чиқади. Бу илдизларни кетма-кет (13.28) га қўйиб, топамиз

$$\frac{h}{2}\Psi_1 - \frac{h}{2}\Psi_2 = 0, \Psi_1 = \Psi_2 = 1, \Psi_{S_x = \frac{h}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$S_x = -\frac{h}{2}$ га тегишли хусусий функция худди шу йўл билан топилади ва

$$\Psi_{S_x = -\frac{h}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

кўринишга эга бўлади. Бу хусусий функциялардаги $\frac{1}{\sqrt{2}}$ коэффициент хусусий функцияларни нормаллаштириш учун хизмат қилади. Ҳақиқатан, нормаллаштириш шартидан

$$\Psi^{+}_{S_x=\frac{h}{2}}\Psi_{S_x=\frac{h}{2}}=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2(11)\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}(1+1)=1$$

эканлиги келиб чиқади.

13.5. Паули тенгламаси

Электроннинг хусусий магнит моментини ҳисобга олувчи норелятивистик тенглама биринчи марта 1927-йилда Паули томонидан талкиф этилди. Бу тенглама Шредингер тенгламасидан фойдаланиб ёзилади. Фараз қилайликки, ташқи электромагнит майдонида магнит моменти μ га тенг бўлган электрон ҳаракат қилаётган бўлсин. У ҳолда стационар ҳолат учун Паули тенгламасини қуйидагича ёзиш мумкин

$$H_P\Psi=E\Psi. \qquad (13.29)$$

Бу ерда

$$H_P=H_m+U,$$
$$H_m=\frac{1}{2m}\left(p-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2-e\varphi, \qquad (13.30)$$
$$U=-(\vec{\mu}\vec{B})=\frac{e}{m_0c}(\vec{S}\vec{B})=\mu_b(\vec{\sigma}\vec{B}),$$

$\phi, \vec{A}$ - ташқи майдон потенциаллари, H_m - Шредингер тенгламасидаги электрон спинини ҳисобга олмовчи гамилтониан, U - электрон магнит моменти ва магнит майдон ўртасида юзага келувчи ўзаро таъсир энергияси, (13.29) да Ψ - функция Шредингер тенгламасидаги бир компонентали функциядан фарқ қилиб, спиннинг икки хил ориентациясини ҳисобга олувчи функциядир. (13.30) да

$$\vec{\sigma}\vec{B}=\sigma_xB_x+\sigma_óB_ó+\sigma_zB_z$$

эканлигини ва σ-матрица компоненталари кўринишларини ҳисобга олсак, (13.29) тенглама иккита оддий тенгламага ажралади

$$E\text{-}H\text{-}\mu_b B_z)\psi_1\text{-}\mu_b(B_x\text{-}B_y)\psi_2=0,$$

$$(E\text{-}H_m+\mu_b B_z)\psi_2\text{-}\mu_b(B_x+B_y)\psi_1=0. \qquad (13.30)$$

Биздаги магнит майдон z- ўқи бўйича йўналсин. У ҳолда $A_x=-\frac{1}{2}yB,\ \ A_y=\frac{1}{2}xB$ бўлади ва

$$H_m=\frac{1}{2m_0}\left(p-\frac{e}{c}A\right)^2+e\varphi=\frac{1}{2m_0}\left(p-\frac{e}{c}A\right)\left(p-\frac{e}{c}A\right)+e\varphi\approx\frac{1}{2m_0}\left(p^2-\frac{2e}{c}Ap\right)+e\varphi$$

$$Ap=A_xp_x+A_yp_y=\frac{B}{2}L_z$$

кўриниш олади. Биз бу ерда магнит майдонини бир жинсли $(\nabla\vec{A}=0)$ ва $\frac{e^2}{2m_0c^2}A^2\approx 0$ деб ҳисобладик. У ҳолда, агар $L_z=mh$ эканлигини ҳисобга олсак,

$$H_m=\frac{p^2}{2m_0}+e\varphi\text{-}\mu_b Bm \qquad (13.31)$$

бўлади ва (13.30) тенгламалар системаси ўрнига

$$\left(E+e\varphi-\frac{p^2}{2m_0}+\mu_b Bm\text{-}\mu_b B\right)\psi_1=0,$$

$$\left(E+e\varphi\text{-}\frac{p^2}{2m_0}\text{-}\mu_b Bm+\mu_b B\right)\psi_2=0. \qquad (13.32)$$

тенгламаларга эга бўламиз. Бу ерда $\mu_b Bm$ ва $\pm\mu_b B$ энергиялар орбитал ва спин магнит моментларнинг магнит майдони билан ўзаро таъсирини ифодалайди. Агар электрон s - ҳолатда жойлашса, магнит квант сон m нолга тенг бўлади ва Паули тенгламаси

$$\left(E+e\varphi\text{-}\frac{p^2}{2m_0}\text{-}\mu_b B\right)\psi_1=0,$$

$$\left(E+e\varphi\text{ -}\frac{p^2}{2m_0}+\mu_b B\right)\psi_2=0.$$

кўринишга келади. Бу тенгламаларда ψ_1 тўлқин функция электрон спинининг z - ўқи бўйлаб, ψ_2 эса бу ўққа тескари йўналган ҳолатларни ифода

этади. Электрон хусусий магнит моментининг ана шундай икки хил ориентацияси Штерн ва Герлах тажрибасида кузатилган.

13.6. Зееманнинг аномал эффекти

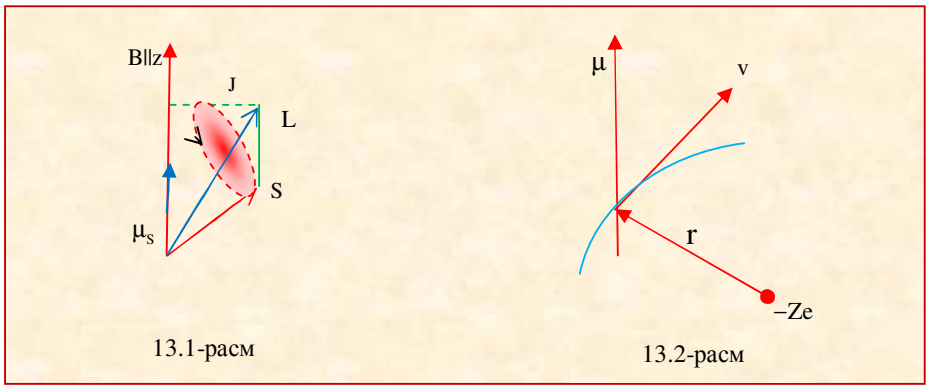
Кўрдикки, атомдаги электрон орбитал ва спин магнит моментларига эга бўлар экан

$$\vec{\mu}_L = -\mu_b \vec{L},$$

$$\mu_S = -\mu_b \vec{S}.$$

Электрон ҳаракати давомида бу моментлар ўртасида ўзаро таъсир мавжуд бўлади ва бу ўзаро таъсирга

$$U(SL) = -(\mu_L \mu_S) = -\mu^2{}_b (\vec{S}\vec{L})$$



13.1-расм 13.2-расм

энергия тўғри келади. Бундай ўзаро таъсир одатда *спин-орбитал ўзаро таъсир* деб аталади. Зееман эффектларини қараб чиқишда бу энергиянинг катта-кичиклиги муҳим аҳамиятга эга бўлади. Атом ташқи магнит майдонига жойлаштирилса, унинг тўлиқ энергияси атомнинг ички энергияси ва атом магнит моментининг магнит майдони билан ўзаро таъсир энергиялари йиғиндисидан иборат бўлади. Бундай ўзаро таъсир энергияси эса майдон индукцияси ва магнит майдон модулига ҳамда улар ўртасидаги бурчакка боғлиқ бўлади (13.1-расм). Агар магнит майдон унча кучли бўлмаса, атомдаги спин-орбитал ўзаро таъсир магнит майдонинг орбитал магнит моменти ва спин магнит моменти билан алоҳида-алоҳида таъсиридан кучсизроқ бўлади, яъни бундай магнит майдони спин ва орбитал моментлар ўртасидаги боғланишни буза олмайди. Берилган ҳолда магнит майдони билан атомнинг тўлиқ магнит моменти ўзаро таъсирда бўлади. Мабодо, магнит майдон кучли бўлса, бу майдон (LS)-боғланишни узиб юборади, атомнинг орбитал моменти L ва спин моменти S алоҳида-алоҳида магнит майдони атрофида прецессия ҳаракатига келади, бу моментлар сақланувчан катталиклар ҳисобланишади. Кучсиз магнит майдонида эса Зееманнинг

аномал эффекти юзага келади, кучли майдонда Зееманнинг нормал эффекти юзага келади (13.2-расм). Бу эффектда спинни ҳисобга олмаса ҳам бўлади. Аммо биз бу ерда нормал эффектни қараб ўтирмасдан, Зееманнинг аномал эффектини кўриб чиқамиз. Юқорида қайд қилганимиздек, кучсиз магнит майдонида атом энергияси

$$E = E^0 - \vec{\mu}_J \vec{B} = E^0 - \mu_{J_2} B$$

га тенг бўлади. Бу ерда E^0-атом ички энергияси, $(-\vec{\mu}_J \vec{B})$ эса атом тўлиқ магнит моментининг магнит майдони билан ўзаро таъсирига тўғри келувчи энергия. Тўлиқ магнит момент орбитал ва спин магнит моментларнинг векторли йиғиндиси

$$\vec{\mu}_j = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S \qquad (13.33)$$

ҳисобланади. Атом бир энергетик ҳолатдан иккинчи бир ҳолатга ўтганда $\hbar\omega_{12}$ энергияли квант нурланиши

$$\hbar\omega_{12} = E_2 - E_1 = (E_2^0 - E_1^0) - (\mu_{J_{2z}} - \mu_{J_{1z}})B = \hbar\omega - (\mu_{J_{2z}} - \mu_{J_{1z}})B \qquad (13.34)$$

Бу ерда $\omega = \frac{E_2^0 - E_1^0}{\hbar}$ - магнит майдони бўлмаган ҳолда $E_2 \to E_1$ ўтишда нурланган квант частотаси. Тўлиқ магнит моментини скаляр шаклда ёзамиз

$$\mu_J = \mu_L \cos(\hat{\vec{L}}, \hat{\vec{J}}) + \mu_S (\hat{\vec{S}}, \hat{\vec{J}}) \qquad (13.35)$$

Тўлиқ механик момент эса

$$\begin{aligned} \hat{\vec{J}} &= \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}, \\ \hat{\vec{S}} &= \hat{\vec{J}} - \hat{\vec{L}}, \\ \hat{\vec{L}} &= \hat{\vec{J}} - \hat{\vec{S}} \end{aligned} \qquad (13.36)$$

бўлганидан (13.36) нинг ҳар иккала тарафини квадратга кўтарамиз

$$\hat{L}^2 = \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - 2\hat{J}\hat{S}, \ldots \hat{S}^2 = \hat{J}^2 + \hat{L}^2 - 2\hat{J}\hat{L}.$$

Бундан

$$\hat{J}\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2), \ldots \hat{J}\hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 + \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \qquad (13.37)$$

$$\hat{J}\hat{S} = |J||S|\cos(\hat{\vec{S}}, \hat{\vec{J}})$$

$$\hat{J}\hat{L} = |J||L|\cos(\hat{\vec{L}}, \hat{\vec{J}})$$

ларни топамиз ҳамда ҳарқандай $\hat{A}$ ва $\hat{A}^2$ операторлар учун

$$\hat{A}\Psi = h\sqrt{A(A+1}, \hat{A}^2\Psi = h^2 A(A+1)$$

ўринли эканлигини эътиборга олиб, (13.35) даги бурчакларнинг

$$\cos(\vec{L}, \vec{J}) = \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{L(L+1)}}$$

$$\cos(\vec{S}, \vec{J}) = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{S(S+1)}}$$

қийматларини аниқлаймиз. Орбитал ва спин магнит моментлар эса мос равишда

$$\mu_L = \mu_b\sqrt{L(L+1)}, \mu_S = 2\mu_b\sqrt{S(S+1)}$$

формулалар орқали квантланади. У ҳолда тўлиқ магнит моменти учун

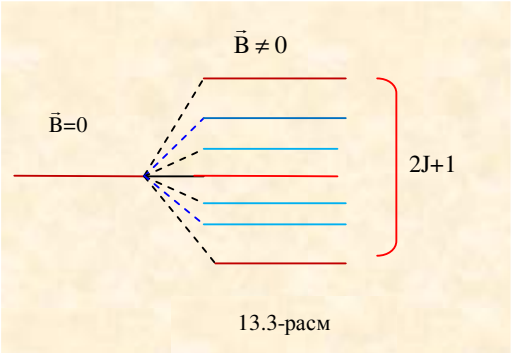
$$\mu_J = \mu_b\left[\frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{S(S+1)}} + 2\frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{S(S+1)}}\right] = \mu_\sigma g_J\sqrt{J(J+1)}$$

формулага эга бўламиз. Бу ерда

$$g_J = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1)\text{-}L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Ланде кўпайтувчиси дейилади. Энди μ_jни (13.33)га қўямиз ва нурланиш частотаси учун

$$\omega_{12} = \omega\text{-}O_L(m_{J_z}g_{J_1}\text{-}m_{J_i}g_{J_1}) \qquad (13.38)$$



13.3-расм

формулани оламиз, бу ерда $O_L = \frac{eB}{2m_0c}$ – Лармор частотасидир. (13.38) бўйича $P_{\frac{3}{2}} \to S_{\frac{1}{2}}$ ўтишга тегишли бўлган ω частотали спектрал чизиқнинг кучсиз магнит майдонида ажралишини ҳисоблаймиз (13.3-расм). $P_{\frac{3}{2}}$ учун $g_J = \frac{4}{3}, S_{\frac{1}{2}}$ учун $g_J = 2$ эканлигини топиб, $\Delta\omega = \omega_{12} - \omega$ нинг $\Delta\omega = \left(\pm\frac{5}{3}, \pm 1, \pm\frac{1}{3}\right)O_L$ бўлишини кўрамиз. Биз бу ерда $P_{\frac{3}{2}} \to S_{\frac{1}{2}}$ ўтишларда $\ell, j, \Delta m_l$ лар учун

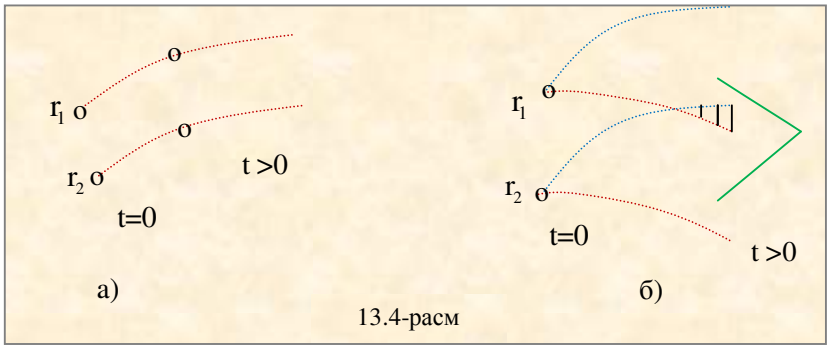
$$\Delta\ell = \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1, \quad \Delta m_y = 0, \pm 1$$

танлаш қоидаларини ҳисобга олдик. Шундай қилиб, кўрамизки, кучсиз магнит майдонида атом спектрал чизиқларининг мураккаб ажралиши юзага келар экан.

13.7. Зарраларнинг айнан ўхшашлиги. Паули принципи.

Микрозарралар системасида зарра ҳаракатини ўрганиш классик физикада кузатилмайдиган физик қонуниятларнинг намоён бўлишига олиб келади. Бир хил зарралардан ташкил топган квант система, масалан электронлар, протонлар, фотонлар ва ҳ.з, классик физикада ўхшаши йўқ айрим хоссаларга эга бўлади. Бу хоссалар бир турдаги зарраларнинг абсолют ўхшашлиги билан боғланган. Макродунёда амалда икки заррани уларнинг массаси, заряди, энергияси билан бир-биридан фарқ қилиб бўлади. Айтилган барча бу катталиклар узлуксиз ўзгарувчан катталиклар ҳисобланади. Зарралар параметридаги фарқлар эса бу катталикларнинг ўлчаниш аниқлигига боғлиқ бўлади. Ҳатто бир турдаги зарралар характеристикаларининг барчаси бир-бирига мос келганда ҳам ҳар бир зарранинг ўз траекторияси бўйлаб ҳаракати кетидан кузатиш олиб бориш ва уларни бир-биридан фарқ қилиш мумкин бўлади.

Микродунёда зарралар ҳолатини ҳарактерловчи катталиклар дискрет қийматларга эга бўлади. Бир турдаги иккита зарранинг ички параметрлари айнан бир хил бўлади. Масалан, барча электронларнинг массалари, зарядлари, спинлари бир хилдир. Агар зарралар бир хил ҳолатларда жойлашса уларнинг ҳолат параметрлари: энергиялари, импулс моменти ва унинг проекцияси, спин проекцияси бир хил бўлади.



13.4-расм

Бу турдаги зарралар характеристикаларининг бир-бирига абсолют мос келиши уларнинг айнан ўхшашлигига, уларни фарқ қилиб бўлмаслигига олиб келади. Бундай ҳолатнинг мавжуд бўлиши квант механикасида *зарраларнинг айнан ўхшашлик принципи* деб аталади ва бу квант механикасининг янги бир постулати ҳисобланади.

Айнан ўхшашлик принципи шу билан боғлиқки, зарралар бир-бирига жуда яқинлашганларида фазода зарра ҳаракатини аниқлашда мавжуд бўлган аниқмаслик туфайли ҳар бир заррани алоҳида кузатиш имконияти бўлмайди. Классик жисмлар бир-бирлари билан тўқнашганларида улардан қайси бирининг юқорига ёки пастга бурилиб кетганлигини кўриш мумкин (13.4а-расм). Квант “объект”лар тўқнашганида эса уларнинг ҳаракат траекториялари ўрнида тўлқин пакети ҳаракат қилаётган “найча”ни кўриш мумкин бўлади. Агар тўлқин пакети бир-бирини қоплаб қолмаса, зарраларнинг фазодаги ҳолати бўйича уларни фарқ қилса бўлади. Аммо бу зарралар ўзаро таъсирда бўлса ёки ҳатто улар ўзаро таъсирлашмасдан бир-бирига яқинлашса ҳам бу тўлқинлар пакетидан иборат найчалар кесишган жойларда қайси зарранинг қаерда эканлигини мутлақо билиб бўлмайди (13.4б-расм). Фақат тўқнашувдан кейин зарраларнинг бири тепага, иккинчиси пастга кетди деб айтиб бўлади, холос. Лекин қайси бирининг пастга, қайси бирининг эса юқорига кетганлигини айтиб бўлмайди. Шу боисдан бир хил характеристикали зарраларни бир-биридан тамоман фарқ қилиб бўлмайди. Айнан ўхшашлик принципи муҳим хулосага олиб келади: бир турдаги зарранинг бир-биридан абсолют фарқ қила олмаслик хусусияти ушбу зарраларнинг ўзаро ўрин алмашинувлари оқибатида система физик ҳолатининг ўзгаришига олиб келмайди. Қулайлик учун фақат иккита заррадан ташкил топган системани қарайлик. Уларнинг айнан ўхшашлиги

туфайли бу зарралар жойларини ўзаро алмаштиришлари натижасида юзага келадиган ҳолати дастлабки ҳолатига тамоман эквивалент бўлади. Бундай алмашинув натижасида зарралар ҳолатига мос келувчи тўлқин функция дастлабки ҳолат функциясидан бирорта фазовий кўпайтувчи билангина фарқ қилади, холос. Агар ҳар бир зарранинг фазовий учта координатаси ва спин проекцияси тўпламини ξ_1,ξ_2 лар билан белгиласак, тўлқин функциясидаги ўзгаришни

$$\Psi(\xi_1,\xi_2)=e^{i\alpha}\Psi(\xi_2,\xi_1)$$

билан ифодалаш мумкин, бу ерда α-ихтиёрий ҳақиқий доимий сон. Зарралар яна қайтадан ўрин алмашса, система бошланғич ҳолатига қайтади

$$\Psi(\xi_1,\xi_2)=e^{i\alpha}\Psi(\xi_2,\xi_1)=e^{2i\alpha}\Psi(\xi_1,\xi_2) \qquad (13.39)$$

Бундан $e^{2i\alpha}=1, e^{i\alpha}=\pm 1$. Демак, $\Psi(\xi_1,\xi_2)=\pm\Psi(\xi_2,\xi_1)$, яъни зарралар ўз ўринларини алмаштирсалар уларнинг ҳолатини ифодаловчи функция ўз ишорасини ўзгартириши ёки ўзгартирмаслиги ҳам мумкин. Бошқача қилиб айтганда, зарралар ҳолатига тўғри келувчи функция ёки симметрик

$$\Psi(\xi_1,\xi_2)=+\Psi(\xi_2,\xi_1) \qquad (13.40)$$

ёки антисимметрик

$$\Psi(\xi_1,\xi_2)=-\Psi(\xi_2,\xi_1) \qquad (13.41)$$

хоссага эга бўлган функциялар ҳисобланади. Равшанки, ягона битта системанинг барча ҳолатларини ифода этувчи тўлқин функциялар бир хил симметрияга эга бўлади, яъни улар ё симметрик, ёки аксинча антисимметрик бўлади. Акс ҳолда, турли симметрияли ҳолатлар суперпозицияси бўлган ҳолат тўлқин функцияси на симметрик, на антисимметрик бўлган бўлар эди. Бу натижа ихтиёрий сондаги бир хил зарралардан ташкил топган системага ҳам тегишли бўлади. Бу система зарраларининг қайсидир жуфти симметрик тўлқин функция билан ифодаланса, қолган зарралар жуфтларининг барчаси ҳам ўшандай хоссага эга бўлади. Шунинг учун бир хил зарралардан ташкил топган система тўлқин функцияси ундаги исталган зарралар жуфтининг ўзаро ўрин алмашинувига нисбатан ёки ўзгармайди, ёки фақатгина ишорасини ўзгартиради. Биринчи ҳолда тўлқин функция симметрик функция, иккинчи ҳолда антисимметрик функция деб юритилади. Хоссасининг симметрик ёки антисимметрик тўлқин функцияси билан ифодаланиши зарралар турига боғлиқ бўлади. Антисимметрик функция билан ифодаланувчи зарралар Ферми-Дирак статистикасига, симметрик функция филан ифодаланувчиларни эса Бозе-Ейнштейн статистикасига бўйсинувчи зарралар деб аталади ва мос равишда улар *фермионлар ёки*

бозонлар деб юритилади. Релятивистик квант механика зарраларнинг қайси статистикага бўйсинишини уларнинг спини билан боғлайди. Фермионлар ярим бутун спинга эга бўладилар, бозонлар эса бутун сонли спинга эга бўладилар. Биз N та бир хил зарралардан ташкил топган системани қарайлик ва улар ўртасидаги ўзаро таъсир эътиборга олмаслик даражасида бўлсин. Ҳар бир зарранинг алоҳида ўзи жойлашуви мумкин бўлган ҳар хил стационар ҳолатларини ифода этувчи тўлқин функциялар $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, ...$ лар бўлсин. Бутун система тўлқин функцияси Ψ_{ni} ни $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, ...$ функциялар орқали қандай ифода этиш мумкин, деган савол туғилсин. Бозонлардан ташкил топган система $\Psi(\xi_1, \xi_2, ..., \xi_N)$ функцияси $P_1, P_2, ...$ ҳар хил индексларнинг ўрин алмашишлари мумкин бўлган функциялар кўпайтмалари $\Psi_{P_1}(\xi_1)\Psi_{P_2}(\xi_2).....\Psi_{P_N}$ йиғиндиси каби ифода этилади. Масалан N=2 бўлса,

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi_{P_1}(\xi_1)\Psi_{P_2}(\xi_2) + \Psi_{P_1}(\xi_2)\Psi_{P_2}(\xi_1)\right] \qquad (13.42)$$

Агар бу икки зарра фермионлар бўлса

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Psi_{P_1}(\xi_1)\Psi_{P_2}(\xi_2) - \Psi_{P_1}(\xi_2)\Psi_{P_2}(\xi_1)\right] \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \Psi_{P_1}(\xi_1)\Psi_{P_1}(\xi_2) \\ \Psi_{P_2}(\xi_1)\Psi_{P_2}(\xi_2) \end{vmatrix} \qquad (13.43)$$

(13.42), (13.43) да $\frac{1}{\sqrt{2}}$ кўпайтувчи $\Psi(\xi_1, \xi_2)$ функцияни нормаллаштиришга хизмат қилади. (13.43) дан муҳим хулоса чиқарамиз: $P_1, P_2, ...$ лар ўзаро тенг бўлса, (13.43) детерминант қаторлари бир-бирига тенг бўлади ва бу детерминант автоматик равишда нолга айланади. Шундай қилиб, системада иккита фермион бир вақтнинг ўзида бир ҳолатда жойлаша олмас экан. Бундай хулоса Паулининг таъқиқловчи принципининг мазмунини ифода этади. Бу принцип кўп электронли системалар квантмеханик назариясини беришда муҳим аҳамиятга эгадир.

Назорат саволлари

1.Электрон спини нима (хусусий, механик момент, магнит момент, спин)?

2.Электрон спини ва Паули матрицаси ўртасидаги боғланишни ёзинг (спин, Паули матрицаси, Планк доимийси).

