O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY VA O‘RTA MAXSUS TA’LIM VAZIRLIGI

M.M. MUSAXANOV, A.S. RAHMATOV

NAZARIY FIZIKA KURSI

III jild

KVANT MEXANIKASI

O‘zbekiston Respublikasi Oliy va o‘rta maxsus ta’lim vazirligi tomonidan universitetlar va pedagogika institutlari uchun darslik sifatida tavsiya etilgan

«TAFAKKUR BO‘STONI»
TOSHKENT –2011

Nurlanish hodisasi Maksvell tomonidan kashf etilgan elektromagnit nazariyasining qonunlariga bo‘ysunadi. Nurlanishning dinamik o‘zgaruvchilar soni cheksiz ko‘p bo‘lib, fazoning har bir nuqtasidagi elektr va magnit maydonlar orqali namoyon bo‘ladi. Moddadan farqliroq, nurlanishni alohida-alohida korpuskulalarga ajratish mumkin emas, nurlanish to‘lqin xususiyatga ega bo‘lib, interferensiya va difraksiya kabi hodisalar orqali o‘zini namoyon etadi. Nurlanishning to‘lqin nazariyasi XIX asrning birinchi yarmida fransuz fizigi Frenel tomonidan asoslab berildi. To‘lqin tarqalish muammolari to‘g‘ri hal etilgandan keyin, to‘lqin gipotezisidan kelib chiqadigan barcha natijalarni tekshirishga va bu gipoteza asosida ma’lum bo‘lgan yorug‘lik hodisalarini, shu jumladan geometrik optikani ham tushuntirishga imkon yaratildi. Optika sohasida yorug‘likning to‘lqin nazariyasi asosida o‘tkazilgan qator mashhur ishlar to‘lqin nazariyasining tutgan o‘rnini yanada mustahkamladi.

Yorug‘likni elektromagnetizm nazariyasini yaratishga XIX asr o‘rtalarida kashf etilgan bir qator hodisalar salmoqli o‘rin tutdi. Fazoda elektromagnit maydon yorug‘likning vakuumdagi tezligiga teng bo‘lgan tezlik bilan to‘lqin tarzda tarqalishi bevosita Maksvell tenglamalaridan kelib chiqadi. Shunday qilib, elektromagnit to‘lqinlarning bo‘sh fazoda, ya’ni vakuumda tarqalishi Maksvell tomonidan nazariy ravishda oldindan keltirib chiqarildi va yorug‘likning elektromagnit nazariyasi yaratiladi. Bu nazariyaga ko‘ra, yorug‘lik juda kichik to‘lqin uzunligiga ega bo‘lib, elektromagnit to‘lqinlardan iboratdir. Keyinchalik nemis fizigi G.Gers bo‘sh fazoda elektromagnit to‘lqinlarni eksperimental ravishda mavjudligini isbotladi. Shu bilan optika va elektromagnetizmning uzviy bog‘liqligi isbotlandi.

Ma’lumki, optikadagi muhim hodisalardan biri nurlanish hodisasidir va uning turli xillari mavjud. Masalan, gazlardan elektr toki o‘tishi jarayonida vujudga keladigan nurlanish, oksidlanayotgan fosforni nurlanishi, elektronlar bilan qattiq jismlarni bombardimon qilish natijasida vujudga keladigan nurlanish, qizdirilgan jismning nurlanishi, ya’ni issiqlik nurlanishi va hokazo. Yoqoridagi qayd etilgan nurlanishlar bir-biridan o‘zlarining vujudga kelish tabiati bilan ajralib turadi. Har qanday nurlanish jarayonida energiyaning biror turi nurlanish energiyasiga aylanadi va jumladan issiqlik nurlanishida energiyaning bir qismi elektromagnit to‘lqin tarzida nurlanadi. Issiqlik nurlanishi

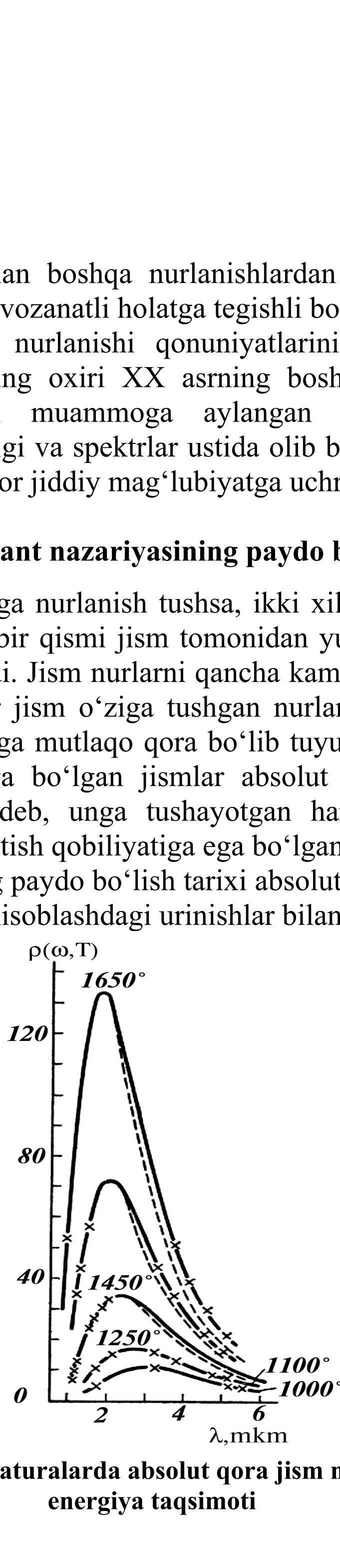
o‘zining xususiyati bilan boshqa nurlanishlardan keskin farq qiladi, chunki bu nurlanish muvozanatli holatga tegishli bo‘lgan nurlanishdir.

Jismlarning issiqlik nurlanishi qonuniyatlarini nazariy tomondan tushuntirish XIX asrning oxiri XX asrning boshlariga kelib klassik fizikada eng muhim muammoga aylangan edi. Elektromagnit nurlanishning intensivligi va spektrlar ustida olib borilgan izlanishlarda klassik fizika birinchi bor jiddiy mag‘lubiyatga uchradi.

1.2. Kvant nazariyasining paydo bo‘lishi

Ma’lumki, jism sirtiga nurlanish tushsa, ikki xil hodisa ro‘y beradi: nurlanishning ma’lum bir qismi jism tomonidan yutiladi, qolgan qismi esa jism sirtidan qaytadi. Jism nurlarni qancha kam qaytarsa, u shuncha qoraroq tuyuladi. Agar jism o‘ziga tushgan nurlanishni qaytarmasdan to‘la yutib qolsa, u bizga mutlaqo qora bo‘lib tuyuladi. Yuqorida qayd etilgan xususiyatga ega bo‘lgan jismlar absolut qora jism deyiladi. “Absolut qora jism” deb, unga tushayotgan har qanday chastotali yorug‘likni butunlay yutish qobiliyatiga ega bo‘lgan jismga aytiladi.

Kvant nazariyasining paydo bo‘lish tarixi absolut qora jismning issiqlik nurlanish spektrini hisoblashdagi urinishlar bilan bog‘liqdir (1-rasm).



1-rasm. Turli temperaturalarda absolut qora jism nurlanish spektrining energiya taqsimoti

Kompton effekti. Fotoeffekt yorug‘likning kvant tabiatiga ega ekanligini rad qilib bo‘lmaydigan darajada to‘la isbotlagan bo‘lsa-da, Eynshteynning fotonlar nazariysi 1923-yilda yana bir tasdiqqa ega bo‘ldi. Artur Kompton qisqa to‘lqinli elektromagnit nurlanishlarni, ya’ni Rentgen nurlarini qattiq jismlarda sochilishiga bog‘liq izlanishlarida nurlanishning to‘lqin uzunligini o‘zgarish hodisasini kashf etdi va bu hodisa Kompton effekti deb nom oldi.

Klassik fizikada yorug‘likning to‘lqin xususiyatlari Maksvell nazariyasi asosida tushuntirilar edi. Bu nazariyaga ko‘ra yorug‘likning o‘zgaruvchan elektr maydoni kristallga tushgandan so‘ng, undagi atomlarning elektronlarini majburan tebrata boshlaydi va tezlanish olgan elektronlar o‘z navbatida ikkilamchi to‘lqinlarni tarqatadi. Sochilgan nurlanish chastotasi (ikkilamchi to‘lqinlar chastotasi) kristallga tushayotgan yorug‘lik nurlarining chastotasi bilan bir xil bo‘ladi.

Rentgen nurlari bilan o‘tkazilgan tajribada, birlamchi nur yo‘nalishi bo‘yicha sochilgan nurlanish intensivligi teskari yo‘nalishda sochilgan nurlanish intensivligidan katta edi. Bu tajribani klassik fizika niqtayi nazaridan tushuntirish katta qiyinchiliklarni yuzaga keltirdi. Tajribalarda sochilgan nurlar chastotasining o‘zgarishi kuzatilib kelindi va to‘lqin nazariyasi tomonidan mutlaqo tushuntirish imkoniyati bo‘lmadi.

Kompton effektini yorug‘likning kvant nazariyasi asosida tushuntirildi, ya’ni birlamchi tushayotgan to‘lqinning uzunligi bilan ikkilamchi sochilayotgan to‘lqinning uzunligi orasidagi mavjud bo‘lgan bog‘lanishni miqdoriy ifodaladi. Fotonlar erkin elektronlar bilan to‘qnashganda fotonlarning chastotasi o‘zgargan holda sochilishi kuzatildi, fotonlar bilan to‘qnashgan elektronlar esa energiya va impulsga ega bo‘lib, natijada ular ma’lum yo‘nalishda harakatlana boshlaydi. Bu holda energiya va impuls saqlanadi. Rentgen nurlarining energiyasi katta bo‘lganligi sababli biz hisoblashlarni o‘tkazganimizda atomdagi elektronlarning energiyasini hisobga olmasak ham bo‘ladi va shu tufayli ularni tinch holatdagi zarrachalar sifatida qarash mumkin. Demak elektronning boshlang‘ich E energiyasi va $\mathbf{P}$ impulsini nolga teng deyish mumkin. Bunday elektronlarni erkin elektronlar deyiladi va erkin elektronlar deb atom bilan bog‘lanish energiyasi foton bilan to‘qnashish paytda olgan energiyasidan kichik bo‘lgan elektronlarga aytiladi.

22.314
M90
UDK: 530. 145.6(075)
BBK 22.31ya73

Musaxanov, M.M.

Kvant mexanikasi: Universitetlar va pedagogika institutlari uchun darslik/ M.M.Musaxanov, A.S. Rahmatov; O‘zR oily va o‘rta-maxsus ta‘lim vazirligi. – T. Tafakkur bo‘stoni, 2011. – 352 b.

I. Rahmatov, A.S.

BBK 22.31ya73

Professor **A.A. Abdumalikov**ning umumiy tahriri ostida

Taqrizchilar:
A. Boydedayev – fizika-matematika fanlari nomzodi, professor,
K. Tursunmetov – fizika-matematika fanlari doktori, professor

Mazkur darslik “Nazariy fizika kursi” darsliklar majmuasining III jildi bo‘lib, asosan norelyativistik kvant mexanikasiga bag‘ishlangan. Darslikda kvant mexanikasining asosiy g‘oyalari, matematik apparati, bir o‘lchamli va markaziy maydonlardagi harakatlar, g‘alayonlanish va sochilish nazariyalari, spin va atomlar nazariyalari keltirilgan. Mavzularni tanlash va ularni bayon qilishda Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti “Yadro va nazariy fizika” kafedrasida ishlab chiqilgan namunaviy o‘quv dasturaga amal qilingan. Darslikda fizikaning zamonaviy yutuqlari o‘z aksini topgan. Har bir bobning masalalari va ularning yechimlari keltirilgan.

Darslik oily ta’lim muassasalari fizika, astronomiya va texnika ta’lim yo‘nalishlarida ta’lim olayotgan talabalar uchun mo‘ljallangan bo‘lib, undan magistratura talabalari va yosh tatqiqotchilar ham foydalanishlari mumkin.

ISBN 978-9943-362-35-2

aytganda, ta’sirlashuvga qadar yorug‘lik kvanti tarzida namoyon bo‘layotgan energiya ta’sirlashuvdan so‘ng elektronning energiyasiga aylanadi. Metall sirtidan elektronni ajratib chiqarish uchun qandaydir ish sarflash kerak (bu ish metalldan elektronlarni chiqish ishi deyiladi va χ bilan belgilanadi). U holda metalldagi elektronning energiyasi $-\chi$ ga teng bo‘ladi. Fotoeffekt hodisasida yorug‘lik kvanti to‘la yutiladi va (1.11) formulada $\hbar\omega' = 0$ bo‘ladi.

Yorug‘lik kvanti yutilgandan keyin elektronning energiyasi $m\upsilon^2/2$ ga teng bo‘ladi. Bunda m – elektronning massasi, υ – esa metall sirtidan chiqayotgan elektronning tezligi.

Fotonlarning ko‘pchilik qismi metall tomonidan yutiladi va faqat ularning bir qismigina elektronlarni urib chiqaradi. ω chastota qancha katta bo‘lsa, metalldan uchib chiquvchi elektronlarning tezligi shunchalik katta bo‘ladi. Ikkinchi tomondan elektronlarning tezligi $\upsilon = 0$ bo‘lsa, tashqi fotoeffekt bo‘lmaydi. Bu hol fotoeffektning chegarasi deb ataladi va bu chegara yorug‘likning tebranishlar chastotasi bilan xarakterlanadi, ya’ni fotoeffektning qizil chegarasini aniqlaydi. Yorug‘likning bundan past chastotasida, berilgan modda uchun fotoeffekt hodisasi namoyo‘n bo‘lmaydi. Demak, fotoeffekt hodisasi uchun (1.11) formula quyidagi ko‘rinishda bo‘ladi:

$$\hbar\omega - \chi = \frac{m\upsilon^2}{2}. \qquad (1.13)$$

(1.13) tenglama Eynshteyn tenglamasi deb yuritiladi va uni quyidagicha tushuntirish mumkin: $\hbar\omega$ energiyaga ega bo‘lgan foton metall sitri bilan to‘qnashib, o‘z energiyasini elektronga beradi. Ushbu energiyaning bir qismi elektronni metal sirtidan chiqarishga sarflansa (χ chiqish ishini bajarish uchun), qolgan qismi elektronning $m\upsilon^2/2$ kinetik energiyasiga aylanadi.

Bu tenglama yorug‘likning fotoeffekt hodisasi uchun energiya saqlanish qonunini bildiradi. Eynshteyn tenglamasi bilan tavsiflanuvchi fotoeffekt hodisasi kvant nazariyasini fundamental asoslarining to‘g‘riligini, ya’ni yorug‘lik energiya qiymati diskret xarakterga ega ekanligini isbotlaydi. Shu bilan bir qatorda, (1.13) tenglama absolut qora jism issiqlik nurlanishini o‘rganishda Plank tomonidan kiritilgan $\hbar$ doimiyni asoslab berdi va Plank g‘oyasini isbotlovchi dastlabki tafsilotlarni to‘g‘ri ekanligini tasdiqladi.

Bunday jismlarning issiqlik nurlanishi ajoyib xususiyatga ega: ularning spektri, ya’ni nurlanishning chastotalar bo‘yicha taqsimlanishi, jismning tabiati bilan mutlaqo bog‘liq emas. Masalan, har qanday yopiq bo‘shliqni, yoki qora kuyani absolut qora jism deb qarash mumkin chunki ularning nurlanish spektri bir xil, sababi ularning har ikkalasi ham o‘ziga tushayotgan yorug‘likni to‘liq yutadi. Ana shu xususiyat tufayli absolut qora jismning nurlanish spektrini statistik fizikadagi metodlar yordamida nazariy hisoblash mumkin.

Issiqlik nurlanish nazariyasining asosiy maqsadi absolut qora jismning temperaturasi va to‘lqin uzunligi orasidagi bog‘lanishni aniqlashdan iboratdir.

Bu sohada tajribalardan kelib chiqadigan xulosalar quyidagicha:

1).absolut qora jismning nurlanish spektri uzluksiz xarakterga ega.

2).har bir temperaturaga tegishli bo‘lgan nurlanishning energetik taqsimotini ifodalovchi egri chiziqda aniq maksimum mavjud bo‘lib, u temperatura oshgan sari qisqa to‘lqin uzunliklar sohasiga siljiydi.

Bu sohada olib borilgan izlanishlar tufayli quyidagi kashf etilgan qonunlarga to‘xtalib o‘taylik.

Birinchi qonun Stefan–Bolsman qonuni deb nomlanib, absolut qora jismning to‘la nur chiqarish qobiliyatini temperaturaning to‘rtinchi darajasiga proporsionalligini ko‘rsatadi:

$$E_T = \sigma T^4, \qquad (1.1)$$

bunda σ – Stefan–Bolsman doimiysi bo‘lib, tajribada aniqlangan qiymati

$$\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\,\frac{Wt}{m^2K^4} \qquad (1.2)$$

ga teng. Vinning siljish qonuni deb nomlangan ikkinchi qonun 1-rasmdagi spektrning maksimumiga taalluqlidir: absolut qora jism nurlanishi maksimumiga mos keluvchi $\lambda_{\max}$-to‘lqin uzunlikning temperaturaga ko‘paytmasi o‘zgarmas kattalikdir, ya’ni

$$\lambda_{\max} T = b \qquad (1.3)$$

Bunda b – Vin doimiysi bo‘lib, tajribalar asosida $b = 2{,}898 \cdot 10^{-3}\,K{\cdot}m$ ekanligi aniqlangan. Bu formuladan ayonki, absolut qora jismning nurlanish temperaturasi qancha yuqori bo‘lsa, $\lambda_{\max}$ shuncha kichik qiymatga ega bo‘ladi, boshqacha aytganda, nurlanish

aniq ifodalash mumkin bo‘lmay qoldi va ularni to‘g‘ri talqin qilish uchun prinsipial yangi nazariyani yaratish ehtiyoji tug‘ildi.

Ma’lumki, bizni qurshab olgan koinotda ikki xil obyektlar farq qilinadi: modda va nurlanish. Modda aniq koordinatalarga ega bo‘lgan korpuskulalardan tashkil topgan bo‘lib, ularning harakati Nyuton mexanikasining qonunlariga bo‘ysinadi, vaqtning berilgan momentida har bir korpuskulaning holati uning joylashishi va tezligi bilan aniqlanadi, ya’ni oltita mustaqil dinamik o‘zgaruvchilar bilan ifodalanadi. Moddaning korpuskular nazariyasi koinotdagi jismlar va katta o‘lchamdagi obyektlarning mexanikasi bilan chegaralanadi.