3.Паули тенгламаси Шредингер тенгламасидан нима билан фарқ қилади (спин магнит момент, магнит майдони, ўзаро таъсир, энергия)?

4. Зееманнинг нормал ва аномал самаралари моҳияти нимадан иборат (кучли магнит майдон, кучсиз магнит майдон, ўзаро таъсир, энергия, мултиплет, бўлиниш энергияси, катта, кичик)?

5. Ланде кўпаювчиси нима? Унинг физик маъноси қандай (спин, орбитал тўлиқ квант сонлар, гидромагнит нисбат, магнит момент, механик момент)?

МАСАЛАЛАР ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 масала. Эркин ҳаракатланувчи релятивистик электрон учун

А) импулс (орбитал) моментнинг ҳаракат интеграли бўла олмаслиги;

Б) тўлиқ (механик) моментнинг вақт бўйича сақланувчан бўлишлиги исботлансин.

Ечиш. Масала ечимини қулайлик учун импулс моменти оператори $\hat{L}$ ва тўлиқ момент оператори $\hat{J}$ ларнинг “x”-компоненталари $\hat{L}_x, \hat{J}_x = \hat{L}_x + \hat{S}_x$ лар учун топамиз. Операторларнинг вақт бўйича ўзгариш қонуни

$$ih\frac{d\hat{L}_x}{dt} = \left[\hat{L}_x, \hat{H}\right] \qquad (1)$$

$$ih\frac{d\hat{J}_x}{dt} = \left[J_x, \hat{H}\right] \qquad (2)$$

ифодаларидаги коммутаторларни ҳисоблаймиз. Эркин зарра учун

$$\hat{H} = c(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y + \hat{\alpha}_z\hat{p}_z) + \hat{\beta}m_0c^2$$

бўлгани учун

а) $$\left[\hat{L}_x, \hat{H}\right] = \left[y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, c(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y + \hat{\alpha}_z\hat{p}_z) + \hat{\beta}m_0c^2\right] =$$

$$= c\hat{\alpha}_y\left[y\hat{p}_z, \hat{p}_y\right] - c\hat{\alpha}_z\left[z\hat{p}_y, \hat{p}_z\right] =$$

$$= c\left\{\hat{\alpha}_y\left(y\hat{p}_z, \hat{p}_y - \hat{p}_y y\hat{p}_z\right) - \hat{\alpha}_z\left(z\hat{p}_y\hat{p}_z - \hat{p}_z z\hat{p}_y\right)\right\} = cih\left(\hat{\alpha}_y\hat{p}_z - \hat{\alpha}_z\hat{p}_y\right)$$

Демак,

$$ih\frac{d\hat{L}_x}{dt} = ihc\left(\hat{\alpha}_y\hat{p}_z - \hat{\alpha}_z\hat{p}\right) \neq 0$$

бўлади ва L_x сақланувчан катталик-ҳаракат интеграли бўла олмайди.

б) $$\left[\hat{J}_x, \hat{H}\right] = \left[\hat{L}_x + \hat{S}_x, \hat{H}\right] = \left[\hat{L}_x, \hat{H}\right] + \left[\hat{S}_x, \hat{H}\right] = c(\hat{\alpha}_y\hat{p}_z - \hat{\alpha}_z\hat{p}_y) + \frac{h}{2}\left[\hat{\sigma}_x, \hat{H}\right]$$

Биз бу ерда $S_x = \frac{h}{2}\hat{\sigma}_x$ тенгликдан фойдаландик. Агар Дирак матрицаси $\hat{\alpha}$ учун $\hat{\alpha} = \hat{\rho}\hat{\sigma}$ ($\hat{\rho}$-матрица) ўринли эканлигини ҳисобга олсак,

$$\frac{h}{2}\left[\hat{\sigma}_x,\hat{H}\right]=\frac{h}{2}\rho c\left[\hat{\sigma}_x,(\hat{\sigma}_x\hat{p}_x+\hat{\sigma}_y\hat{p}_y+\hat{\sigma}_z\hat{p}_z)+\hat{\beta}m_0c^2\right]=$$

$$\frac{h}{2}\rho c\left\{\left[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y\right]\hat{p}_y+\left[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_z\right]\hat{p}_z\right\}==\frac{h}{2}\hat{\rho}c\left\{2i\hat{\sigma}_z\hat{p}_y-2i\hat{\sigma}_y\hat{p}_z\right\}=-ihc(\hat{\alpha}_y\hat{p}_z-\hat{\alpha}_z\hat{p}_y)$$

натижага эга бўламиз. Биз бу ерда Паули матрицалари хоссаларидан фойдаландик. Шундай қилиб, топамиз:

$$\left[\hat{J}_x,\hat{H}\right]=ihc(\hat{\alpha}_y\hat{p}_z-\hat{\alpha}_z\hat{p}_y)-ihc(\hat{\alpha}_y\hat{p}_z-\hat{\alpha}_z\hat{p}_y)=0$$

Демак,

$$\frac{d\hat{J}_x}{dt}=\frac{d}{dt}(\hat{L}_x+\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma})=0$$

Яъни

$$J_x=L_x+\frac{\hbar}{2}\sigma=const$$

тўлиқ момент вақт бўйича сақланувчан бўлади. Бундан кўрамизки, электроннинг $S=\frac{h}{2}\sigma$ спинга эга бўлиши унинг релятивистик хоссаси экан.

2 Масала. Электромагнит майдонда ҳаракат қилувчи релятивистик электрон учун

$$\frac{d\hat{x}}{dt},\qquad \frac{d\hat{p}_x}{dt}$$

ҳаракат қонунлари топилсин.

Ечиш. $\hat{x},\hat{p}_x$ лар учун ҳаракат тенгламалари

$$\frac{d\hat{x}}{dt}=\frac{1}{ih}\left[\hat{x},\hat{H}\right]+\frac{\partial\hat{x}}{\partial t} \tag{15}$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt}=\frac{1}{ih}\left[\hat{p}_x,\hat{H}\right]+\frac{\partial\hat{p}_x}{\partial t}. \tag{16}$$

Бу ерда зарра электромагнит майдонда харакат килаётгани учун импулс урнига умумлашган импулс олишга тугри келади: $\hat{p}_x\to\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_x(x,t)$. x,p_x лар вақтнинг ошкормас функцияси бўлганлигидан

$$\frac{dx}{dt}=0,\qquad \frac{dp_x}{dt}=0$$

бўлади ва (15, 16) лардаги коммутаторлар қуйидагича ҳисобланади:

$$\left[x,\hat{H}\right]=\left[x,(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x+\hat{\alpha}_y\hat{p}_y+\hat{\alpha}_z\hat{p}_z)+\hat{\beta}\,m_0c+e\phi\right]==c\hat{\alpha}_x\left[x,\hat{p}_x\right]=c\hat{\alpha}_x\left(x\,\hat{p}_x-\hat{p}_x x\right)=i\hbar c\hat{\alpha}_x$$

Биз бу ерда

$$\left[x,\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_x\right]=\left[x,p_x\right],\quad \left[x,-\frac{e}{c}A_x\right]=-\frac{e}{c}\left[x,A_x\right]=0$$

эканлигини эътиборга олдик.

$$\left[\hat{p}_x,c(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x+\hat{\alpha}_y\hat{p}_y+\hat{\alpha}_z\hat{p}_z)+\hat{\beta}\,m_0c^2+e\phi\right]=c\hat{\alpha}_y\left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right]+c\hat{\alpha}_z\left[\hat{p}_x,\hat{p}_z\right]+e\left[\hat{p}_x,\phi\right]\rightarrow$$

$$\left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right]=\hat{p}_x\hat{p}_y-\hat{p}_y\,\hat{p}_x=(\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_x)(\hat{p}_y-\frac{e}{c}A_y)-(\hat{p}_y-\frac{e}{c}A_y)(\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_x)=ih\frac{e}{c}(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y})=$$

$$=ih\frac{e}{c}rot_z\vec{A}=ih\frac{e}{c}B_z,\ \left[\hat{p}_x,\hat{p}_z\right]=-ih\frac{e}{c}B_y\ \ ,\left[\hat{p}_x,e\phi\right]=e\hat{p}_x\phi-e\phi\,\hat{p}_x=$$

$$-\,ih\frac{\partial\phi}{\partial x};\rightarrow ihe\left\{-\frac{\partial\phi}{\partial x}-(\hat{\alpha}_y\hat{B}_z-\hat{\alpha}_z\hat{B}_y)\right\}$$

$$\frac{\partial\hat{p}_x}{\partial t}=-\frac{e}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}$$

Шундай қилиб:

$$\frac{d\,\hat{p}_x}{dt}=-\frac{e}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}-e\frac{\partial\phi}{\partial x}+e(\hat{\alpha}_y\hat{B}_z-\hat{\alpha}_z\hat{B}_y)=e\left\{-\frac{\partial\phi}{\partial x}-\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}+\left[\hat{\alpha}\times\vec{B}\right]_x\right\}=eE_x+e\left[\hat{\alpha}\times\vec{B}\right]_x$$

Бу ерда $E_x=-\frac{\partial\phi}{\partial x}-\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}$ - электр майдон кучланганлиги. Биз топган натижа

$$\frac{d\hat{x}}{dt}=c\hat{\alpha}_x=\hat{v}_x$$

тезликни ифода этиш лозим бўлганидан

$$\hat{v}_x=c\hat{\alpha}_x,$$

$$\hat{v}=c\hat{\alpha},\quad \hat{\alpha}=\frac{\hat{v}}{c}$$

келиб чиқади. Шунинг учун

$$\frac{d\hat{x}}{dt}=c\hat{\alpha}_x=\hat{v}_x\ \ ,\ \ \frac{d}{dt}(\hat{p}_x-\frac{e}{c}A_x)=e\,E_x+\frac{e}{c}\left[\vec{v}\ \ x\,\vec{B}\right]_x.$$

Охирги тенглик ўнг томони электронга электромагнит майдон томонидан таъсир этаётган Лоренц кучининг оператор кўринишдаги ифодаси ҳисобланади.

3 Масала. Водород атоми иккинчи энергетик (n=2) сатҳининг электрон спин-орбитал ўзаро таъсирида ажралиши – нозик структураси ҳисоблансин.

Ечиш. Бош квант сон n=2 бўлгани учун орбитал квант сон ℓ=0,1 қийматларга эга бўлади, l нинг бу қийматларида ж квант сони эса ℓ=0 бўлганда j=1/2, ℓ=1 бўлганда эса $j = 1 \pm 1/2 = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ бўлади. Спин-орбитал ўзаро таъсир ҳисобга олинмаганда n=2 учун энергия (Z=1)

$$E_2 = Z^2 E_2(H) \cong -\frac{13,69}{4} \text{эВ} = \text{-3,4 'эВ}$$

бўлади ва $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$, $2P_{3/2}$ термлар барчаси -3,4 эВ энергияга эга бўлади. Ўзаро таъсир ҳисобга олинганда

$$(j = 1/2): \qquad E_{2,1/2} = E_2\left[1 + \frac{\alpha^2}{4}(2 - \frac{3}{4})\right] = E_2(1 + \frac{5\alpha^2}{16})$$

$$(j = 3/2): \qquad E_{2,3/2} = E_2\left[1 + \frac{\alpha^2}{4}(1 - \frac{3}{4})\right] = E_2(1 + \frac{\alpha^2}{16})$$

бўлади ва ажралиш кенглиги

$$\Delta E = E_{2,1/2} - E_{2,3/2} = \alpha^2 |E_2|(\frac{5}{16} - \frac{1}{16}) = \frac{\alpha^2 |E_2|}{4} \Rightarrow$$

$$(\alpha^2 = \frac{1}{137^2} = \frac{1}{18769} = 5,3 \cdot 10^{-5}) \Rightarrow \frac{5,3}{4}|3,4\text{эВ}| \cdot 10^{-5} = 4,5 \cdot 10^{-5} \text{эВ}$$

$$\Delta E = 4,5 \cdot 10^{-5} \text{эВ}$$

Частоталар бирлигида бу кенглик $\Delta E = h\Delta v$ бундан

$$\Delta v = \frac{\Delta E}{h} = \frac{4,5 \cdot 10^{-5}}{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 6,25 \cdot 10^{18} \text{c}} = \frac{4,5}{4,2} \cdot 10^{10} \text{Гц} = 1,10 \cdot 10^4 \text{МГц}.$$

Бу натижа тажриба натижасига тўласинча мос келади. Лекин шуни айтиш керакки, Дирак назариясидаги нозик структура формуласи $2^2S_{1/2}, 2^2P_{1/2}$ термларнинг ўз навбатида ажралишини тушунтира олмайди. Лемб-Резерфорд тажрибаси эса бу термларнинг нозик структураси мавжуд эканлигини ва унинг кийматининг 1058 мГц га тенг булишини курсатади.

4 Масала. Қўшимча ташқи майдон бўлмаганида гамма-квант электрон-позитрон жуфтини ҳосил қила олмаслиги исботлансин.

Ечиш: Ташқи майдон бўлмаганида $\gamma \to e^- + e^+$ жараён учун энергия ва импулснинг сақланиш қонунларини ёзамиз. Агар биз позитрон ҳолатини манфий энергияли электрон ҳолати десак,сақланиш қонунлари қуйидагича бўлади

$$\begin{aligned} &-c\sqrt{p^2 + m^2{}_0c^2} + h\omega = c\sqrt{p^2{}_1 + m^2{}_0c^2}\ , \\ &\vec{p} + \frac{h\omega}{c}\vec{n} = \vec{p}_1\ . \end{aligned} \qquad (1)$$

$\vec{p}-$манфий энергияли электрон импулси, $\vec{p}_1$- мусбат энергияли электрон импулси. Агар (1) даги $\vec{p}_1$ ни квадратга кўтариб, уни (1) иккинчи ифодасига қўйсак

$$-c\sqrt{p^2 + m^2{}_0c^2} + h\omega = c\sqrt{p^2 + 2\frac{h\omega}{c}\vec{p}\,\vec{n} + \frac{h^2\omega^2}{c^2} + m^2{}_0c^2}\ .$$

Бу тенгликнинг ҳар иккала тарафини квадратга кўтариб ёзамиз

$$c^2(p^2 + m^2{}_0c^2) + (h\omega)^2 - 2c\,h\omega\sqrt{p^2 + m^2{}_0c^2} = c^2(p^2 + 2\frac{h\omega}{c}\vec{p}\,\vec{n} + \frac{(h\omega)^2}{c^2} + m^2{}_0c^2)\cdot$$

Охирги муносабатнинг чап томонидан ҳеч вақт унинг ўнг томони келиб чиқмаслиги кўриниб турибди, яни

$$\sqrt{p^2 + m^2{}_0c^2} \neq |\vec{p}\,\vec{n}|\,.$$

Мустақил ишлаш учун масалалар

1 $\hat{S}_z$ операторнинг $\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_1\end{pmatrix}$ функциясига таъсирини топинг.

2.Паули матрицалари учун қуйидаги муносабатлар ўринли эканлиги исботлансин:

$$\left[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y,\right] = 2i\hat{\sigma}_z;\ \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x;\ \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_z,\ \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = 3$$

3.Атом қуйидаги спектрал ҳолатларда жойлашган бўлса, унинг магнит моменти ҳисоблансин.

а) ^1D; б) $^4F_{3/2}$; с) $^2Д_{5/2}$; д) $^6S_{3/2}$.

4.Атом 3-масалада кўрсатилган спектрал ҳолатларда жойлашганда Ланде кўпаювчиси нимага тенг?

5.Қуйидаги ўтишлар

а) $P \rightarrow {}^{1}S$; б) ${}^{3}Д_{1} \rightarrow P_{0}$; с) ${}^{3}Д_{3/2} \rightarrow {}^{2}P_{1/2}$

да ҳосил бўлган спектрал чизиқлар кучсиз магнит майдонида Зееманнинг қайси турдаги эффектини майдонга келтиради?

XIV-БОБ
СОЧИЛИШНИНГ КВАНТ НАЗАРИЯСИ

14.1. Сочилишнинг дифференциал эффектив кесими ва тўлиқ кесими

Зарраларнинг бошқа зарралар билан ўзаро таъсирлашуви натижасида бошланғич йўналишидан четланиб кетиш ҳодисаси с*очилиш деб* аталади. Бундай жараённи ўрганувчи сочилиш назарияси ёки тўқнашув назарияси деб номланган бўлим квант механикасида алоҳида ўрин тутади. Тўқнашув жараёнида тўқнашувчи зарраларнинг ички ҳолатлари ўзгариши ва бирорта зарранинг бошқа бир заррага айланиш жараёнлари ҳам юз беради. Шунга қараб зарраларнинг тўқнашуви икки турда бўлинади: эластик ва ноэластик тўқнашув. Эластик тўқнашувда сочилаётган зарраларнинг ички ҳолатлари ўзгармай, фақат уларнинг ҳаракат йўналишлари ўзгаради. Ноэластик тўқнашувда эса унда иштирок этаётган зарраларнинг ички ҳолатлари, шунингдек турлари ҳам ўзгариши мумкин бўлади. Биз фақат эластик тўқнашувлар назарияси билан қисқача танишиб ўтамиз. Зарралар тўқнашуви жараёнини ўрганиш фанда жуда катта аҳамиятга эгадир. Ихтиёрий зарра ёки нур қандайдир объектга тушганда, улар ўртасида ўзаро таъсирлашув жараёни ҳосил бўлади. Бу таъсирлашув, аниқроғи тўқнашув натижаси ўлароқ сочилган зарра ёки нурнинг хусусиятлари орқали бу жараён хоссалари ва қонуниятлари ўрганилади. Мисол тариқасида, Резерфорд томонидан алфа-зарраларнинг олтин фольгада сочилишини ўрганиш натижасида атомнинг планетар моделининг кашф этилишини келтириш мумкин. Швецарияда жойлашган катта адрон коллайдерида жаҳон олимлари жуда катта энергиягача тезлатилган протонлар тўқнашувини ўрганиш натижасида олам қандай пайдо бўлган деган асрий жумбоққа жавоб ахтаришга уринмоқдалар.

Сочилиш жараёнининг асосий характеристикаси бўлиб унинг дифференциал ва тўлиқ эффектив кесимлари ҳисобланади. Дифференциал эффектив кесим деганда вақт бирлигида $d\Omega$ гавдали бурчак элементида сочилган зарралар сони $dN(\theta,\varphi)$ нинг тушаётган зарралар оқими J_T га бўлган нисбатига айтилади

$$\partial\sigma = \frac{1}{J_T}\partial N(\theta,\phi). \qquad (14.1)$$

Бу ерда $\partial N(\theta,\phi)$ катталик жиҳатдан dS юза элементидан ўтиб сочилаётган зарралар оқим зичлиги J_T нинг шу юза катталигига кўпайтмасига тенг бўлади

$$\partial N(\theta,\phi) = J_C\, dS. \qquad (14.2)$$

(14.2) даги dS гавдали бурчак элементи dS билан қуйидагича боғланган

$$dS = r^2 d\Omega.$$

Шунинг учун дифференциал эффектив кесим

$$d\sigma = \frac{J_C}{J_T} r^2 d\Omega \qquad (14.3)$$

нишондан сочилиб, турли йўналишлар бўйлаб ҳаракат қилиб кетади. Сочилиб кетган зарраларга узоқлашувчи сферик тўлқин деб қараш мумкин бўлади

$$\psi_C = \frac{1}{r} f(\theta,\phi) e^{ikr}. \qquad (14.4)$$

Бу ерда $f(\theta,\phi)$ марказдан турли йўналишларда зарраларнинг сочилиш эҳтимоли бўлиб, у *сочилиш амплитудаси* деб аталади. Энди тушаётган ва сочилаётган тўлқинларнинг эҳтимолли оқим зичликларини ҳисоблаймиз

$$J_T = \upsilon |\psi_T|^2 = \upsilon |e^{ikz}|^2 = \upsilon, \qquad J_C = \upsilon |\psi_C|^2 = \upsilon \left| f(\theta,\phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right|^2 = \frac{\upsilon}{r^2} |f(\theta,\phi)|^2.$$

У ҳолда (14.4) формула

$$\partial\sigma = |f(\theta,\phi)|^2 d\Omega \qquad (14.5)$$

кўринишга келади. Агар $\partial\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ эканлигини ҳисобга олсак, тўлиқ кесим

$$\sigma = \int d\sigma = 2\pi \int |f(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta d\theta \qquad (14.6)$$

формула орқали топилади.

14.2. Эластик сочилишда Борн яқинлашуви.

Марказий куч майдонида сочилишни қарайлик. Бу майдон потенциали $r \to \infty$ да $U(r) \to 0$ бўлсин. Бу ҳолда ҳаракатдаги зарра энергияси фақат мусбат қийматлар ($E > 0$) қабул қилади. $U(r)$ потенциал майдонда ҳаракат қилаётган зарра учун Шредингер тенгламаси

$$-\frac{h^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(r)\psi = E\psi. \qquad (14.7)$$

$k^2 = \frac{2\mu E}{h^2}$, $V(r) = \frac{2\mu}{h^2} U(r)$ алмаштиришлари ўтказилгандан кейин бу тенглама

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = V(r)\psi \tag{14.8}$$

кўринишга эга бўлади. (14.8) тенгламани қўзғолиш назарияси усули билан ечамиз. Унга кўра бу тенгламанинг ечими системанинг қўзғолган ҳолдаги ечими ψ_0 ва қўзғатувчи потенциалнинг ечимга киритадиган тузатмаси χ ларнинг йиғиндисидан иборат бўлади

$$\psi=\psi_0+\chi. \tag{14.9}$$

Биз қараётган ҳолда қўзғолмаган ечим тушаётган зарралар ҳолатини, яъни $\psi=e^{ikz}$ ечимга тузатма эса сочилаётган зарралар ҳолатига, яъни

$$\chi=f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

мос келгани учун (14.8) тенглама қўзғолиш назариясининг биринчи яқинлашувида

$$\nabla^2\chi + k^2\chi = V(r)\chi \tag{14.10}$$

кўринишига келади. Одатдагидек (14.7) нинг ечимини қўзғолмаган ҳолдаги ечим бўйича қаторга ёйиб ўтирмасдан, электродинамикада ечими мавжуд бўлган (14.10) га ўхшаш Даламбер тенгламаси ечимидан фойдаланиб топамиз. Заряд зичлиги $\rho(\vec{r},t)$ бўлган зарядлар системаси томонидан r масофада m вақт моментида яратилган даврий потенциал бўлсин

$$\varphi(r,t)=\varphi_0(r)e^{-i\omega t} \tag{14.11}$$

Даламбернинг

$$\nabla^2\varphi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} = -4\pi\rho \tag{14.12}$$

тенгламасини қаноатлантиради. Даламбер тенгламасидан фойдаланиб ва (14.9) ечимни ҳисоб олиб $\psi_0(r)$ функция учун қуйидаги стандарт

$$\nabla^2\varphi_0 + \frac{\omega^2}{c^2}\varphi = -4\pi\rho_0 \tag{14.13}$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Унинг ечими

$$\phi_0(r,t)=\int\frac{\rho(r^*,t-\frac{|r^*-r|}{c})}{|r^*-r|}d\vartheta^* \qquad (14.14)$$

формула орқали ифодаланади. Энди (14.10) ва (14.12) ларни солиштириб, бизга ноъмалум бўлган доимий параметрларнинг қийматларини топамиз

$$\phi_0(r)=\chi,\ \ k^2=\frac{\omega^2}{c^2},\ \ \rho_0=-\frac{V(r)\psi_0}{4\pi}.$$

У ҳолда (14.12) тенглама ечимини қуйидагича ёза оламиз

$$\chi(r)=-\frac{1}{4\pi}\int\frac{V(r)\psi_0(r^*)}{|\vec{r}^*-\vec{r}|}e^{ik|\vec{r}^*-\vec{r}|}d\vartheta^*. \qquad (14.15)$$

Бу ечимни сочувчи марказдан анча узоқ масофа $r>>r^*$ лар учун кўриб ўтамиз. Бунинг учун, тушаётган оқим йўналиши бўйича бирлик вектор $\bar{n}_0$ сочилган зарралар йўналиши бўйича $\bar{n}$ векторларни киритиб, улар орасидаги бурчакни θ орқали белгилаймиз. Бизни $r>>r^*$ масофадаги ечим қизиқтиргани учун

$$|\vec{r}^*-\vec{r}|=r-\vec{n}\vec{r}^*$$

ёйилмадан фойдаланамиз. Агар $z^*=\vec{r}^*\vec{n}_0$ эканлигини ҳисобга олсак,

$$\chi(r)=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{ik(n-n_0)r^*}V(r^*)d\vartheta^* \qquad (14.16)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Демак,

$$f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{ik(\vec{n}_0-\vec{n})r^*}V(r^*)d\vartheta^*. \qquad (14.17)$$

Бундан сочилиш амплитудаси учун

$$f(\theta)=-\frac{1}{4\pi}\int e^{ik(\vec{n}-\vec{n}_0)r^*}V(r^*)\,d\vartheta^* \qquad (14.18)$$

тенгликни ҳосил қиламиз. Энди

$$\vec{q} = k(\vec{n} - \vec{n}_0) = 2\ k\ \sin\frac{\theta}{2},$$

$$V(r) = \frac{2\mu}{h^2}U(r)$$

алмаштиришлар олиб, сочилиш амплитудаси учун

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{4\pi}\int e^{i\vec{q}\vec{r}^*}U(r^*)d\vartheta^*$$

ифодага эга бўламиз. Ниҳоят дифференциал кесим учун

$$d\sigma = -\frac{\mu^2}{4\pi^2 h^4}\left|\int e^{i\vec{q}\vec{r}^*}U(r^*)\,d\vartheta^*\right|^2 d\Omega. \qquad (14.19)$$

кўринишдаги формулани топамиз. Энди (14.19) ни бироз соддалаштирамиз

$$\int e^{i\vec{q}\vec{r}^*}U(r^*)d\vartheta^* = -2\pi\int_0^\pi e^{iqr^*\cos\theta}d\cos\theta\int U(r^*)\,r^{*2}\,dr^* = -2\pi\int U(r^*)\,r^*\,dr^*\left.\frac{e^{iqr^*\cos\theta}}{iq}\right|_0^\pi =$$

$$= \frac{4\pi}{q}\int U(r^*)r^*\sin qr^*\,dr^*.$$

Натижада (14.19) дан

$$d\sigma = \frac{4\mu^2}{q^2h^4}\left|\int U(r^*)r^*\sin qr^*\,dr^*\right|^2 d\Omega \qquad (14.20)$$

Борн яқинлашувида дифференциал кесим формуласига эга бўламиз. Агар марказий майдон Кулон майдони бўлса, бу майдонда Z_1e зарядли зарралар сочувчи марказнинг Z_2e зарядидан сочилаётган бўлса, бу майдонда потенциал энергия

$$U(r) = \frac{Z_1Z_2e^2}{r}$$

кўринишда берилади ва дифференциал эффектив кесим

$$d\sigma = \frac{4\mu^2Z_1Z_2e^4}{q^2h^4}\left|\int \sin qr dr\right|^2 d\Omega\ .$$

Бу ердаги интегрални ҳисоблайлик

$$\int_0^\infty \sin qrdr = \lim_{\lambda\to 0}\int_0^\infty e^{-\lambda r}\sin qrdr = \lim_{\lambda\to 0}\frac{1}{2i}\int_0^\infty\left[e^{(iq-\lambda)r} - e^{-(iq+\lambda)r}\right]dr = \frac{1}{q}.$$

Демак, сочилишнинг кесими

$$d\sigma = \frac{4\mu^2(Z_1Z_2e^2)^2}{q^4\hbar^4}d\Omega = \left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4E}\right)^2\frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}.$$

Бу эса Кулон майдонида сочилиш учун Резерфорднинг машҳур формуласи ҳисобланади.