Keyinchilik modda tuzilishining atom gipotezasi paydo bo‘lishi bilan, korpuskular nazariya yordamida mikroskopik darajadagi barcha fizikaviy hodisalarni ham tushuntirishga harakat qilindi. To‘g‘ridan-to‘g‘ri atom gipotezasini tekshirishga imkoniyat bo‘lmaganligi sababli, bilvosita xarakterga ega bo‘lgan isbotlarga juda ko‘p vaqt va e’tibor ajratildi, ya’ni molekulalardan tashkil topgan moddiy jismlarning makroskopik xususiyatlarini tekshirishda alohida har bir molekulaning harakat qonunlari tahlil qilindi. Matematik jihatdan bu masala nihoyatda murakkabdir, chunki erkinlik darajasi soni juda ko‘p bo‘lgan sistemaning dinamik o‘zgaruvchilarining o‘rtacha qiymati hisobga olinishi kerak. Shu o‘rinda bir mol modda miqdorida molekulalar soni N_A=6,02 · 10^{23} (Avogadro soni) ga teng ekanligini eslatib o‘tish joiz deb hisoblaymiz.

Bunday sistemaning harakat tenglamalarini aniq yechish mumkin emas, shuning uchun ushbu masalani statistik usullar yordamida yechish kerak. Shunday qilib, yangi fan-statistik mexanika vujudga keldi. Gazlar harakatini tekshirish (gazlarning kinetik nazariyasi) va termodinamikadan (statistik termodinamika) olingan yangi natijalar moddaning korpuskular nazariyasining asosiy qoidalarini sifatli va imkoniyat darajasida aniq miqdoriy hisoblashlarga imkon yaratadi.

Shu paytning o‘zida fizikaning boshqa bo‘limlari bilan birga elektr va magnit hodisalar haqidagi ta’limot ham tez sur’atlarda rivojlana boshladi. Bu sohada katta muvaffaqiyatlarga ingliz fizigi J. Maksvell erishdi. 1865-yilda elektromagnit nazariyasining asosiy qonunlarini va ularni ifodalovchi tenglamalarni keltirib chiqardi. Mexanikada Nyuton qonunlari qanday rol o‘ynasa, elektromagnetizm sohasida J.Maksvell tenglamalari ham shunday ahamiyat kasb etadi.

SO'ZBOSHI

To'rt jildlik "Nazariy fizika kursi" darslikning 3-jildi "Kvant mexanikasi" kursiga bag'ishlangan bo'lib, hozirgi zamon nazariy fizika bo'limlari ichida muhim o'rin egallaydi.

XIX asrning oxiriga kelib fizikada bir qator ko'zga ko'rinuvchi yutuqlarga erishildi. Bu davrda o'sha paytgacha bo'lgan III asrlik davr mobaynida yaratilib va har tomonlama takomillashib kelgan mavjud nazariyalar asosida ushbu yutuqlarning katta qismini nazariy jihatdan tushuntirib berish imkoni bor edi. Nyuton mexanikasi Yerdagi va osmon jismlarining harakatini bemalol tavsiflab berdi. U fizikaning gidrodinamika, to'lqin harakat nazariyasi va akustika kabi bo'limlarining rivojlanishida asos bo'lib xizmat qildi. Kinetik nazariya gaz va boshqa muhit xossalarini atroflicha tushuntirib bera oldi. Maksvellning elektromagnit nazariyasi elektr va magnit hodisalarni tuuvchi

elektromagnit to'lqinlarning mavjud ekanligini ham oldindan ko'rsatib berdi; shu tariqa yorug'likning elektromagnit tabiati haqidagi tasavvurlar paydo bo'ldi. Atrofimizdagi olam, o'sha paytda, mavjud nazariyalar asosida to'la tushuntirilishi mumkindek tuyuldi. Faqatgina bir qator hodisalar ushbu nazariyalar asosida tushuntirila olmadi, lekin ko'pchilik mavjud nazariyalar ularni tez orada asoslashi mumkinligiga astoydil ishonishgan edi.

Haqiqatda esa voqealar rivoji ular o'ylaganday bo'lmadi. Yuqorida qayd etilgan hodisalarning nazariy jihatdan tushuntirilishi XX asrning boshlariga ikki yangi fundamental nazariya: nisbiylik nazariyasi va kvant mexanikasining yaratilishi bilan amalga oshdi. XIX asrgacha ma'lum bo'lgan fizikani klassik fizika deb atash qabul qilingan.

Mazkur darslik asosan zamonaviy fizikaning norelyativistik kvant mexanikasi qismiga bag'ishlan. Ushbu darslikning asosiy maqsadi kvant mexanikasining bo'limlarini bayon etishdan iborat bo'lib, unda yorug'likning kvant tabiati hamda elektronning to'lqin xususiyatlarini tasdiqlaydigan bir qator tajriba natijalari va M.Plank, A.Eynshteyn, N.Bor, L. de-Broyl g'oyalarining har tomonlama tahlili asosida kelib chiqqan Shredinger to'lqin tenglamasi atroflicha yoritib berilgan. Ushbu tenglamadan foydalangan holda bir o'lchamli masalalar, garmonik

I bob.

KVANT MEXANIKASINING FIZIKAVIY ASOSLARI

1.1. Klassik fizikaning asosiy qiyinchiliklari

XIX asrning oxiri XX asrning boshiga kelib klassik nazariyada asosan fizikaviy sistema holatini rivojlanishini to'la ifodalash uchun mustaqil kattaliklardan foydalanilgan va ular muayyan vaqt momentidagi dinamik o'zgaruvchilar deb nomlangan. Ushbu kattaliklar vaqtning har bir momentida aniq qiymatga ega bo'lib, ularning qiymatlari to'plami sistemaning dinamik holatini aniqlab beradi. Bundan tashqari, agar fizikaviy sistemaning holati uchun barcha koordinatalarning qiymati vaqtning boshlang'ich momentida ham berilgan bo'lsa, u holda fizikaviy sistemaning vaqt bo'yicha rivojlanishi to'la-to'kis aniqlangan bo'ladi va uning keyingi harakatini ham oldindan aytib berishga imkon yaratiladi. Matematik nuqtayi nazardan qaraganda, dinamik o'zgaruvchilar vaqtning funksiyasi bo'lib, ikkinchi tartibli differensial tenglamalar sistemasi orqali aniqlanadi. Shunday qilib, klassik norelyativistik nazariyaning asosiy maqsadi tekshirilayotgan sistemaning dinamik o'zgaruvchilarini aniqlab olib, vaqt bo'yicha ularning o'zgarishini ifodalovchi harakat tenglamalarini tuzishdan iborat.

Klassik mexanikaning asosiy qonunlari Nyuton tomonidan ta'riflab berilgandan boshlab, XIX asrning oxirigacha ushbu dastur muvaffaqiyatli rivojlanib keldi va yangi eksperimental natijalarning paydo bo'lishi, nazariy jihatdan, yangi dinamik o'zgaruvchilar va yangi tenglamalarning paydo bo'lishiga olib keldi. Shu bilan bir qatorda yangi hodisani, yoki yangi jarayonni umumiy nazariy sxemaga kiritish katta qiyinchiklar tug'dirmadi. Shu davr ichida biror bir eksperimental natija yoki fizik kashfiyot yuqoridagi qayd etilgan dasturning to'g'riligiga shubha tug'dirmadi. Bu rivojlanish 1900-yilgacha muvaffaqiyatli davom ettirildi, lekin mikrodunyo miqiyosidagi fizikaviy hodisalar to'g'risidagi bilimlar borgan sari ko'payishi va chuqurlashishi natijasida klassik fizika bir qator qiyinchiliklar va qarama-qarshiliklarga duch keldi.

Juda tez ma'lum bo'ldiki, klassik fizika asosida atom hamda subatom darajasidagi fizikaviy hodisalarni va ulardagi bo'ladigan jarayonlarni

temperaturasi oshgan sari absolut qora jismning nurlanish qobiliyatining maksimumi qisqa to'lqin uzunliklar sohasiga siljiydi.

1900-yilgacha tajribalardan olingan absolut qora jismning nurlanish spektri intensivligining egri chizig'ini nazariy jihatdan ma'lum bo'lgan klassik fizikaning fundamental qonunlari asosida tushuntirib bo'lmadi . Klassik mexanika, statistik termodinamika va elektromagnit nazariyasining qonunlaridan foydalangan holda faqatgina Reley-Jins formulasini olindi, ya'ni

$$\rho(\omega,T)=\frac{\omega^2}{\pi^2c^3}\,kT \qquad (1.4)$$

bunda $k=1{,}3807\cdot10^{-23}$ J/K – Bolsman doimiysi, $\rho(\omega,T)-$ nurlanish energiyasi zichligi. Reley-Jins formulasi bilan faqat 1-rasmdagi shtrixlangan qism tushuntira olinadi (past chastotalar sohasi). Reley-Jins formulasiga asosan nurlanish energiyasining to'la intensivligi cheksiz orta borishi kerak. Eksperiment natijasiga ko'ra to'la nurlanishning intensivligi cheklidir. Shunday qilib, hosil qilingan formulalar tajriba bilan keskin qarama-qarshi chiqdi.

1900-yilga kelib Maks Plank absolut qora jism nurlanish muammosini hal etdi va issiqlik nurlanish spektrini aynan ifodalovchi formulani olishga muvaffaq bo'ldi. Ammo Plank buning uchun modda-nurlanish o'zaro ta'siri haqidagi klassik fikrlarga mutlaqo zid bo'lgan yangi g'oya kiritishga majbur bo'ldi. Uning g'oyasiga asosan, elektromagnit nurlanish energiyasi uzluksiz ravishda emas, balki alohida diskret porsiyalar – kvantlar – holida atomlarda yutilishi va nurlanishi mumkin. Bunda ε – energiya kvanti ν nurlanish chastotasi bilan h universal doimiy ko'paytmasiga teng bo'lishi kerak ekan:

$$\varepsilon=h\nu \qquad (1.5)$$

bunda

$$h=6{,}62606957\cdot10^{-34}\ J\cdot s \qquad (1.6)$$

- Plank doimiysi. Plank gipotezasiga asosan moddadan chiqarayotgan ν chastotali nurlanishning E umumiy energiyasi energiya kvantiga (ε ga) karrali bog'liq bo'ladi, ya'ni

$$E=n\varepsilon=nh\nu=n\hbar\omega$$

Universal doimiy $\hbar=h/2\pi=1{,}05\cdot10^{-34}\,J\cdot s$ hozirgi zamon fizikasida juda katta ahamiyatga ega. Uning qiymatini turli metodlar bilan eksperimental ravishda aniqlash mumkin.

ortganini, ya'ni yorug'lik kvanti paydo bo'lganini bildiradi. Boshqacha aytganda, klassik zarrachalarning to'qnashuvidagi kabi, sistema to'qnashuv jarayonida enegiyasi $\hbar\omega$ va impulsi $\hbar\mathbf{k}$ ga teng bo'lgan yorug'lik kvanti o'zining energiyasi $\hbar\omega'$ va impulsini $\hbar\mathbf{k}'$ o'zgartiradi.

Yuqoridagi qabul qilingan belgilashlar hisobga olinsa, matematik nuqtayi nazardan energiya va impulsning saqlanish qonunlari quyidagicha ifodalanadi:

$$\hbar\omega+E=\hbar\omega'+E', \qquad (1.11)$$

$$\hbar\boldsymbol{k}+\boldsymbol{P}=\hbar\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{P}' \qquad (1.12)$$

Bu tenglamalar yorug'likning sochilishini, yutilishini va nurlanishini, ya'ni uning asosiy jarayonlarini o'z ichiga qamrab oladi.

Agar $\omega'=0$ bo'lsa, u holda $\mathbf{k}'=0$ bo'ladi, unda (1.11) va (1.12) tenglamalar $\hbar\omega$ energiyaga ega bo'lgan yorug'lik kvantining sistema tomonidan yutilishini ko'rsatadi. Agar $\omega=0$ (demak $\mathbf{k}=0$ bo'ladi) bo'lsa, bu tenglamalar $\hbar\omega$ energiyali kvantining nurlanishini ifodalashadi. Va nihoyat, agarda ω va ω'lar noldan farqli bo'lsa, u holda bu tenglamalar yo'rug'likning sochilishini ifodalaydi, ya'ni $(\hbar\omega,\hbar\mathbf{k})$ yorug'lik kvanti to'qnashuv jarayonida boshqa $(\hbar\omega',\hbar\mathbf{k}')$ yorug'lik kvantiga aylanadi.

Yuqorida keltirilgan (1.11) va (1.12) formulalar, ya'ni energiya va impuls saqlanish qonunlari, yorug'likning ham to'lqin, ham korpuskular tassavurlariga zid keladi va ularni klassik fizika qonunlari orqali tushuntirish mumkin emas. Lekin shunga qaramay, Eyshteyning gipotezasi bir qator tajribalarni tushuntirishga yordam berdi va yorug'lik kvantlari haqidagi g'oya to'la tasdiqlandi. Quyida yorug'lik kvantlari g'oyasini tasdiqlovchi ba'zi tajribalar bilan tanishib chiqamiz.

Tashqi fotoelektrik effekt. Fotonlar g'oyasini bevosita tasdiqlanishi tashqi fotoelektrik effekt (fotoeffekt) hodisasini eksperimental o'rganish natijasida ro'yobga chiqdi. Fotoeffekt hodisasi shundan iboratki, yorug'lik yoki ultrabinafsha nurlar bilan metall yuzasini nurlantirilganda undan elektronlar ajralib chiqadi. Tajribalarning ko'rsatishicha, fotoelektronlarning energiyasi yorug'lik intensivligiga mutlaqo bog'liq emas, balki yorug'likning ω chastotasi bilan bog'liq ekanligi ma'lum bo'ldi. Agarda (1.11) energiya saqlanish qonunini fotoeffekt hodisasi qo'llanilsa, foton bilan elektronning ta'sirlashuv jarayonida fotonning $\hbar\omega$ energiyasi elektronga o'tadi, boshqacha ossilator masalasi, markaziy maydondagi harakat, vodorod va vodorodsimon atomlarning nazariyasi, ko‘p elektronli atomlarning nazariyasi kabi masalalarning yechilishi ko‘rsatilgan. Shu bilan birga ushbu darslikda kvant mexanikasida keng qo‘llaniladigan taqribiy usullar, xususan, g‘alayonlanish nazariyasi, sochilish nazariyasi va relyativistik kvant mexanikasining elementlari bayon etilgan.

Darslikda bayon etilgan fundamental fizikaviy nazariya mikrozarrachalarni tashqi kuch maydonlarida harakatini va yorug‘lik tezligidan ancha kichik bo‘lgan tezliklardagi zarrachalarning o‘zaro-ta’siri o‘rganiladi. Shunga o‘xshash masalalar klassik fizikada ham o‘rganilgan edi. Ammo klassik fizika tushunchalari, uning asosiy tenglamalari mikrodunyoni tavsiflashda bir qator muammolarga duch keldi. Ushbu vaziyat mikrodunyoga xos bo‘lgan diskretlikni ifodalovchi yangi qonuniyatlarining mavjudligini aniqlash va zarrachalar harakat qonunlarini tavsiflashning yangi g‘oyalarini ilgari surishni taqozo etdi.

Elektromagnit o‘zaro ta’sir bilan bog‘langan zarrachalar sistemasini o‘rganish kvant mexanikasining asosiy vazifalaridan birini tashkil etadi va bu doiraga atomlar, molekulalar, kristallar, moddalarning xususiyatlari va ularda sodir bo‘ladigan juda ko‘p hodisalar kiradi.

Kvant mexanikasi atom va molekulalarning fizikasining asosini tashkil etadi.

U yadro fizikasi, moddaning elektron nazariyasi, qattiq jism fizikasi, kvant kimyosi, kvant statistikasi va boshqa bir qator fanlarning negizidir.

Keyinchalik ma’lum bo‘ldiki, Shredinger nazariyasi asosida atomlarning barcha hodisalarini tushuntirib bo‘lmaydi, xususan atomning magnit maydoni bilan o‘zaro-ta`sirini to‘g‘ri ifodalash mumkin bo‘lmadi, shuningdek murakkab atomlar nazariyasini yaratishda ham bir qator qiyinchiliklarga duch kelindi. Bu hodisalarni tushuntirish uchun elektronning spin xususiyatlarini hisobga olishga to‘g‘ri keldi. Shredinger nazariyasining keyingi rivojlanishi Dirakning relyativistik nazariyasining vujudga kelishi bilan chambarchas bog‘liqdir. Dirak tenglamasi yordamida harakatlanuvchi elektronlarning nafaqat relyativistik, balki spin xususiyatlarini ham ifodalash imkoniyati yaratildi.

Darslikda bayon qilingan nazariy mavzularni amaliy jihatdan mustahkamlashga katta e’tibor qaratilgan. Shu maqsadda har bir bob

oxirida mavzularga mos keluvchi masalalar va sinov savollari berilgan. Ba’zi masalalarning yechimlari ham keltirilgan.

Darslikda mavzularni tanlashda universitetlar uchun ishlab chiqilgan hamda Oliy va o‘rta maxsus ta’lim vazirligi tomonidan tasdiqlangan “Kvant mexanikasi kursi bo‘yicha na’munaviy dastur” asos qilib olingan. Kursni bayon qilish uslubiyati Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy Universiteti fizika fakulteti “Yadro va nazariy fizika” kafedrasida ko‘p yillar davomida ushbu nazariy kurs bo‘yicha ta’lim berib kelayotgan professor-o‘qituvchilarning tajribasi asos qilib olingan.

Ushbu darslik O‘zbekiston Respublikasi Vazirlar Mahkamasi qoshidagi Fan va texnologiyalarni rivojlantirishni muvofiqlashtirish qo‘mitasi tomonidan “ОИД-3–9” – sonli innovatsion loyiha doirasida yaratilgan.

Darslikni yaratishda o‘zlarining qimmatli fikr-mulohazalarini bildirgan taqrizchilar professor A.A. Boydedayev va profofessor K.A. Tursunmetovga mualliflar o‘z minnatdorchiliklarini bildiradilar.