14.3. Сочилиш фазаси. Парциал кесим

Марказий майдонда сочилаётган зарра учун Шредингер

$$\nabla^2\psi + k^2\psi = V(r)\psi \qquad (14.21)$$

тенгламасининг аниқ ечимини ахтарамиз. Бу ерда $k^2 = \frac{2\mu}{h^2}E$. Марказий майдонда ҳаракат қилувчи зарранинг энергияси E, импульс моменти квадрати $\hat{L}^2 = h^2 l(l+1)$ ва унинг проекцияси $L_z = mh$ сақланувчан бўлишади ҳамда бу катталикларга тегишли (14.46) тенгламанинг хусусий функцияси

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_l(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad (14.22)$$

умумий кўринишда бўлади. Агар $R_l(r) = u_l(r)/r$ деб олсак, (14.21) дан $u_l(r)$ учун тенгламани ёзамиз

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u_l = V(r)\,u_l. \qquad (14.23)$$

(14.21) нинг $E = \frac{h^2}{2\mu}k^2$ га тегишли умумий ечими (14.22) - ортогонал функциялар бўйича

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=+l} C_{lm}\,R_l(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi) \qquad (14.24)$$

ёйилмаси тариқасида ёзилади. Ечимни (14.22) шаклида тасвирлаш орқали амалда биз уни импулс моменти (14.21) ва унинг z-ўқига проекцияси (m) қийматлари бўйича фарқ қилувчи ҳолатлар суперпозицияси тариқасида оламиз. Сочилиш жараёни учун қуйидаги асимптотик кўринишга

$$\psi_{r\to\infty} = e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (14.25)$$

эга бўлган хусусий ечимни топишимиз лозим. Бу ечим z-ўқи атрофида айланишга нисбатан симметрик бўлгани учун φ бурчакка боғлиқ бўлмайди. Шунинг учун (14.24) да m квант сонга боғлиқ ҳадлар тушиб қолади

$$\Psi(r,\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell R_\ell P_\ell(\cos\theta) \ . \qquad (14.26)$$

Энди асосий вазифамиз C_1 ни топишдан иборат бўлади. Бунинг учун марказий куч майдонида $E > 0$ энергияли зарра ҳаракати учун Шредингер тенгламаси ечимига мурожаат этамиз. Бу ечимни

$$R_1(r) = a\frac{e^{ikr}}{r} + b\frac{e^{-ikr}}{r} \qquad (14.27)$$

кўринишда олиш мумкин. Бу ечим сочувчи марказга $-\infty$ дан келиб тушиб, ва ундан сочилгач $+\infty$ га нисбатан узоқлашувчи сферик тўлқинлар суперпозициясидан иборатдир. (14.27) ни E нинг мусбат қийматлари учун ҳақиқий функция бўлиш шартини

$$R_\ell(r) = a_\ell \frac{\sin(kr + \beta_\ell)}{r}$$

шаклида ёзсак бўлади. У ҳолда

$$\Psi_{r\to\infty} \approx \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell\, a_\ell\, P_\ell(\cos\theta)\frac{\sin(kr+\beta_l)}{r}. \qquad (14.28)$$

Келгуси ҳисобларни енгиллаштириш мақсадида

$$\beta_1 = \delta_1 - 1\frac{\pi}{2}, \qquad C_1\, a_1 = \frac{b_1}{k}$$

белгилашлар киритамиз ва (14.28) ни

$$\Psi_{r\to\infty} \approx \sum_{l=0}^{\infty} b_l\, P_l(\cos\theta)\frac{\sin\left(kr+\delta_l - l\frac{\pi}{2}\right)}{kr} \qquad (14.29)$$

кўринишга келтирамиз. Энди тушаётган зарраларни ифода этувчи ясси тўлқин e^{ikz} ни сферик тўлқинларга ёйиб ёзамиз. Бундай ёйилманинг умумий асимптотик кўриниши қуйидагича бўлади

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \chi_l(r) P_l(\cos\theta). \qquad (14.30)$$

(14.30) нинг ҳар иккала тарафини $P_{l'}(x)$ $(x=\cos\theta)$ га кўпайтириб, x бўйича интеграллаб ёзамиз

$$\int_{-1}^{1} e^{ikrx} P_{\ell'}(x)dx = \sum_{\ell=0}^{\infty} \chi_\ell(r) \int_{-1}^{1} P_{\ell'}(x) P_\ell(x) dx. \qquad (14.31)$$

Бу ердаги Лежандр кўпҳадлари учун

$$\int_{-1}^{1} P_{l'}(x)\, P_l(x)\, dx = \frac{2}{2l+1}\delta_{l'l}$$

ортонормаллик шарти амал қилади. У ҳолда (14.31) дан топамиз

$$\chi_l(r) = \frac{2l+1}{2}\int_{-1}^{1} e^{ikrx} P_{l'}(x)\, dx. \qquad (14.32)$$

(14.32) нинг ўнг тарафидаги интегрални бўлаклаб интеграллаймиз

$$\chi_\ell(r) = \frac{2\ell+1}{2}\left\{\frac{e^{ikrx}}{ikr} P_\ell(x)\Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1}\frac{e^{ikrx}}{ikr}\frac{dP_\ell(x)}{dx}dx\right\}. \qquad (14.33)$$

Биламизки, Лежандр кўпҳади

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell\, \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}\left(x^2-1\right)^\ell$$

тенглик билан аниқлади ва $P_\ell(x=1)=1,\ P_\ell(x=-1)=(-1)^\ell$ қийматларга эга бўлади. Демак, (14.33)

$$\chi_\ell(r)=\frac{2\ell+1}{2}\left\{\frac{e^{ikrx}-(-1)^\ell e^{-ikr}}{ikr}-\frac{1}{ikr}\int_{-1}^{1}e^{ikrx}\frac{dP_\ell(x)}{dx}dx\right\}. \qquad (14.34)$$

(14.34) нинг ўнг тарафида интеграл остида жойлашган

$$e^{ikrx}\sim P_\ell(x),\ \ \frac{dP_\ell(x)}{dx}\sim P_{\ell-1}(x)$$

тартибида ва бу интеграл

$$\int_{-1}^{1}P_l(x)P_{l-1}(x)dx=0$$

бўлгани учун

$$\chi_\ell(r)=\frac{2\ell+1}{2}\frac{e^{ikr}-(-1)e^{-ikr}}{ikr}. \qquad (14.35)$$

Бу ифодани соддалаштириш учун $(-1)^\ell$ ни

$$(-1)^l=\left(e^{i\pi}\right)^l=e^{il\pi/2}e^{il\pi/2}$$

шаклида ёзамиз. У ҳолда

$$\chi_l(r)=\frac{2l+1}{2}e^{il\pi/2}\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}}{ikr}$$

бўлади ва

$$e^{i\ell\pi/2}=\left(\cos\frac{\pi}{2}+i\sin\frac{\pi}{2}\right)^\ell=i^\ell$$

эканлигини эътиборга олсак,

$$\chi_l(r)=i^l(2l+1)\frac{\sin(kr-l\pi/2)}{kr} \qquad (14.36)$$

натижага келамиз. (14.36) ни (14.30) га қўямиз

$$e^{ikz}=\sum_{\ell=o}^{\infty}i^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\frac{\sin(kr-\ell\pi/2)}{kr}. \qquad (14.37)$$

Энди (14.24) даги сочилиш амплитудаси бўлган $f(\theta)$ ни Лежандр кўпҳади бўйича қаторга ёямиз

$$f(\theta)=\sum_{\ell=0}^{\infty}\eta_\ell P_\ell(\cos\theta) \quad . \tag{14.38}$$

Бу ерда η_ℓ - доимий коэффициентлар. У ҳолда (14.37), (14.38) ларни (14.30) га қўямиз

$$\Psi_{r\to\infty}=\sum_{\ell=0}^{\infty}i^\ell(2\ell+1)P_\ell(\cos\theta)\frac{\sin\left(kr+\delta_\ell-\ell\frac{\pi}{2}\right)}{kr}+\sum_{\ell=0}^{\infty}\eta_\ell P_\ell(\cos\theta)\frac{e^{ikr}}{kr}\,. \tag{14.38}$$

Бошқа томондан, (14.38) функция (14.29) - асимптотик функция кабидир. Бурчак θ - нинг исталган қийматида бу функцияларда бир хил иштирок этаётган $P_\ell(\cos\theta)$ - кўпҳад олдидаги коэффициентлар бир-бирларига тенг бўлади

$$\frac{1}{2ik}b_l e^{i\left(\delta_l-l\frac{\pi}{2}\right)}=\frac{2l+1}{2ik}+\eta_l\,, \tag{14.39}$$

$$\frac{1}{2ik}b_l e^{-i(\delta_l-l)\frac{\pi}{2}}=\frac{2l+1}{2ik}e^{il\pi} \quad . \tag{14.40}$$

(14.40) дан

$$b_l=(2l+1)e^{i\left(\delta_l+l\frac{\pi}{2}\right)}$$

эканлигини топиб, уни (14.38) га қўямиз

$$\eta_l=\frac{2l+1}{2ik}\left(e^{2i\delta_l}-1\right) \quad . \tag{14.41}$$

(14.41) ни (14.38) га қўйиб, сочилиш амплитудасини топамиз

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left(e^{2e\delta_\ell}-1\right)P_\ell(\cos\theta)\,. \tag{14.42}$$

Бундан сочлишнинг дифференциал кесими учун

$$d\sigma=|f(\theta)|^2 d\Omega=\frac{1}{4k^2}\left|\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left(e^{2i\delta_\ell}-1\right)P_\ell(\cos\theta)\right|^2 d\Omega \tag{14.43}$$

формулага эга бўламиз. Бундан кўринадики, сочилиш кесими сочилиш фазаси δ_l га боғлиқ бўлар экан. (14.43) ни интеграллаб, тўлиқ кесимни топиш мумкин. Бунинг учун $x = \cos\theta, d\Omega = \sin\theta\, d\theta d\varphi = -2\pi d(\cos\theta) = -2\pi dx$ деб белгиласак,

$$\sigma=\frac{\pi}{2k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\left[(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)\right]\left[(2l'+1)\left(e^{-2i\delta_l}-1\right)\right]\int_{-1}^{1}P_l(x)P_{l'}(x)dx=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\delta_l}-1\right)\left(e^{-2i\delta_l}-1\right)=$$

$$=\frac{(2i)^2}{k^2}\pi\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\frac{e^{i\delta_l}-e^{-i\delta_l}}{2i}\times\frac{e^{i\delta_l}-e^{-i\delta_l}}{2i}e^{-i\delta_l}$$

ёки

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2\delta_l \quad . \tag{14.44}$$

(14.44) дан кўринадики, сочилишнинг тўлиқ эффектив кесими σ парциал кесимлар деб аталадиган σ_l (бу ерда $l=0(s), 1(p), 2(d), \ldots$) ларнинг йиғиндисидан иборат бўлади:

$$\sigma = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sigma_\ell ,$$

бунда

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l \quad . \tag{14.45}$$

Бу кесимнинг мумкин бўлган максимал қиймати

$$(\sigma_\ell)_{max} = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell+1)$$

формула билан аниқланади.

Назорат саволлари:

1. Нега сочилиш кесим бирлигида ифодаланади?
2. Дифференциал ва тўлиқ кесим нима билан бир-биридан фарқ қилади?
3. Сочилиш амплитудаси нима?
4. Эластик сочилишда қандай катталик ўзгарувчан бўлади?
5. Манфий энергиянинг қандай физик маъноси бор?
6. Парциал кесим деб нимага айтилади?
7. Борн яқинлашуви қандай зарралар учун қўлланилади?
8. Сочилиш амплитудаси ва сочилиш фазаси нима?

МАСАЛА ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1 Масала. Борн яқинлашувида зарра $U(r)=\frac{\alpha}{r}e^{-\frac{r}{a}}$ потенциал майдонда сочилишининг дифференциал ва тўлқин кесимлари ҳисоблансин. Дифференциал кесим учун $qa>>1$ чегарада Резерфорд формуласи ўринли эканлиги кўрсатилсин.

Ечиш. Дифференциал кесим учун Борн яқинлашувида

$$d\sigma=\frac{4m^2}{h^4q^2}\left|\int U(r)r\sin qrdr\right|^2 d\Omega$$

формула ўринли бўлганидан, бу формулага $U(r)$ -қийматини қўямиз

$$d\sigma=\frac{4m^2\alpha^2}{h^4q^2}\left|\int_0^\infty e^{-\frac{r}{a}}\sin qrdr\right|^2 d\Omega=\frac{4m^2\alpha^2}{h^4q^2}\left|\frac{e^{-\frac{r}{a}}\left(-\frac{1}{a}\sin qr-q\cos qr\right)}{\left(-\frac{1}{a}\right)^2+q^2}\right|_0^\infty d\Omega=$$

$$=\frac{4m^2\alpha^2}{h^4q^2}\frac{q^2a^4}{(1+q^2a^4)^2}d\Omega=\left(\frac{2m\alpha a^2}{h^2}\right)^2\frac{d\Omega}{(1+q^2a^4)^2}.$$

Масала шартига кўра $qa>>1$ бўлгани учун

$$d\sigma=\left(\frac{2m\alpha a^2}{h^2}\right)^2\frac{d\Omega}{q^4a^4}\quad. \tag{1}$$

Бизда $q=2k\sin\frac{\theta}{2}$, $\quad k=\frac{\sqrt{2mE}}{h}$ бўлганидан

$$q^4h^4=16k^4h^4\sin^4\frac{\theta}{2}=16(2mE)^2\sin^4\frac{\theta}{2}$$

буни (1) - га қўямиз

$$d\sigma=\left(\frac{2m\alpha}{16(2mE)^2}\right)^2\frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}=\left(\frac{\alpha}{4E}\right)^2\frac{d\Omega}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\quad.$$

Бу дифференциал кесим Кулон майдонида сочилишга мос келади ва Резерфорд формуласи ҳисобланади. Энди $d\sigma$-ни $d\Omega$ бўйича интеграллаб, тўлиқ эффектив кесимни ҳисоблаймиз. Бунинг учун аввало $d\Omega$ нинг кўринишини ўзгартирамиз

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi = 2\pi \sin\theta d\theta = 4\pi \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}d\theta = 4\pi d\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right).$$

У ҳолда

$$\sigma = \left(\frac{2m\alpha a^2}{h^2}\right)^2 \int_0^{\pi} \frac{4\pi d(\sin^2\frac{\theta}{2})}{(1+4k^2a^2\sin^2\frac{\theta}{2})^2} = 4\pi\left(\frac{2m\alpha a^2}{h^2}\right)^2 \int_0^1 \frac{dx}{(1+4k^2a^2x)^2} = .$$

$$= \pi\left(\frac{4m\alpha a^2}{h^2}\right)^2 \left(-\frac{1}{4k^2a^2}\right)\left[\frac{1}{1+4k^2a^2x}\right]\Bigg|_0^1 = 16\pi a^2\left(\frac{m\alpha a^2}{h^2}\right)^2 \frac{1}{1+4k^2a^2}$$

2 Масала. Зарранинг $U(r)=U_0 e^{-\frac{r^2}{a^2}}$ потенциал майдонда сочилишининг дифференциал ва тўлиқ эффектив кесимлари Борн яқинлашувида топилсин.
Ечиш. Берилган $U(r)$ потенциални Борн яқинлашувидаги дифференциал эффектив кесимга қўйсак,

$$d\sigma = \frac{4m^2U_0^2}{q^2h^4}\left|\int_0^{\infty} e^{-\frac{r^2}{a^2}} r\sin qr dr\right|^2 d\Omega$$

бўлади. $\sin qr = \frac{1}{2i}(e^{iqr} - e^{-iqr})$ бўлганидан

$$d\sigma = \frac{m^2U_0^2}{q^2h^4}\left|\int_0^{-\infty} e^{-\frac{r^2}{a^2+iqr}} r dr - \int_0^{\infty} e^{--\frac{r^2}{a^2-iqr}} r dr\right|^2 d\Omega$$

$-\frac{r^2}{a^2} \pm iqr$ даражани тўлиқ квадратга айлантирамиз

$$-\frac{r^2}{a^2} \pm iqr = -\frac{1}{2}(r^2 \mp iqa^2 r) = -\frac{1}{a^2}\left(r \mp \frac{iqa^2}{2}\right)^2 - \frac{q^2a^2}{4}.$$

Шунинг учун

$$d\sigma = \frac{4m^2U_0^2}{q^2\hbar^4} e^{-\frac{q^2a^2}{2}} \left|\int_0^{-\infty} e^{-\frac{r^2}{a^2(r-\frac{iqa^2}{2})^2}} r dr - \int_0^{\infty} e^{\frac{r^2}{a^2(r+\frac{iqa^2}{2})^2}} r dr\right|^2 d\Omega.$$

Агар $\frac{1}{a^2}\left(r \mp \frac{iqa^2}{2}\right) = y^2$ алмаштириш ўтказсак, 1-интегралда $r=ay+\frac{iqa^2}{2}$, 2 - интегралда эса $r=ay-\frac{iqa^2}{2}$, иккала интегралда ҳам $dr=ady$ бўлади ва

$$d\sigma = \left(\frac{4mU^2}{qh^2}\right)^2 e^{-\frac{q^2a^2}{2}} = \left|\int_0^{-\infty} e^{-y^2\left(ay+\frac{iqa^2}{2}\right)} ady - \int_0^{\infty} e^{-y^2\left(ay-\frac{iqa^2}{2}\right)} ady\right|^2 d\Omega =$$

$$= \left(\frac{mU_0}{qh^2}\right)^2 e^{-\frac{q^2a^2}{2}} \left|iqa^3 \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy\right|^2 d\Omega = \left(\frac{mU_0}{qh^2}\right)^2 e^{-\frac{q^2a^2}{2}} q^2 a^6 \frac{\pi}{4} d\Omega = \cdot$$

$$= \frac{\pi a^2}{4}\left(\frac{mU_0 a^2}{h^2}\right)^2 e^{-\frac{q^2a^2}{2}} d\Omega$$

Бу ерда биз $\int_0^{\infty} e^{-y^2} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ эканлигидан фойдаландик. Тўлиқ эффектив кесим

$$\sigma = \frac{\pi a^2}{4}\left(\frac{mU_0 a^2}{h^2}\right)^2 2\pi \int_0^{\pi} e^{-\frac{q^2a^2}{2}} \sin\theta\, d\theta == \frac{\pi a^2}{2}\left(\frac{mU_0 a^2}{h^2}\right)^2 2\pi \int_0^{\pi} e^{-2k^2a^2\sin^2\frac{\theta}{2}} 2d\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right) =$$

$$= \pi^2 a^2 \left(\frac{mU_0 a^2}{h^2}\right)^2 \left.\frac{e^{-2k^2a^2\sin\frac{\theta}{2}}}{-2k^2a^2}\right|_0^{\pi} = \frac{\pi^2}{2k^2}\left(\frac{mU_0 a^2}{h^2}\right)^2 \left(1 - e^{-2k^2a^2}\right).$$

3 Масала. Борн яқинлашувида $U(r)=U_0\delta(\vec{r})$ (бу ерда $\delta(\vec{r})$-Диракнинг δ-функцияси) потенциалида сочилишнинг эффектив кесими топилсин.

Ечиш. Дифференциал кесим $d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega$ бўлгани учун Борн яқинлашувида $f(\theta)$-сочилиш амплитудасини ҳисоблаймиз. Биламизки,

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi h^2}\int e^{i\vec{q}\vec{r}} U(r) dr = \frac{mU_0}{2\pi h^2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{q}\vec{r}} \delta(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{mU_0}{2\pi h^2}.$$

Демак, сочилиш изотроп бўлар экан, чунки $f(\theta)$ сочилиш бурчагига боғлиқ бўлмас экан. Шунингдек, $f(\theta)$ сочилувчи зарра энергиясига ҳам боғлиқ бўлмайди.

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \left(\frac{m^2U_0^2}{4\pi^2h^2}\right) d\Omega.$$

Интеграллаб, тўлиқ кесимни топамиз ($\int d\Omega = 4\pi$)

$$\sigma = \frac{m^2 U_0^2}{\pi h^2}.$$

4 Масала. Борн яқинлашувида электронларнинг ҳажм бўйича текис зарядланган сферик ядро томонидан эластик сочилишининг эффектив кесими ҳисоблансин.

Ечиш. Биламизки, Борн яқинлашувида эффектив кесим сочувчи майдон потенциали U га боғлиқ бўлади. Ядро сферик майдонга эга бўлгани учун $U=U(r)$ бўлади ва бу функция ядронинг электростатик потенциали $\varphi(\vec{r})$ билан

$$U(\vec{r}) = -e\varphi(\vec{r}) \tag{1}$$

кўринишда боғланган бўлади. Ўз навбатида $\varphi(\vec{r})$ потенциал

$$\Delta\phi = -4\pi\rho \tag{2}$$

Пуассон тенгламасини қаноатлантиради (бу ерда ρ - заряднинг ҳажм зичлиги). Энди (2)-тенгламани Фуре интегралига ёйиб ёзамиз

$$\Delta\phi = \int (\Delta\phi)_q e^{-i\vec{q}\vec{r}} d\vec{q} = -4\pi \int \rho_q e^{-i\vec{q}\vec{r}} d\vec{q}. \tag{3}$$

Иккинчи томондан $\varphi(\vec{r})$ потенциалнинг Фуре ёйилмаси

$$\phi(\vec{r}) = \int \phi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\,\vec{r}} dq$$

каби ёзилгани учун охирги тенгликка чап томонидан Δ-оператор билан таъсир этсак ва $\Delta=\Delta(\vec{r})$ функцияси эканлигини эътиборга олсак,

$$\Delta\phi(\vec{r}) = \Delta\int \phi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} d\vec{q} = \int \phi_{\vec{q}} \Delta(e^{-i\vec{q}\vec{r}}) d\vec{q} = -\int \phi_{\vec{q}} q^2 e^{-i\vec{q}\vec{r}} d\vec{q}$$

эканлигини топамиз. Энди охирги тенгламани (3)-билан солиштириб топамиз

$$\phi_{\vec{q}} = \frac{4\pi}{q^2}\rho_{\vec{q}}. \tag{4}$$

Потенциал ва заряд зичликларининг Фуре компоненталари

$$\phi_{\vec{q}} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \phi(\vec{r}) e^{i\vec{q}\,\vec{r}} dr, \qquad \rho_{\vec{q}} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \rho(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}} dr$$

бўлгани учун (4)-га асосан

$$\int \phi(\vec{r})\, e^{i\vec{q}\vec{r}} dr = \frac{4\pi}{q^2} \int \rho(\vec{r})\, e^{i\vec{q}\vec{r}} dr \ . \qquad (5)$$

Ядро заряди унинг ҳажм бўйича текис тақсимланганлиги ва ядро сиртидан ташқарида нолга тенг бўлганлиги учун

$$\rho(\vec{r})\big|_{r\le R} = \rho_0 = \frac{ze}{V} = \frac{ze}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{3ze}{4\pi R^3}$$

бўлади. Бу ерда R - ядро сферасининг радиуси. У ҳолда

$$\int U(\vec{r})\, e^{i\vec{q}\vec{r}} dr = -e\int \phi(\vec{r})\, e^{i\vec{q}\vec{r}} dr = \frac{-4\pi e\rho_0}{-q^2} \int\limits_{r\le R} e^{i\vec{q}\vec{r}} dr$$

Бу ердаги

$$\int\limits_{r\le R} e^{i\vec{q}\vec{r}} dr \quad = 2\pi \int\limits_0^R \int\limits_0^{2\pi} e^{iqr\cos\theta} r^2 dr \sin\theta\, d\theta = = 2\pi \int\limits_0^R r^2 dr \int\limits_0^{\pi} e^{iqr\cos\theta} \sin\theta d\theta = \frac{4\pi}{q} \int\limits_0^R r \sin qr^2 dr =$$

$$= \frac{4\pi}{q^3} (\sin qR - qR\cos qR)$$

У ҳолда эффектив кесим

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^2} \left| \int U(\vec{r}) e^{i\vec{q}\vec{r}} dr \right|^2 d\Omega == \frac{m^2}{4\pi^2 h^2} \left(\frac{4\pi e 3ze}{q^2 4\pi R^3} \right)^2 \left(\frac{4\pi}{q^3} \right)^2 (\sin qR - qR\cos qR)^2 =$$

$$= \left(\frac{6mze^2}{q^2 h^2} \right)^2 \frac{(\sin qR - qR\cos qR)^2}{(qR)^2} d\Omega \qquad (6)$$

(6)-формулада $x=qR$ алмаштириш ўтказиб, ундаги

$$\phi(x) = \frac{(\sin x - \cos x)}{x^6} \qquad (7)$$

функцияни алоҳида текширамиз. Аввало шуни қайд қилиш лозимки, зарранинг сочилиш бурчаги $\theta \to 0$ (яъни $x \to 0$) да $\phi(x) \to \infty$ бўлади ва (6)-даги кесим чексиз катта бўлади. Агар $x << 1$ бўлса, (7)-даги функцияларни Тейлор қаторига ёйиб ёзиш мумкин

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \ldots, \qquad \cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \ldots$$

У ҳолда

$$\varphi \approx \frac{\left[x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}-x\left(x-\frac{x^2}{2!}+\frac{x^4}{4!}\right)+\ldots\right]^2}{x^6}=\frac{\left[-\frac{x^3}{6}+\frac{x^5}{120}+\frac{x^3}{2}+\frac{x^5}{24}+\ldots\right]^2}{x^6}=\frac{\left[\frac{x^3}{3}-\frac{x^5}{30}+\ldots\right]^2}{x^6}=$$

$$=\frac{1}{x^6}\left(\frac{x^6}{9}-\frac{x^8}{45}+\ldots\right)=\frac{1}{9}-\frac{x^2}{45}+O\left(x^4\right)$$

бўлади ва (6)-даги эффектив кесим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{ze^2}{2mv^2}\right)\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\left\{1-\frac{1}{5}(qR)^2+O\left[(qR)^2\right]\right\} \tag{8}$$

кўринишга эга бўлади. Бу ерда биз

$$q=2k\sin\frac{\theta}{2}=2\frac{p}{h}\sin\frac{\theta}{2}=\frac{2mv}{h}\sin\frac{\theta}{2}$$

эканлигини ҳисобга олдик. (8)-дан кўринадики, агар ядро радиуси $R=0$ бўлса, ядро нуқтавий ядро бўлади ва унинг майдони Кулон майдони ҳисобланади. Шунинг учун ҳам берилган ҳолда эффектив кесим учун

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{ze^2}{2mv^2}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}} \tag{9}$$

Резерфорд формуласини топамиз. Агарда $R\neq 0$ бўлса, ядронинг майдони Кулон майдонидан четланади ва натижада сочилиш эффектив кесими учун (9)-дан кичикроқ қийматга эга бўлган кесимни оламиз

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{ze^2}{2mv^2}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\left[1-F(\theta)\right], \tag{10}$$

бу ерда $F(\theta)=\frac{4}{5}(kR)^2\sin^2\frac{\theta}{2}$.

5 Масала. Парциал тўлқинлар усулидан фойдаланиб, секин зарраларнинг кенглиги a, чуқурлиги U_0 бўлган тўғри бурчакли потенциал ўрадан сочилишининг тўлиқ эффектив кесими ҳисоблансин. Бунда

$$\sqrt{\frac{2mU_0}{h^2}}a<<1$$

ҳоли қаралсин.

Ечиш. Зарра сочилаётган потенциал ўра сферик симметрияга эга бўлгани учун сферик координаталар системасида радиал функция учун Шредингер тенгламаси қуйидаги кўринишга эга бўлар эди

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2m}{h^2}\left[E-U(r)-\frac{h^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R=0\,. \qquad (11)$$

Агар биз $R(r)=\frac{\chi(r)}{r}$ (бу ерда янги $\chi(r)$ функция $\chi(r)\big|_{r=0}=0$ чегаравий шартни қаноатлантиради) алмаштириш ўтказсак, (11)-тенглама содда кўринишга келади

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{2m}{h^2}\left[E-U(r)-\frac{h^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]\chi=0\,. \qquad (12)$$

Берилган потенциал майдондан сочилаётган зарралар кичик тезликка эга бўлганликлари учун улар асосан s - ҳолатдаги (орбитал квант сони $l=0$ бўлган) зарралар ҳисобланади. Шу сабабли (12) тенглама берилган ҳолда

$$\chi''+\frac{2m}{h^2}(E-U_0)\chi=0 \qquad (13)$$

кўринишини олади. Бу ерда биз $\frac{d^2\chi}{dr^2}=\chi''$, $U=-U_0$ деб ёздик. Биз (13)-тенгламанинг $r>a$ (ўра мавжуд бўлган соҳа) бўлган соҳалардаги ечимларини ахтарамиз. Бунинг учун (13)-тенгламани икки соҳа учун ёзамиз

$$\chi_1''+k_1^2\chi_1=0 \qquad (r>a),$$
$$\chi_2''+k_2^2\chi_2=0 \qquad (r<a).$$

Бу ерда $k_1^2=\frac{2mE}{h^2}$, $k_2^2=\frac{2m(E+U_0)}{h^2}$ деб белгиланади. Бу тенгламаларнинг ечимлари қуйидаги кўринишга эга бўлади

$$\chi_1(r)=\sin(k_1 r+\delta_0) \qquad r>a,$$
$$\chi_2(r)=A\sin k_2 r \qquad r<a,.$$

Биринчи ечимдаги δ_0 зарраларнинг потенциал майдонда сочилишида улар фазасининг ўзгаришини ифода этади. Бу ечимлар $r=a$ чегарада узлуксиз бўлиши шарт, яъни

$$\begin{aligned}\chi_1(r)\big|_{r=a} &= \chi_2(r)\big|_{r=a}\\ \chi_1'(r)\big|_{r=a} &= \chi_2'(r)\big|_{r=a}\end{aligned}.$$

Бу шартлардан

$$\begin{aligned}\sin(k_1a+\delta_0) &= A\sin k_2a\\ \cos(k_1a+\delta_0) &= \frac{k_2}{k_1}A\cos k_2a\end{aligned} \qquad (14)$$

тенгликларни осонлик билан топамиз. Бу тенгликларнинг чап ва ўнг томонларини ўзаро мос равишда бўлиб ёзамиз

$$\mathrm{tg}(k_1a+\delta_0)=\frac{k_1}{k_2}\mathrm{tg}k_2a\,. \qquad (15)$$

Сочилишнинг тўлиқ эффектив кесими $\sigma=\sum_l \sigma_l$, парциал кесим σ_l эса

$$\sigma_l=\frac{4\pi}{k_l^2}\sum_l(2l+1)\sin^2\delta_l$$

формула орқали ифодалангани учун биз қараётган $l=0$ бўлган ҳолда тўлиқ кесим

$$\sigma=\frac{4\pi}{k_1^2}\sin^2\delta_0$$

орқали ҳисобланади. Бу ифодадаги

$$\delta_0=\mathrm{arctg}\left(\frac{k_1}{k_2}\mathrm{tg}k_2a\right)-k_1a\,.$$

Масалада кичик тезликдаги зарралар ҳоли қаралаётгани учун $k_1=\sqrt{\frac{2mE}{h^2}}$ кичик қийматга эга бўлади, яъни $\frac{k_1}{k_2}\mathrm{tg}k_2a<<1$ бўлади. Шунинг учун

$$\mathrm{arctg}\left(\frac{k_1}{k_2}\mathrm{tg}k_2a\right)\approx\frac{k_1}{k_2}\mathrm{tg}k_2a$$

деб ёзиш мумкин. У ҳолда

$$\delta_0 = \frac{k_1}{k_2} tgk_2a - k_1a = k_1a\left(\frac{tgk_0a}{k_0a} - 1\right).$$

Бу ерда $E \to 0$ бўлгани учун $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{h^2}(E+U_0)} \Rightarrow k_0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{h^2}}$ деб ёздик. δ_0 ҳам жуда кичик қийматга эга бўлади ва шунинг учун $\sin^2\delta_0 \approx \delta_0^2$

$$\sigma = 4\pi a^2\left(\frac{tgk_0a}{k_0a} - 1\right)^2 \quad .$$

Унча ҳам чуқур бўлмаган ўра учун $k_0a<<1$ бўлганида

$$tgk_0a \approx k_0a - \frac{(k_0a)^3}{3}$$

бўлади ва тўлиқ кесим

$$\sigma=4\pi a^2 \frac{k_0^4a^4}{9} = \left(\frac{4}{3}\frac{mU_0a^3}{h^2}\right)$$

кўринишга эга бўлади.

Мустақил ишлаш учун масалалар

1. Сочилиш амплитудаси учун

$$\phi(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{i=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)p_l(\cos\theta)$$

муносабатнинг ўринли эканлиги ва Лежандр кўп ҳади $P_l(\cos\theta)$ нинг ортогоналлигидан фойдаланиб, сочилишнинг тўлиқ кесими учун

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l$$

формулани келтириб чиқаринг.

2. Борн яқинлашувида

$$U(r)=\frac{\lambda}{r}e^{-r/a}$$

потенциалда сочилишнинг амплитудаси ва тўлиқ кесимини ҳисобланг.

3. Борн яқинлашувига водород атоми потенциал майдонида сочилишнинг дифференциал кесимини топинг.

XV-БОБ
ВАҚТГА БОҒЛИҚ ҚЎЗҒОЛИШ

15.1. Вақтга боғлиқ бўлган қўзғолиш.

Қўзғотувчи таъсир вақтга боғлиқ $(W = \hat{W}(t))$ бўлгани учун система гамилтониани вақтга боғлиқ бўлади

$$H(t) = H_0 + W(t) \ . \qquad (15.1)$$

Натижада система энергияси сақланувчан катталик бўла олмайди. Берилган ҳолда фақатгина қўзғолмаган ҳолат тўлқин функцияларига қўзғотувчи таъсир киритадиган тузатмалар ҳақида гап боради. Қаралаётган ҳолда Шредингер тенгламаси

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{W}(t)\right)\psi \qquad (15.2)$$

шаклида ёзилади. Қўзғолмаган система учун Шредингер тенгламаси

$$\hat{H}_0\psi_k^0 = E_k^0\psi_k^0 \qquad (15.3)$$

дан хусусий функция ва хусусий қийматлар бизга маълум. (15.2) тенгламадаги тўлқин функция (15.3) даги хусусий функцияларнинг суперпозицияси тариқасида аниқланади

$$\psi = \sum c_k(t)\psi_k^0 \ . \qquad (15.4)$$

Бу ердаги ёйилма коэффициентлари $c_k(t)$ вақтнинг функцияси ҳисобланади. (15.4) ёйилмани (15.2) га қўямиз ва (15.3) ни эътиборга оламиз. У ҳолда

$$ih\sum\frac{\partial c_k(t)}{\partial t} = \sum c_k(t)\,\hat{W}(t)\,\psi_k^0 \qquad (15.5)$$

тенгламага эга бўламиз. Бу тенгламанинг ҳар икки тарафини чап томондан $\psi_{k'}^{0*}$ га кўпайтирамиз ва бутун фазо бўйича интеграллаймиз ҳамда

$$\int\psi_{k'}^{0*}\psi_k^0 d\tau = \delta_{k'k}$$

эканлигини ҳисобга оламиз

$$ih\frac{\partial c_k(t)}{\partial t} = \sum W_{k'k}(t)\,c_{k'}(t) \ . \qquad (15.6)$$

Бу ифода (15.1) тенгламанинг энергия тасаввуридаги кўриниши бўлиб ҳисобланади. (15.6) да қўзғотувчи операторнинг матрица элементи

$$W_{k'k} = \int \hat{\psi}^{0*}_{k'} \bar{W}(t) \psi^0_k d\tau = W_{k'k} e^{\frac{i}{\hbar}(E^0_{k'} - E^0_k)t}$$

шаклда ёзилади, чунки унда иштирок этувчи функция стационар ҳолат тўлқин функциясидир

$$\psi^0_k = \psi^0_k(x,t) = \psi^0_k(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E^0_k t} \quad . \qquad (15.8)$$

Энди (15.5) тенгламани кетма-кет яқинлашишларда ёзамиз. Бунинг учун $c(t)$ функцияларни

$$c(t) = c^{(0)} + c^{(1)} + c^{(2)} + ...$$

каби ёзиб, турли яқинлашувлардаги тенгламаларга эга бўламиз

$$ih\frac{\partial c^0_k}{\partial t} = 0 \qquad \text{(0-инчи яқинлашув)} \qquad (15.9)$$

$$ih\frac{\partial c^{(1)}_k}{\partial t} = \sum W_{k'k} c^{(0)}_{k'} \qquad \text{(1-инчи яқинлашув)} \qquad (15.10)$$

$$ih\frac{\partial c^{(2)}_k}{\partial t} = \sum W_{k'k} c^{(1)}_{k'} \qquad \text{(2-инчи яқинлашув)} \qquad (15.11)$$

ва ҳоказо давом эттириш мумкин. (15.9) тенгламанинг ечими содда кўринишга эгадир: $c^0_k = const$. Функциянинг бу қиймати бошланғич шарт вазифасини ўтайди, яъни, t=0 вақт моментидаги система ҳолатини ифодалайди. Агар бу моментда система энергияси E^0_n қийматга эга бўлса, $c^0_k = \delta_{nk}$ кўринишга эга бўлади. Топилган бу қийматни (15.10) га қўйиб, биринчи яқинлашувдаги тўлқин функцияни аниқлаймиз

$$c^{(1)}_k = -\frac{i}{h}\int_0^t W_{kn}(t')\,dt' \quad . \qquad (15.12)$$

Шу тариқа кетма-кет Шредингер тенгламасининг ечимлари топиб борилади. Топилганлардан кўринадики, тўлқин функцияга киритиладиган тузатмалар $W(t)$ операторнинг вақтга қандай боғлиқ бўлганлиги билан аниқланар экан. Фараз қилайлик, қўзғотувчи оператор вақтнинг даврий функцияси бўлсин

$$\hat{W}(t) = \hat{A}e^{-i\omega t} + \hat{B}e^{i\omega t}. \qquad (15.13)$$

Бу ерда A, B лар вақтга боғлиқ бўлмаган операторлар, ω - қўзғотувчи операторнинг вақт бўйича ўзгариш частотаси. $W(t)$ оператори энергия оператори бўлгани учун у эрмит оператори ҳисобланади. Шунинг учун (15.13) ни ёза оламиз

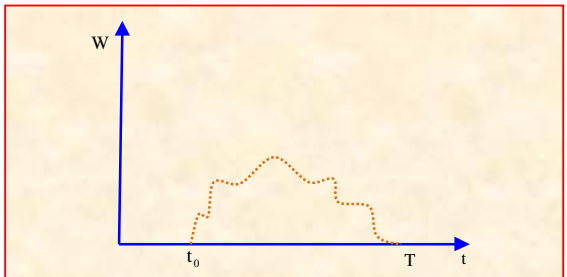
$$A_{kn}e^{-i\omega t} + B_{kn}e^{-i\omega t} = A^*_{nk}e^{i\omega t} + B^*_{nk}e^{-i\omega t} \ . \qquad (15.14)$$

Бундан $B_{kn} = A^*_{nk}$, шунинг учун (15.13) матрица кўринишида қуйидагича ёзилади

$$W_{kn}(t) = W_{kn}e^{i\omega_{kn}t} = A_{kn}e^{i(\omega_{kn}-\omega)t} + A^*_{nk}e^{i(\omega_{kn}+\omega)t} \ . \qquad (15.15)$$

Бу ерда $\omega_{kn} = \dfrac{E_k^0 - E_n^0}{h}$ - ҳолатдан ҳолатга ўтиш частотаси. (15.15) ни (15.12) га қўйиб интеграллаймиз

$$c^{(1)}{}_k = -\frac{A_{kn}e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}}{h(\omega_{kn}-\omega)} - \frac{A^*_{nk}e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}}{h(\omega_{kn}+\omega)} \ . \qquad (15.16)$$



15.1-расм

Шуни қайд қиламизки, (15.16) нинг махражидаги $h(\omega_{kn}-\omega)$ айирма нолга тенг бўлмаслиги лозим, яъни $E_k^0 - E_n^0 \neq \pm h\omega$ тенгсизлик ўринли бўлади, акс ҳолда $c_k^{(1)}$ чексизликка интилган бўлар эди. Вақт бўйича ташқи ўзгарувчан қўзғолиш таъсирида бир квант ҳолатдан бошқа бир квант ҳолатга ўтиш эҳтимолини ҳисоблаймиз. Фараз қилайлик, $t = t_0 = 0$ вақт моментида

система энергияси E_n^0 бўлган ҳолатда жойлашган бўлсин (15.1-расм). Бошланғич $t_0 = 0$ дан ҳар қандай t вақтда системанинг ихтиёрий E_k^0 энергияли ҳолатда бўлиш эҳтимоли қуйидагича аниқланади

$$\left|c_k(t)\right|^2 = \left|c_k^{(1)}(t)\right|^2 = \frac{1}{h^2}\left|\int_0^t W_{kn}(t')\,dt'\right|^2 . \qquad (15.17)$$

Бу ердаги $W_{kn}(t')$ матрица элементи асосан стационар ҳолат тўлқин функциялари орқали аниқланади

$$W_{kn}(t') = \int \psi_k^{0*}(x)\hat{W}(t')\psi_n^0(x)\,e^{-i\omega_{kn}t'}dx = W_{kn}^0(t')\,e^{-i\omega_{kn}t'} . \qquad (15.18)$$

(15.18) да

$$W^0{}_{kn}(t') = \int \psi_k^{0*}(x)\,\hat{W}(t')\psi_k^0(x)\,dx . \qquad (15.19)$$

Агар қўзғотувчи таъсир вақт бўйича даврий ўзгарса, яъни

$$\hat{W}=\hat{W}(x,t')=W^0(x)\,e^{i\omega t'} \qquad (15.20)$$

бўлса,

$$W_{kn}(t')=W_{kn}^0(x)\,e^{i(\omega-\omega_{kn})t'}$$

кўриниш олади ва

$$\delta(\omega-\omega_{kn}) = \frac{1}{2\pi}\int_0^t e^{i(\omega-\omega_{kn})t'}dt'$$

эканлигини ҳисобга олиб, (15.17) ни қуйидагича ёза оламиз

$$\left|c_k(t)\right|^2 = \frac{4\pi^2}{h^2}\left|W_{kn}^0(x)\right|^2 \delta^2(\omega-\omega_{kn}) . \qquad (15.21)$$

Биз қараётган вақт интервалини $(0,T)$ деб ҳисобласак, (15.21) даги δ - функциянинг бирини $\omega = \omega_{kn}$ соҳада

$$\delta(\omega-\omega_{kn}) = \frac{1}{2\pi}\int_0^T e^{i(\omega-\omega_{kn})t'}dt' = \frac{1}{2\pi}\int_0^T dt' = \frac{T}{2\pi} \qquad (15.22)$$

каби ёза оламиз ва $\left|c_k^{(1)}(t)\right|^2 = P_{kn}$ деб белгиласак,

$$P_{kn} = \frac{2\pi}{h^2}\left|W_{kn}^0\right|^2 T\,\delta(\omega - \omega_{kn}) \qquad (15.23)$$

формулага эга бўламиз. Вақт бирлигидаги ўтишлар эҳтимоли эса

$$p_{kn} = \frac{P_{kn}}{T} = \frac{2\pi}{h^2}\left|W_{kn}^0\right|^2 \delta(\omega - \omega_{kn})\,. \qquad (15.24)$$

(15.24) тенглик вақтга даврий боғлиқ ўзгарувчи қўзғолиш таъсири остида системанинг бир квант ҳолатдан иккинчи бир квант ҳолатга вақт бирлигида ўтиш эҳтимолидир. Биз қараётган ҳолда қўзғолиш оператори $t = 0$ дан $t = T$ гача бўлган вақт оралиғида нолдан фарқли ҳисобланади (15.1-расм), $t \geq T$ вақт моментларида эса қўзғолиш вақтга боғлиқ бўлмаслиги ҳам мумкин. Агар шундай деб фараз қилсак, (15.24) да $\delta(\omega\text{-}\omega_{kn})=\delta(\omega_{kn})$ бўлади ва дискрет спектр учун $n \to k$ квант ўтишнинг вақт бирлигидаги эҳтимоли

$$p_{kn} = \frac{2\pi}{h^2}\left|W_{kn}^0\right|^2 \delta(E_n^0 - E_k^0) \qquad (15.25)$$

кўриниш олади. Агарда дискрет спектрга эга бўлган ҳолатдан узлуксиз спектрга эга бўлган ҳолатларга квант ўтишлар содир бўлаётган бўлса, бу эҳтимолият

$$p_{k\nu} = \frac{2\pi}{h}\left|W_{k\nu}^0\right|^2 \delta(E_\nu - E_k^0 - h\omega) \qquad (15.26)$$

шаклда аниқланади. Бу эҳтимолият фақатгина $E_\nu=E_k^0+h\omega$ энергияли ҳолатлар ўртасида бўладиган ўтишлар учун нолдан фарқли бўлади (бу ерда ν - индекс спектри узлуксиз бўлган ҳолатни билдиради). Агар узлуксиз спектр энергетик сатҳлари турланган бўлса, барча ҳолатлар интервали $d\nu$ энергияси $E=E_k^0+h\omega$ бўлган ягона ҳолатга келади ва бу ҳолатга ўтиш эҳтимоли

$$p_{kE} = \frac{2\pi}{h}\left|W_{kE}^0\right|^2 \qquad (15.27)$$

шаклини олади. Агар бир вақтнинг ўзида k-ҳолатдан турли хил n-ҳолатларга исталганча ўтишлар мумкин бўлса, эҳтимолликларни қўшиш қоидасига кўра (15.27) нинг йиғиндиси олинади

$$\sum p_{kn} = \frac{2\pi}{h}\sum \left|W^0{}_{kn}\right|^2 \delta(E^0{}_k - E^0{}_n) \quad . \qquad (15.28)$$

Агар тўлиқ эҳтимолликни $P=\sum p_{kn}$ десак, у ҳолатлар зичлиги $\rho(E_k^0)$ орқали

$$P = \frac{2\pi}{h}\int \left|W_{kn}^0\right|^2 \rho(E_k^0)\,\delta(E_k^0 - E_n^0)\,dE_k^0$$

ёки

$$P = \frac{2\pi}{h}\left|W_{kn}^0\right|^2 \rho(E_n^0) \qquad (15.29)$$

каби ёзилади.