O‘z g‘oyasiga asoslanib hamda statistik fizika qonunlaridan foydalanib, Plank absolut qora jismning issiqlik nurlanish spektrini hisoblaydigan formulaga keldi, ya’ni T temperaturadagi muvozanatli nurlanishning hajmiy energiyasi zichligi uchun quydagi ko‘rinishdagi formulani keltirib chiqardi:

$$\rho(\omega,T)=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\;\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)-1} \tag{1.7}$$

Olingan (1.7) formulani tahlil qilaylik:

1. $\hbar\omega \ll kT$ uchun, ya’ni to‘lqin uzunligi λ ning yoki temperatura T ning katta qiymatlarida eksponentani $\hbar\omega/kT$ darajalari bo‘yicha qatorga yoyish mumkin. Qatorning birinchi hadi Reley-Jins formulasini beradi.
2. $\hbar\omega \gg kT$ uchun, ya’ni yuqori chastotalar yoki past temperaturalar uchun $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \gg 1$ bo‘lib, Plank formulasi quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$\rho(\omega,T)=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\,e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \tag{1.8}$$

Shunday qilib, klassik tasavvurlarga g‘oyat zid, mutlaqo yangi tushuncha kiritilish natijasida keltirib chiqarilgan Plank formulasi absolut qora jism nurlanishining natijalarini muvaffaqiyatli tarzda tushuntira oldi, xususan, (1.7) formula muvozanatli issiqlik nurlanish hodisasini to‘liq tavsiflab beradi.

1.3. Yorug‘likning kvant nazariyasi

Plankning kvantlar g‘oyasiga binoan jismlarning nurlanish energiyasini yutish va chiqarish jarayoni uzlukli ravishda yuz beradi. Bu g‘oya klassik mexanika va statistik fizika yecha olmagan issiqlik nurlanish muyammosini hal qilib, issiqlik nurlanishi nazariyasini yaratishga olib keldi.

Shu davrdan boshlab fizikaviy kattaliklar faqat uzluksiz o‘zgaruvchi kattaliklarni qabul qilibgina qolmay, balki uzlukli, diskret o‘zgaruvchi kattaliklarni ham qabul qilishi mumkinligi katta ahamiyatga ega bo‘ldi. Plank g‘oyasiga asosan jismlarning nurlanishi uzluksiz emas, balki alohida-alohida porsiyalar bilan, ya’ni kvantlar sifatida chiqariladi.

Yorug‘lik kvantining energiyasi ε yorug‘likning chastotasi ω bilan quyidagi ifoda orqali bo‘glangan:

$$\varepsilon=\hbar\omega. \tag{1.9}$$

Plankning nurlanish kvantlari g‘oyasini A. Eynshteyn yanada rivojlantirib, kvant xususiyat umuman yorug‘likka tegishli xususiyatdir, deb hisoblashni taklif etdi. Eynshteynning fikricha, yorug‘lik haqidagi g‘oyaga binoan yorug‘lik ε-energiyaga ega bo‘lishi bilan bir qatorda $\boldsymbol{p}$- impulsga (bu va bundan keying ifodalarda vektor kattaliklarni qoraytirilgan harflar bilan belgilanadi) ham ega bo‘lishi kerak, yani

$$\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}. \tag{1.10}$$

Harakat qiluvchi yorug‘lik kvantlarini Eynshteyn fotonlar deb nomladi va yorug‘lik fotonlar tarzida nurlanadi, tarqaladi, yutiladi, umuman olganda yorug‘lik fotonlar sifatida mavjuddir deb ta’kidladi. (1.9) va (1.10) formulalar yorug‘lik kvant nazariyasining asosiy formulalari bo‘lib, yorug‘lik kvantining ε–energiyasi va $\boldsymbol{p}$–impulsini yassi monoxromatik to‘lqinning ω–chastotasi va λ–to‘lqin uzunligi bilan bog‘laydi. Yorug‘lik kvant nazariyasini mohiyati shundan iboratki, mikrosistemalar (masalan, elektron, atom, molekula) va yorug‘lik o‘rtasidagi energiya va impulsning almashinuvi biror yorug‘lik kvantlarining paydo bo‘lishi va boshqasining yo‘qolishi bilan aniqlanadi. Shu fikrni tasdiqlash maqsadida yorug‘likning biror bir sistema bilan o‘zaro ta’sirini, ya’ni to‘qnashuvini ko‘rib chiqaylik.

Yorug‘lik kvanti bilan to‘qnashuvdan oldin sistemaning energiya va impulsini mos ravishda E va $\boldsymbol{p}$ orqali belgilasak, u holda to‘qnashuvdan keyin bu kattaliklar E' va $\boldsymbol{p}'$ qiymatlarni qabul qiladi. Shu bilan birga $\hbar\omega$ va $\hbar\boldsymbol{k}$ orqali to‘qnashuvdan oldin yorig‘lik kvantining energiyasi va impulsini belgilansa, u holda to‘qnashuvdan keyin shu kattaliklar $\hbar\omega'$ va $\hbar\boldsymbol{k}'$ orqali belgilab olinadi. Umuman olganda, to‘qnashuv deganda quyidagi tushunish kerak: sistemaning yorug‘lik bilan to‘qnashishi natijasida ω–chastota va $\boldsymbol{k}$–yo‘nalishga ega bo‘lgan elektromagnit to‘lqining energiyasi va impulsi mos ravishda $\hbar\omega$ va $\hbar\boldsymbol{k}$ ga kamaygani, ya’ni yorug‘lik kvanti yo‘q bo‘lganligini bildiradi, shu bilan birga ω'-chastota va $\boldsymbol{k}'$-yo‘nalishga ega bo‘lgan boshqa elektromagnit to‘lqinining energiyasi hamda impulsi mos ravishda $\hbar\omega'$ va $\hbar\boldsymbol{k}'$ ga turg‘un holatdagi atomni aylanma orbita bo‘ylab harakatlanayotgan elektronning impuls momenti $\hbar$ kattalikga butun karralidir, ya’ni

$$M = m_e \upsilon r_n = n\hbar . \qquad (1.25)$$

Bunda $n = 1,2,3,\ldots$ butun sonlarni qabul qiladi, $\hbar$ – Plank doimiysi.

II. Atomning nurlanishi yoki yorug‘likni yutishi elektronlarni barqarorlik shartiga bo‘ysinuvchi orbitalarning biridan ikkinchisiga o‘tishida sodir bo‘ladi. Boshqacha aytganda, atom energiya E_n bo‘lgan bir turg‘un holatdan energiyasi E_m bo‘lgan boshqa turg‘un holatga o‘tganda yorug‘lik kvantining chiqishi yoki yutilishi ro‘y beradi. Bu kvantning chastotasi quyidagi munosabat bilan aniqlanadi.

$$\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} . \qquad (1.26)$$

N.Bor o‘zining postulatlariga asoslanib, vodorod atomining nazariyasini yaratdi. Vodorod atomi yadrosining zaryadi $+e$ ga teng bo‘lsin, elektron shunday orbita bo‘ylab harakatlansinki, bu orbitada elektron harakat miqdorining momenti Bor shartiga asosan kvantlansin, ya’ni (1.25) shart bajarilsin. Yadro atrofida r_n radiusli orbita bo‘ylab υ tezlik bilan aylanayotgan elektronnig harakatini ko‘rib chiqaylik.

Musbat $+e$ va manfiy $-e$ zaryad orasidagi o‘zaro ta’sir kuchi

$$F = \frac{e^+ e^-}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2} = \frac{a}{r_n^2}$$

bo‘ladi. Ikkinchi tomondan klassik mexanikaga asosan υ tezlik bilan harakatlanuvchi elektron bu kuch ta’sirida markazga intilma tezlanishga ega bo‘ladi, ya’ni

$$\frac{m_e \upsilon^2}{r_n} = \frac{a}{r_n^2} . \qquad (1.27)$$

Ushbu ifodadan orbita radiusi aniqlanadi:

$$r_n = \frac{a}{m_e \upsilon^2} \qquad (1.28)$$

Hozircha faqat klassik nazariya nuqtayi nazaridan ish ko‘rildi. Endi (1.25) formulada ifodalangan barqarorlik shartini qo‘llaylik va formuladan υ tezlikni topib, (1.28) ga qo‘yilsa, vodorod atomi uchun n holatdagi turg‘un orbitaning radiusi aniqlanadi:

$$r_n = \frac{n^2}{m_e a}\hbar^2 \qquad (1.29)$$

Bundagi n–bosh kvant soni deb ataladi va $n = 1,2,3,\ldots$, ya’ni butun musbat sonlarni qabul qiladi.

Ushbu orbitalarga mos keluvchi turg‘un holatlarda vodorod atomining to‘liq energiyasi, elektronning kinetik energiyasi va elektronning yadro bilan o‘zaro ta’sir energiyalarining yig‘indisidan iborat:

$$E_n = \frac{m_e \upsilon^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} = \frac{m_e \upsilon^2}{2} - \frac{a}{r_n} \qquad (1.30)$$

Ikkinchi tomonidan (1.27) tenglamaning ikkala tomonini $r_n/2$ ko‘paytirilsa, u

$$\frac{m_e \upsilon^2}{2} = \frac{a}{2r_n}$$

ko‘rinishga keladi. Olingan ifoda yordamida (1.30) ni quyidagicha yozishimiz mumkin:

$$E_n = \frac{a}{2r_n} - \frac{a}{r_n} = -\frac{a}{2r_n} \qquad (1.31)$$

Bu ifodadagi r_n o‘rniga uning (1.29) bilan aniqlanuvchi qiymati qo‘yilsa, vodorod atomining turg‘un holatlarini xarakterlovchi energetik sathlarining qiymatlarini hisoblash imkoniyatini beruvchi formula hosil bo‘ladi:

$$E_n = -\frac{a^2 m_e}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} . \qquad (1.32)$$

Gauss birliklar sistemasida bu formula ancha ixcham ko‘rinishga ega bo‘ladi:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} . \qquad (1.33)$$

Elektron bir turg‘un orbitadan ikkinchisiga o‘tganida, masalan n holat orbitasidan m holat orbitasiga o‘tganida va agar $n > m$ bo‘lsa, energiya kvantining chiqishi kuzatiladi:

$$\Delta E = E_n - E_m = \frac{m_e \cdot e^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right). \qquad (1.34)$$

Bu energiyaning chastotasi Plank doimiysi orqali aniqlanadi va $\Delta E = \hbar\omega$ bo‘ladi, u holda

$$\omega = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{m_e e^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (1.35)$$

Agar $(k - k_0) = \xi$ kabi yangi o‘zgaruvchi kiritsak, unda $\psi(x,t)$ quyidagi ko‘rinishda bo‘ladi:

$$\psi(x,t) = c(k_0)e^{i(\omega_0 t - k_0 x)}\int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i\left[\left(\frac{d\omega}{dk}\right)t - x\right]\xi} d\xi$$

chunki

$$\exp\{i[\omega t - kx]\} = \exp\left\{i\left[\omega_0 t + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)(k - k_0)t - \left(k_0 + (k - k_0)\right)x\right]\right\} =$$

$$= \exp\left\{i\omega_0 t - ik_0 x + i\frac{d\omega}{dk}\xi t - i\xi x\right\} =$$

$$= \exp\left\{i(\omega_0 t - k_0 x)\right\}\exp\left\{i\left(\frac{d\omega}{dk}t - x\right)\xi\right\}$$

$$\text{va} \quad k = k_0 + (k - k_0), \quad \mathrm{dk} = \mathrm{d(k\text{-}k_0)} = d\xi .$$

Dastlab ξ bo‘yicha oddiy integrallash natijasida

$$\psi(x,t) = 2c(k_0)\frac{\sin\left\{\left[\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t - x\right]\Delta k\right\}}{\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t - x} e^{i(\omega_0 t - k_0 x)} = c(x,t)e^{i(\omega_0 t - k_0 x)} \qquad (1.50)$$

ni olinadi. Sinus funksiya argumentidagi Δk kichik bo‘lganligi sababli, $c(x,t)$ funksiyani $\exp[i(\omega_0 t - k_0 x)]$ funksiyaga nisbatan sekin o‘zgaruvchi funksiya deb aytish mumkin. Shuning uchun $\psi(x,t)$ ni ω_0 chastotali va k_0 to‘lqin soniga teng bo‘lgan deyarli monoxromatik to‘lqin deb qarash mumkin. Bunda $c(x,t)$ to‘lqin amplitudasi. Uni batafsil o‘rganib chiqaylik. $c(x,t)$ quyidagi ko‘rinishga ega.

$$c(x,t) = 2\Delta k\frac{\sin\alpha(x,t)}{\alpha(x,t)},$$

bunda

$$\alpha(x,t) = \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)t\right]\Delta k .$$

Matemetika kursidan ma’lumki $\sin\alpha/\alpha$ funksiya $\alpha = 0$ nuqtada maksimum qiymatga erishadi, $\alpha = \pm\pi$ da nolgacha tushadi, so‘ngra esa tez so‘nuvchi tebranma funksiyaga aylanadi. Amplituda $c(x,t)$

Rentgen nurlari kvanti bilan to‘qnashgandan keyin elektronning energiyasi juda katta qiymatga ega bo‘lishini ko‘rsatish uchun nisbiylik nazariyasi formulalaridan zarrachaning massasini uning tezligiga bog‘liqligini hisobga olish kerak. Nisbiylik nazariyasiga binoan υ tezlikda harakatlanuvchi elektronning kinetik energiyasi

$$E' = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \upsilon^2 / c^2}} - m_0 c^2 , \qquad (1.14)$$

impulsi esa

$$\mathbf{P}' = \frac{m_0 \boldsymbol{\upsilon}}{\sqrt{1 - \upsilon^2 / c^2}} . \qquad (1.15)$$

ga teng, bunda m_0– elektronning tinchlikdagi massasi, c – yorug‘likning vakuumdagi tezligi.

Olingan qiymatlarni (1.11) va (1.12) formulaga qo‘yilsa hamda $E = 0$ va $\mathbf{P} = 0$ ekanligi nazarda tutilsa, quyidagi natijaga kelinadi:

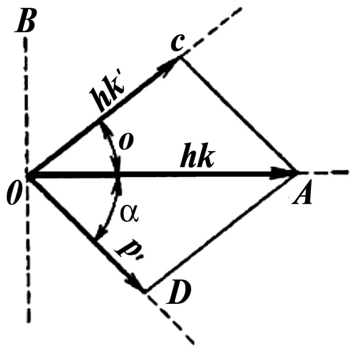
$$\hbar\omega = \hbar\omega' + m_0 c^2\left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1\right), \qquad (1.16)$$

$$\hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}' + \frac{m_0 \boldsymbol{\upsilon}}{\sqrt{1 - \beta^2}} . \qquad (1.17)$$

Hosil bo‘lgan (1.16) va (1.17) tenglamalar mos holda skalar va vektor tenglamalardir. Bunda $\beta = \upsilon / c$ bo‘lib, ω va $\mathbf{k}$ – tushayotgan Rentgen nurlarining chastotasi va to‘lqin vektori, ω' va $\mathbf{k}'$ esa sochilgan nurlarning tegishli kattaliklaridir. (1.16) va (1.17) tenglamalardan muhim natija kelib chiqadi: sochilgan fotonning energiyasi va impulsi tushayotgan fotonning energiyasi va impulsidan kichiqroq bo‘ladi, ya’ni sochilayotgan nurlanishning to‘lqin uzunligi tushayotgan nurlanishning to‘lqin uzunligidan kattaroqdir, chunki $\lambda = c/v$ formulaga asosan, to‘lqin uzunligi ortadi.

(1.16) va (1.17) formulalarning to‘g‘riligini isbotlash uchun sochilayotgan yorug‘likning ω chastotasini θ sochilish burchagiga qanday bog‘langanligini aniqlab olish zarur. 2- rasmda tasvirlangan impulslar diagrammasini ko‘rib chiqaylik.

Rasmda OA o‘qi bo‘yicha bir-lamchi, ya’ni tushayotgan rentgen nurlarining yo‘nalishi ko‘rsatilgan, OC yo‘nalish bo‘yicha esa elektronlar bilan to‘q-nashish tufayli sochilgan ikki-lamchi Rentgen nurlarining yo‘nalishi beril-gan, θ sochilish burchagini, α esa birlamchi kvant va elektronning olgan impulsi orasidagi burchakni ifoda-laydi. Sochilgan $\hbar\omega'$ kvantning qiymati va burchak orasidagi bog‘lanishni topish uchun, (1.17) tenglamaning OA va OB o‘qlarga bo‘lgan proeksiyasi olinadi.



2-rasm. Kompton parallelogrammi.

$$\frac{\hbar\omega}{c}=\frac{\hbar\omega'}{c}\cos\theta+\frac{m_0\upsilon}{\sqrt{1-\beta^2}}\cos\alpha \qquad (1.18)$$

$$0=\frac{\hbar\omega'}{c}\sin\theta-\frac{m_0\upsilon}{\sqrt{1-\beta^2}}\sin\alpha \qquad (1.19)$$

(1.18) va (1.19) tenglamalarning har biri kvadratga ko‘tariladi va hosil bo‘lgan tenglamalar bir-biriga qo‘shiladi. Natijada quyidagi ifodaga kelamiz:

$$\hbar^2\omega^2-2\hbar^2\omega\omega'\cos\theta+\hbar^2\omega'^2=\frac{m_0^{\,2}\upsilon^2c^2}{1-\beta^2}. \qquad (1.20)$$

Bu ifodani soddalashtirish maqsadida energiyani saqlanish qonunidan foydalaniladi, ya’ni (1.16) tenglama quyidagi ko‘rinishda yoziladi:

$$\hbar(\omega-\omega')+m_0c^2=\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

va ikkala tomoni kvadratga ko‘tariladi. Natijada

$$\hbar^2\omega^2-2\hbar^2\omega\omega'+\hbar^2\omega'^2+m_0^{\,2}c^4+2\hbar m_0c^2(\omega-\omega')=\frac{m_0^{\,2}c^4}{\sqrt{1-\beta^2}} \qquad (1.21)$$

kerak. Biroq ma’lumki, vodorod – barqaror atomdir. Shu kamchilik bilan bir qatorda, atomning planetar modeliga xos bo‘lgan ikkinchi kamchiligi ham mavjud edi. Uning mohiyati quyidagidan iboratdir: zaryadi $+e$ ga teng bo‘lgan vodorod atomning yadrosi atrofida r radiusli orbita bo‘ylab υ tezlik bilan aylanayotgan elektron uchun vaqtning har bir minutida F_k – Kulon kuchi va F_{mk} – markazdan qochma kuchlar teng bo‘lish kerak, ya’ni

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}=\frac{m_0\upsilon^2}{r}. \qquad (1.24)$$

Bu tenglama r ning har bir qiymatlari uchun bajarilishi lozim va r ning har bir ixtiyoriy qiymatiga elektron tezligi υ va energiyasi E ning anarishi
tufayli, ya’ni elektronning yadroga yaqinroq orbitalarga o‘tish natijasida, chiqariladigan elektromagnit nurlanishning energiyasi uzluksiz qiymatlarga ega bo‘lishi kerak. Boshqacha aytganda, vodorod atomning nurlanish spektri uzluksiz bo‘lishi lozim. Eksperimental natijalarga ko‘ra esa, vodorod atomning spektri chiziqli, ya’ni uzlukli ekanligi aniqlandi va vodorod atomi barqaror atom ekanligi tasdiqlandi.

Shunday qilib, Rezerford tomonidan taklif etilgan atomning planetar modeli, ya’ni elektr zarrachalardan tashkil topgan atom modeli Nyuton mexanikasi va Maksvell –Lorents elektrodinamikasi qonunlariga zid kelar edi. Bu model atomning barqaror mavjudligini va atomlar spektrlarining chiziqliligini tushuntirishga imkon bermadi.

1913-yilda Nils Bor bu kamchiliklarni yengish maqsadida o‘zining nazariyasini taklif etdi. N.Bor atomning barqarorligiga va yutish hamda nurlanish spektral chiziqlarining mavjudligiga asoslanib, yadro atrofida elektronning dinamik harakatini diskret statsionar holatlarda yuz beradi deb faraz qildi va kvant nazariyasi asosida atom tuzulishini tushuntirish uchun quyidagi ikki postulatni taklif etdi:

I. Atomning mustahkam barqarorligidan kelib chiqqan holda, atom ma’lum turg‘un holatlarda mavjud bo‘ladi, bu holatlardagi atom energiyasining qiymatlari $E_1, E_2, ..., E_n, ...$diskret qatorni tashkil etadi. Turg‘un holatlarga turg‘un orbitalar mos keladi va bu turg‘un orbitalar bo‘yicha harakatlayotgan elektronlar uchun nurlanish sodir bo‘lmaydi. Kvant shartlari, yoki barqarorlik shartlari, quyidagicha ta’riflanadi:

ifodaga ega bo‘lamiz va (1.35) orqali nurlanishning chastotasi aniqlanadi.

Shunday qilib, (1.33) formula vodorod atomi uchun n ning har xil qiymatlariga to‘g‘ri keladigan energiya qiymatlarini, yani E_n larni, hisoblashga imkon beradi. Bu asosda vodorod atomining energetik sathlarini chizish mumkin. Vodorod atomining normal (uyg‘onmagan) holatida elektron eng quyi energetik sathda, ya’ni kvant soninng $n=1$ qiymatiga mos keluvchi sathda joylashgan bo‘ladi. Agar atomga tashqaridan biror energiya berilsa, elektron $n=2,3,4...$qiymatlarga mos bo‘lgan energetik sathlarning biriga ko‘tariladi. Atomning bu holatlari uyg‘ongan holatlar deb ataladi. Uyg‘ongan holatdan normal holatga qaytayotgan atom elektromagnit nurlanish chiqaradi.

Asosiy holatdagi atomning energiyasi:

$$E_n=-\frac{m_ee^4}{2\hbar^2}=-13{,}64eV$$

ga teng bo‘lib, vodorod atomining ionlashtirish potensiyali uchun Bor nazariyasi tomonidan keltirib chiqarilgan va bu qiymat tajriba natijalari bilan mos keladi. Misol tariqasida N.Bor nazariyasini tasdiqlovchi bir tajriba keltirib o‘tiladi.

Mikrosistemalarga ya’ni diskret
energetik sathlarning mavjudligini Frank va Gers 1914-yilda tajriba orqali tasdiqlashdi. Ular simob bug‘lari orasidan elektr tokini o‘tkazib, elektron bilan gaz atomi to‘qnashuvining elastik yoki noelastik xarakterlari uchun to‘qnashuvdan keyin tezliklar taqsimotini tekshirishgan edi. Tajribalar natijasida, Frank va Gers quyidagi natijalarga kelishgan edi:

1. Elektronlarning tezligi muayyan kritik tezlikdan kichik bo‘lgan holda, to‘qnashuv elastik tarzda namoyon bo‘ladi, ya’ni elektron o‘z energiyasini atomga bermasdan, faqat o‘z tezligi yo‘nalishini o‘zgartiradi.

2. Agar elektronlarning tezligi biror muayyan kritik tezlikka teng bo‘lsa, bu hollarda to‘qnashuv noelastik sodir bo‘ladi, ya’ni elektron o‘z energiyasini qisman yo‘qotadi va aynan shu energiya atomga o‘tib, o‘z navbatida atom katta energiya bilan xarakterlanuvchi boshqa statsionar holatga o‘tadi.

$$\psi(x,t)=\int_{k-\Delta k}^{k+\Delta k}C(k)e^{i(\omega t-kx)}dk \qquad (1.47)$$

Bu ifodada yig‘ilgan to‘lqinlarning impulslari o‘zaro kam farqlanadi, ya’ni $\frac{\Delta \mathbf{k}}{\mathbf{k_0}}=\frac{\Delta \mathbf{p}}{\mathbf{p_0}}<<1$ deb faraz qilinadi. (1.47) formulaga bog‘liq yana bir narsaga diqqat qilaylik, ω aslida k ning funksiyasidir:

$$\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}$$

Modomiki, $\Delta k/k_0<<1$deb faraz qilinar ekan, unda bu taxmindan foydalanib integralni soddalashtirishga o‘tiladi. Ushbu maqsadda ω quyidagicha yoziladi:

$$\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}=\frac{\hbar}{2m}\left[k_0+(k-k_0)\right]^2=$$
$$=\frac{\hbar k_0^{\,2}}{2m}+\frac{\hbar k_0(k-k_0)}{m}+\frac{\hbar}{2m}(k-k_0)^2=$$
$$=\omega_0+\frac{\hbar k_0}{m}(k-k_0)+\frac{\hbar}{2m}(k-k_0)^2$$

ω ning bu ko‘rinishi uning k atrofida yoyilgan Teylor qatoridir:

$$\omega=\omega_0(k)+\left(\frac{\partial\omega}{\partial k}\right)_{k=k_0}(k-k_0)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}\right)_{k=k_0}(k-k_0)^2$$
$$\omega_0(k)=\omega_0,\ \left(\frac{\partial\omega}{\partial k}\right)_{k=k_0}=\frac{\hbar k_0}{m},\ \left(\frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}\right)_{k=k_0}=\frac{\hbar}{m} \qquad (1.48)$$

Quyidagiga e’tibor beraylik: biz ko‘rayotgan qatorda $(k-k_0)$ ning ikkinchi darajali hadi uning birinchi darajali hadiga nisbatan ancha kichik ekan:

$$\left|\frac{\frac{1}{2}\frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}(k-k_0)^2}{\frac{\partial\omega}{\partial k}(k-k_0)}\right|=\left|\frac{k-k_0}{2k_0}\right|=\left|\frac{\Delta k}{k_0}\right|<<1.$$

Shuning uchun, ω ni ifodalashda (1.48) formuladagi dastlabki ikkita had bilan cheklansak bo‘ladi va quyidagi chiziqli ifoda olinadi:

$$\omega=\omega_0(k)+\left(\frac{\partial\omega}{\partial k}\right)(k-k_0) \qquad (1.49)$$

tenglama hosil bo‘ladi. (1.21) tenlamadan (1.20) tenlama ayirilsa va sodda matematik amallar bajarilsa,

$$\omega - \omega' = \frac{\hbar}{m_0 c}\omega\omega'(1-\cos\theta) \qquad (1.22)$$

Ifoda hosil bo‘ladi. (1.22) formulada ω ni $2\pi c/\lambda$ va ω'ni $2\pi c/\lambda'$ orqali almashtirilsa, to‘lqin uzunligining o‘zgarishi topiladi va mashxur Kompton munosabati hosil qilinadi:

$$\Delta\lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_0 c}\sin^2\frac{\theta}{2}. \qquad (1.23)$$

Bu munosabat ko‘rsatadiki, sochilish burchagi qancha katta bo‘lsa, fotondan elektronga beriladigan impuls shuncha katta bo‘ladi. Kompton formulasida sochilayotgan moddaning xarakteristikalari qatnashmaydi, bu esa biz ko‘rgan holda Rentgen nurlarining sochilishi fotonlarning erkin elektronlar bilan o‘zaro ta’siri orqali aniqlanishini ko‘rsatadi. Sochilgan Rentgen nuri to‘lqin uzunligining o‘zgarishini energiya va impulsga ega fotonlar asosida tushuntiriladi. Shunday qilib, Komptonning tajribalari yorug‘lik kvanti - fotonda impulsning mavjudligini isbotlab beruvchi birinchi tajriba bo‘ldi va impulsni haqiqatdan ham (1.10) formula orqali ifodalanishini ko‘rsatib berdi.

1.4. Yorug‘likning to‘lqin - korpuskular dualizmi

Yuqoridagi aytilganlarga asosan, Plank o‘zining yorug‘lik mayda zarrachalardan iboratdir, degan tushunchasi bilan haq ekan degan fikr paydo bo‘ladi. Ammo bu fikrni so‘zsiz qabul qilinishiga yoruglikning to‘lqin tabiatini tasdiqlovchi (uning interferensiya va difraksiya hodisalariga bo‘ysinishi haqidagi) ko‘pgina tajribalar to‘sqinlik qiladi. Korpuskular va to‘lqin nazariyalar naqadar zid ekanligini ko‘rsatish uchun oddiy misol tariqasida ikki tirqish orqali hosil bo‘lgan yorug‘lik interferensiyasini ko‘rib chiqaylik, ya’ni Yung tajribasini. Hisoblashni soddalashtirish maqsadida tirqishli ekran bilan fotoplastinka orasidagi masofani tirqishlar orasidagi masofaga nisbatan birmuncha katta deb hisoblaylik. Unda S_1 dan II fotoplastinkagacha va S_2 dan II fotoplastinkagacha bo‘lgan r_1 va r_2 nurlar parallel nurlar deb hisoblanishi mumkin (garchi rasmda bu nurlar kesishsa ham, S_1 va S_2 orasidagi masofa I – tirqishli ekran va II – fotoplastinka orasidagi

noma’lum to‘lqin (keinchalik uni yana batafsilroq ko‘rib chiqamiz) De-Broyl to‘lqini deb ataladi.

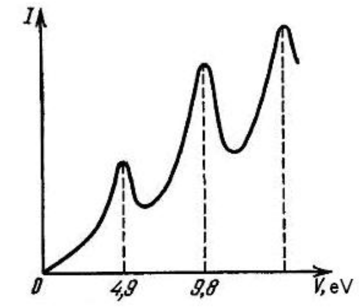
Shunday qilib, quyidagi xulosaga kelinadi: foton bu odatdagi zarracha ham va odatdagi to‘lqin ham emas, balki aniq klassik tassavurga ega bo‘lmagan ajoyib obyektdir. Shuning uchun ham fotonning tabiatini klassik tassavurlar yordamida tushuntirishga harakat qilganimizda unga, ayrim hollarda zarracha xususiyatini, ayrim hollarda esa to‘lqin xususiyatini tatbiq etishga majbur bo‘lamiz. Fizikada paydo bo‘lgan bu ajoyib *holat to‘lqin-korpuskular dualizm* degan nom oldi.

1.5. Bor postulatlari

XIX asrning oxirlariga kelganda bir qator mashhur tajribalar tufayli atomning murakkab tuzulishi to‘g‘risidagi fikr anchagina oydinlashib qoldi. Bu sohada ayniqsa ingliz fizigi Ernest Rezerford tomonidan amalga oshirilgan tajribalar alohida o‘rin tutadi. 1911-yilda Rezerford tajriba xulosalariga asoslanib, atomning yadro modelini taklif etdi. Bu modelga ko‘ra, atomning hamma musbat zaryadi va atomning deyarli butun massasi radiusi 10^{-13} sm tartibda bo‘lgan juda kichik hajm ichida mujassamlashtirilgan musbat yadrodan iborat va atom yadrosi atrofida esa 10^{-8} sm tartibda bo‘lgan masofalarda orbitalararo bo‘ylab manfiy zaryadlangan elektronlar harakatlanadi. Shu tariqa atomning yadro modeli yaratildi. Uni ba’zan, atomning planetar modeli deb ham ataladi, chunki yadroni Quyoshga, elektronlarni esa sayyoralarga o‘xshatiladi. Bu model atom tuzilishini o‘rganishda muhim qadam bo‘ldi. Lekin uning kamchiliklari ham mavjud edi va bu kamchiliklar birinchidan atomning barqarorligini, ikkinchidan atomlar spektrlarining chiziqliligini hamda uning qonuniyatlarini tushuntirishga ojiz edi.

Vodorod atomi misolida bu model bilan tanishib chiqaylik. Planetar modelga ko‘ra zaryadi $+e$ ga teng bo‘lgan yadro atrofida bitta elektron yopiq orbita bo‘ylab harakatlanadi. Klassik elektron nazariya qonunlariga muvofiq orbita bo‘yicha tezlanuvchan harakatlanayotgan elektron elektromagnit nurlanish chiqarishi va energiyasi kamayganligi sababli uning orbitasi borgan sari kichrayib borishi lozim. Hisoblashlarning ko‘rsatishicha, taxminan 10^{-8} sek vaqt o‘tishi bilan vodorod atomining elektroni yadroga qulab tushishi va atom yemirilishi

Boshqacha aytganda, atom umuman energiyani qabul qilmasligi mumkin (elastik tuqnashuvda) yoki yonma-yon joylashgan ikki statsionar holatlarning ayirmasiga teng energiyasiga mos bo‘lgan energiya miqdorini qabul qilishi mumkin (noelastik to‘qnashuv). Natijada elektronlarning energiyasiga bog‘liq holda, o‘tayotgan elektr toki rasmda tasvirlangan maksimum va minimumlarga ega bo‘ladi.



4-rasm. Frank–Gers tajribasidan olingan Volt–Amper xarakteristikasi.

Elektronlarning kinetik energiyasi ortishi bilan tok ham orta boshlaydi, lekin bu ortish elektronlarning energiyasi 4,9 eV qiymatigacha davom etadi. Shunday so‘ng tok keskin kamayadi, chunki elektronlar simob atomlari bilan to‘qnashish jarayonida ularning ichki holatini o‘zgartirib, o‘z energiyalarini yo‘-qotadi, ya’ni noelastik to‘qnashuv ro‘y beradi. Tajribaning ko‘rsatishicha tok qiymatlarining keskin kamayishi elektronning energiyasi 4,9 eV ga karrali bo‘lgan holda amalga oshadi. Demak, simob atomini quyi energetik sathdan yuqori energetik sathga ko‘tarish uchun 4,9 eV energiya lozim ekan. Elektron faqat ma’lum energiyani simob atomiga beradi. Yuqoridagi tajribadan ma’lumki, 9,8 eV va 14,7 eV energiyalarda elektronlar mos ravishda simob atomining ikkinchi va uchinchi energetik sathlariga ko‘tariladi. Shu tariqa Frank va Gers tajribasi atomning turg‘un holatlari haqidagi Bor postulatini isbotlab berdi va atomlarda diskret energetik sathlar mavjudligini bevosita tasdiqladi.

Bor nazariyasining yutuqlaridan yana biri shundan iboratki, uni vodorodsimon atomlar, ya’ni yadroning zaryadi Ze bo‘lgan, lekin tashqi orbitasida bittagina elektron bo‘lgan atomlarga, masalan He^+, Li^{++} va hokazolarga qo‘llash mumkin. Ammo ko‘pgina yutuqlarga qaramasdan Bor nazariyasi ba’zi bir kamchiliklardan ham holi emas. Masalan, asosiy muvaffaqiyatsizliklardan biri shundan iborat bo‘ldiki, bu nazariya vodorod atomidan keyingi atomlarni, ya’ni geliy atomining qonuniyatlarini mutlaqo tushuntirib bera olmadi, ikkinchidan spektral

$$\psi(x,t) = Ce^{i(\omega t - kx)} \qquad (1.43)$$

(1.43) dagi $(\omega t - kx)$ kattalik to‘lqin fazasini ifodalaydi. Ixtiyoriy x nuqtada faza aniq qiymatga ega, ya’ni

$$\alpha = \omega t - kx$$

Fazaning qiymati vaqt o‘tishi bilan fazoda υ tezlik bilan o‘zgaradi. Bu tezlikni hosil qilish maqsadida, avvalgi tenglik vaqt bo‘yicha differensiallanadi va

$$\upsilon = \frac{\omega}{k} \qquad (1.44)$$

tenglik hosil bo‘ladi. Bu tezlik ***fazaviy tezlik*** deyiladi.

Agarda υ tezlikni k ga bog‘liq desak, demak to‘lqin uzunligiga $(\lambda = 2\pi/k)$ ham bog‘liq bo‘ladi, bu holda to‘lqin dispersiyasi o‘rinlidir. Elektromagnit to‘lqinlardan farqli o‘laroq, de-Broyl to‘lqinlari uchun bo‘sh fazoda ham dispersiya hodisasi mavjuddir.

Nisbiylik nazariyasiga asosan

$$E = +\sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} = m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0} + ... \qquad (1.45)$$

m_0- zarrachaning tinchlikdagi massasi. (1.45) ni (1.40) ga qo‘yilsa ,

$$\omega = \frac{m_0c^2}{\hbar} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0\hbar} + ...$$

Ifoda hosil bo‘ladi va $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ ekanini hisobga olsak,

$$\omega = \frac{m_0c^2}{\hbar} + \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m_0} + ... \qquad (1.46)$$

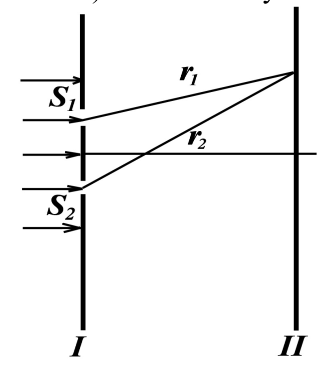
natijaga kelinadi, demak $\upsilon = \omega/k$ k ning funksiyasi bo‘lib, dispersiya mavjudligini isbotlaydi.