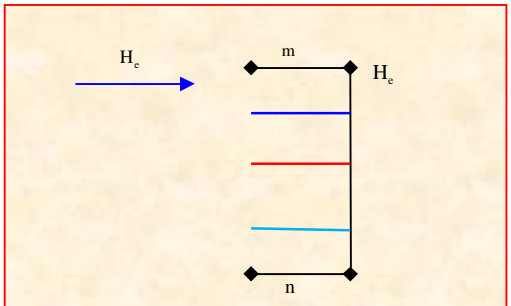
15.2. Кескин қўзғолиш

Фараз қилайлик, вақтнинг $t \to -\infty$ моментида қаралаётган тизим Гамилтониани $\hat{H}_0$, $t \to \infty$ да эса у қуйидаги оператор орқали ифодалансин

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + V \, .$$

Шубҳасиз, вақтнинг маълум қийматларида бир ҳолатдан иккинчи ҳолатга ўтиш содир бўлади. Шунинг учун тизимдаги ўзаро таъсирнинг бошланиш вақти тушунчасини киритамиз ва бу вақтни τ катталик орқали белгилаймиз. Энг аввало, $\tau \to 0$ бўлган ҳолни кўриб ўтамиз. Ностационар ҳолат учун Шредингер тенгламаси

$$ih\left(\Psi\left(\frac{\tau}{2}\right) - \Psi\left(-\frac{\tau}{2}\right)\right) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \hat{H}\Psi dt$$



15.2-расм

ни таҳлил қиламиз. Агар Ψ ни чекли деб фараз қиладиган бўлсак, охирги интеграл нолга интилади. Бу шуни англатадики, тўлқин функцияси вақт

бўйича ўзгармайди. Вақтнинг $t < -\frac{\tau}{2}$ қийматида эса Гамилтониан $\hat{H} = \hat{H}_0$ доимий қийматга эга бўлади. Бу ҳолда Гамилтонианнинг хусусий қийматларига мос келувчи тенгламани қуйидагича ёзиб оламиз

$$\hat{H}_0 \varphi_n^0 = E_n^0 \varphi_n^0 .$$

Бошланғич ҳолатда учун ностационар Шредингер тенгламаси

$$ih \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

нинг ечими бизга қуйидаги тўлқин функциясини беради

$$\Psi(t) = e^{-\frac{iE_n^0 t}{\hbar}} \varphi_n^{(0)} . \qquad (15.30)$$

Юқорида таъкидлаб ўтганимиздек, вақтнинг t>0 ҳолати учун Гамилтонианнинг кўриниши $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + V$ бўлади. Шунинг учун (15.30) функцияни φ_n бўйича қаторга ёямиз

$$\Psi(t) = \sum c_n e^{-\frac{iE_n^{(1)} t}{\hbar}} \varphi_n^{(1)} . \qquad (15.31)$$

Аниқ ечимни топиш учун (15.30) ва (15.31) ифодалар t=0 да кесишувини талаб қиламиз, яъни

$$\Psi(t)_{t \to 0-\varepsilon} = \Psi(t)_{t \to 0+\varepsilon} .$$

Ушбу вақт моментида иккала экспонента кўрсаткичлари бирга тенглашади. Натижада қуйидаги муносабатни ҳосил қиламиз

$$\varphi_n^{(0)} = \sum c_m \varphi_m^{(1)} .$$

Ушбу тенглик $\varphi_n^{(0)}$ функцияларни $\varphi_m^{(1)}$ бўйича қаторга ёйишдан иборатдир. Бу функциялар ортонормал бўлганлиги учун, бизга ноъмалум бўлган c_m коэффициентларни қуйидаги муносабатдан топишимиз мумкин

$$c_m = \left\langle \varphi_m^{(1)} \middle| \varphi_n^{(0)} \right\rangle .$$

15.2-расмда иккита n ва m ҳолат тасвирланган. Бунда N ҳолатлардан m ҳолатларга ўтиш эҳтимоли қуйидагича ифодаланади

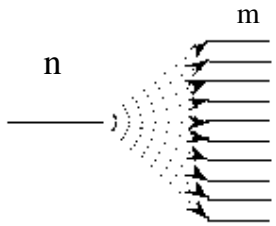
$$W_{n\to m} = |c_n|^2 = \left|\left\langle \varphi_n^0 \middle| \varphi_m^1 \right\rangle\right|^2$$

$$\hat{H}_1 \varphi_n^1 = E_n^1 \varphi_n^1 .$$

Агар қаралаётган тизимга бирорта $\hat{H}_1$ ёки $\hat{H}_0$ қўзғолишлар қўйилган бўлса, у ҳолда қуйидаги тенглама ўринли бўлади

$$\hat{H}_0 \varphi_n^0 = E_n^0 \varphi_n^0 .$$

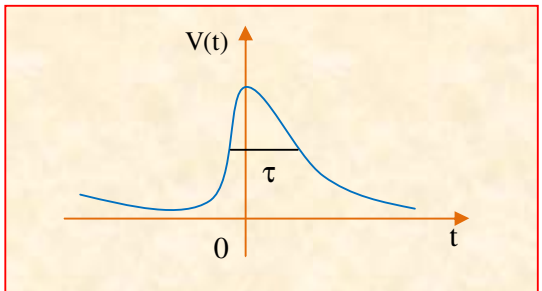
Ўтиш пайтида $n \to m$ эҳтимоллик худди шу $W_{n\to m} = \left|\left\langle \varphi_n^0 \middle| \varphi_m^1 \right\rangle\right|^2$ ифода билан аниқланади. Ушбу эҳтимоллик шуни англатадики, агар бизда айнан бир хил эффект юз берадиган иккита мутлақо бир хил тизим мавжуд бўлса, унда таъсир тугаганидан кейин турли хил ҳолатларда ушбу тизимларнинг нолга тенг бўлмаган эҳтимоллиги мавжуд. Шундай қилиб, агар классик механикада, агар тизимнинг ҳолати ва ушбу тизимдаги ташқи ҳаракатларнинг катталиги ва йўналиши маълум бўлса, у ҳолда бу ҳаракат тугаганидан кейин бўладиган тизимнинг ҳолатини мутлақ эҳтимоллик билан аниқлаш мумкин, аммо квант механикасида бундай эҳтимоллик мавжуд эмас. Фақатгина таъсир қилиш тугаганидан кейин тизимнинг маълум бир ҳолатда аниқланиши эҳтимолини аниқлаш мумкин (15.3-расмга қаранг).



15.3 – расм

15.3. Чекли вақт оралиғидаги қўзғолиш назарияси

Чекли вақт оралиғида таъсир этувчи қўзғолиш назарияси билан танишиб чиқамиз. Бунинг учун иккита зарранинг ўзаро таъсирлашувидан фойдаланамиз. 15.4-расмда ушбу ўзаро таъсирнинг графиги кўрсатилган. Бу ерда $\tau -$ қўзғолиш давомийлигини ифодаловчи параметр, $V(t)$ - қўзғолиш оператори. Шундай қилиб, биронта мувозанат ҳолатдаги системага қўзғолишнинг таъсирини ва натижада система ҳолатининг ўзгариш хусусиятларини билишимиз зарур бўлади. Ушбу муаммони ҳал қилиш учун биз стационар бўлмаган қўзғолиш назариясидан фойдаланамиз. Демак, тизимнинг Гамильтон функциясини қуйидагича тасаввур қиламиз



15.4 – расм

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(t).$$

Фараз қилайлик, стационар $\hat{H}_0\varphi_n = E_n\varphi_n$ тенгламанинг ечими олдиндан маълум бўлсин. У ҳолда $t \to \infty$ да тизим ҳолатига $\hat{H}$ қўзғолишнинг таъсирини топиш учун қуйидаги

$$ih\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$$

тенгламанинг ечимини топишимиз керак. Охирги тенгламадаги Ψ функцияни қаторга ёямиз

$$\Psi = \sum_n c_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\varphi_n$$

ва Ψ_n функция учун $t \to -\infty$ да бошланғич шартларни шакллантирамиз

$$\Psi_n\Big|_{t\to-\infty} = e^{-\frac{iE_n t}{h}}\varphi_n .$$

Бу ердан $c_n(t \to -\infty) = 1$ эканлиги келиб чиқади. Шу билан бирга $c_m(t \to -\infty) = 0$, $m \neq n$ бўлади. (2) тенгламани (1) га қўямиз

$$\sum_n\left(ih\dot{c}_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{h}} + E_n c_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{h}}\right)j_n = \sum_n c_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{h}}\left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t)\right)j_n$$

$$\sum_n\left(ih\dot{c}_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{h}} + \cancel{E_n c_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{h}}}\right)j_n = \cancel{\sum_n c_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{h}}E_n j_n} + \sum_n c_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{h}}\hat{V}(t)j_n$$

$$\sum_n i\hbar\dot{c}_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\varphi_n = \sum_n c_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\hat{V}(t)\varphi_n .$$

Ушбу тенгламанинг чап томонини φ_m^* кўпайтирамиз ва интеграллаймиз

$$ih\dot{c}_m(t)e^{-\frac{iE_m t}{h}} = \sum_n c_n(t)e^{-\frac{iE_n t}{h}} V_{mn}(t)$$

бунда $V_{nm}(t) = \langle \varphi_m | \hat{V}\varphi_n \rangle$. Қуйидаги алмаштириш

$$\frac{E_m - E_n}{h} = \omega_{mn}.$$

ни киритамиз. Натижада $\dot{c}_m$ доимий коэффициентлар учун қуйидаги ифодага эга бўламиз

$$\dot{c}_m = \frac{1}{ih}\sum_k c_k(t)e^{-i\omega_{mk}t}V_{mk}(t).$$

Охирги тенгламани $-\infty$ ва t оралиғида интеграллаймиз

$$c_m(t) = \delta_{mn} + \frac{1}{ih}\sum_k \int_{-\infty}^{t} c_k(t)e^{-i\omega_{mk}t}V_{mk}(t)dt.$$

Бу ерда δ_{mn} Кронекер белгиси бўлиб, у қуйидаги шартни қаноатлантиради $c_n(t \to -\infty) = 1$ ва $c_m(t \to -\infty) = 0$, $m \neq n$. У ҳолда, ушбу тенглик ўринли бўлиши лозим

$$\int_{-\infty}^{t} \dot{c}_k(t)dt = \dot{c}_k(t) - \dot{c}_k(t \to -\infty).$$

Охирги муносабатда c_k ни даражалар бўйича қаторга ёямиз ва қўзғолиш назариясини қўллаймиз

$$c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + \ldots.$$

Юқорида айтилганлардан келиб чиққан ҳолда, нолинчи яқинлашув, табиийки қуйидаги тенглик

$$c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + \ldots.$$

орқали ифодаланади. Навбатдаги биринчи яқинлашувни қуйидагича ёзишимиз мумкин

$$c_n^{(0)}(t)=1; \qquad c_m^{(0)}(t)=\delta_{nm}.$$

Ушбу тенглама қўзғолиш назариясининг биринчи тартибини тавсифлайди. Демак, бунда n ҳолатдан m ҳолатга ўтиш эҳтимолияти қуйидаги ифода билан аниқланади

$$W_{n\to m}=\left|c_m(\infty)\right|^2=\frac{1}{h^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega_{mn}t}V_{mn}dt\right|^2. \qquad (15.32)$$

Энди фараз қилайлик, $V_{mn}=V_{mn}^0e^{-\gamma|t|}$ бўлсин. У ҳолда охирги ифодада алоҳида интегралларни қуйидагича ёзиб оламиз

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega_{mn}t-\gamma|t|}dt=\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega_{mn}t-\gamma|t|}dt.$$

Ушбу изоҳни қуйидаги муносабат билан осонгина исботлашимиз мумкин

$$e^{i\varphi}=\cos\varphi+i\sin\varphi.$$

Энди қуйидаги интегрални кўриб чиқамиз

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma|t|}i\sin\omega_{mn}tdt=i\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}tdt.$$

Бу интегрални қисмларга ажратиб чиқамиз

$$i\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}tdt=\begin{vmatrix}v=\sin\omega_{mn}t & dv=\omega_{mn}\cos\omega_{mn}tdt\\ du=e^{-\gamma|t|}dt & u=-\frac{1}{\gamma}e^{-\gamma|t|}\end{vmatrix}=\underbrace{-\frac{i}{\gamma}e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}t\Big|_{-\infty}^{\infty}}_{\to 0}+i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\gamma}e^{-\gamma|t|}\omega_{mn}\cos\omega_{mn}tdt=$$

$$=\frac{i\omega_{mn}}{\gamma}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma|t|}\cos\omega_{mn}tdt=\begin{vmatrix}v=\cos\omega_{mn}t & dv=-\omega_{mn}\sin\omega_{mn}tdt\\ du=e^{-\gamma|t|}dt & u=-\frac{1}{\gamma}e^{-\gamma|t|}\end{vmatrix}=$$

$$=\frac{i\omega_{mn}}{\gamma}\left[\underbrace{-\frac{1}{\gamma}e^{-\gamma|t|}\cos\omega_{mn}t\Big|_{-\infty}^{\infty}}_{\to 0}-\frac{\omega_{mn}}{\gamma}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}tdt\right]=-i\left(\frac{\omega_{mn}}{\gamma}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}tdt\cdot$$

Тенгликнинг ўнг ва чап томонларини ўзаро тенглаштириб

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}tdt=-i\left(\frac{\omega_{mn}}{\gamma}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}tdt$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}t\,dt + i\left(\frac{\omega_{mn}}{\gamma}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}t\,dt = 0$$

$$i\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}t\,dt\left[1+\left(\frac{\omega_{mn}}{\gamma}\right)^2\right] = 0.$$

муносабатларни ҳосил қиламиз. ω_{mn} и γ комплекс катталиклар эканлигини ҳисобга олсак, охирги тенглик бажарилиши учун қуйидаги шарт ўринли бўлиши шарт

$$i\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma|t|}\sin\omega_{mn}t\,dt = 0.$$

Шундай қилиб (15.32) тенгламанинг тўғрилиги исботланди. cos функциянинг тоқ функция эканлигидан фойдаланиб, интегралнинг чегараларини қуйидагича ўзгартиришимиз мумкин

$$\mathrm{Re}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{mn}t-\gamma|t|}dt = 2\,\mathrm{Re}\int_{0}^{\infty} e^{i\omega_{mn}t-\gamma|t|}dt.$$

Охирги интеграл осонлик билан ҳисобланади

$$2\,\mathrm{Re}\int_{0}^{\infty} e^{i\omega_{mn}t-\gamma|t|}dt = 2\,\mathrm{Re}\frac{1}{i\omega_{mn}-\gamma}\int_{0}^{\infty} e^{i\omega_{mn}t-\gamma|t|}d\left(i\omega_{mn}-\gamma\right)t =$$

$$= 2\,\mathrm{Re}\frac{1}{i\omega_{mn}-\gamma}e^{i\omega_{mn}t-\gamma|t|}\Big|_0^{\infty} = -2\,\mathrm{Re}\frac{1}{i\omega_{mn}-\gamma} =$$

$$= \mathrm{Re}\frac{2}{\gamma-i\omega_{mn}} = \mathrm{Re}\left(\frac{2}{\gamma-i\omega_{mn}}\frac{\gamma+i\omega_{mn}}{\gamma+i\omega_{mn}}\right) = \mathrm{Re}\left(\frac{2\gamma}{\gamma^2+\omega_{mn}^2}+i\frac{2\omega_{mn}}{\gamma^2+\omega_{mn}^2}\right) = \frac{2\gamma}{\gamma^2+\omega_{mn}^2}.$$

Яна (15.32) формулага қайтамиз ва ўтиш эҳтимолияти учун қуйидаги муносабатни ҳосил қиламиз

$$W_{n\to m} = \left|c_m(\infty)\right|^2 = \frac{1}{h^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{mn}t}V_{mn}dt\right|^2 = \frac{\left|V_{nm}^0\right|^2}{h^2}\left(\frac{2\gamma}{\gamma^2+\omega_{mn}^2}\right)^2.$$

Биз ўтиш вақти деб номланадиган $\tau=\frac{1}{\gamma}$ параметрни киритамиз. У ҳолда охирги тенгламани қуйидагича қайта ёзиб оламиз

$$W_{n\to m}=\frac{\left|V_{nm}^{0}\right|^{2}}{\hbar^{2}}\frac{4}{\left(\frac{1}{\tau^{2}}+\omega_{mn}^{2}\right)^{2}}\frac{1}{\tau^{2}}=\frac{\left|V_{nm}^{0}\right|^{2}}{\hbar^{2}}\frac{4}{\left(\frac{1+\tau^{2}\omega_{mn}^{2}}{\tau^{2}}\right)^{2}}\frac{1}{\tau^{2}}=\frac{\left|V_{nm}^{0}\right|^{2}}{\hbar^{2}}\frac{4\tau^{\cancel{4}\,2}}{\left(1+\tau^{2}\omega_{mn}^{2}\right)^{2}}\frac{1}{\cancel{\tau^{2}}}=,$$

$$=\frac{\left|V_{nm}^{0}\right|^{2}}{\hbar^{2}}\frac{4\tau^{2}}{\left(1+\tau^{2}\omega_{mn}^{2}\right)^{2}}$$

$$W_{n\to m}=\frac{\left|V_{nm}^{0}\right|^{2}}{\hbar^{2}}\frac{4\tau^{2}}{\left(1+\tau^{2}\omega_{mn}^{2}\right)^{2}}.$$

Ушбу тенгламаларга нисбатан баъзи чекловларни кўриб чиқамиз.

1. $\tau\to\infty$. У ҳолда $W_{n\to m}\to 0$. Бундай ҳолда бизда ўтишга олиб келмайдиган чегараланган адибатик қўзғолиш мавжуд бўлади.

2. $\tau\to 0$. Бу ҳолатда ҳам $W_{n\to m}\to 0$. Инерция кучлари ҳаракат қилади, чунки ўзаро таъсир жуда қисқа.

3. Матрицанинг элементи бўлган ҳолатлар ҳам мавжуд $V_{nm}^{0}=0$. Бундай ҳолда, ўтиш эҳтимоли нолга тенг.

Назарий механика курсидан маълумки, $\frac{E(t)}{\omega(t)}=\text{const}$ бўлиб, адиабатик инвариантлик мавжуд, яъни $E(t)$ва (ёки) $\omega(t)$ нисбат ўзгармайди. Квант механикасида шунга ўхшаш боғлиқлик мавжуд. Ифода

$$c_{m}^{(1)}(t)=\frac{1}{ih}\int_{-\infty}^{t}e^{-i\omega_{mn}t'}V_{mn}(t')dt'$$

фақат ўтиш эҳтимоллиги кичик бўлган тақдирдагина амал қилади, акс ҳолда яқинлашув тартибини ўзгартиришга тўғри келади. Ўтиш даврининг энг катта эҳтимоли $\omega(t)\sim 1$ га тенг бўлиб, ўтиш даври $\omega(t)$нинг ошиб бориши билан эҳтимолият $W_{n\to m}\to 0$ интилади.

15.4. Даврий қўзғолишга ўтиш.

Бундай ўтиш квант тизимининг электромагнит майдон билан ўзаро таъсири натижасида юз беради. Агар бизда $\vec{d}$ дипол моментига эга бўлган ихтиёрий квант системаси берилган бўлса, унга ташқи $\vec{\varepsilon}(t)$ электр майдони қўйилганда қўзғолиш қуйидаги формула билан аниқланади

$$V=-\vec{d}\vec{\varepsilon}.$$

Бу ерда $\vec{\varepsilon}=\vec{\varepsilon}\cos\omega t$. Фараз қилайлик, $V=V_{0}e^{-i\omega t}$ бўлсин. Бу ҳолда, n ҳолатдан m ҳолатга ўтиш эҳтимолияти ушбу формула билан аниқланади

$$c_m(t)=\frac{1}{ih}\int_0^t e^{i(\omega_{mn}-\omega)t'}V_{mn}(t')dt'.$$

Бу интеграл осонлик билан ечилади

$$c_m(t)=\frac{1}{ih}\int_0^t e^{i(\omega_{mn}-\omega)t'}V_{mn}(t')dt'=\frac{V_{mn}^0}{ih}\frac{1}{i(\omega_{mn}-\omega)}\left[e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}-1\right]=\frac{V_{mn}^0}{h}\frac{1-e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}}{\omega_{mn}-\omega}.$$

Бинобарин, ўтиш эҳтимолияти қуйидагига тенг

$$W_{n\to m}(t)=\left|c_m(t)\right|^2=\frac{\left|V_{mn}^0\right|^2}{\hbar^2}\frac{\left(1-e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}\right)\left(1-e^{-i(\omega_{mn}-\omega)t}\right)}{(\omega_{mn}-\omega)^2}=$$

$$=\frac{\left|V_{mn}^0\right|^2}{\hbar^2}\frac{1-e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}-e^{-i(\omega_{mn}-\omega)t}+e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}e^{-i(\omega_{mn}-\omega)t}}{(\omega_{mn}-\omega)^2}=$$

$$=\frac{\left|V_{mn}^0\right|^2}{\hbar^2}\frac{1-e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}-e^{-i(\omega_{mn}-\omega)t}+1}{(\omega_{mn}-\omega)^2}=$$

$$=\frac{\left|V_{mn}^0\right|^2}{\hbar^2}2\frac{1-\frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}+e^{-i(\omega_{mn}-\omega)t}}{2}}{(\omega_{mn}-\omega)^2}=2\frac{\left|V_{mn}^0\right|^2}{\hbar^2}\frac{1-\cos(\omega_{mn}-\omega)t}{(\omega_{mn}-\omega)^2}$$

Қуйидаги функцияни кўриб чиқамиз

$$f(x,t)=\frac{1-\cos xt}{x^2}.$$

Бу ерда t ихтиёрий катталик. Бу функция қуйидаги муносабатни қаноатлантиради

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1-\cos xt}{x^2}dx=\pi|t|.$$

Энди t нинг катта қийматларидаги кўзғолишни кўриб ўтамиз. Ушбу функция орқали берилган соҳада марказий максимум муҳим аҳамиятга эга. t нинг катта қийматларида, марказий максимум жуда баланд ва тор бўлади. Шунинг учун $t\to\infty$ да қуйидаги муносабат ўринли бўлади

$$\left.\frac{1-\cos xt}{x^2}\right|_{t\to\infty}\to\pi t\left|\delta(x)\right|.$$

δ- функциянинг қуйидаги

$$\frac{1}{a}\delta(t)=\delta(at)$$

хоссасидан фойдаланамиз ва ўтиш эҳтимолияти учун ифодани қуйидагича ёзишимиз мумкин

$$W_{n\to m}(t)\Big|\xrightarrow[t\to\infty]{}2\frac{\left|V_{mn}^{0}\right|^{2}}{h^{2}}\pi t\delta(\omega_{mn}-\omega).$$

Қуйидаги тенгликларни ҳисобга олиб, $h\omega_{nm}=E_n-E_m$ охирги ифодани ўзгартирамиз

$$W_{n\to m}(t)\Big|\xrightarrow[t\to\infty]{}2\frac{\left|V_{mn}^{0}\right|^{2}}{\hbar}\pi t\delta(E_m\text{-}E_n\text{-}h\omega).$$

Бундан келиб чиқадики, ўтиш эҳтимолияти

$$E_m=E_n+h\omega$$

тенглик ўринли бўлгандагина нолдан фарқли бўлади. Даврий частотали ω тебранишлар таъсирида $h\omega$ катталикка пропорционал ҳолда юқорига қараб ўтишлар содир бўлиши мумкин. Агар қўзголиш $\varepsilon=\varepsilon_0\cos\omega t$ функция орқали берилган бўлса, у ҳолда юқорига ва пастга тушиш эҳтимолиятлари бир хил бўлади. Бундай ўтишлар мажбурий ўтишлар бўлиб, ўз-ўзича юз бермайди, чунки майдон классик майдондан иборат. Охирги эҳтимолият бирлик вақтда содир бўлувчи ўтиш эҳтимолиятини аниқлашга имкон беради

$$k_{n\to m}=\frac{dW_{n\to m}(t)}{dt}=\frac{2\pi}{h}\left|V_{mn}^{0}\right|^{2}\delta(E_m\text{-}E_n\text{-}h\omega).$$

Энди узлуксиз спектрлар ҳолини кўриб ўтамиз. Фараз қилайлик, атом майдонидаги ҳолат узлуксиз ҳолда тақсимланган бўлсин ва у ҳолда

$$\sum_m k_{n\to m}=\frac{2\pi}{h}\int\varphi(E_m)dE_m\left|V_{nm}\right|^{2}\delta(E_m-E_n-h\omega)=\frac{2\pi}{h}\rho(E_n+h\omega).$$

муносабат ўринли бўлади. Бу ерда $\rho(E_n+h\omega)$ якуний ҳолат зичлиги. Бирор n ҳолатдаги тизимни аниқлаш эҳтимолияти учун қуйидагига эга бўламиз

$$k=\frac{2\pi}{h}\sum_n P_n\left|V_{nm}\right|^{2}r(E_n+h\omega).$$

Ушбу формула *Ферминнинг олтин қоидаси* дейилади. Бу ерда

$$P_n \sim e^{-\frac{E_n}{kt}}$$

катталик юқори ёки пастки сатҳлардаги ўтишларнинг термодинамик мувозанатини тавсифлайди. Масалан, иккита сатҳни қарайлик. У ҳолда ўтиш эҳтимолияти Диракнинг делта функцияси орқали аниқланиши керак. Амалда эса, маълум бир кенгайиш пайдо бўладики, ўтиш эҳтимолияти Лоренц функцияси орқали тавсифланади

$$\delta(\omega_0 - \omega) \to \frac{1}{\pi}\frac{\gamma}{\gamma^2 + (\omega_0 - \omega)}.$$

Ушбу кенгайиш квант таъсири $\tau\Delta E = h$ туфайли пайдо бўлади ва бу ноаниқлик муносабатининг натижасидир.