Endi to‘lqin harakati bilan zarracha harakati orasidagi bog‘lanishni keltirib chiqaraylik. Buning uchun to‘lqin paketi, yoki to‘lqinlar guruhi ko‘rib chiqiladi. Zarrachaning bu holatini impulslari bo‘yicha o‘zaro kam farqlanuvchi de-Broyl to‘lqinlarining yig‘indisi orqali hosil qilinadi. Eng sodda bo‘lgan bir o‘lchovli to‘lqin paketining ifodasi quyidagi ko‘rinishga ega:

masofadan ancha kichik bo‘lsa, r_1 va r_2 ni o‘zaro parallel deb qarash mumkin) va bu nurlar yo‘llari ayrmasi taxminan $d\sin\varphi$ ga teng bo‘ladi.

To‘lqin nazariyasiga asosan, fotoplastinkaning yoritirilganligi nurlarning kesishgan nuqtadagi maksimumga erishishi uchun, bu nuqtalar uchun yo‘llar ayrmasi λ to‘lqin uzinligining butun soniga teng bo‘lishi kerak (maksimumlar sharti):

$$d\sin\varphi = n\lambda = 2n\frac{\lambda}{2}, \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2).$$



3-rasm. Yung tajribasi.

Bu formulaning fizik ma’nosi quyidagicha: φ burchaka mos bo‘lgan nuqtaga birinchi va ikkinchi tirqishlardan nurlar bir xil fazada keladi va natijada ular bir-birini kuchaytiradi. Yo‘llar ayirmasi to‘lqin uzunligining yarim butun soniga teng bo‘lgan yo‘nalishlar uchun esa, nurlar ushbu nuqtaga qarama-qarshi faza bilan keladi va bir-birini so‘ndiradi. Oqibatda bu nuqtalarda yoritilishning minimumi kuzatilishi kerak, burchak esa quyidagi tenglama orqali aniqlanadi:

$$d\sin\varphi = n\lambda = (2n+1)\frac{\lambda}{2} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2).$$

Shunday qilib, fotoplastinkada o‘zaro almashingan yorug‘ va qorong‘i chiziqli interferension manzara hosil bo‘ladi. Tajribalarda haqiqatan ham xuddi shunday ko‘rinish kuzatiladi, bu esa yorug‘likning to‘lqin tabiatini isbotlovchi dalildir. Bu yerda muhim bir narsani taqidlash lozim: biz izohlagan interferensiya uchun bir vaqtning o‘zida ikkita tirqish ishtirok etishi kerak. Agar bitta tirqish yopilsa, unda interferension manzara yo‘qoladi va fotoplastinka bir tekis yoritiladi. Haqiqatda, agar foton bizning oddiy tushunchamizdagi zarracha bo‘lsa, unda u bir vaqtning o‘zida ikkala tirqishdan ham o‘ta o‘lmaydi. Faqat to‘lqingina bir vaqtda ikkita tirqishdan o‘tishi mumkin. Zarracha esa faqat tirqishlarning birortasi orqali o‘tadi. Shuning uchun, agar foton haqiqatda odatdagi zarracha bo‘lsa, unda fotonlardan iborat bo‘lgan yorug‘lik hech qachon interferension manzarani hosil qila olmaydi, bu

esa yuqorida keltirilgan tajriba natijalariga ziddir. Aynan shu holat korpuskular nazariyaga qarshi asosiy dalil bo‘lib xizmat qildi.

Ba’zi olimlar korpuskular nazariyani oqlash maqsadida interferension manzaraning paydo bo‘lishini tushuntirishga harakat qildilar va uni shunday ta’rifladilar: oddiy yorug‘likda juda ko‘p fotonlar qatnashadi va ularning zichligi katta bo‘lganligi uchun bir-biriga ta’sir qilishi mumkin, qandaydir murakkab o‘zaro ta’sir mexanizm natijasida esa yorug‘lik bir vaqtda ikkala tirqishni sezadi va o‘zini to‘lqin kabi tutadi. Agar bu fikr to‘g‘ri bo‘lsa, unda nurlanish juda kichik intensivlikka ega bo‘lgan holda, ya’ni fotonlarning zichligi juda kichkina miqdorga ega bo‘lganda, fotonlarning o‘zaro ta’siri juda ham kam bo‘lishi kerak va shuning uchun interferension manzara yo‘qolishi kerak. Ammo, o‘tkazilgan tajribalar shuni ko‘rsatdiki, yorug‘likning intensivligi har qancha kichraytirilsa ham, baribir interferension manzara yo‘qolmaydi. Faqat interferension manzarani aniq kuzatish uchun nurlash vaqtini (ekspozitsiya vaqtini) cho‘zish kerak bo‘ladi. Demak, interferension manzarani fotonlarning o‘zaro ta’siri orqali paydo bo‘ladi deb tushuntirish yo‘lidagi urinishlar asossiz ekan.

Shunday qilib, fotonlarning har biri bir vaqtning o‘zida ikkita tirqishni sezib, ular orqali to‘lqin kabi o‘tadi, degan birdan bir hulosaga kelamiz. Lekin ayrim foton bilan bog‘langan bu to‘lqin juda ham g‘ayritabiiy bo‘lishi kerak. Biz bilamizki, foton fotoplastinka bilan to‘qnashganida uning yuzasida nuqta ko‘rinishida iz qoldirib o‘zini to‘lqin emas, balki zarracha sifatida namoyon qiladi. Faqat fotoplastinkaga tushgan fotonlarning soni ko‘paygandagina (ekspozitsiya vaqti cho‘zilganda) ularning izlari tutashib, interferension manzarani hosil qiladi. Bundan yana bir xulosa chiqarish mumkin: biz ko‘rayotgan to‘lqin ayrim foton bilan bo‘glangan bo‘lsa ham, ammo negadir u o‘zini namoyon qilishi uchun ko‘pgina bir-biriga bog‘lanmagan fotonlar ishtirok etishini talab qilar ekan. Shuning uchun ayrim fotonga oid bo‘lgan to‘lqin elektromagnit to‘lqin bo‘la olmaydi, chunki elektromagnit to‘lqin bo‘lganida u yakka foton holida ham interferension manzara hosil qilardi. Bu to‘lqin bevosita fizik mazmunga ega bo‘la olmaydi, chunki har qanday fizik to‘lqin davomiylikka ega bo‘lib, fotoplastinka atomlariga bir vaqtning o‘zida uning ko‘p yerlarida uzluksiz ravishda ta’sir qilgan bo‘lardi. Bu ajoib

chiziqlarning intensivligini hisoblashda ham Bor nazariyasi inqirozga uchradi. Yuqoridagi jiddiy kamchiliklarga asoslanib, Bor nazariyasini yarim klassik, yarim kvant nazariyasi sifatida qabul qilish mumkin. Shunga qaramay Bor nazariyasi fizika fanini rivojlanishida katta ahamiyatga ega bo‘ldi, chunki mikrodunyodagi paydo bo‘lgan atomlarning nurlanishi bilan bog‘liq bo‘lgan bir qator muammolarini yechdi va shu bilan birga atom hodisalarini tushuntirishda klassik fizikaning qonunlarini qo‘llash mumkin emasligini ko‘rsatib berdi.

1.6. Zarrachalarning to‘lqin tabiati. De-Broyl g‘oyasi

Avvalgi paragraflardan ma’lum bo‘ldiki, Plank va Eynshteynlarning urinishlari tufayli yorug‘lik fotonlardan iborat, degan tushuncha paydo bo‘ldi, bu tushuncha absolut qora jismning nurlanish spektrini, fotoffekt va Kompton effektini tushuntirishda yordam berdi.

Plank g‘oyasiga asosan yorug‘lik to‘lqini ν chastotaga va k to‘lqin vektoriga ega bo‘lsa, unda uni tashkil qilgan fotonlarning har biri ushbu ε energiyaga va $\boldsymbol{p}$ impulsga ega bo‘lishi kerak:–

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega \qquad (1.36)$$

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \qquad (1.37)$$

(1.36) va (1.37) formulalardan ko‘rinib turibdiki, foton ikki xil xarakteristikaga egadir, ya’ni $\omega, \boldsymbol{k}$ – to‘lqinni ifodalovchi kattaliklar va $\varepsilon, \boldsymbol{p}$ – korpuskulani ifodalovchi kattaliklar.

Fotonning to‘lqin xarakteristikalari uning interferensiyalanish va difraksiyalanish qobiliyatiga ega bo‘lishini ko‘rsatadi. Korpuskular xarakteristikalari esa fotonga zarracha sifatida qarash mumkinligini bildiradi. Bu ikki xil xarakteristikalar Plank doimiysi $\hbar$ orqali o‘zaro bog‘langan.

1923-yilda Lui de-Broyl kvant nazariyasini rivojlantirish uchun muhim qadam qo‘ydi. U tabiatdagi simmetriyaga asoslanib, agar yorug‘lik, jumladan fotonlar to‘lqin xususiyatdan tashqari korpuskular xususiyatlarni ham namoyon qilar ekan, zarrachalar ham korpuskular xususiyatlar bilan bir qatorda to‘lqin xususiyatlariga ham ega bo‘lishi kerak degan g‘oyani ilgari surdi.

Avvalgi paragrafda vodorod atomi nurlanishi spektrini tushuntirish uchun N. Bor tomonidan kiritilgan postulatlar haqida fikr yuritgan edik.

Oradan o‘n yil o‘tgach de-Broyl g‘oyalari ushbu nazariyani asoslab berdi. Uning fikricha atomdagi har bir elektronga turg‘un to‘lqin mos keladi. Bor nazariyasiga ko‘ra elektronlar doiraviy orbitalar bo‘ylab harakatlangani uchun, de-Broylning fikricha, atomdagi elektronlarga doiraviy o‘z-o‘ziga tutashuvchi doiraviy turg‘un to‘lqinlar mos keladi. Mana shu tasdiqqa asoslangan holda Borning kvantlanish shartlari va ulardan kelib chiqadigan natijalar (avvalgi paragrafga qarang) to‘la asoslanadi.

Shunday qilib, de-Broyl $\boldsymbol{p}$ impulsga ega bo‘lgan elektronni to‘lqin uzunligi λ_e bilan bog‘lash kerakligini ta’kidladi:

$$\lambda_e = \frac{h}{p} \qquad (1.38)$$

Demak, energiyasi E va impulsi $\boldsymbol{p}$ ga teng bo‘lgan erkin harakatlanuvchi elektron de-Broyl yassi to‘lqini bilan quyidagicha bog‘langan:

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = Ce^{i(\omega t - \boldsymbol{kr})} \qquad (1.39)$$

Zarrachalarning to‘lqin hamda korpuskular xarakteristikalari orasidagi bog‘lanishini fotonga xos bo‘lgan ko‘rinishiga ega deb qaraladi, ya’ni

$$E = \hbar\omega \qquad (1.40)$$

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \qquad (1.41)$$

bo‘ladi. Ushbu tenglamalar de-Broylning asosiy tenglamalari deb yuritiladi.

(1.40) va (1.41) tenglamalardan $\omega = \frac{E}{\hbar}$ va $\boldsymbol{k} = \frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}$ larni aniqlab, (1.39) tenglamaga qo‘yilsa,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ce^{\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{pr})} \qquad (1.42)$$

de-Broyl to‘lqini hosil bo‘ladi.

Endi (1.39) to‘lqin va zarracha harakatining mexanik qonunlar bilan bog‘lanishini ko‘rsataylik. Ushbu bog‘lanish yaqqol namoyon bo‘lishi uchun bitta yo‘nalish tanlab olinsin, masalan OX yo‘nalishini, va bu yo‘nalishda to‘lqin harakatlansin. U holda (1.39) o‘rniga quyidagi ifoda hosil bo‘ladi:

qo‘shila olishligi bevosita Maksvell tenglamalarining chiziqliligidan kelib chiqadi. Ma’lumki, tenglamaning chiziqliligi quyidagi ma’noni anglatadi: agar tenglamaning qandaydir yechimlari mavjud bo‘lsa, ularning istalgan chiziqli kombinatsiyasi ham shu tenglamaning yechimi bo‘ladi. Fizikada bu tasdiq superpozitsiya prinsipi sifatida ma’lumdir: tabiatda qandaydir yorug‘lik to‘lqinlari alohida holda mavjud ekan, unda albatta ularning yig‘indisiga mos keluvchi to‘lqin ham mavjud bo‘lishi kerak. Aynan mana shu superpozitsiya prinsipi tufayli ikki tirqishli ekran orqasida hosil bo‘lgan to‘lqinni har bir tirqishdan alohida sochilgan to‘lqinlar yig‘indisidir deb qaray olamiz. Shu narsaga ahamiyat berish kerakki, to‘lqinlar qo‘shilganida ularning intensivliklari oddiygina qo‘shilmaydi. Buni to‘lqinlarga oid bo‘lgan kompleks ifodani qo‘llash orqali aniq ko‘rish mumkin. Masalan, $\psi_1(\mathbf{r},t)$ va $\psi_2(\mathbf{r},t)$ to‘lqinlarning yig‘indisidan iborat bo‘lgan $\psi(\mathbf{r},t)$ to‘lqin berilgan bo‘lsin:

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi_1(\boldsymbol{r},t) + \psi_2(\boldsymbol{r},t).$$

Ushbu to‘lqinni intensivligini topaylik:

$$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 = |\psi_1(\boldsymbol{r},t)|^2 + |\psi_2(\boldsymbol{r},t)|^2 + 2Re\,\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\,\psi_2(\boldsymbol{r},t).$$

Ko‘ryapmizki, to‘lqinlar yig‘indisining intensivligi faqat qo‘shiluvchi ikkala to‘lqinlarning intensivliklaridan iborat bo‘lmay, balki $2Re\psi_1^*\psi_2$ bilan ifodalangan qo‘shimcha hadni ham o‘z ichiga oladi. Bu qo‘shimcha had interferensiyon had deb ataladi, chunki u tufayligina interferension hodisa mavjuddir. Masalan, bir xil intensivlikka ega bo‘lgan ikki to‘lqin qo‘shilganda, ular ikki barobar katta intensivlikka ega bo‘lgan natijaviy to‘lqinni hosil qilmay, balki interferension hadning ishorasiga qarab ular bir-birini yoki so‘ndiradi, yoki kuchaytiradi. Qizig‘i shundaki, ular bir-birini maksimal kuchaytirgan holda natijaviy intensivlik kutilgan ikki marta o‘rniga to‘rt marotaba kuchayar ekan.

Demak, interferensiyon hadning ishorasi boshlang‘ich fazalar farqi bilan bog‘liqdir. Yuqorida keltirilgan eslatmalardan so‘ng biz endi muhim tasdiqni qabul qilishga tayyormiz. Ma’lumki, zarrachalarga interferensiya va difraksiya hodisalari xosdir, shunday ekan ularga mos keluvhi de-Broyl to‘lqinlari ham superpozitsiya prinsipiga bo‘ysunishi shart. Ammo superpozitsiya prinsipi de-Broyl va fizik to‘lqinlar uchun matematik o‘xshashlikka ega bo‘lsada, lekin fizik ma’nosi bilan farq qiladi.

Fizik to‘lqinlar o‘zi tarqalayotgan muhitning holatini (akustik to‘lqinlar, suvdagi to‘lqinlar va hokazo), yoki qandaydir maydon holatini (elektromagnit to‘lqinlar, gravitatsion to‘lqinlar) belgilaydi. Xo‘sh, de-Broyl to‘lqinlari esa nimaning holatini belgilar ekan? Modomiki, de-Broyl to‘lqini ayrim zarrachaga xos ekan, u faqat shu zarrachaning holatini aniqlashga munosibdir. Masalan, de-Broyl yassi to‘lqini

$$A\exp\left[i(\boldsymbol{kr} - \omega t)\right]$$

aniq $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ impuls va $E = \hbar\omega$ energiyaga ega bo‘lgan zarracha holatiga mosdir.

Zarracha uchun superpozitsiya prinsipini qabul qilinishining o‘zi, zarrachalar holati haqidagi klassik tushunchamizni o‘zgartirishga majbur qiladi. Masalan, superpozitsiya prinsipiga asosan, tabiatda har xil energiya va impulsli de-Broyl yassi to‘lqinlarining yig‘indisidan iborat bo‘lgan de-Broyl to‘lqiniga mos keluvchi holat amalga oshishi mumkin:

$$A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{pr} - Et)\right] + B\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p'r} - E't)\right].$$

Ahamiyat beraylik, zarrachaning bu holati endi aniq impuls va aniq energiyaga ega emas. Klassik fizikaga asosan bunday bo‘lishi mutlaqo mumkin emas. Haqiqatan ham, klassik fizikaga binoan zarracha vaqtning har qanday momentida qandaydir aniq impuls va energiyaga ega. Ammo tajribalar bizni superpozitsiya prinsipini tan olishni taqozo qilar ekan, u holda zarrachani klassik fizika uchun yo‘q bo‘lgan bu holatlarini mavjudligini ham qabul qilish lozim. Ushbu g‘ayritabiiy holni ilgariroq, ya’ni de-Broyl to‘lqinlarining ehtimoliy talqinini ko‘rgan vaqtda anglash lozim edi. Yana bir marta de-Broyl yassi to‘lqinini diqqat bilan ko‘rib chiqaylik:

$$\psi(\mathbf{r},t) = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{pr} - Et)\right].$$

Ushbu holatda, zarracha aniq impuls va energiyaga ega bo‘lsa ham, biz uning koordinatalari haqida aniq bir ma’lumotga ega emasmiz. Haqiqatan ham, zarracha bu holatda fazoning istalgan qismida bir xil topilish ehtimoliga egadir, chunki

$$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 = |A|^2 = const$$

Demak, klassik fizika bilan hech qanday umumiylikka ega bo‘lmagan quyidagi tasavvurga egamiz: zarracha shunday holatlarda bo‘lishi mumkinki, uni aniq fizik kattaliklar bilan ifodalash mumkin emas.

$$\overline{x} = \frac{\int x \cdot dN(x)}{N} = \int x \cdot |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, d\boldsymbol{r} \qquad (1.82)$$

Demak, $\mathbf{r}$ ga bog‘liq funksiya bilan ifodalanuvchi har qanday fizik kattalikning o‘rtacha qiymati quyidagicha ifodalanadi:

$$\overline{F(\boldsymbol{r})} = \int F(\boldsymbol{r}) \cdot |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, d\boldsymbol{r} = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\, F(\boldsymbol{r}) \cdot \psi(\boldsymbol{r},t)\, d\boldsymbol{r} \qquad (1.83)$$

Shunga binoan impulsning funksiyasi bo‘la oluvchi har qanday fizik kattalikning o‘rtacha qiymati quyidagi formula orqali hisoblanishi mumkin:

$$\overline{F(\boldsymbol{p})} = \int F(\boldsymbol{p}) \cdot |\varphi(\boldsymbol{p},t)|^2\, d\boldsymbol{p} = \int \varphi^*(\boldsymbol{p},t)\, F(\boldsymbol{p}) \cdot \varphi(\boldsymbol{p},t)\, d\boldsymbol{p}. \qquad (1.84)$$

Ko‘rinib turibdiki, agar fizik kattalik impulsning funksiyasi ekanligini bevosita $\psi(\boldsymbol{r},t)$ funksiya orqali ifodalamoqchi bo‘linsa, bir muncha murakkab ifoda hosil bo‘ladi. Vaholangki, bunday kattaliklarni yozish uchun Fur’e almashtirishlar nazariyasidan kelib chiqqan juda sodda usul mavjud:

$$\overline{F(\boldsymbol{r})} = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\, F\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right) \cdot \psi(\boldsymbol{r},t)\, d\boldsymbol{r}. \qquad (1.85)$$

Formuladagi $F\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)$ belgining ma’nosi quyidagi misollarda ko‘rinadi:

$$\overline{p_x} = \int \varphi^*(\boldsymbol{p},t)\, p_x \varphi(\boldsymbol{p},t)\, d\boldsymbol{p} = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \cdot \psi(\boldsymbol{r},t)\, d\boldsymbol{r} \equiv$$

$$\equiv -i\hbar \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial \psi(\mathbf{r},t)}{\partial x}\, d\boldsymbol{r} \qquad (1.86)$$

$$\overline{p_x^2} = \int \varphi^*(\boldsymbol{p},t)\, p_x^2 \varphi(\boldsymbol{p},t)\, d\boldsymbol{p} = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \cdot \psi(\boldsymbol{r},t)\, d\boldsymbol{r} \equiv$$

$$\equiv (-i\hbar)^2 \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial^2 \psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial x^2}\, d\boldsymbol{r}$$

Demak, $F(\boldsymbol{p})$ funksianing ifodasidagi $\boldsymbol{p}$ lar o‘rniga $\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)$ qo‘yilsa, unda $F\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)$ olinar ekan.

Ammo fizik kattaliklarning tajribada olingan qiymatlari, ularning o‘rtacha qiymatlaridan keskin farq qilishi mumkin. Bu chetlanishlar

maksimumga erishgan koordinata x_0 ni aniqlaylik. Bu nuqtani to‘lqin paketning markazi deb olaylik. To‘lqin paketning markazi yuqorida aytilganlarga binoan quyidagi shartdan topilishi kerak:

$$\alpha(x,t) = \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]\Delta k = 0$$

Demak, $x_0 = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t$ kelib chiqadi. Bundan ko‘rinib turibdiki, paketning markazi x o‘qi bo‘ylab doimiy tezlik bilan harakatlanadi. Bu tezlik gruppaviy tezlik deb ataladi va

$$\upsilon_{gr} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 \qquad (1.51)$$

formula orqali aniqlanadi. (1.46) ga asoslanib υ_{gr} hisoblasak,

$$\upsilon_{gr} = \frac{\hbar k}{m_0}$$

hamda $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, $\mathbf{p} = m_0\boldsymbol{\upsilon}$ ni eslasak, $\boldsymbol{\upsilon}$-zarracha tezligi,

$$\boldsymbol{\upsilon}_{gr} = \boldsymbol{\upsilon} \qquad (1.52)$$

degan ajoyib xulosaga kelinadi, ya’ni de-Broyl to‘lqinining $\boldsymbol{\upsilon}_{gr}$ gruppaviy tezligi zarrachaning $\boldsymbol{\upsilon}$ mexanik tezligiga teng bo‘ladi. Shunday qilib, to‘lqin paketi ajoyib xususiyatlarga ega ekan: u klassik zarracha kabi fazoviy cheklanishga ega bo‘lgan tuzilma bo‘lib, $\boldsymbol{\upsilon}_{gr} = \frac{\mathbf{p}}{m}$ tezlik bilan harakatlanar ekan va shu vaqtning o‘zida $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$ to‘lqin xarakteristikalariga ega bo‘lar ekan.

Ikki hol uchun de-Broyl to‘lqin uzunliklarini hisoblaylik. (1.41) dan ma’lumki, $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}$ kelib chiqadi, $\upsilon << c$ kichik tezliklar bilan cheklanilsa va $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}$ tenglikdan foydalanilsa, quyidagi formula hosil bo‘ladi:

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_0 E}}. \qquad (1.53)$$

Zarrachaning massasi va energiyasi ma’lum bo‘lgan holda zarrachaning to‘lqin uzunligini hisoblash mumkin. Olingan (1.53) formulani elektron uchun qo‘llaymiz. Odatda, elementar zarralar energiyasi elekron-Voltlarda, ya'ni $E=eV$ formula orqali hisoblanadi. Bunda $e-$ elektron zaryadi, V esa voltlarda o'lchangan elektronni tezlashtiruvchi potensiallar farqi. Elektronning massasi $m_0 = 9{,}1\cdot10^{-28} g$ ga teng ekanligi hisobga olinsa, u holda quyidagi formula olinadi.

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eV}} = \sqrt{\frac{150}{V}}\,\overset{0}{A}. \qquad (1.54)$$

Misol uchun $V=1eV$ bo'lganida $\lambda = 12{,}2\,\overset{0}{A}$ qiymatiga teng bo'ladi, $V=10000eV$ bo'lganida esa $\lambda = 0{,}122\,\overset{0}{A}$ bo'ladi. $E = 6\cdot10^{-14}eV$ energiyaga ega bo'lgan vodorod molekulasining to'lqin uzunligini hisoblab chiqaylik. Molekula massasi $m = 2\cdot1{,}66\cdot10^{-24} g$ ga teng. Bu kattaliklar (1.53) formulaga qo'yilsa, de-Broyl to'lqin uzunligi $\lambda = 1\overset{0}{A}$ ekanligi aniqlanadi. Yuqoridagi olingan natijalardan ko'rinib turibdiki, de-Broylni to'lqin uzunligi juda kichik qiymatlarga ega bo'ladi. Zarrachaning energiyasi va massasi qancha katta bo'lsa, uning to'lqin uzunligi shuncha kichik bo'ladi. Zarrachaning to'lqin xususiyatlarini kuzatish uchun de-Broylni to'lqin uzunligi tartibida bo'ladigan atom masshtabidagi obyektlarni olish kerak.

De-Broyl g'oyasi juda tez vaqt ichida tajriba orqali tasdiqlandi. Zarrachalar uchun yorug'lik yoki rentgen nurlari kabi interferensiya va difraksiya hodisalarini kuzatish lozim bo'ldi. 1927-yilda Devisson va Jermer tomonidan birinchi bo'lib kristallarda elektronlarning difraksiyasini kuzatish tajribasi taklif etildi. Ular bu tajribalarda elektronlarning sochilishini o'rgandilar. Tajribadagi elektronlar katta energiyaga ega bo'lmaganligi uchun, ular kristall ichiga chuqur kira olmay, asosan uning sirt yuzasidan sochilardi. Kristall yuzasi tabiiy difraksion panjaradan iborat bo'lganligi sababli elektronlarning bu sochilishi de-Broyl to'lqini difraksiyasining natijasidir, deb qaraldi. Shunday ekan, o'tkazilgan tajriba natijalari optikadagi yorug'lik difraksiyasi natijalari bilan bir xil bo'ladi deb kutilgan edi.

Optikadan ma'lumki, difraksiyaning maksimal intensivlikka ega bo'lgan burchaklari (θ) quyidagi shartni qanoatlantirishi lozim:

$$d\sin\theta = n\lambda \qquad (1.55)$$

Devisson–Jermer tajribasida $d-$ kristall panjara doimiysi, $\lambda-$ elektronning de-Broyl to'lqin uzunligi bo'lib, (1.54) formula orqali topiladi.

$$w(V,t) = \int_V dw = \int_V P(\boldsymbol{r},t)\,dV. \qquad (1.61)$$

Agar cheksiz hajm bo'ylab integrallansa, zarrachani biror yerda joylashganlik ehtimoliga ega bo'lamiz. Zarracha, albatta, fazoning biror yerida mavjuddir va shuning uchun ham bu muqarrar hodisadir. Matematikada (ehtimollar nazariyasida) muqarrar hodisaning ehtimolligini birga teng deb hisoblash kelishilgan. Demak, bu kelishuvga binoan

$$\int |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, dV = 1. \qquad (1.62)$$

Ushbu shart normallash sharti deb ataladi va bu shartni qanoatlantiruvchi ψ funksiya esa normallashgan funksiya hisoblanadi. Odatda, fizik jihatdan real bo'lgan sharoitlarda zarrachaning harakati doimo cheklangan sohada sodir bo'ladi, shuning uchun (1.62) integral yaqinlashuvchidir, bu vaziyatda esa normallash shartini doimo amalga oshirish mumkin. Ammo juda ko'p hollarda ideallashtirilgan funksiyalardan foydalanish qulayroqdir, lekin ular uchun (1.61) dagi integral uzoqlashadi va natijada normallash sharti bajarilmaydi. Misol qilib de-Broyl yassi to'lqinni olish mumkin:

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{pr} - Et)\right].$$

Bu holda integralning uzoqlashishi aniqdir:

$$\int |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, dV = |A|^2 \int dV = \infty.$$

Shuni aytish kerakki, de-Broyling yassi to'lqini ideal aniq impulsga ega bo'lgan zarrachaga xos. Haqiqatda esa zarracha impulsi kichkina bo'lsa ham noaniqlikka ega. Lekin shunga qaramay, de-Broyl to'lqini fazoda cheklanadi, ya'ni to'lqin paketiga aylanadi va integral yaqinlashadi.

1.9. Superpozitsiya prinsipi

Endi kvant nazariyasini tuzishda muhim ahamiyatga ega bo'lgan bir masalani hal qilishga o'taylik. Optika kursidan ma'lumki, difraksiya va interferensiya hodisalari to'lqinlarning qo'shilishi, ya'ni ularning superpozitsiyasi bilan bog'liqdir. Matematik jihatdan to'lqinlarning

Shunday qilib, de-Broyl to'lqinlari superpozitsiyasi zarracha holatlari superpozitsiyasidir. Turli de-Broyl to'lqinlarini qo'shish orqali zarrachaning o'zga holatlariga mos keluvchi de-Broyl to'lqinlarini olish mumkin. Shuni aytish kerakki, zarrachaning holati umumiy hollarda bir muncha murakkab ifodalar bilularning
matematik ifodasi ma'lum bo'lgan to'lqin deb nomlanuvchi ifodaga mos bo'lmaydi. Ammo, shunga qaramay ularni "to'lqin funksiyalari" deb nomlash qabul qilingan. Keyinchalik "de-Broyl to'lqini" iborasi o'rniga "to'lqin funksiya " degan atama qo'llaniladi, "de-Broyl to'lqini" atamani esa ba'zan faqatgina yassi to'lqinni belgilash uchun qo'llaniladi.

Yuqorida aytilganlar hisobga olinsa, kvant nazariyasidagi superpozitsiya prinsipini quyidagicha ifodalash mumkin: agar zarracha ψ_1 to'lqin funksiyasiga mos holatda yoki o'zga ψ_2 to'lqin funksiyasiga mos holatda bo'la olsa, unda u

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = c_1\psi_1(\boldsymbol{r},t) + c_2\psi_2(\boldsymbol{r},t)$$

bilan ifodalangan har qanday holatda ham bo'la oladi (bunda c_1 va c_2 ixtiyoriy kompleks sonlar). Demak, ko'rinib turibdiki, agar zarracha $\psi_1, \psi_2, ..., \psi_n$ to'lqin funksiyalariga mos bir qancha holatlarga ega bo'lsa, unda superpozitsiya prinsipiga binoan zarrachaga murakkab holatlar ham xosdir:

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 + C_3\psi_3 + ... + C_n\psi_n.$$

Agar yig'indiga (superpozitsiyaga) kiruvchi holatlar bir-biridan cheksiz kichiklik bilan farq qilsa, unda biz yig'indi o'rniga integralga ega bo'linadi. Masalan:

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \int f(\boldsymbol{p})\exp[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{pr} - Et)]d\boldsymbol{p}$$

(bunda va bundan keyin ham quyidagicha qisqacha belgilashdan foydalaniladi: $d\boldsymbol{p} = dp_x dp_y dp_z$.)

1.10. Impulsning topilish ehtimolligi

Oldingi paragraflarda to'lqin paketi harakati bilan tanishgan edik. Uni quyidagicha ifodalash mumkin:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \int f(\mathbf{p})\exp[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr} - Et)]d\mathbf{p}. \qquad (1.63)$$

bilan birga $\Pi(\boldsymbol{p}) = |\varphi(\boldsymbol{p},t)|^2$ impulslar bo'yicha ehtimollik taqsimotini ham aniqlashga imkon beradi ((1.73) ifodaga asosan).

Shuni ta'kidlash lozimki, kvant nazariyasi klassik mexanikadan farqli ravishda, bo'lajak voqealarni aniq aytib bera olmay, balki ularning amalga oshishi ehtimolligini ko'rsatadi. Bu esa kvant nazariyasidagi oldindan aytilgan narsalarni aniqligini tekshirish uchun juda ko'p marta tajribalar o'tkazish lozimligini bildiradi. Ammo bitta zarracha bilan qayta-qayta tajriba o'tkazish real bo'lmagan masaladir, chunki mikroobyekt ustida o'tkazilgan har bir o'lchov uning holatini o'zgartiradi. Shunga ko'ra, ko'p marta bir xil tajribalar o'tkazish uchun bir xil holatdagi bir-biriga bog'liq bo'lmagan va bir xil to'lqin funksiyasi bilan tavsiflanagan ko'p miqdordagi aynan o'xshash zarrachalar bo'lishi kerak. Zarrachalarning bunday to'plamini ***zarrachalar ansambli*** deyiladi. Ansambl yordamida ehtimollik haqidagi tushunchaga real ma'no berish mumkin. Masalan, $\boldsymbol{r}$ nuqta atrofida zarrachani topilish ehtimolligi $|\psi(r,t)|^2$ ga teng, N zarrachali ansambldagi ehtimollik esa,

$$dN(\boldsymbol{r},t) = N\cdot|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, d\boldsymbol{r} \qquad (1.79)$$

ga teng bo'lib, zarrachalar soni $\boldsymbol{r}$ nuqta atrofida $d\boldsymbol{r} = dx\,dy\,dz$ hajm ichida topilishini anglatadi. Agar zarrachalarning impulsi o'lchanayotgan bo'lsa, unda impuls fazoning $\boldsymbol{p}$ nuqtasi atrofidagi $d\boldsymbol{p}$ element hajm ichida topiladigan zarrachalar soni

$$dN(\boldsymbol{p},t) = N\cdot|\varphi(\boldsymbol{p},t)|^2\, d\boldsymbol{p} \qquad (1.80)$$

ga teng bo'ladi. Shuni aytish kerakki, ushbu formulalardagi N qancha katta bo'lsa, formulalarning ma'nosi shuncha to'liq aniqlikka ega bo'ladi.

Ansambl yordamida $\psi(r,t)$ holatdagi biron-bir fizik kattalikning o'rtacha qiymatiga ham real ma'no berish mumkin. Masalan,

$$\int x\cdot|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, d\boldsymbol{r} \qquad (1.81)$$

ifodani ko'rib chiqaylik. Bu ifodaning kattaligi ansamblning hamma zarrachalar bo'yicha o'rtachalashtirilgan "$\bar{x}$" koordinatasiga teng ekanligini tushunish qiyin emas. Haqiqatan ham (1.81) formulada binoan

Barcha λ va d lar ma'lum ekan, u holda yuqoridagi (1.55) formula asosida maksimal difraksiya burchaklarini nazariy jihatdan oldindan aytib berish mumkin:

$$\theta = arc\sin\frac{\hbar\lambda}{d}. \tag{1.56}$$

Agar (1.54) va (1.55) formulalarga birgalikda amal qilinsa, quyidagi munosabatni olish mumkin

$$\sqrt{V}\sin\theta = const. \tag{1.57}$$

Bu formuladan ko'rinib turibdiki, tezlatuvchi potensialni o'zgartirilsa maksimal difraksiya burchaklari ham o'zgarar ekan. Devisson–Jermer tajribalarida o'tkazilgan o'lchash natijalari nazariy olingan (1.56) va (1.57) formulalarga to'liq mos keladi va o'z navbatida de-Broyl g'oyalarini haqqoniy ekanligini tasdiqlaydi.

Shunday qilib, fotonga xos bo'lgan to'lqin-korpuskular dualizm har qanday mikroobyektlarga ham xos ekanligiga ishonch hosil qildik.

1.7. De-Broyl to'lqinlarining fizik ma'nosi

Endi de-Broyl to'lqinining fizik ma'nosini aniqlashga o'tamiz. Avvalo to'lqin va zarracha o'rtasidagi asosiy farqni eslatib o'taylik. Ma'lumki, to'lqin qandaydir davomiylikka ega va u o'zini bir vaqtda fazoning turli yerlarida namoyon qila oladi. Zarracha esa aniq bir vaqt momentida faqatgina bir yerda oshkor bo'la oladi. Aynan shuning uchun Plank, Eynshteyn va de-Broyl g'oyalari tajriba natijalarini tushuntirgan bo'lsa ham, avvaliga bu g'oyalarda qandaydir ichki qarama-qarshilik mavjuddek tuyuladi. Misol tariqasida ko'rilgan 1.4-paragrafdagi yorug'likning ikki tirqishdagi difraksiyasini batafsil tahlil qilaylik. Ma'lumki, ikki tirqishli ekrandan o'tgan yorug'lik uning orqasiga qo'yilgan fotoplastinkada interferension manzarani hosil qiladi: fotoplastinkada maksimum va minimumlarning almashinuvi kuzatiladi. Bu tajribada yorug'likning to'lqin tabiati haqida ikki dalilga egamiz:

1. Fotoplastinkaning turli yerlari bir vaqtda uzluksiz ravishda qorayishi.
2. Yorug'likning to'lqin deb qarovchi nazariya asosida kelib chiqqan formulalarga interferension manzaraning aynan mos kelishi.

manzara shaklida ko'rina boshlaydi. Ko'ryapmizki, de-Broyl to'lqinining ehtimoliy talqini (ehtimollik interpretatsiyasi) bir yo'la to'lqin- korpuskular dualizm asosini tashkil qiluvchi barcha qarama-qarshiliklarni hal qilib berar ekan.