15.5. Грин функцияси

Шредингер тенгламасини ташқи майдонда кўриб чиқамиз ва уни кичик $V(\vec{r}, t)$ қўзғолиш деб ҳисоблаймиз

$$ih\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (H_0 + V(\vec{r}, t))\Psi. \qquad (15.33)$$

Фараз қилайлик қўзғолишнинг бошланиш вақти $t = t_0$ ҳамда унинг тугаш вақти $t = T > t_0$ бўлсин. У ҳолда қўзғолмаган ҳолатнинг тўлиқ ечимлар тўплами қуйидаги формула орқали берилади

$$\{\Psi_n^{(0)}(x)\} \equiv \{\varphi_n^{(0)}(\vec{r})e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\}. \qquad (15.34)$$

Квант ўтишлар масаласини қуйидагича муҳокама қиламиз. Вақтнинг $t = t_0$ моментида тизим $\Psi_n^{(0)}$ ҳолатда жойлашган бўлсин. Вақтнинг кейинги моментларида тизимга $V(\vec{r}, t)$ қўзғолишнинг таъсири берилиб ва у кейинги $t = T$ вақт моментигача давом этади. Ушбу қўзғолишнинг таъсири натижасида тизим ҳолати $\Psi_m^{(0)}$ $(m \neq n)$ дан бошқа ҳолатга ўтиш эҳтимолияти қуйидагича бўлади

$$\Psi_n^{(0)} \to \Psi_m^{(0)}.$$

Бошқача қилиб айтганда, (15.33) тенгламанинг қуйидаги

$$\Psi(\vec{r},t)\Big|_{t=t_0} = \Psi_n^{(0)}(\vec{r},t_0)\,. \qquad (15.35)$$

бошланғич шартни қаноатлантирувчи ечими $\Psi(\vec{r},t)$ ни топишимиз лозим бўлади. Бунинг учун, (15.35) тенгламадаги функцияни қуйидагича қаторга ёямиз

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_k C_k(t)\Psi_k^{(0)}(\vec{r},t)\,, \qquad (15.36)$$

бу ерда $C_k(t)$ аниқланиши шарт бўлган ноъмалум функция. Бошланғич шартлар (15.33) ни ҳисобга олсак, қуйидаги тенглик $C_k(t_0) = \delta_{kn}$ ўринли эканлиги келиб чиқади. (15.36) ни (15.35) га қўйиб, унинг ҳар иккала томонини $\Psi_m^{(0)*}(\vec{r},t)$ кўпайтирамиз ва берилган ўзгарувчилар бўйича интеграллаб, қуйидаги тенгламани ҳосил қиламиз

$$ih\frac{dC_m(t)}{dt} = \sum_k V_{mk}(t)C_k(t), \qquad (15.37)$$

$$V_{mk}(t) = \int \Psi_m^{(0)*}(\vec{r},t)\; V(t)\; \Psi_k^{(0)}(\vec{r},t)\; d\vec{r}\,.$$

Биз биламизки, нолинчи яқинлашувда

$$C_k^{(0)}(t) = \delta_{kn}\,,$$

тенглик бажарилади, чунки вақтнинг дастлабки моментида тизим $\Psi_n^{(0)}$ ҳолатда жойлашган бўлади. Шунинг учун ушбу тенглик ўринли

$$C_m(t) = \delta_{mn} + C_m^{(1)}(t) + \ldots. \qquad (15.36)$$

Ушбу ифодани (15.35) тенгликка қўйиб, биринчи тартибдаги ҳадларни сақлаб қоламиз ва биринчи яқинлашувда қуйидаги тенгламани ҳосил қиламиз

$$ih\frac{dC_m^{(1)}}{dt} = V_{mn}(t), \qquad C_m^{(1)} = \frac{1}{ih}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_{mn}(t')\,. \qquad (15.37)$$

Худди шундай йўл билан, иккинчи яқинлашувдаги қўзғолиш учун қуйидаги тенгламани ёзамиз

$$ih\frac{dC_m^{(2)}}{dt}=\sum_k V_{mk}C_k^{(1)} \qquad (15.38)$$

ва ҳоказо. (15.32) ва (15.33) тенгламаларни (15.31) тенгламага қўйиб

$$\Psi(\vec{r},t)=\Psi_n^{(0)}(\vec{r},t)+\frac{1}{ih}\sum_k\int_{t_0}^{t}dt'\ V_{kn}(t')\Psi_k^{(0)}(\vec{r},t)+\ldots,\quad (t\geq t_0). \qquad (15.39)$$

муносабатни оламиз. (15.39) тенгламанинг ўнг томонини қуйидагича ёзиб оламиз

$$\frac{1}{ih}\sum_k\int_{t_0}^{t}dt'V_{kn}(t')\Psi_k^{(0)}(\vec{r},t)=\frac{1}{ih}\sum_k\Psi_k^{(0)}(\vec{r},t)\int_{t_0}^{t}dt'\int d\vec{r}'\,\Psi_k^{(0)*}(\vec{r}',t')\ V(\vec{r}',t')\,\Psi_n^{(0)}(\vec{r}',t').$$

ва қуйидаги алмаштиришни

$$\frac{-i}{h}\theta(t_1\text{-}t_2)\sum_k\Psi_k^{(0)}(x_1)\,\Psi_k^{(0)*}(x_2)\equiv G_0(x_1,x_2),\quad x=(\vec{r},t), \qquad (15.40)$$

ўтказамиз. Бу ерда $G_0(x_1,x_2)$ - Грин функцияси ва у қуйидаги

$$\left(ih\frac{\partial}{\partial t}-H_0(\vec{r},t)\right)G_0(x,x')=\delta^4(x-x')$$

$$G_0(x,x')\big|_{t=t'+0}=-\frac{i}{h}\delta(\vec{r}-\vec{r}').$$

тенглама ҳамда бошланғич шартларни қаноатлантиради. Охирги тенгламани ҳисобга олиб (15.39) функцияни қуйидагича ёзиб оламиз

$$\Psi(\vec{r},t)=\Psi_n^{(0)}(\vec{r},t)+\int_{t_0}^{t}dt'\int d\vec{r}'\,G_0(x,x')\,V(x')\,\Psi_n^{(0)}(x'). \qquad (15.41)$$

Охирги ифодадаги тўлқин функция қўзғолиш назариясининг биринчи тартибли Шредингер (15.41) тенгламасининг ечимидан иборат.

15.6. Тўлқин функцияси учун қўзғолиш назариясини умумлаштириш

(15.33) тенгламанинг аниқ ечимини топиш учун, қўзғолмаган ҳолат Грин функцияси $G(x,x_1)$ дан фойдаланамиз. Фараз қилайлик, Грин функцияси қуйидаги тенгламани қаноатлантирсин

$$\left(ih\frac{\partial}{\partial t}-H(\vec{r},t)\right)G(x,x_1)=\delta^4(x-x_1).$$

Бу тенгликни қўзғолиш назарияси бўйича қаторга ёйсак

$$G(x,x_1)=G_0(x,x_1)+\int d^4x'\ G_0(x,x')\,V(x')G_0(x',x_1)+$$
$$+\int d^4x'\int d^4x''\,G_0(x,x')\,V(x')\,G_0(x',x'')\,V(x'')\,G_0(x'',x_1)+...$$

ёки рамзий шаклда

$$G=G_0+\underline{G_0V}G_0+\underline{G_0V}G_0VG_0+...=G_0+G_0V(G_0+G_0VG_0+...)=G_0+G_0VG\,.$$

Охирги ифодадан кўриниб турибдики, ушбу интеграл тенглама мавжуд

$$G(x,x_1)=G_0(x,x_1)+\int d^4x'\ G_0(x,x')\,V(x')\,G(x',x_1)\,.$$

(15.37) тенгликдан фойдаланиб, қуйидаги муносабатни ҳосил қиламиз

$$ih\int d\vec{r}'\,G_0(x,x')\Psi_n^{(0)}(x')=\Psi_n^{(0)}(x)\,,\quad t>t',$$

Юқоридаги тенгликдан Грин функция $G_0(x,x')$ сининг бир квант заррачани бир нуқта $x'=(\vec{r}',t')$ дан иккинчи нуқта $x=(\vec{r},t)$ га вақтнинг $t>t'$ моментида ўтишини ифодалаши бевосита келиб чиқади. Шунинг учун, $G_0(x,x')$ функция қўзғолмаган ҳолат пропагатори деб номланади. (15.37) ни ҳисобга олиб, (15.41) ифодани қуйидагича ўзгартирамиз,

$$\Psi(x)=ih\int d\vec{r}'G_0(x,x')\Psi_n^{(0)}(x')+ih\int d^4x''\int d\vec{r}'G_0(x,x'')V(x'')G_0(x'',x')\Psi_n^{(0)}(x')+...,$$
$$\Psi(x)=ih\int d\vec{r}'\Big\{G_0(x,x')+\int d^4x''\,G_0(x,x'')V(x'')G_0(x'',x')+...\Big\}\Psi_n^{(0)}(x')=$$
$$=ih\int d\vec{r}'G(x,x')\Psi_n^{(0)}(x')\,,\quad t\ge t';\quad t'=t_0. \qquad (15.42)$$

(15.42) ифода (15.38) тенгликка мос келишини қуйидаги муносабат орқали

$$G(x,x')\Big|_{t=t'+0}=-\frac{i}{h}\delta(\vec{r}-\vec{r}') \qquad (15.43)$$

аниқлаш қийин эмас, чунки у зарур бошланғич шарт $\Psi(x)\Big|_{t=t_0+0}=\Psi_n^{(0)}(\vec{r},t_0)$ ни қаноатлантиради. Шунинг учун (15.42) формула биз излаётган керакли ечимни беради. (15.42) тенгликнинг асослилиги Грин функциясининг қуйидаги ифодасидан келиб чиқади

$$G(x,x') = -\frac{i}{h}\theta(t-t')\sum_n \Psi_n(x)\Psi_n^*(x').$$

Бу ерда $\Psi_n(x)$ Шредингер тенгламасининг ечимлари. Шундай қилиб, вақтга боғлиқ бўлган Шредингер тенгламасининг аниқ ечимини (15.42) кўра, тўлиқ Грин функцияси орқали ифодалаш мумкин экан. Демак, квант тизимининг n ҳолатдан вақт $t = t_0$ нинг m ҳолатига вақт $t = T > t_0$ нинг моментида ўтиш эҳтимоли амплитудаси қуйидаги скаляр қўпайтма орқали аниқланар экан

$$\int d\vec{r}\, \Psi_m^{(0)} * (\vec{r},T)\Psi(\vec{r},T) \equiv M_{n\to m}.$$

Бу ифодани тўлқин функциясини қаторга ёйиш формула (15.31) га қўйиб қуйидагини топамиз

$$M_{n\to m} = C_m(T).$$

Демак, биз учун керакли бўлган $n \to m$ ҳолатлар ўтиш эҳтимоли $P_{n\to m}$ қуйидаги формула билан берилади

$$P_{n\to m} = \left|C_m(T)\right|^2,$$

(15.42) га биноан, эҳтимоллик амплитудаси қуйидагича ифодаланиши мумкин

$$C_m(T) = ih\int d\vec{r}\int d\vec{r}'\, \Psi_m^{(0)} * (\vec{r},T)G(\vec{r},T;\vec{r}',t_0)\Psi_n^{(0)}(\vec{r}',t_0). \qquad (15.44)$$

15.7. Эволюция оператори учун қўзғолиш назарияси

Эволюция оператори учун тенглама

$$ih\frac{\partial U(t)}{\partial t} = (H_0 + V(t))U(t), \quad U(t_0) = 1,$$

нинг ечимини қуйидаги шаклида ахтарамиз

$$U(t) = U_0(t)U_1(t), \quad U_0(t_0) = 1; \quad U_1(t_0) = 1.$$

Бу ерда қаерда U_0 оператор ушбу $ih\frac{\partial U_0}{\partial t} = H_0U_0$ тенгламани қаноатлантиради. Охирги икки тенгламани ўзаро биргаликда ечиб қуйидаги

$$\underline{ih\frac{\partial U_0}{\partial t}U_1} + ihU_0\frac{\partial U_1}{\partial t} = \underline{H_0U_0U_1} + VU_0U_1$$

ифодани ҳосил қиламиз. Тагига чизилган ҳадларни тенгламадан туширамиз ва унинг ҳар иккала томонини $U_0^{-1} \equiv U_0^{+}$ ҳадга кўпайтирамиз

$$ih\frac{\partial U_1(t)}{\partial t} = V_{int}(t)U_1(t), \quad V_{int}(t) = U_0^{+}(t)V(t)U_0(t),$$

ва кейин t вақт бўйича интеграллаймиз

$$U_1(t) - \underbrace{U_1(t_0)}_{1} = \frac{1}{ih}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_{int}(t')U_1(t'). \qquad (15.45)$$

(34) интеграл тенгламани қўзғолиш назариясига кўра қаторга ёямиз

$$U_1(t) = U_1^{(0)}(t) + U_1^{(1)}(t) + U_1^{(2)}(t) + \ldots$$

ва бир хил тартибдаги ҳадларни ўзаро тенглаштирамиз

$$U_1^{(0)} = 1, \quad U_1^{(n)}(t) = \frac{1}{ih}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_{int}(t')U_1^{(n-1)}(t'), \quad (n = 1, 2, \ldots). \qquad (15.46)$$

(15.45) ва (15.46) формулалар асосида биринчи яқинлашувда қуйидаги тенгликни ҳосил қиламиз

$$U_1(t) = 1 + \frac{1}{ih}\int_{t_0}^{t} dt'\, V_{int}(t'). \qquad (15.47)$$

Охирги (15.47) тенгламани $U(t) = U(t, t_0)$ эволюция операторига нисбатан тенгламага осонгина айлантириш мумкин. Дарҳақиқат, (15.47) ни чап томондан $U_0(t)$ кўпайтириб

$$U_0(t)U_1(t) = U_0(t) + \frac{1}{ih}\int_{t_0}^{t} dt' U_0(t) \underbrace{V_{int}(t')}_{U_0^{-1}(t')V(t')U_0(t')} U_1(t'),$$

ва ушбу тенглик

$$U_0(t) \equiv U_0(t, t_0) = U_0(t, t')\underbrace{U_0(t', t_0)}_{U_0(t')}, \quad U(t) = U_0(t)U_1(t) = U(t, t_0),$$

ни ҳисобга олиб, биз истаётган интеграл тенгламага эга бўламиз

$$U(t,t_0)=U_0(t,t_0)+\frac{1}{ih}\int_{t_0}^{t}dt'U_0(t,t')V(t')U(t',t_0).$$

Ушбу тенгламанинг ечимини одатдаги усулда, яъни уни қаторга ёйиш

$$U(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}U_n(t,t_0),\quad U_n(t,t_0)\sim\varepsilon^n.$$

орқали ахтариш мумкин.

15.8. Квант тизими орқали фотонларнинг чиқарилиши ва ютилиши

Электромагнит майдон таъсири остида атомларнинг бир сатҳдан иккинчи сатҳга ўтиш эҳтимолятини кўриб чиқамиз. Фараз қилайлик қаралаётган электромагнит майдон монохроматик бўлсин

$$\vec{\varepsilon}(\vec{r},t)=\vec{\varepsilon}_0\cos(\omega_0 t-\vec{k}\vec{r}),\quad k=\frac{2\pi}{\lambda}.$$

Агар a атомнинг чизиқли ўлчамлари бўлса, унда атом ўлчамларига нисбатан фаза катталигининг ўзгариш тартиби $\frac{2\pi a}{\lambda}$ бўлади. Фараз қилайлик, $\frac{a}{\lambda}<<1$ ҳол ўринли бўлсин. У ҳолда атом ичкарисида тўлқин фазасининг ўзгариши кичиклигини эътиборга олиб охирги тенгликни қуйидагича ёзиб оламиз

$$\vec{\varepsilon}(\vec{r},t)=\vec{\varepsilon}_0\cos(\omega_0 t).\qquad(15.48)$$

Агар атомдаги электрон тезлигини жуда кичик $v<<c$ деб олсак, у ҳолда Лоренц кучининг тақрибий ифодаси $\vec{F}=\frac{e}{c}[\vec{v},\vec{H}]\sim\frac{v}{c}e\vec{\varepsilon}$. Ушбу ҳолат учун магнит майдонининг таъсирини эътиборга олмасак ҳам бўлади. Электр майдони (15.48) ни скаляр потенциал орқали қуйидагича ёзиб олмиз

$$\varphi(\vec{r},t)=-\vec{\varepsilon}(t)\vec{r}.$$

Демак,

$$V(\vec{r},t)=-e\varphi=e\vec{\varepsilon}(t)\vec{r}=-\vec{\varepsilon}(t)\vec{d},\ \vec{d}=-e\vec{r}$$

атомнинг дипол моменти ядродан электронга нисбатан радиус вектордан иборат экан. Энергия операторини қуйидагича ёзиб оламиз

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\vec{r}, t),$$

бу ерда $V(\vec{r}, t)$ кичик қўзғолиш деб ҳисобланади. Ўтиш эҳтимолияти (15.42) формула билан аниқланади. Бу аниқ

$$V_{mn}(\omega_{mn}) = -\vec{\varepsilon}(\omega_{mn})\vec{d}_{mn} \equiv -\varepsilon(\omega_{mn})(\vec{e}\vec{d}_{mn}), \qquad (15.49)$$

Бу ерда $\vec{e}$ бирлик вектор, $\vec{\varepsilon}(\omega_{mn})$ эса майдоннинг $\omega=\omega_{mn}$ частотага мос келувчи Фюрье компоненти ҳисобланади

$$\vec{\varepsilon}(\omega_{mn}) = \frac{1}{2\pi}\int dt\ \vec{\varepsilon}(t)e^{i\omega_{mn}t}.$$

Шундай қилиб, 1 см^2 орқали ўтадиган тўлиқ энергия қуйидагича аниқланади:

$$W = \frac{c}{4\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\ \varepsilon^2(t) = \frac{c}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\ |\varepsilon(\omega)|^2 = c\int_{0}^{+\infty} d\omega\ |\varepsilon(\omega)|^2 \equiv \int_{0}^{+\infty} W(\omega)\, d\omega. \quad (15.50)$$

Биз бу ерда Фюрье қаторига ёйиш

$$\varepsilon(t) = \int d\omega e^{i\omega t}\varepsilon(\omega)$$

формуласидан фойдаландик ва $\varepsilon(\omega) = \varepsilon^*(-\omega)$ эканлигини инобатга олдик. Охирги ифодадан кўриниб турибдики майдон таъсири вақти давомида ўтаётган тўлиқ энергия миқдори

$$W(\omega)=c|\varepsilon(\omega)|^2.$$

Демак, охирги тенгликни ҳисобга олсак, ўтиш эҳтимолияти

$$P_{n\to m} = \left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 |\vec{e}\vec{d}_{mn}|^2 \frac{W(\omega_{mn})}{c}.$$

кўринишга эга бўлади. Бунда $W(\omega)=w(\omega)cT$ ва $w(\omega)$ эса ω частотадаги энергия зичлиги, T - энергия оқими вақти. Ва ниҳоят, бирлик вақтдаги ўтиш эҳтимолияти учун қуйидаги формулани топамиз

$$\frac{P_{n\to m}}{T}=\frac{4\pi^2}{h^2}\left|\vec{e}\vec{d}_{mn}\right|^2 w(\omega_{mn}).$$

Шундай қилиб, ўтиш эҳтимоли дипол моменти матрицаси билан аниқланар экан.

Назорат саволлари:

1. Шредингер тенгламасини ностационар ҳол учун ёзинг?
2. Вақтга боғлиқ қўзғолишда нега энергия тузатма ахтарилмайди?
3. Тўлқин функция учун биринчи яқинлашувдаги формулани ёзинг?
4. Даврий ўзгарувчи ғалаёнда тўлқин функциясига топиладиган тузатма қандай ёзилади?

МАСАЛА ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ

1.Масала. Бошланғич вақт моментида (t=0 бўлганда) асосий ҳолатда жойлашган водород атомига вақт бўйича даврий ўзгарувчи бир жинсли электр майдони таъсир этади. Атомни ионлантириш учун керак бўлган майдоннинг минимал частотаси аниқлансин, шунингдек, қўзғолиш назариясидан фойдаланиб, ионланишнинг вақт бирлигидаги эҳтимолияти ҳисоблансин (охирги ҳолатда электрон эркин деб ҳисоблансин).

Ечиш. Электр майдони таъсирида атом ионланаётган ва электрон эркин ҳолатга (бундай ҳолат узлуксиз спектрга эга бўлади) ўтаётган ҳол учун вақт бирлигидаги эҳтимолият

$$dW_{nv}=\frac{2\pi}{h}\left|<v|F|n>\right|^2\delta\left(E_v\text{-}E_n^0\text{-}h\omega\right)dv \qquad (1)$$

формула орқали топилади. Бу ерда E_n^0- асосий ҳолат. E_v- узлуксиз спектрли ҳолатга мос келувчи энергиялар, dv -узлуксиз спектр ҳолатидаги частоталарнинг дифференциал интервали. $<v|F|n>-(n\to v)$ ўтишга оид ғалаёнлантирувчи оператор матрица элементи. $h\omega$ - ω частотали электр майдоннинг атом томонидан $(n\to v)$ ўтишда ютиладиган энергияси. $\delta\left(E_v\text{-}E_n^0\text{-}h\omega\right)$ - ўтиш вақтида энергиянинг сақланиш қонунини ифодаловчи Диракнинг δ-функцияси. Агар $\vec{r},e$ лар орқали атомдаги электрон радиус – вектори ва зарядини белгиласак, ташқи электр майдон амплитудасини

$$\vec{\varepsilon}=\vec{\varepsilon}_0\sin\omega t$$

ва ғалаёнлантирувчи операторни

$$\hat{w}(t)=e\vec{\varepsilon}\,\vec{r}=\ e\vec{\varepsilon}_0\vec{r}\sin\omega t=\hat{F}e^{i\omega t}+Fe^{-i\omega t} \qquad (2)$$

десак,

$$\hat{F} = \frac{i}{2} e\vec{\varepsilon}_0 \vec{r}$$

бўлади ва

$$< v \left| F \right| n >= \int \Psi_v^* \hat{F} \Psi_n^0 (r) dr \ . \qquad (3)$$

Бу ерда Ψ_v^*, $\Psi_n^0(r)$лар водород атомининг ионланиш ва асосий ҳолатига мос келувчи тўлқин функциялар

$$\Psi_n^0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}, \qquad \Psi_v = \Psi_{\vec{k}}(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \ .$$

($\vec{k}$-ионланиш вақтида атомдан учиб чиқадиган электрон тўлқин вектори).(3)-ҳисоблаймиз

$$< v \left| F \right| n >= \frac{ie}{2} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \int e^{-i\vec{k}\vec{r} - \frac{r}{a}} (\vec{\varepsilon}_0 \vec{r}) dr \qquad (4)$$

Бу интегрални ҳисоблаш учун сферик координаталар системаси (ρ, θ, φ)-киритамиз. Қутб ўқини $\vec{k}$ вектор бўйича йўналтирсак ва $\vec{k}, \vec{\varepsilon}$ лар орасидаги бурчакни θ десак

$$\vec{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0 \left(\vec{n}_x \sin\theta \cos\varphi_0 + \vec{n}_y \sin\theta \cos\varphi_0 + \vec{n}_z \cos\theta \right),$$
$$\vec{r} = r_0 \left(\vec{n}_x \sin\theta \cos\varphi + \vec{n}_y \sin\theta \cos\varphi + \vec{n}_z \cos\theta \right),$$

эканлигини ҳисобга олсак,

$$\vec{\varepsilon}_0 \vec{r} = \varepsilon_0 r \left[\cos\psi \cos\theta + \sin\psi \sin\theta \cos(\varphi - \varphi_0) \right] \qquad (5)$$

каби ёзилади; бу ерда $\varphi_0 -$берилган системада $\vec{\varepsilon}_0$ нинг азимут бурчаги. (5)-асосида (4)-интегрални ҳисоблаймиз. Ўз-ўзидан кўринадики, $d\tau = r^2 dr \sin\theta d\varphi$ даги $d\varphi$ бўйича (4)-интегралда $\sin(\varphi - \varphi_0) \Big|_0^{2\pi} = 0$ бўлгани учун (5)-нинг иккинчи ҳади (4)-ҳисоблашда иштирок этмайди. Шунинг учун $(\cos\theta = x)$ десак

$$< v|F|n >= \frac{ie 2\pi \varepsilon_0 \cos\psi}{2^{5/2} \pi^2 a^{3/2}} \int_{-1}^{1} \left(\int_0^{\infty} e^{-ikrx - \frac{r}{a}} r^3 dr \right) x dx = \frac{ie\varepsilon_0 \cos\psi}{2^{3/2} \pi a^{3/2}} \int_{-1}^{1} \left(\int_0^{\infty} e^{-\left(ikx - \frac{1}{a}\right) r} r^3 dr \right) x dx =$$

$$= \frac{ie\varepsilon_0 \cos\psi}{(2a)^{3/2}\pi} \int_{-1}^{1} \frac{3!\,xdx}{\left(\frac{1}{a} + ikx\right)^4} = \frac{ie\varepsilon_0 \cos\psi}{(2a)^{3/2}\pi} \frac{16ka^5}{(1+k^2a^2)^3} \qquad (6)$$

Бу ерда

$$\int \frac{xdx}{(c+bx)^4} = \frac{1}{c^2}\left[-\frac{1}{2(c+bx)^2} + \frac{b}{3(c+bx)^3}\right]$$

жадвал интегралидан фойдаландик. Бунда $\delta(E_v\text{-}E_n^0\text{-}h\omega)$ $(n \to v)-$ ўтишдаги энергиянинг сақланиш қонунини ифода этади, яъни ўтишда $E_v\text{-}E_n^0\text{-}h\omega=0$ ёки $E_v\text{-}E_n^0=h\omega$ тенгликнинг бажарилиши зарур ҳисобланади. Биламизки, $(E_v\text{-}E_n^0)_{min} = \frac{me^4}{2h^2} = h\omega_{min}$. Бундан атомни ионлантириш учун зарур бўлган минимал частота $\omega_{min} = \frac{me^4}{2h^3}$ эканлигини топамиз. (1)-даги частоталар дифференциал интервалини қуйидагича ёзамиз

$$dv = \vec{k}^2 dk \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = k^2 dk\, d\Omega_{\vec{k}} = k^2 \frac{dk}{dE_v} d\Omega_{\vec{k}} dE_v = \frac{mk}{\hbar^2} d\Omega_{\vec{k}} dE_v .$$

Бу ерда биз

$$d\Omega_{\vec{k}} = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi, \qquad dE_v = d\left(\frac{p^2}{2m}\right) = d\left(\frac{h^2k^2}{2m}\right) = \frac{h^2 kdk}{m} = \frac{h^2}{mk} k^2 dk$$

алмаштиришлар ўтказдик. У вақтда (6)-асосида (1)-ни қуйидагича ёза оламиз

$$dW_{nv} = \frac{2^6 me^2 a^7 \varepsilon_0^2 k^3 \cos^2\psi}{\pi h^3 (1+k^2a^2)^6} \delta\left(E_v\text{-}E_n^0\text{-}h\omega\right) d\Omega_{\vec{k}} dE_v \qquad (7)$$

(7)-ни dE_v бўйича интеграллаб, $\vec{k}$ нинг берилган йўналиши бўйича электроннинг атомдан учиб чиқиши билан боғлиқ бўлган ионлашув эҳтимолиятини топамиз. Бундай интеграллашда $E_v=E_n^0+h\omega$ нуқтагина аҳамиятга эга бўлгани учун

$$k^2 = \frac{2mE_v}{h^2} = \frac{2m}{h^2}\left(E_n^0 + h\omega\right) = \frac{2m}{h^2}\left(-h\omega_0 + h\omega\right) = \frac{2m}{h}\left(\omega\text{-}\omega_0\right)$$

бўлади. Бу ерда $E_n^0=-\frac{me^4}{2h^2}=-h\omega_0$. Бундан $\omega_0=\frac{me^4}{2h^3}$. У ҳолда

$$\left(1+k^2a^2\right)=1+\frac{2m}{h}\left(\omega-\omega_0\right)\left(\frac{h^2}{me^2}\right)^2=1+\frac{2m}{h}\left(\omega-\omega_0\right)\frac{h^4}{m^2e^4}=1+\frac{\omega-\omega_0}{\omega_0}=\frac{\omega}{\omega_0}$$

бўлади. Шундай қилиб эҳтимолият

$$dW_{\bar{k}}=\frac{64me^2a^7}{\pi h^3}\left(\frac{2m}{h}\right)^{3/2}\varepsilon_0^2\cos^2\psi\, d\Omega_{\bar{k}}=\int\frac{\omega_0^{3/2}\left(\frac{\omega}{\omega_0}-1\right)^{3/2}\delta\left(E_v-E_n^0-h\omega\right)}{\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^6}dE_v=$$

$$=\frac{64}{\pi h^2}a^3\varepsilon_0^2\cos^2\psi d\Omega_{\bar{k}}\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_0-1}\right)^{3/2}\int\delta(E_v-E^0{}_n-h\omega)\,dE_v==\frac{64}{\pi h}a^3\varepsilon_0{}^2\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_0-1}\right)^{3/2}\cos^2\psi\, d\Omega_{\bar{k}}$$

(бу ерда $\int\delta(E_v-E_n^0-\hbar\omega)dE_v=1$). Агар бурчак бўйича (7)-ни интегралласак ва

$$\int_0^\pi\cos^2\psi s d\Omega_{\bar{k}}=\frac{4\pi}{3}$$

эканлигини ҳисобга олсак, водород атомининг вақт бирлиги ичида ташқи даврий ўзгарувчи электр майдони таъсирида ионлашиш эҳтимолияти

$$W_i=\frac{256}{3h}a^3\varepsilon_0^2\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_0-1}\right)^{3/2} \qquad (8)$$

бўлади. Бундан

$$\frac{dW_i}{d\omega}=0$$

асосида бу эҳтимолиятнинг

$$\omega=\frac{4}{3}\omega_0=\frac{4}{3}\omega_{min}$$

қийматида максимал бўлишини топамиз.