Albatta, de-Broyl to'lqinining ehtimoliy interpretatsiyasi faqat foton uchungina tegishli bo'lmay, balki har qanday zarracha uchun ham o'rinlidir. De-Broyl g'oyalarining universalligidan kelib chiquvchi bu muhim holni alohida uqtirib o'tish lozim. Quyida de-Broyl to'lqinining fizik to'lqinlardan farqini ta'kidlovchi bir xususiyatini ko'rib chiqaylik.

Hamma fizik to'lqinlarning intensivligi ularning fizik holatini aniqlaydi, chunki intensivlik tebranish energiyasi bilan bog'liqdir. De-Broyl to'lqinlari intensivligi esa zarrachalarning joylashish ehtimolini belgilaydi. Shuning uchun intensivlik kattaligining o'zi emas, balki fazoning turli qismlaridagi intensivlik nisbatlari muhimdir. Bu nisbatlar zarrachani fazoning biron yeriga qaraganda boshqa bir yerida necha marotaba ko'p namoyon bo'la olish ehtimolligini ko'rsatadi.

1.8. Koordinatani aniqlash ehtimolligi

Shu narsaga ahamiyat berish lozimki, zarrachaning $r(x,y,z)$ nuqta atrofida topilish ehtimolligi biz tanlagan sohaning kattaligi bilan bog'liqdir. Cheksiz kichik sohani ko'ra boshlaganimizda, ya'ni $x, x+dx; y, y+dy; z, z+dz$ biz ψ ni shu soha ichida doimiy deb hisoblasak bo'ladi va u holda zarrachaning topilish ehtimolligini faqat shu sohaning kattaligiga proporsional deb hisoblash mumkin. Unda (1.58) ni quyidagicha yozgan afzalroqdir:

$$dw(\boldsymbol{r},t) = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, dx\cdot dy\cdot dz = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\, dV. \tag{1.59}$$

unda dw (cheksiz kichik miqdor) zarrachaning t vaqt momentida nuqta atrofidagi dV elementar hajmda joylashish ehtimolligini bildiradi. Quyidagi kattalik esa

$$P(\boldsymbol{r},t) = \frac{dw}{dV} = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \tag{1.60}$$

ehtimollik zichligi ma'nosiga ega bo'ladi. Ehtimolliklarni qo'shish qonuniga asosan, zarrachaning chekli V hajmda topilish ehtimoli chekli kattalikka ega bo'ladi va quyidagi integralga teng bo'lishi lozim:

(1.63) formuladagi de-Broyl to'lqinlarining $f(\boldsymbol{p})$- qator koeffitsiyentlariga fizik ma'no berib bo'ladimi, degan ta'biiy savol tug'iladi. Unga javob berish uchun to'lqin paketining x o'qi bo'ylab tarqaluvchi bir o'lchovli holatini ko'rib chiqaylik:

$$\psi(x,t) = \int f(\boldsymbol{p})\exp[\frac{i}{\hbar}(px - Et)]d\boldsymbol{p}. \tag{1.64}$$

Faraz qilaylik, to'lqin paketi difraksion panjaraga normal to'shayotgan bo'lsin, u keyinchalik qanday o'zgaradi? Ma'lumki, aniq $\mathbf{p}$ impulsga ega bo'lgan de-Broyl to'lqini aniq $k = \frac{p}{\hbar}$ to'lqin soniga va $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ to'lqin uzunligiga ega. Suning uchun paket tarkibiga kiruvchi har bir de-Broyl to'lqini bir-biriga bog'lanmagan holda difraksion panjaradan, maksimumlar shartiga ko'ra, faqat aniq θ burchaklarga sochiladi:

$$\sin\theta = \frac{n\lambda}{d} = \frac{2\pi\hbar\cdot n}{p\,d} \tag{1.65}$$

bunda d – panjara chiziqlari orasidagi masofa, n – maksimumlar soni. Bu yonalishlarda sochilgan to'lqin intensivliklariga mos keluvchi de-Broyl to'lqini esa $|f(p)|^2$ amplitudasi modulining kvadratiga proporsional bo'ladi. Natijada to'lqin paketi panjaradan o'tgach, yelpig'ich kabi yoyiladi va uning intensivligining burchak taqsimoti quyidagicha bo'ladi:

$$\mathrm{I}(\theta) \approx |f(p)|^2 = \left| f\left(\frac{2\pi\hbar\cdot n}{Sin\theta\cdot d}\right)\right|^2. \tag{1.66}$$

Bu yerda (1.65) formuladan kelib chiquvchi impuls va maksimal difraksiya burchagi orasidagi bog'lanishdan foydalanildi:

$$p = \frac{2\pi\hbar\cdot n}{sin\theta\cdot d} \tag{1.67}$$

(1.66) formulaga aniqlik kiritish maqsadida, turli tartibdagi maksimumlar o'zaro bir-birini qoplamaydi, ya'ni tushayotgan to'lqin paketida impuls tarqoqligi yetarli darajada kichik boladi, deb taxmin qilaylik. Masalan, juda kichik burchaklar uchun $n=1$ bo'ladi. Statistik talqinga binoan $I(\theta)$- boshlang'ich holatdagi to'lqin paketi yordamida ifodalangan zarrachaning θ burchakka sochilish ehtimolligidir.

butun $\boldsymbol{p}$ fazo bo'ylab olingan integral $\int_{-\infty}^{\infty}\Pi(\boldsymbol{p})\,d\boldsymbol{p}$ ga teng bo'lib, zarrachaning biron bir impulsga ega bo'lish ehtimolidir va shuning uchun ham bu ishonarli voqeadir. Ishonarli voqeaning ehtimolligini odatda birga teng deb olinadi, ya'ni

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Pi(\boldsymbol{p})\,d\boldsymbol{p} = \int_{-\infty}^{\infty}|\varphi(\boldsymbol{p},t)|^2\,d\boldsymbol{p} = 1. \tag{1.77}$$

Bu shartga bo'ysinuvchi $\varphi(\mathbf{p},t)$ funksiya normallashgan deb ataladi. Garchi (1.71) formulaga asosan

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\,d\boldsymbol{r} = \int_{-\infty}^{\infty}|\varphi(\boldsymbol{p},t)|^2\,d\boldsymbol{p} \tag{1.78}$$

ekan, undan ko'rinib turibdiki, agar $\boldsymbol{p}$ impulslar fazosida normallash sharti bajarilsa, u holda avtomatik tarzda $\boldsymbol{r}$ koordinata fazosida ham normallash sharti bajarilgan bo'ladi.

Shunday qilib, agar $\psi(\mathbf{r},t)$ to'lqin funksiya ma'lum bo'lsa, unda (1.73) - Fur'e formulasi yordamida $\varphi(\boldsymbol{p},t)$ ni ham aniqlash mumkin va shu bilan impuls ehtimolligi taqsimotini ham topa olamiz. Demak, birgina $\psi(\boldsymbol{r},t)$ funksiya haqidagi ma'lumot ham koordinata bo'yicha ehtimollik taqsimotini, ham impuls ehtimollik taqsimotini aniqlashga imkoniyat yaratar ekan.

1.11. Fizik kattaliklarning o'rtacha qiymatlarini va o'rtacha kvadratik qiymatlarini hisoblash

O'tgan paragriflarda mikroobyektlar ishtirokida bo'ladigan jarayonlarni ta'riflash uchun kvant nazariyasini qo'llash talab etilishini ko'rib chiqdik. Kvant nazariyasi haqida quyidagi tushunchalarga egamiz:

I. Zarrachaning holati $\psi(\mathbf{r},t)$ to'lqin funksiya o'rqali aniqlanadi.

II. Kvant mexanikasida superpozitsiya prinsipi mavjuddir, bu esa tabiatda fizik kattaliklarni aniq qiymatlarga ega bo'lmagan holatlarning borligini taqozo etadi. Bu holatlar uchun fizik kattalikning faqat biron qiymatini topilish ehtimoli to'g'risida gapirish mumkin.

III. $\psi(\boldsymbol{r},t)$ to'lqin funksiyasini bilishimiz, u bilan ta'riflanadigan holatdagi $P(\boldsymbol{r},t) = \frac{dW}{dV} = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ koordinata bo'yicha ehtimollik taqsimoti

Endi tushayotgan yorug'lik intensivligi juda kichik miqdorga kamaytirildi deb faraz qilaylik. Mazkur holda, 1.4-paragrafda aytilganidek, fotoplastinkaning qorayishi tartibsiz joylashgan nuqtalar ko'rinishida bo'lishi kerak va fotoplastinkaning o'zi mohir bo'lmagan mergan tomonidan otilgan nishonni eslatishi kerak.

Bu tajribaviy misol yorug'likning fotonlardan iboratligini va ular fotoplastinka bilan to'qnashganda o'zlarini zarracha kabi tutishini isbotlash maqsadida keltirilgan edi. Demak, yuqorida aytilgan yorug'likning to'lqin tabiatini isbotlovchi birinchi dalilni tushirib qoldirilsa ham bo'ladi, chunki fotoplastinkaning uzluksiz xarakterga ega bo'lgan qorayishini faqatgina odatdagi yorug'likda fotonlarning ko'p bo'lishi bilan tushuntirish mumkin.

Hayoliy tajribani davom ettiraylik: katta vaqt oralig'ida tirqishlardan ketma-ket fotonlarni yuboraylik, ya'ni intensivlikni avvalgicha kichik deb hisoblab, ekspozitsiya vaqti oshiriladi. Qanday natijaga erishiladi? Qizig'i shundaki, fotoplastinkadagi qora nuqtalarning soni ko'paygani sari, ular o'zaro tutashib, aniq interferetsion manzarani hosil qilar ekan. Demak, fotonlar fotoplastinka bilan o'zaro ta'sir qilganda o'zini zarracha kabi namoyon etishiga qaramay, ularning tabiatini baribir qandaydir sirli to'lqin boshqarib turishini tan olmay ilojimiz yo'q. Modomiki, yuborilayotgan fotonlar oralig'idagi vaqt juda katta ekan, demak, ular mustaqil fotonlardir va shuning uchun oldinroq ta'kidlaganimizdek, bu to'lqin ayrim fotonnig xususiyatidir deb ham tan olish lozim. Lekin g'alati bir hol bor: bu to'lqin ayrim foton xarakteristikasi bo'lishiga qaramay, u o'zini faqat ko'p miqdordagi mustaqil fotonlar mavjud sharoitdagina aniq namoyon qiladi (Biz bilamizki, bitta foton fotoplastinkada faqat bitta dog' qoldiradi va shunday ekan uning bir o'zi interferension manzarani hosil qila olmaydi). De-Broyl to'lqini deb atalgan to'lqin mana shunday zid xarakterga egadir. Bu muammoni Maks Born hal qilib berdi. Uning fikrlarini to'la tasavvur etish uchun yana bir boshqa hayoliy tajribani ko'z oldimizga keltiraylik.

Faraz qilaylik, butun dunyo bo'ylab juda ko'p laboratoriyalarda bir vaqtning o'zida yuqorida aytilgan tajriba o'tkazilsin. Lekin, tushayotgan yorug'lik intensivligi va ekspozitsiya vaqti shunday tanlansinki, natijada fotoplastinkada faqatgina bitta qoraygan nuqta hosil bo'lsin. Bizga ravshanki, turli laboratoriyalarda bu qoraygan nuqtalar fotoplastin-

kaning har xil joyida bo'ladi. Keling endi olingan natijalarni (bu nuqtalarning koordinatlarini) yig'aylik va ularni fotoplastinka kattaligidagi qog'oz yuzasiga tushiraylik. Nima kuzatiladi? Maks Born bu savolga quyidagicha javob bergan: qog'ozdagi hosil bo'ladigan ko'rinish odatdagi optik tajribalardan olinadigan ikki tirqishdagi interferension manzaraga aynan mos keladi.

Maks Bornning yuqoridagi kabi fikr yuritishlari uni de-Broyl to'lqinlariga statistik izoh berishga undadi. Uning taxminiga ko'ra de-Broyl to'lqinlarining intensivligi fotonning berilgan vaqt momentida berilgan yerda topilish ehtimolligiga proporsionaldir:

$$\mathrm{w}(\boldsymbol{r},t)=\left|\psi(\boldsymbol{r},t)\right|^2=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\cdot\psi(\boldsymbol{r},t). \qquad (1.58)$$

Boshqacha aytganda, ayrim fotonga xos bo'lgan de-Broyl to'lqini ehtimollik to'lqinidir va yorug'lik to'lqinidagi elektr hamda magnit maydonlarning kuchlanishlari bilan to'g'ridan-to'g'ri aloqador emas.

Demak, de-Broyl to'lqini informatsion xarakterga ega va shuning uchun ham u fizik to'lqin bo'la olmaydi. Mana endi bizga ravshanlashdiki, nima uchun ayrim fotonga de-Broyl to'lqini mos kelsa ham, u fotoplastinkaga fizik to'lqinlar kabi fazoviy davomiylikda ta'sir eta olmas ekan. De-Broyl to'lqini o'zida ehtimollik informatsiyasini tashir ekan. U o'zini aniq namoyon qilishi uchun ko'p mustaqil fotonlarni talab qilishining sababi ham endi tushunarlidir. Ma'lumki, ehtimollik qonunlari o'zlarini aniq namoyon qilishi uchun tajribalarning bir necha bor mustaqil holda takrorlanishini taqozo qiladi: tajribalar qancha ko'p takrorlansa ehtimollik qonunlarining bajarilishi shuncha aniq bo'ladi. Misol tariqasida "chikka va pukka" deb ataluvchi o'yinni olaylik (tangani havoga otib o'ynash): biz bilamizki, tangani havoda otgan vaqtimizda uning raqamli va raqamsiz (gerbli) tomonlarining tushish ehtimoli bir xil, albatta bu qonuniyat tanga juda ko'p marta otilgandagina o'zini namoyon qiladi. Yuqoridagi ko'rgan tajribamizda esa tirqishlardan o'tgan fotonni fotoplastinkaning biron nuqtasiga tushish ehtimoli shu nuqtadagi de-Broyl to'lqini intensivligi bilan aniqlanadi va shuning uchun uning fotoplastinkadagi taqsimlanishi interferentsiya qonuniga bo'ysunadi. Biz tirqishlar orqali katta vaqt oralig'ida ketma-ket fotonlarni yuborgan chog'da, go'yoki yakka foton ustidagi tajribani ko'p marta mustaqil ravishda takrorlagan bo'lamiz, natijada de-Broyl to'lqini tutgan ehtimoliy informatsiya interferension

Modomiki, $\boldsymbol{p}$ impulsli zarracha aniq θ burchakka og'ar ekan, unda to'lqin paketi holida (ya'ni tushayotgan zarracha impulsi noaniq bo'lgan holda) uning θ burchakka cheklanish ehtimoli $-I(\theta)$, tushayotgan to'lqin paketida shu burchakka mos keluvchi $\boldsymbol{p}$ impulsli zarrachaning holatini topish ehtimoliga proporsional, deb hisoblash tabiiydir. Vaholangki, (1.66) formulaga binoan $I(\theta)\approx|f(p)|^2$ bo'lar ekan, u holda $|f(p)|^2$ to'lqin paketida zarrachaning $\boldsymbol{p}$ impulsli holatini topish ma'noga ega, degan fikr tug'iladi. Bu izohni uch o'lchovli hol uchun umumlashtirilsa ham bo'ladi. $\psi(\mathbf{r},t)$ ni de-Broyl to'lqinlari bo'yicha qatorga yoyish koeffitsiyentlari modulining kvadrati $|f(p)|^2$ bizga $\psi(\boldsymbol{r},t)$ holatdagi zarrachaning aniq $\boldsymbol{p}$ impulsli holatda topilish ehtimolligi ma'nosini beradi.

Endi Fur'e yoyilmasi nimaligini bir eslaylik. Ma'lumki, ihtiyoriy silliq funksiyani Fur'e integrali ko'rinishida ifodalash mumkin:

$$\mathrm{F}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\Phi(\boldsymbol{k})\,e^{i\mathbf{kr}}\,d\boldsymbol{k}. \qquad (1.68)$$

Ushbu formulani Fur'e almashtirishi yoki Fur'e qatori deb ataladi. Birinchi nom (1.68) formulada $F(\mathbf{r})$ funksiyani boshqa $\Phi(\mathbf{k})$ funksiya orqali ifodalanganini bildiradi, imulada $F(\boldsymbol{r})$ funksiyani $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{kr}}$ funksiyalar bo'yicha qatori, degan ma'noni anglatadi. Bu izohga binoan, $\Phi(\boldsymbol{k})$ qator koeffitsiyentlari ma'nosiga egadir va ular ko'pincha Fur'e komponentalari deb ataladi. Fur'e teoremasiga asosan (1.68) formulani quyidagicha yozish mumkin:

$$\Phi(\boldsymbol{k})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int F(\boldsymbol{r})\,e^{-i\mathbf{kr}}\,d\boldsymbol{r}. \qquad (1.69)$$

Ushbu formula Fur'e teskari almashtirish formulasi deyiladi.

Agar ikkita $F_1(\boldsymbol{r})$ va $F_2(\boldsymbol{r})$ funksiyalar berilgan bo'lsa, ularning Fur'e komponetlari $\Phi_1(\boldsymbol{k})$ va $\Phi_2(\boldsymbol{\kappa})$ bo'lsa, u holda quyidagi tenglik o'rinli bo'ladi:

$$\int F_2^*(\boldsymbol{r})F_1(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=\int\Phi_2^*(\boldsymbol{k})\Phi_1(\boldsymbol{k})d\boldsymbol{k}. \qquad (1.70)$$

Xususan, $F_1(\mathbf{r})=F_2(\mathbf{r})$ bo'lganda (1.70) formuladan quyidagi tenglik kelib chiqadi.

$$\int\left|\mathrm{F}(\boldsymbol{r})\right|^2 d\boldsymbol{r}=\int\left|\Phi(\boldsymbol{k})\right|^2 d\boldsymbol{k}. \qquad (1.71)$$

Fur'e teoremasining mavjudligi shunday fikrni targ'ib qiladi: vaqtning istalgan momentida zarrachaning har qanday holati aniq impulsli holatlar superpozisiyasi ko'rinishida tasavvur etilishi mumkin. Haqiqatda, (1.68) va (1.69) formulalarga asosan $\psi(\mathbf{r},t)$ to'lqin funksiyasini hamma vaqt quyidagicha yozish mumkin:

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\varphi(\boldsymbol{p},t)e^{i\frac{\boldsymbol{pr}}{\hbar}}d\boldsymbol{p}, \qquad (1.72)$$

$$\varphi(\boldsymbol{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\psi(\boldsymbol{r},t)e^{-i\frac{\boldsymbol{pr}}{\hbar}}d\boldsymbol{r}. \qquad (1.73)$$

Bu formulalarda t parametr rolini o'ynaydi. (1.72) formulada integrallash (1.68) formuladagidan farq qilib, zarrachaning impulsi bo'yicha amalga oshiriladi $(d\boldsymbol{p}=\hbar^3 d\boldsymbol{k})$. Formulalarga $\frac{1}{\hbar^{3/2}}$ karsning kiritilishi esa ularni simmetrik ko'rinishga keltirish bilan bog'liqdir.