2 Масала. Водород атомида содир бўладиган $1s \to 2p$ радиацион ўтишга нисбатан бу атомнинг $1s$-ҳолатда яшаш вақти ва энергетик сатҳининг кенглиги ҳисоблансин.

Ечиш. Атомнинг бирор β-инчи ҳолатда яшаш вақти

$$\tau = \frac{1}{<\alpha|\,\hat{w}\,|\beta>} \tag{1}$$

формула билан аниқланади. Бу ерда $<\alpha|\,\hat{w}\,|\beta>$ атомнинг β-ҳолатдан α-ҳолатга диполли ўтишга тегишли матрица элемент ва у

$$<\alpha|\,\hat{w}\,|\beta> = \frac{4\omega^3}{3\pi h c^3}\sum\left|<\alpha|D|\beta>\right|^2 \tag{2}$$

кўринишда ёзилади. $D = er$ - дипол момент,

$$<\alpha|\,D\,|\beta> = \int \Psi_\alpha{}^* e r \Psi_\beta \, d\upsilon \tag{3}$$

$1s$-ҳолатга тегишли функцияни $\Psi_\beta = \Psi^0_{min}(1s)$, $2p$ - ҳолатга тегишлисини эса $\Psi_\alpha = \Psi^0_{min}(2p)$ деб белгиласак, сферик координата системасида $1s$-учун $n=1$, $\ell=0$, $m=0$ бўлганида

$$\Psi_\beta = \Psi^0_{100}(1s) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}},$$

$2p$ - учун эса $n=2$, $\ell=1$, $m=0,\pm1$

$$\Psi_\alpha = \left\{ \begin{array}{l} \Psi^0_{210}(2p) = \dfrac{r}{2\sqrt{6a^5}} e^{-\frac{r}{a}} i\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta \\ \Psi^0_{21\pm1}(2p) = \dfrac{r}{2\sqrt{6a^5}} e^{-\frac{r}{a}}\left(\pm i\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm ij}\right) \end{array} \right\}$$

деб ёза оламиз. $1s \to 2p$ ўтишда ℓ, m квант сонлар учун танлаш қоидалари $\Delta\ell = \pm1$, $\Delta m = -\pm1$ лардан иборат бўлади ва шунга кўра (3)-нинг қуйидагича элементлари мавжуд бўлади

$$<211|\,er\,|100>, \quad <210|\,er\,|100>, \quad <21\text{-}1|\,er\,|100>.$$

Лекин булардан фақатгина $<210|\,er\,|100>0$ бўлади, қолганлари эса нолга тенг бўлади.

$$<210|\,er\cos\theta\,|100>=e\int\Psi^*_{210}r\cos\theta\,\Psi_{100}(1s)r^2\sin\theta\,d\theta\,dj\,d\upsilon=$$

$$=\frac{e}{2\sqrt{6a^5}}i\sqrt{34}\pi\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\int_0 e^{-\frac{3r}{2a}}r^4dr\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}dj=$$

$$=i\sqrt{34}\pi\frac{e}{2\sqrt{6a^5}}\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}4!\left(\frac{2a}{3}\right)^5\frac{2}{3}2\pi=$$

$$=\frac{ei}{2\sqrt{2}\pi a^4}24(\ )\frac{2a}{3}^5\frac{2}{3}2\pi=\frac{8iea}{\sqrt{2}}\left(\frac{2}{3}\right)^5.$$

У ҳолда (2)-йиғиндида фақат $<210|D|100>$ иштирок этади.

$$<\alpha|\,\hat{w}\,|\beta>=\frac{4\omega^3}{3\pi h\,b\,a\,\tau c^3}\left|<210|D|100>\right|^2=\frac{4\omega^3}{3\pi h\,b\,a\,\tau c^3}\left(\frac{2}{3}\right)^{10}\frac{64e^2a^2}{2}\approx 0,74\frac{e^2a^2\omega^3}{\pi h\,c^3}.$$

Водород атоми энергияси $E_n^0=-\frac{me^4}{2h^2n^2}$ билан аниқланганлиги учун $1s\to 2p$ ўтишга тегишли частота

$$\omega=\frac{E_n^0(1s)-E_n^0(2p)}{h}=\frac{me^4}{2h^3}\left(1-\frac{1}{4}\right)=\frac{3me^4}{8h^3}.$$

Агар $a=\frac{h^2}{me^2}$ эканлигини ҳисобга олсак,

$$<\alpha|\,\hat{w}\,|\beta>=0,74\frac{e^2}{\pi c^3h}\frac{h^4}{m^2e^4}\left(\frac{3}{8}\frac{me^4}{h^3}\right)^3\approx 0,04\frac{me^{10}}{\pi c^3h^6}\approx\frac{10^8}{3}c^{-1}.$$

Демак, атомнинг $1s$-ҳолатда яшаш вакти $\tau\approx 3*10^{-8}c$, шунинг учун энергетик сатҳнинг кенглиги

$$\Delta E\approx\frac{h}{\tau}=1,4*10^{-14}эВ$$

га тенг бўлади.

Мустақил ишлашга масалалар

1. Чизиқли бўлмаган кучсиз боғланишли ясси осциллятор потенциал энергияси

2.

$$U(x,y)=\frac{1}{2}m\omega^2(4x^2+y^2)+f(x,t)$$

бўлса, унинг учун биринчи яқинлашувда тузатмалар топилсин. Ғалаёнлантирувчи таъсир тариқасида вақтга боғлиқ бўлган функция олинсин.

2. Изотроп осциллятор потенциал энергияси

$$U(x,y)=\frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2)+g(x,t)$$

бўлса, унинг биринчи уйғонган ҳолат энергиясига 1-яқинлашувда тузатма ҳисоблансин.

3. Сферик-симметрик майдонда ҳаракат қилувчи ва энергияси E_{n1}^0 спинсиз зарра ўз-ўқи бўйича йўналган бир жинсли доимий магнит майдонига (кучланганлиги H) киритилган. 1-яқинлашувда энергия ва тўлқин функциясига тузатмалар топилсин.

XVI- БОБ
ДИРАК ТЕНГЛАМАСИ

16.1. Дирак тенгламаси

Бизга маълумки, релятивистик квант механикаси асосида зарра энергияси, импулси ва тинч массаси ўртасида қуйидаги

$$E^2 - c^2p^2 - m_0{}^2c^4 = 0 \qquad (16.1)$$

муносабат ётади. Ўтган мавзуларимизда ушбу формула асосида Клейн-Гордон тенгламаси ёзилган эди. Аммо бу тенглама, аввал қайд қилганимиздек, спинсиз зарранинг ҳаракат тенгламаси бўлиб ҳисобланар эди. 1928 йилда Дирак электроннинг релятивистик тенгламасини бошқача йўл билан асослаб берди. У (16.1) муносабатни квадратик шаклдан чизиқли шаклга келтирди. Дирак томонидан масаланинг бундай ҳал қилинишининг маълум сабаблари бўлган. Масала шундаки, Клейн-Гордон тенгламаси доирасида заряд зичлиги учун ёзилган формула баъзи қийинчиликни юзага келтирган эди. Заряд зичлиги маъносидан келиб чиқадиган бўлсак, бу зичликнинг бирлик заряд миқдорига нисбати зарралар концентрациясини беради

$$N = \frac{\rho}{e} = \frac{ih}{2m_0c^2}\left(\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^+}{\partial t)}\right). \qquad (16.2)$$

Физика нуқтаи назаридан зарра концентрацияси ҳамма вақт мусбат катталик ҳисобланади. Аммо Клейн-Гордон тенгламаси вақт бўйича иккинчи тартибли тенгламадир, демак, ψ ва $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ катталиклар айрим нуқтада бир-бирига боғлиқ бўлмаган ҳолда берилиши мумкин бўлганидан, зарралар концентрацияси N манфий қийматга ҳам эга бўлиши мумкин. Концентрациянинг манфий бўлмаслиги учун заряд зичлиги формуласида вақт бўйича мавжуд бўлган ҳосиладан соқит бўлиш лозим. Бу эса фақатгина тўлқин тенгламасида вақт бўйича ҳосиланинг биринчи тартибда иштирок этганидагина мумкин бўлади. Релятивистлик инвариантлик талабидан келиб чиққан ҳолда шундай хулосага келамизки, тенгламага координата бўйича ҳам биринчи тартибли ҳосилаларнинг кириши талаб этилади. Ҳолатларнинг суперпозиция принципи эса тенгламанинг чизиқли бўлишини тақозо этади. Шундай қилиб, Дирак томонидан ёзиладиган тўлқин тенглама вақт ва координаталар бўйича биринчи тартибли чизиқли дифференциал тенглама эканлиги келиб чиқади. Шунинг учун (16.1) муносабатни биринчи даражали тенглама кўринишида қуйидагича ёзиб оламиз

$$\left\{\frac{\hat{E}}{c} + (\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y + \hat{\alpha}_z\hat{p}_z) + \hat{\beta}m_0c^2\right\}\psi = 0. \qquad (16.23)$$

Бу тенгламани чап томондан

$$\left\{\frac{\hat{E}}{c}-(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x+\hat{\alpha}_ó\hat{p}_ó+\hat{\alpha}_z\hat{p}_z)-\hat{\beta}\,m_0c^2\right\}$$

ифодага кўпайтириб, (16.3) га киритилган *Дирак матрицалари* деб аталувчи $\hat{\alpha},\hat{\beta}$ матрицаларни аниқлаймиз

$$\left\{\frac{\hat{E}^2}{c^2}-\sum_i\hat{\alpha}_i{}^2\hat{p}_i{}^2)-\hat{\beta}^2m_0{}^2c^4-\sum_{i\neq j}(\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_j+\hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_i)\hat{p}_i\hat{p}_j+\sum_i(\hat{\beta}\hat{\alpha}_i+\hat{\alpha}_i\hat{\beta})\hat{p}_i\right\}\psi=0 \tag{16.4}$$

(16.1) ва (16.4) ларни солиштириб, уларнинг тенг кучли бўлишлари учун Дирак матрицалари қуйидаги шартларни қаноатлантириши зарур

$$\hat{\alpha}_x{}^2=\hat{\alpha}_ó{}^2=\hat{\alpha}_z{}^2=1,\ \ \hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_j+\hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_i=0,\ \hat{\beta}\hat{\alpha}_i+\hat{\alpha}_i\hat{\beta}=0,\ \hat{\beta}^2=1\ \ (i,j=1,2,3) \tag{16.5}$$

(16.5) тенгликлар Дирак матрицаларининг хоссаларини ифода этади ва улар асосида бу матрицаларнинг очиқ кўринишлари топилади. Бу матрицалар ўз ичига Паули матрицаларини олган бўлиб, тўрт сатрли, тўрт устунли матрицалар ҳисобланади

$$\hat{\alpha}_i=\begin{pmatrix}0' & \hat{\sigma}_i'\\ \hat{\sigma}_i' & 0'\end{pmatrix}\ (i=1,2,3),\ \hat{\beta}=\begin{pmatrix}I' & 0'\\ 0' & -I'\end{pmatrix},\ \ 0'=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix},\ I'=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\hat{\sigma}_i$$

16.2. Паули матрицалари.

Паули матрицалари компонентларининг кўринишлари бизга маълум. Улардан фойдаланиб, Дирак матрицаларининг очиқ кўринишларини келтирамиз

$$\hat{\alpha}_x=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix},\ \hat{\alpha}_ó=\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix},\ \hat{\alpha}_z=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{pmatrix},\ \hat{\beta}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix} \tag{16.6}$$

Бу матрицалар орқали (16.5) муносабатнинг биронтасини текшириб кўрамиз

$$\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}i&0&0&0\\0&-i&0&0\\0&0&i&0\\0&0&0&-i\end{pmatrix},\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x=$$

$$\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}i&0&0&0\\0&-i&0&0\\0&0&i&0\\0&0&0&-i\end{pmatrix}=-\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x$$

Демак, Дирак матрицалари учун (16.5) муносабатлар ўринли бўлади ва $\hat{\alpha}$-матрицалар ўзаро антикоммутатив матрицалар бўлади. $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ -матрицалар тўрт қаторли матрицалар бўлганидан ва улар Дирак тенгламасида иштирок этганлари учун бу тенгламадаги тўлқин функция ҳам тўрт қаторли матрица бўлади

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1&0&0&0\\\psi_2&0&0&0\\\psi_3&0&0&0\\\psi_4&0&0&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\\\psi_3\\\psi_4\end{pmatrix},$$

ва унинг қўшмаси эса

$$\psi^+=\left(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*\right) \tag{16.7}$$

кўринишда бўлади.

16.3. Дирак назариясида узлуксизлик тенгламаси.

Дирак тенгламасида $\hat{E}\to ih\frac{\partial}{\partial t}$, $\hat{p}\to -ih\frac{\partial}{\partial x_i}$ алмаштириш олиб, уни қуйидаги

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t}+ihc\hat{\alpha}_i\frac{\partial\psi}{\partial x_i}-\hat{\beta}m_0c^2\psi=0 \tag{16.8}$$

шаклга келтириб оламиз ва (16.8) тенгламанинг қўшмасини ёзамиз

$$-ih\frac{\partial\psi^+}{\partial t}-ihc\frac{\partial\psi^+}{\partial x_i}\hat{\alpha}_i-\hat{\beta}m_0c^2\psi^+=0. \tag{16.9}$$

Бу ерда $(\hat{\alpha}\psi)^+ = \psi^+\hat{\alpha}^+ = \psi^+\hat{\alpha}$, чунки $\hat{\alpha}^+ = \hat{\alpha}$ эрмит матрицасидир. (16.8) ни чап томондан ψ^+ га, (16.9) ни ўнг томондан ψ га кўпайтириб, уларни бир-бирларидан айириб қуйидаги тенгликни ҳосил қиламиз

$$\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^+}{\partial t} + c\psi^+\hat{\alpha}_i\frac{\partial\psi}{\partial x_i} + c\frac{\partial\psi^+}{\partial x_i}\hat{\alpha}_i\psi = 0 \qquad (16.10)$$

ёки

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(c\psi^+\hat{\alpha}_i\psi) = 0. \qquad (16.11)$$

Агар $\rho=\psi^+\psi$, $j_i=c\psi^+\hat{\alpha}_i\psi$ белгилашларни киритсак, ушбу узлуксизлик тенгламасига эга бўламиз

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial j_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{ёки} \quad \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{j} = 0. \qquad (16.12)$$

Бу ерда $\rho, \vec{j}$ лар мос равишда эҳтимолли зичлик ва эҳтимолли оқим зичлиги ҳисобланади. Агар $\rho_e = e\rho$, $\vec{j}_e = e\vec{j}$ катталикларни киритсак, улар энди мос равишда эҳтимолли *заряд зичлиги* ва эҳтимолли *ток зичлиги* деб аталади. Зарралар концентрацияси $N = \frac{\rho_e}{e} = \psi^+\psi$ ўз ичига тўлқин функцияларнинг вақт бўйича ҳосиласини олмайди ва у Шредингер назарияси доирасида аниқланиб мусбат қийматга эга бўлади

$$\rho=\psi^+\psi=\left(\psi^\bullet{}_1\psi^\bullet{}_2\psi^\bullet{}_3\psi^\bullet{}_4\right)\times\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\psi_1{}^+\psi_1+\psi_2{}^+\psi_2+\psi_3{}^+\psi_3+\psi_4{}^+\psi_4. \qquad (16.13)$$

Демак, Клейн-Гордон тенгламасига хос бўлган манфий концентрация билан боғлиқ қийинчилик қаралаётган ҳолда бартараф этилар экан. Дирак тенгламаси билан тавсифланувчи зарранинг спини нечага тенг эканлигини аниқлаш мақсадида марказий-симметрик майдонда ҳаракатланаётган релятивистик заррани қараймиз. Бу ҳолда зарранинг потенциал энергияси фақат марказгача бўлган масофа r га боғлиқ бўлади. Бундай зарра учун Дирак тенгламаси

$$\left\{\ \hat{E} - c(\hat{\alpha}\hat{p}) - \hat{\beta}\,m_0c^2 - U(r)\ \right\}\psi = 0 \qquad (16.14)$$

шаклда ёзилади. Бу зарра учун Гамилтон оператори эса

$$\hat{H}_D = c(\hat{\alpha}\hat{p}) + \hat{\beta}m_0c^2 + U(r)\,. \qquad (16.15)$$

Бизга маълумки, Шредингер назарияси доирасида марказий-симметрик майдонда ҳаракат қилаётган зарра учун унинг импулс моментининг квадрати ва бирор ўққа бўлган проекцияси $\left(\hat{L}^2, \hat{L}_z\right)$ ҳаракат интеграли, яъни сақланувчан катталик бўлади. Шундай экан, биз $\hat{L}_z = x\hat{p}_ó - ó\hat{p}_x$ операторининг (16.12) оператор билан ўзаро коммутациясини текшириб кўрамиз

$$K_1 = \left[\hat{H}_D, \hat{L}_z\right] = \left[c(\hat{\alpha}\hat{p}) + \hat{\beta}m_0c^2 + U(r), x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\right] = c\left[(\hat{\alpha}\hat{p}), x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\right].$$

Бу коммутаторда $\left[\hat{\beta}m_0c^2 + U(r), x\hat{p}_ó - ó\hat{p}_x\right] = 0$ бўлгани учун уни (16.13) да тушириб қолдирдик. $(\hat{\alpha}\hat{p}) = \hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_ó\hat{p}_ó + \hat{\alpha}_z\hat{p}_z$ бўлгани учун

$$K_1 = c\left[\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_ó\hat{p}_ó, x\hat{p}_ó - ó\hat{p}_x\right] = -ich(\hat{\alpha}_x\hat{p}_ó - \hat{\alpha}_ó\hat{p}_x) \neq 0\,.$$

Демак, берилган коммутатор нолга тенг эмас экан, яъни H_D ва L_z операторлари ўзаро коммутатив бўлмайди. Бундан релятивистик зарранинг импулс моменти берилган ҳолда сақланувчан катталик бўла олмайди, деган хулосага келамиз. Дирак тенгламасида $L_z \to J_z = L_z + S_z$ алмаштириш ўтказиб, бу янги операторнинг H_D оператори билан коммутациясини текшириб кўрамиз

$$K_2 = \left[H_D, J_z\right] = \left[H_D, L_z + S_z\right] = K_1 + \left[H_D, S_z\right] = K_1 + K_3 \qquad (16.16)$$

(16.16) да K_3 коммутаторни ҳисоблаш учун $\hat{\alpha} = \hat{\rho}\hat{\sigma}$ алмаштириш ўтказамиз. Бу ерда ρ σ билан коммутация қилишади ва $\hat{\rho}^2 = 1$ тенг бўлган матрицадир. Спин операторини Паули матрицаси орқали $\hat{S}_z = \frac{h}{2}\hat{\sigma}_z$ кўринишда ифодалаймиз. У ҳолда

$$K_3 = \left[\hat{H}_D, \hat{S}_z\right] = \frac{h}{2}\left[c\hat{\rho}(\hat{\sigma}_x\hat{p}_x + \hat{\sigma}_ó\hat{p}_ó + \hat{\sigma}_z\hat{p}_z) + \hat{\beta}m_0c^2 + U(r), x\hat{p}_ó - ó\hat{p}_x\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{2}\left[c\hat{\rho}(\hat{\sigma}_x\hat{p}_x + \hat{\sigma}_ó\hat{p}_ó), \hat{\sigma}_z\right] = \frac{h}{2}c\hat{\rho}\left\{\left[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z\right]\hat{p}_x + \left[\hat{\sigma}_ó, \hat{\sigma}_z\right]\hat{p}_ó\right\} = ich\hat{\rho}(\hat{\sigma}_x\,\hat{p}_ó - \hat{\sigma}_ó\hat{p}_x) =$$

$$= ich(\hat{\alpha}_x\hat{p}_ó - \alpha_ó\,\hat{p}_x) = -K_1$$

Демак,

$$K_2 = K_1 + K_3 = K_1 - K_1 = 0 \text{ ёки } \left[H_D, J_z\right] = 0.$$

Юқорида олинган натижалардан шундай хулосага келиб чиқадики, релятивистик зарра учун орбитал импулс моменти эмас, балки тўлиқ импулс моменти ҳаракат интеграли ҳисобланар экан. Бундай момент

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

тенглик билан ифодаланади ва *тўлиқ момент* деб аталади. Демак, электрон спинининг мавжуд бўлишлиги ва унинг $\frac{h}{2}$ га тенг эканлиги Дирак тенгламасидан ўз-ўзидан келиб чиқар экан.

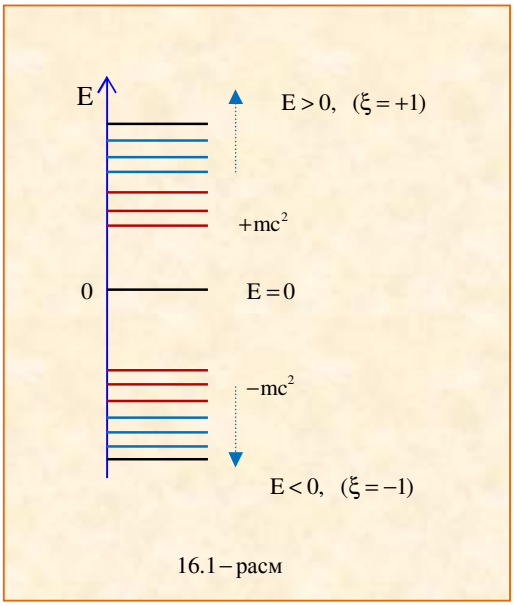
16.4. Позитрон масаласи.

Биз зарра ҳаракатини ифодаловчи бир неча тўлқин тенгламаларини кўриб ўтдик. Бу тенгламаларда иштирок этувчи тўлқин функциялар, масалан, Шредингер тенгламасида бир компонентали функция ҳисобланар эди. Паули тенгламасида эса у спиннинг икки хил ориентациясига мос келувчи икки компонентали функция-спинордан иборат бўлар эди. Бизда Дирак тенгламасидаги тўлқин функция нега тўрт компонентали ва унинг қандай физик маъноси бор деган савол туғилади. Бу саволга жавоб бериш учун энергия ва импулс ўртасидаги релятивистик боғланишга яна қайтамиз. Фараз қилайликки, зарра тинч турган (p=0) бўсин. У ҳолда зарра энергияси $E_{\pm} = \pm m_0 c^2$ кўринишдаги икки илдизга эга бўлади. Ана шу нуқтаи назардан Дирак тенгламасидаги хусусий функция

$$\psi = \begin{cases} \psi_1 \ \text{spin}\ \hat{S}_z = +\frac{h}{2}, \ E_+ = +m_0c^2; \\ \psi_2 \ \text{spin}\ \hat{S}_z = -\frac{h}{2}, \ E_- = -m_0c^2; \\ \psi_3 \ \text{spin}\ \hat{S}_z = +\frac{h}{2}, \ E_+ = +m_0c^2; \\ \psi_4 \ \text{spin}\ \hat{S}_z = -\frac{h}{2}, \ E_- = -m_0c^2. \end{cases} \tag{16.17}$$

Бошқа томондан ҳам (16.17) хулосаларнинг асосли эканлигини кўрсатиш мумкин. Бунинг учун $\hat{S}_z = \pm\frac{h}{2}$ операторининг хусусий функцияси ва хусусий қийматини топиш йўли билан исботлаш мумкин

$$\hat{S}_z\psi = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \\ \psi_3 \\ -\psi_4 \end{pmatrix}. \tag{16.18}$$

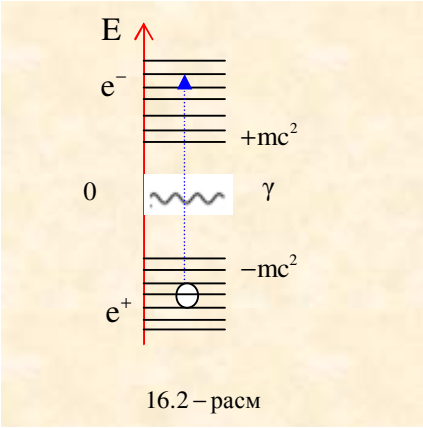


16.1 – расм

Бу ердан кўринадики, тўлқин функциянинг ψ_1, ψ_3 компоненталари z-ўқининг мусбат йўналиши бўйича спини йўналган электрон ҳолатларини, ψ_2, ψ_4 компоненталар эса z-ўқининг манфий йўналиши бўйлаб спини йўналган электрон ҳолатларини ифода этар экан. Бу ҳолатларга мос равишда $\hat{S}_z$ нинг хусусий қийматлари $\pm\frac{h}{2}$ га тенг бўлар экан (16.1-расм). Энди зарра энергиясининг манфий қийматининг $(E_- = -m_0c^2)$ моҳияти устида тўхталайлик. Биринчи қарашда энергиянинг бундай қийматга эга бўлишининг физикавий маъноси йўқдай туйилади. Лекин бу ҳодисани чуқур таҳлил қилиш шуни кўрсатадики, бу тушунчада маълум физикавий маъно мужассамлашган бўлар экан. Диракнинг фикрича, манфий энергияли барча сатҳлар электронлар билан тўлган бўлади. Паули принципига кўра, ҳар бир сатҳда биттадан электрон жойлашади. Мусбат энергияли электрон сатҳлари ва манфий энергияли сатҳлар орасидаги энг кичик интервал $E_+ - E_- = 2m_0c^2$ қийматни ташкил этади. Манфий энергияли электронлар концентрацияси чексиз каттадир. Бундай сатҳлар жойлашуви мумкин бўлган электронлар билан тўла бўлгани учун мусбат энергияли «зона»дан манфий энергияли «зона»га электронларнинг ўтиши Паули принципи билан таъқиқланган бўлади. Лекин манфий зонадан мусбат зонага электронларнинг ўтиши мумкин. Агар манфий зонадаги электронга $2m_0c^2$ дан кам бўлмаган ташқаридан энергия берилса, бу зонадан битта электроннинг мусбат зонага ўтиши мумкин бўлади ва ўтган бу электрон ўзини мусбат энергияли электрон каби ҳис этади. Лекин ўтган электроннинг

жойи манфий зонада бўш қолади. Бошқача айтганда манфий энергиялик сатҳда «тешик» (ғовак) ҳосил бўлади.

Бу тешик чиқиб кетган электрон жойи бўлгани учун ўзини $-(-e)=e$ зарядли, $-(-m_0)=m_0$ массали, яъни электронга тескари бўлган зарра каби ҳис этади. Шундай қилиб, манфий зонадан мусбат зонага электроннинг ўтиши иккита зарранинг пайдо бўлишига олиб келади - электрон ва антиэлектрон юзага келади. Демак, Диракнинг тешиклар тўғрисидаги назарияси жуфт зарраларнинг туғилишини олдиндан айтиб берган. Ҳақиқатан, 1933 йилда жуфт зарраларнинг юзага келиш жараёни кашф этилиб, электронга тескари бўлган зарра - протон тажрибада кузатилди (16.2-расм).



16.2 – расм

Манфий зонада юзага келадиган тешик узоқ вақт эркин яшай олмас экан, унинг жойига мусбат зонадан электроннинг ўтиши, оқибатда унинг ва тешикнинг бир вақтда йўқолиши мумкин бўлади. Бундай ҳодиса зарра жуфтларининг *аннигиляцияси* деб айтилади. Бундай аннигиляция натижасида иккита гамма-квантнинг ажралиб чиқиши кузатилади. Ҳозирги вақтда деярли ҳар бир элементар зарраларнинг, шунингдек енгил ядроларнинг антизарралари ва антиядролари мавжудлиги тажрибада аниқланган. Бу релятивистик квант назариясининг ютуқларидан бири ҳисобланади.

16.5. Электромагнит майдон учун Дирак тенгламаси

Потенциаллари ϕ ва $\vec{A}$ бўлган электромагнит майдонда электрон ҳаракатини қараб чиқайлик. Бунинг учун $E \to E - e\varphi,\ \vec{p} \to \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ алмаштиришни ўтказишга тўғри келади. Қулайлик учун Дирак тенгламасидаги операторларни қуйидагича умумлаштириб ёзамиз

$$\hat{P}_1 = -ih\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c}A_x, \hat{P}_ó = -ih\frac{\partial}{\partial ó} - \frac{e}{c}A_ó, \hat{P}_z = -ih\frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c}A_z, P_4 = \frac{ih}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{c}\varphi \ . \quad (16.19)$$

У ҳолда Дирак тенгламаси қуйидаги шаклда ёзилади

$$(\hat{P}_4 + \sum_i \hat{\alpha}_i \hat{P}_i + \hat{\beta} m_0 c)\,\psi = 0 \quad . \qquad (16.20)$$

(16.20) тенгламани чап томондан $(\hat{P}_4 - \sum_j \hat{\alpha}_j \hat{P}_j - \hat{\beta} m_0 c)$ га кўпайтирамиз

$$\left\{\hat{P}_4^{\,2} - \sum_i \hat{P}_i^{\,2} - m_0 c - \sum_{i^1 j} (\hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j \hat{P}_i \hat{P}_j + \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i \hat{P}_j \hat{P}_i) - \sum_i (\hat{\beta}\hat{\alpha}_i + \hat{\alpha}_i \hat{\beta})\hat{P}_i - \sum_i \hat{\alpha}_i (\hat{P}_4 \hat{P}_i - \hat{P}_i \hat{P}_4)\right\}\psi = 0 \quad (16.21)$$

(16.21) ни очиб чиқиш учун $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ матрица хоссаларидан фойдаламиз

$$\hat{\beta}\hat{\alpha}_i + \hat{\alpha}_i \hat{\beta} = 0, \ \ \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_j = -\hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_i \ \text{ ва } \ i = 1, \ j = 2$$

деб қабул қилиб, кейин чиққан натижани умумлаштирамиз. У ҳолда

$$(\hat{P}_1\hat{P}_2 - \hat{P}_2\hat{P}_1)\psi = \left\{(-ih\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c}A_x)(-ih\frac{\partial}{\partial ó} - \frac{e}{c}A_ó) - (-ih\frac{\partial}{\partial ó} - \frac{e}{c}A_ó)(-ih\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c}A_x)\right\}\psi = \\ = \frac{ieh}{c}\mathrm{rot}_z \vec{A}\psi = \frac{ieh}{c}H_z\psi \qquad (16.22)$$

(бу ерда H_z-магнит майдони кучланганлигининг компонентаси).

$$\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2 = \hat{\rho}\hat{\sigma}_x\hat{\rho}\hat{\sigma}_ó = \hat{\rho}^2\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_ó = \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_ó = i\hat{\sigma}_z \, .$$

Демак,

$$\hat{\alpha}_1\hat{\alpha}_2(\hat{P}_1\hat{P}_2 - \hat{P}_2\hat{P}_1) = -\frac{eh}{c}(\hat{\sigma}_z H_z) \, .$$

Бу натижани умумлаштириб ёзсак,

$$\sum_{i \neq j}(\hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_j\hat{P}_i\hat{P}_j - \hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_i\hat{P}_j\hat{P}_i) = -\frac{eh}{c}(\vec{\sigma}\vec{H}) \qquad (16.23)$$

Энди (16.21) даги охирги ҳадни ҳисоблаймиз

$$(\hat{P}_4\hat{P}_1-\hat{P}_1\hat{P}_4)\psi=\left\{\left(\frac{ih}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{e}{c}\varphi\right)\left(-ih\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)-\left(-ih\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)\left(\frac{ih}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{e}{c}\varphi\right)\right\}\psi=\frac{ieh}{c}E_x$$

ёки

$$\sum_i \hat{\alpha}_i(\hat{P}_4\hat{P}_i-\hat{P}_i\hat{P}_4)=\frac{ieh}{c}\hat{\rho}(\vec{\sigma}\vec{E}) \qquad (16.24)$$

Шундай қилиб, электромагнит майдонда ҳаракат қилувчи электрон учун Диракнинг тенгламаси иккинчи тартибли дифференциал тенглама бўлар экан

$$\left\{\left(\frac{E}{c}-\frac{e}{c}\phi\right)^2-\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2-m_0{}^2c^2+\frac{eh}{c}(\vec{\sigma}\vec{H})-\frac{ieh}{c}\hat{\rho}(\vec{\sigma}\vec{E})\right\}\psi=0. \qquad (16.25)$$

Бу тенгламанинг дастлабки уч ҳади Клейн-Гордон тенгламасидаги ҳадлар бўлиб, унинг тўртинчи ҳади электрон магнит моментининг магнит майдони билан ўзаро таъсирини ифодалайди. Аммо (16.25) нинг охирги ҳади мавҳум бўлганидан, ҳеч қандай физикавий маънога эга бўлмайди.

Назорат саволлари

1.Дирак тенгламаси ҳақида нимани биласиз.
2.Дирак матрицаларининг кўринишини ёзинг.
3. Позитрон масаласи нима.
4. Дирак тенгламасининг электромагнит майдондаги кўринишини ёзинг.

МАСАЛА ЕЧИШ НАМУНАЛАРИ.

1 масала. Эркин электрон релятивистик тенгламасидан фойдаланиб Дирак матрицалари, уларнинг хоссалари ва кўринишлари аниқлансин.

*Ечиш***.** бизга маълумки, релятивистик зарра энергияси ва импулси ўртасида

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2-\vec{p}^2-m_0^2c^2=0 \qquad (1)$$

боғланиш мавжуддир. Бу муносабатни

$$\left(\frac{E}{c}-\sqrt{p^2+m_0c^2}\right)\left(\frac{E}{c}+\sqrt{p^2+m_0c^2}\right)=0 \qquad (2)$$

кўринишда ёзсак ҳам бўлади. Дирак электроннинг релятивистик тенгламасини (2) муносабатнинг илдизларидан бири кўринишида ёзган

$$\left\{\frac{E}{c}-\hat{\alpha}\,\hat{p}-\hat{\beta}\,m_0c\right\}\Psi=0 \qquad (3)$$

бу ерда $\hat{\alpha}$ $(\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z)$, $\hat{\beta}$ Дирак матрицалари дейилади. (3)-тенгламани

$$\left\{\frac{E}{c}-(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x+\hat{\alpha}_y\hat{p}_y+\hat{\alpha}_z\hat{p}_z)-\hat{\beta}m_0c\right\}\Psi=0$$

кўринишда ёзиб, унинг чап томонидан

$$\left\{\frac{E}{c}+(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x+\hat{\alpha}_y\hat{p}_y+\hat{\alpha}_z\hat{p}_z)+\hat{\beta}m_0c\right\}\Psi \text{ га}$$

кўпайтирамиз:

$$\begin{aligned}&\Big\{(\frac{E}{c})^2-\hat{\alpha}^2{}_x\hat{p}^2{}_x-\hat{\alpha}^2{}_y\hat{p}^2{}_y-\hat{\alpha}^2{}_z\hat{p}^2{}_z-\hat{\beta}^2m_0^2c^2-\\&-(\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y+\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x)\hat{p}_x\hat{p}_y-(\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z+\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_y)\hat{p}_y\hat{p}_z-\\&-(\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_x+\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_z)\hat{p}_z\hat{p}_x-(\hat{\alpha}_x\hat{\beta}+\hat{\beta}\hat{\alpha}_x)m_0c\hat{p}_x-\\&-(\hat{\alpha}_y\hat{\beta}+\hat{\beta}\hat{\alpha}_y)m_0c\hat{p}_y-(\hat{\alpha}_z\hat{\beta}+\hat{\beta}\hat{\alpha}_z)m_0c\hat{p}_z\Big\}\psi=0\end{aligned} \qquad (4)$$

Биз (1) да $p^2=p_x^2+p_y^2+p_z^2$ эканлигини ҳисобга олсак, (1) ва (4) ларни солиштириб, осонликча қуйидагиларни топамиз

$$\left\{\begin{array}{c}\hat{\alpha}_x^2=\hat{\alpha}_y^2=\hat{\alpha}_z^2=\hat{\beta}^2=1;\\ \hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y+\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x=0 \quad \hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z+\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_y=0 \quad \hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_x+\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_z=0\\ \hat{\alpha}_x\hat{\beta}+\hat{\beta}\hat{\alpha}_x=0 \quad \hat{\alpha}_y\hat{\beta}+\hat{\beta}\hat{\alpha}_y=0 \quad \hat{\alpha}_z\hat{\beta}+\hat{\beta}\hat{\alpha}_z=0\end{array}\right\} \qquad (5)$$

Бу муносабатларнинг Дирак матрицаларнинг хоссаларини ва уларнинг кўринишларини тўла аниқлаб беради: $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z$, $\hat{\beta}$ матрицалар ўзаро антикоммутатив, хусусий қиймати ± 1 бўлган матрицалар ҳисобланади. Ҳақиқатан,

$$\hat{\alpha}_x^2\Psi=\hat{\alpha}_x(\hat{\alpha}_x\Psi)=\hat{\alpha}_x(\lambda\Psi)=\lambda(\hat{\alpha}_x\Psi)=\lambda^2\Psi=\Psi,$$

Бундан $\lambda^2=1$, $\lambda=\pm 1$ (4) муносабатлар Дирак матрицаларнинг камида тўрт сатрли ва тўрт устунли матрицалар бўлишлигини кўрсатади

$$\hat{\alpha}_k=\begin{pmatrix}0' & \sigma_k'\\ \sigma_k' & 0'\end{pmatrix}, \quad \hat{\beta}=\begin{pmatrix}I & 0'\\ 0' & I\end{pmatrix}, \quad k=1,2,3;$$

бу ерда σ'_k -Паули матрицалардир

$$\sigma'_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma'_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$
$$\sigma'_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad O' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(3)-тенгламадаги оператор эрмит оператори бўлганлиги сабабли Дирак матрицалари ҳам эрмит матрицаларидир. Агар $\hat{\alpha} = \hat{\alpha}_{km}$ десак,

$$\hat{\alpha} = \hat{\alpha}^+ = (\hat{\alpha}_{km})^+ = \hat{\alpha}^*_{km}, \quad \hat{\beta} = \hat{\beta}^+ .$$

Кўпинча назарияда, $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ матрицалар ўрнида $\gamma_\mu = (\vec{\gamma}, \gamma_4)$, $\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$ матрицалари ишлатилади ва бу ерда

$$\vec{\gamma} = -i\vec{\beta}\vec{\alpha} = i\begin{pmatrix} 0' & -\hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0' \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \vec{\beta}$$

янги матрицалар учун

$$\gamma_\mu\gamma_\nu = +\gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}, \quad \mu = 1,2,3,4$$
$$\gamma_5\gamma_\mu + \gamma_\mu\gamma_5 = 0$$

муносабатлар ўринли бўлади. Барча γ_μ матрицалар каби γ_5 матрица ҳам эрмит матрицаси ҳисобланади:

$$\gamma_5{}^+ = (\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4)^+ = \gamma_4\gamma_3\gamma_2\gamma_1 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = \gamma_5$$

ҳамда

$$\gamma_5{}^2 = 1 \quad \gamma_5 = -\begin{pmatrix} 0' & I \\ I & 0' \end{pmatrix}, \qquad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

2 масала. Электромагнит майдонда ҳаракат қилаётган электрон учун Дирак тенгламасидан норелятивистик яқинлашувда автоматик равишда магнит моменти (кинематик магнит момент) келиб чиқиши исботлансин.

Ечиш. Электромагнит майдонда ҳаракат қилаётган релятивистик электрон учун гамилтониан қуйидаги кўринишга эга бўлади:

$$\hat{H} = c\hat{\alpha}\hat{P} + \hat{\beta}m_0c^2 + e\phi \ . \qquad (6)$$

Бу ерда $\hat{P} = \hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$-умумлашган импулс, $\vec{A}, \phi$-майдоннинг векторли ва скаляр потенциаллари.

(6) нинг чап томонини $\frac{H - e\phi}{c}$ кўринишга келтириб, квадратга кўтарамиз:

$$\left(\frac{H - e\phi}{c}\right)^2 \psi = \left\{\left(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \hat{\beta}\, m_0 c\right\}^2 \psi = \left[\left(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - m_0 c^2\right]\psi = 0 \qquad (7)$$

(7) тенгликнинг ўнг томонидаги биринчи ҳад формула

$$(\hat{\alpha}\,\hat{\beta})(\hat{\alpha}\,\hat{C}) = \hat{B}\,\hat{C} + i(\hat{\sigma}\left[\hat{B} \times \hat{C}\right])$$

ёрдамида ечилади

$$\left(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 = \left(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\left(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) = \left(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + i\left(\hat{\sigma}\left[\left(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) x \left(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]\right)$$

Бу тенгликдаги $\left[(\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) \times (\hat{\alpha}\,\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A})\right]$ векторли кўпайтманинг компонентасини топайлик

$$\left[\left(\hat{\alpha}\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) \times \left(\hat{\alpha}\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]_x = -\frac{e}{c}\left\{\left[\left(\hat{p} \times \vec{A}\right)\right]_x + \left[\vec{A} \times \hat{p}\right]_x\right\} = \frac{e}{c}\left\{\hat{p}_y A_z - \hat{p}_z A_y + A_y \hat{p}_z - A_z \hat{p}_y\right\} =$$

$$= -\frac{e}{c}\left\{-ih\frac{\partial A_z}{\partial y} + ih\frac{\partial A_y}{\partial z}\right\} = ih\frac{e}{\varepsilon}\left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right) = ih\frac{e}{c}\,\mathrm{rot}_x\vec{A} = ih\frac{e}{c}B_x.$$

Чунки $\mathrm{rot}\vec{A} = \vec{B}$.Шундай қилиб, (7) тенглик

$$\left(\frac{H - e\phi}{c}\right)^2 \psi = \left|\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right|^2 \psi + m_0^2 c^2 \psi - \frac{e\,h}{c}(\vec{\sigma}\,\vec{B})\psi \qquad (8)$$

кўриниш олади. Норелятивистик яқинлашувда электромагнит майдонда ҳаракатланувчи электрон учун Гамилтон оператори

$$\left(\frac{H - e\phi}{c}\right)^2 = m_0{}^2 c^2 + \left|\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right|^2$$

ёки

$$\frac{H-e\phi}{c}=\sqrt{m^2{}_0c^2+\left|\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right|^2}=m_0c\sqrt{1+\frac{\left|\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right|^2}{m_0^2c^2}}\,.$$

Агар $\left|\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right|^2 << m_0^2c^2$ бўлса

$$\frac{H-e\phi}{c}\approx m_0c\left\{1+\frac{1}{2}\frac{\left|\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right|^2}{m_0^2c^2}+\ldots\right\}=m_0c+\frac{\left|\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right|^2}{2m_0c} \qquad (9)$$

Энди (7) релятивистик муносабатдан норелятивистик муносабатга

$$H=m_0c^2+H_1 \qquad (10)$$

алмаштириш орқали ўтамиз. Биз $H_1, e\phi$ ларни тинч ҳолат энергияси m_0c^2 га нисбатан кичик бўлган катталиклар деб ҳисоблаймиз. У ҳолда (9) тенглик

$$\left(\frac{m_0c^2+H_1-e\phi}{c}\right)^2=\left|\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right|^2+m_0^2c^2-\frac{eh}{c}(\vec{\sigma}\vec{B})$$

каби ёзилиб

$$\left(\frac{m_0c^2+H_1-e\phi}{c}\right)^2\approx m_0^2c^2+2m_0(H_1-e\phi) \qquad (11)$$

эканлигини ҳисобга олсак

$$H_1=e\phi+\frac{\left|\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right|^2}{2m_0}-\frac{eh}{2m_0c}(\vec{\sigma}\vec{B}) \qquad (12)$$

кўринишга келади ва норелятивистик яқинлашувдаги гамилтониан бўлади . Биз (11) ни (12) билан солиштириб кўрамизки, улар бир-биридан $-\frac{eh}{2m_0c}(\vec{\sigma}\vec{B})$ ҳадга фарқ қилади. Бу ҳаднинг $\frac{eh}{2m_0c}\vec{\sigma}$ қисми электроннинг магнит моменти дейилади:

$$\vec{\mu} = \frac{eh}{2m_0c}\vec{\sigma}$$

ва

$$-\frac{eh}{2m_0c}(\vec{\sigma}\vec{B}) = -(\vec{\mu}\vec{B}) = U^{м}$$

магнит моментнинг ташқи магнит майдон $\vec{B}$ билан ўзаро магнит таъсирига тўғри келадиган энергия ифода этади. Бу энергия $\frac{v}{c}$ тартибидаги (норелятивистик ҳамда $v << c$) кичик катталик ҳисобланади.

Мустақил ишлаш учун масалалар

1. Дирак тенгламасидан $\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\mathrm{div}(\psi^* c\hat{\alpha}\psi)$ узлуксизлик тенгламасининг келиб чиқиши исботлансин.

8**.** Дирак ва Паули матритсалари кўринишларидан фойдаланиб,улар ўртасида мавжуд бўлган муносабатларнинг ўринли эканлиги исботлансин.

9**.** Релятивистик электрон учун $\frac{d}{dt}(\hat{p}-\frac{e}{c}\vec{A})$ ҳосила ҳисоблансин ва натижа классик ҳаракат тенгламаси билан солиштирилсин.

10**.** Водород атоми $n=3$ сатҳининг спин-орбитал ўзаро таъсир натижасида ҳосил бўладиган нозик структура кенглиги частоталар бирлигида ҳисоблансин.

Адабиётлар

1. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц. Нерелятивисткая квантовая механика. Наука. М., 1999
2. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц. Теория поля. Изд. Наука. М., 1999
3. А. Мессиа. Квантовая механика. М.. Мир, Том 1. 1978, Том 2. 1979.
4. Л.С. Давыдов. Квантовая механика М., Наука, 1973.
5. Д.И. Блохинцев. Основы квантовой механики - М., 1983.
6. Г.Х.Хошимов, Р.Я.Расулов, Н.Х.Йўлдошев.Квант механика асослари.Т.,"Ўқитувчи", 1995.
7. И.В. Савельев. Основы теоретической физики. Т.2. Квантовая механика. М., 2005.
8. А. Бойдедаев Махсус нисбийлик назарияси. Тошкент, ТДПУ. 2001.
9. И. Е. Иродов. Сборник задач по квантовой физике. Москва. Энергоатомиздат, 1997.
10. З. Флюгге. Задачи по квантовой механике . М., Мир, 1974..
11. И. Е. Иродов. Сборник задач по квантовой физике. Москва. Энергоатомиздат, 1997.
12. Р. Бобожонов, А. М. Худайберганов, Г. А. Кочетков. Атом физикасидан масалалар ечиш учун қўлланма. Тошкент, Университет, 1993.
13.Е.Н. Расулов, У.Ш.Бегимқулов, К.Р.Насриддинов, Ш.Х.Ахмаджанова.Квант физикасидан масалалар тўплами. ТДПУ, 2004
14.Е.Н. Расулов. У.Ш.Бегимқулов. Ш.Х. Ахмаджанова. Ш.М. Адашбоев.Квант физикасидан масалалар тўплами. Электрон ўқув қўлланма, 2005
15. А.Е. Гречко, В.И.Сучаков, О.Ф. Томашевич, А.М. Федорченко. Сборник задач по теоретической физике. - М., Просвещение, 1979.
16. Серова Ф.Г.. Янкина А.А. Сборник задач по теоретической физике. М., Просвещение, 1979.

МУНДАРИЖА

Низом Абдураззакович Тайланов – Физика математика фанлари номзоди