Demak, to'lqin paketi uchun ishlatgan (1.63) formula aynan Fur'e qatorining o'zginasi ekan, chunki uni quyidagicha yozish mumkin:

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\int f(\boldsymbol{p})\exp[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{pr}-Et)]d\boldsymbol{p} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\varphi(\boldsymbol{p},t)\exp[\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}]\,d\boldsymbol{p} \qquad (1.74)$$

bunda

$$\varphi(\boldsymbol{p},t)=(2\pi\hbar)^{3/2}e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\cdot f(\boldsymbol{p}). \qquad (1.75)$$

(1.75) dan quyidagi ifodani hosil bo'ladi:

$$\left|\varphi(\boldsymbol{p},t)\right|^2=(2\pi\hbar)^3\left|f(\boldsymbol{p})\right|^2 \qquad (1.76)$$

u holda $|\varphi(\mathbf{p},t)|^2$ ham zarrachaning $\mathbf{p}$ impulsli holatda topilish ehtimolligini anglatadi. Umumiy (1.76) formulaga asoslanib, $|\varphi(\mathbf{p},t)|^2$ faqat to'lqin paketi uchun emas, balki zarrachaning har qanday holati uchun ham topilish ehtimolligi ma'nosini beradi, deyish mumkin. Aniqroq aytganda,

$$\Pi(\boldsymbol{p})=\left|\varphi(\boldsymbol{p},t)\right|^2$$

ifoda ehtimollik zichligi ma'nosiga ega va zarrachaning impulsining $\boldsymbol{p}$ qiymat atrofida topish ehtimolligi $\Pi(\boldsymbol{p})\,d\boldsymbol{p}$ degan manoni anglatadi, bu yerda $d\boldsymbol{p}=dp_x dp_y dp_z$ $\boldsymbol{p}$ impulslar fazosidagi hajm elementi. Ravshanki, *Elektron energiyasining kamayishi ushbu*

$$\frac{dE}{dt}=-\frac{e^2\omega^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}=-\frac{128\pi\varepsilon_0}{3m_0^2e^2c^3}E^4$$

formula bilan aniqlanadi. Undan

$$\frac{1}{E^3}=\frac{1}{E_0^3}+\frac{128\pi\varepsilon_0}{3m_0^2e^2c^3}t\,,\qquad E_0=-\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0}\,,\qquad r_0=0,53\cdot10^{-10}\,m\,.$$

$\vartheta_1=0,1c=3\cdot10^7\,\frac{m}{s}$ *tezlikka ega bo'lgan elektronning yadrogacha bo'lgan masofasi r_0 dan r_1 gacha kamayishi uchun ketgan τ vaqti*

$$\tau=\frac{4\pi^2\varepsilon_0^2c^3m_0^2}{e^4}\left(r_0^3-r_1^3\right)\approx1,4\cdot10^{-11}s$$

ga teng bo'ladi.

***13. Masala**. Relyativistik elektron foton bilan to'qnashish natijasida foton 60° burchak ostida sochildi, elektron esa to'xtab qoldi. Quyidagilar aniqlansin:*

a) sochilgan foton to'lqin uzunligining kompton siljishi;

b) agarda harakatlanuvchi fotonning energiyasi elektronning tinch holatdagi energiyasiga teng bo'lsa, to'qnashuvdan oldin elektronning kinetik energiyasi.

Javobi: a) $\lambda-\lambda'=\frac{4\pi\hbar}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2}=0,012\mathring{A}.$

b) 0,17 Mev.

***14. Masala**. Massasi m_1 ga va kinetik energiyasi E_k ga teng bo'lgan norelyativistik zarracha tinch holatda bo'lgan m_2 massali zarracha bilan pesh to'qnashadi. Bu zarrachalarning massalar markazi bilan bog'langan sanoq sistemasida to'qnashishdan keyingi zarrachalarning de-Broyl to'lqin uzunliklari aniqlansin.*

Javobi: $\lambda_1=\lambda_2=\left(1+\frac{m_1}{m_2}\right)\cdot\frac{h}{\sqrt{2m_1E_k}}\,.$

***15.** ψ to'lqin funksiyasini tordagi mexanik to'lqin va elektromagnit to'lqinlar bilan solishtiring hamda ularning bir-biriga o'xshash va bir-biridan farqli jihatlarini ko'rsatib bering.*

***16.** To'lqin funksiyasining matematik ta'rifini ifodalab bering va uning asosiy xossalarini ko'rsating. To'lqin funksiyasining fizikaviy ma'nosini ochib beruvchi holatlarni tavsiflab bering.*

***17.** Holatlarning superpozitsiya prinsipini ifodalab bering. Superpozitsiya prindipi hayoliy diffaksion tajribaga qanday qo'llaniladi?*

***18.** Zarrachaning koordinatasi va impulsning proyeksiyasi orasidagi noaniqlik munosabatini batafsil va har tomonlama muhokama qilib chiqing. To'lqin paketi va noaniqlik munosabati asosida klassik hamda kvant mexanikasi orasidagi bog'lanishni tahlil qilib chiqing.*

***19.** Nima sababdan kvant mexanikasida zarrachaning harakatini ifodalash uchun trayektoriya tushunchasidan foydalanish mumkin emas?*

***20.** Qanday aniqlik bilan bir vaqtning o'zida zarrachaning koordinatasini va tezligini aniqlash mumkin?*

Misol sifatida ikki uchi biriktirilgan torning ko'ndalang tebranishi masalasini keltirish mumkin. Bu holda harakat tenglamasi

$$\frac{d^2U}{dx^2}+k^2U=0 \qquad (2.16)$$

ko'rinishga ega. Agarda $\hat{L}=-\frac{d^2}{dx^2}$ desak, $L=k^2$ bo'ladi. Yechim $0\le x\le l$ sohada mavjuddir, bunda l - torning uzunligini ifodalaydi. (2.16) tenglamaning chegaraviy shartlari quyidagicha bo'ladi: agarda $x=0$ va $x=l$ bo'lsa, $U=0$ bo'ladi. Fizikaviy nuqtayi nazardan tebranish jarayonida torning ikki uchi tebranmaydi. Bu masalaning xususiy yechimlari $U_n(x)=sin\frac{\pi n}{l}x$ bo'ladi, xususiy qiymatlari esa $L_n=k_n^2=\frac{\pi^2n^2}{l^2}$ bo'ladi, va bunda $n=1,2,3,\ldots$ ga teng.

Kvant mexanikasida to'lqin funksiyasining argumentlari butun soha bo'yicha o'zgarishi bilan ajralib turadi, ya'ni $-\infty<x<+\infty$, $-\infty<y<+\infty$, $-\infty<z<+\infty$ sohada $\psi(x,y,z)$ funksiya o'zgaradi. Shu tufayli kvant mexanikasi masalalarida to'lqin funksiya uchun chegaraviy shartlarni klassik fizikadagi tebranish masalalaridagi kabi bevosita ifodalay olmaymiz.

Ammo kvant mexanikasida zarrachalar sonini saqlanishidan foydalanib, chegaraviy shartlarga ekvivalent bo'lgan tabiiy talablarni keltirib chiqarish mumkin. Ma'lumki, zarrachalar sonini saqlanish talabi sohaning biror nuqtasida zarrachani topish ehtimolligini vaqtga bo'gliq emasligidan kelib chiqadi, ya'ni

$$\frac{d}{dt}\int\psi^*\psi\;dV=0 \qquad (2.16)$$

bu yerda integral ψ funksiya argumentlarini o'zgarish sohasi bo'yicha olinadi, demak bu sohada zarrachani topish ehtimolligi barqarordir. (2.16) bajarilishi uchun to'lqin funksiyasi quyidagi shartlarni qanoatlantirishi kerak.

1. o'zgaruvchilarni o'zgarish sohasida chekli bo'lishi ;
2. uzluksiz bo'lishi ;
3. bir qiymatli bo'lishi.

Qisqacha aytganda kvant mexanikasida to'lqin funksiya chekli, uzluksiz va bir qiymatli bo'lishi kerak.

fluktuatsiyalar deb atalib, fizik kattalik qiymatlarining noaniqliklarini yuzaga keltiradi. Matematik statistika kursidan ma'lumki, fluktuatsiya, odatta, o'rtacha kvadratik og'ish deb atalib, qaralgan kattalikning o'lchangan va o'rtacha qiymatlari ayirmasining kvadratini o'rtachalab olinadi.

O'rtacha qiymat ΔL ma`lum bo'lgan holda, og'ish quyidagi formulaga binoan hisoblanad:

$$\Delta L=L-\bar{L}\,. \qquad (1.87)$$

Statistik fluktuatsiyani esa, yoki o'rtacha kvadratik og'shni qiyidagicha yozish mumkin.

$$\overline{(\Delta L)^2}=\overline{\left(L-\bar{L}\right)^2}=\overline{L^2}-2\bar{L}\;\bar{L}+\left(\bar{L}\right)^2=\overline{L^2}-\left(\bar{L}\right)^2.$$

1.12. Noaniqlik munosabatlari

De-Broyl to'lqinlarning statistik talqini nazariy yo'l bilan olingan natijalarni tajriba ma'lumotlari bilan bog'lash imkonini beradi. Biroq bu talqin mikroobyektlarning tabiati to'g'risidagi masalani chetda qoldiradi. Bu yerda asosiy qiyinchilik tajribadan olingan natijalarni tavsiflash uchun goh zarrachalar manzarasidan, goh to'lqinlar manzarasidan foydalanishga to'g'ri keladi. Bir xil mikroobyektlarning o'zi, masalan elektronlar, ba'zi tajribalarda o'zini muayyan trayektoriyalar bo'yicha harakatlanuvchi zarrachalar singari tutadi, boshqa tajribalarda esa ular o'zini superpozitsiya prinsipiga bo'y sunadigan to'lqinlar kabi tutadi. Ammo ravshanki, bir xil mikroobyektlarning o'zini tavsiflash uchun ham to'lqin, ham korpuskular manzaralardan foydalanishga majbur bo'lganligimiz sababli, bu mikroobyektlarga zarrachalarning barcha xossalari va to'lqinlarning barcha xossalari taalluqli bo'ladi deya olmaymiz.

Ma'lumki, klassik mexanikada zarrachalarni trayektoriyalari va bu trayektoriya bo'ylab ularning harakati bizni qiziqtiradi. Zarrachani trayektoriya bo'ylab harakati bilan vaqtning har bir momentidagi aniq koordinatasi va aniq impulsining mavjudligi chambarchas bog'langan. Birinchi kattalik zarrachaning holatini aniqlab bersa, ikkinchisi esa shu kattalikning cheksiz kichik vaqt davomida o'zgarshini ko'rsatadi:

$$x + dx = x + \frac{p_x}{m} dt = x + \upsilon_x dt , \qquad (1.88)$$

bunda m –zarrachaning massasi, υ_x– uning tezligi. Statistik ansambldagi zarrachalar xilma-xil koordinataga va impulslarga ega bo‘lishi mumkin. Agar bu klassik ansambl bo‘lganida edi aniq impulsga va aniq koordinataga ega bo‘lgan ansambllarni tanlab olish mumkin bo‘lardi. Kvant ansambl holida esa bunday tanlab olish imkoniyati bo‘lmaydi, chunki bu holda zarrachalarning joylashishi va ularning impulsi orasidagi munosabat klassik holatdagi munosabatdan mutlaqo farq qiladi. Mikroolamdagi uchraydigan bu muhim xususiyatni batafsil o‘rganib chiqish uchun, mikrozarrachalarnig difraksiyasi tajribalaridan kelib chiqadigan natijalarga asoslaniladi. Ushbu tajribalarning asosiy natijasi de-Broyl formulasida ifodalangan bo‘lib, to‘lqin uzunligini impuls bilan bog‘laydi:

$$p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} . \qquad (1.89)$$

Ma’lumki, to‘lqin qandaydir davomiylikka ega va u o‘zini bir vaqtning o‘zida fazoning turli yerlarida namoyon qila oladi. Shuning uchun “ x nuqtada to‘lqin uzunligi λ ga teng” degan ibora ma’noga ega emas, chunki λ to‘lqin shaklining funksiyasidir. Shu tufayli (1.89) formulaning o‘ng tomoni x koordinataning funksiyasi bo‘la olmaydi. Demak, (1.89) ning chap tomoni ham, ya’ni p impuls ham x koordinataning funksiyasi bo‘la olmaydi. Shunday qilib, quyidagi xulosaga kelinadi: modomiki (1.89) dagi de-Broyl munosabati to‘g‘ri munosabat ekan, u holda zarrachaning p impulsi uning x koordinatasini funksiyasi bo‘la olmaydi. Mikrodunyo olamida “ x nuqtada zarracha impulsi p ga teng” degan ibora hech qanday ma’noga ega emas. Demak, kvant sohasida bir vaqtning o‘zida ham impuls, ham koordinata aniq qiymatlarga ega bo‘ladigan ansambllar mavjud emas. Avvalo to‘lqin guruhidan tashkil topgan ansambllar uchun bu mulohazani isbotlab beraylik. 1.5-paragrafda ko‘rsatib o‘tilganidek,

$$\psi(x,t) = \int_{k-\Delta k}^{k+\Delta k} C(k) e^{i(\omega t - kx)} dk \qquad (1.90)$$

to‘lqinlar guruhi quyidagi ko‘rinishda ifodalanishi mumkin:

5. Nima uchun biz ba’zan yorug‘likning to‘lqin xususiyatlarini nomoyon qilishi to‘g‘risida, ba’zan esa uning korpuskular xususiyatlarini nomoyon etishi to‘g‘risida gapirishimiz mumkin?

6. Nima uchun biz elektronning ba’zi hollarda to‘lqin xususiyatlarini, ba’zi hollarda esa uning korpuskular xususiyatlarini nomoyon etishi to‘g‘risida so‘z yuritishimiz mumkin?

7. Foton va elektron orasida ajralib turuvchi barcha farqlarni batafsil ko‘rsatib bering.

8. Ixtiyoriy zarrachaning de-Broyl to‘lqin uzunligi uning o‘lchamlaridan katta yoki kichik bo‘la oladimi? Zarrachaning o‘lchamlari va uning de-Broyl to‘lqin uzunligi orasida o‘zaro bog‘lanish mavjudmi?

9. Makroskopik sohada kvant effektlarini kuzatish imkoniyati mavjud bo‘lishi uchun Plank doimiysining qiymati qanday bo‘lishi kerakligini baholang.

***10.** Rezerford tomonidan taklif qilingan atomning planetar modelida elektronlarni qaysi kuchlar ushlab turadi va atom sistemasining turg‘unligini ta’minlab turadi?*

***11.** Rezerford tomonidan taklif qilingan atomning planetar modeli va Bor nazariyasi orasidagi asosiy farqlarni ko‘rsatib bering.*

12. Masala. *Radiusi* $0{,}53\cdot10^{-10} m$ *ga ega bo‘lgan vodorod atomining doiraviy orbita bo‘ylab harakatlanuvchi elektronining yadroga tushish vaqti baholansin, bunda klassik elektrodinamikaning qonunlariga binoan elektronning nurlanishga sarf qilgan energiyasi*

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3}\frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 c^3}\ddot{\mathbf{r}}^2$$

formula bilan aniqlangan deb hisoblansin($\ddot{\mathbf{r}}$-elektronning tezlanish vektori).

***Yechish**:*

Soddalik uchun elektronning tezlanishi r radiusli aylana bo‘ylab tekis harakat qilgandagi tezlanishiga

$$\omega = \frac{\vartheta^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_0 r^2}$$

teng bo‘lsin deb faraz qilamiz. U holda norelyativistik hol uchun to‘liq energiya E quyidagi ko‘rinishga keladi:

$$E = \frac{m_0\vartheta^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{m_0\vartheta^2}{2} .$$

II bob
KVANT MEXANIKASINING MATEMATIK APPARATI

2.1. Chiziqli va o‘z-o‘ziga qo‘shma operatorlar

Har bir fundamental fizikaviy nazariyada o‘ziga xos matematik apparat qo‘llaniladi. Klassik mexanikani vujudga kelishi differensial va integral hisoblash metodlarining rivojlanishi bilan chanbarchas bog‘liq. Elektrodinamika fanini va Eynshteynning relyativistik mexanikasini paydo bo‘lishi esa, vektor va tenzor analizning keng hamda har tomonlama qo‘llanishi bilan bog‘liq. Kvant mexanikasining asosiy qonunlarini aniq va to‘g‘ri ifodalash uchun matematiklar tomonidan ishlatilayotgan tushunchalar va g‘oyalarni shu fanga tatbiq qilish lozim edi. Kvant mexanikasidagi bu g‘oyalarning eng asosiysi va keng qo‘llaniladigani bu operatorlar nazariyasidir.

Ma’lumki, moddiy nuqta trayektoriyasini ifodalovchi funksiyalarni aniqlab berish masalasi klassik mexanikaning asosiy masalasini tashkil etadi va bu nazariyada fizik kattaliklar koordinata va vaqtning funksiyasi sifatida tavsiflanadi. Kvant mexanikasida esa vaziyat batamom boshqacha, chunki elektronning koordinata va impulsi, bir vaqtning o‘zida aniq qiymatlar qabul qila olmaydigan fizik kattaliklar turiga kiradi. Ikkinchi tomondan kvant nazariyasi klassik mexanikadan farqli ravishda bo‘lajak voqealarni aniq aytib bera olmaydi, balki ularni amalga oshish ehtimolligini ko‘rsatadi. Shuning uchun ham, bu fikirlarni to‘gri aks ettirish uchun mutlaqo boshqacha bo‘lgan matematik apparatni qo‘llashga majbur bo‘lindi va bunday nazariya sifatida operatorlar nazariyasi qabul qilindi.

Ushbu matematik apparatni bayon qilishdan oldin (1.83) va (1.84) ifodalarda mos holda koordinata hamda impulslar funksiyalarining o‘rtacha qiymatlarini qanday aniqlaganimizni eslaylik. Agar ana shu funksiyalardagi impulslar o‘rniga impuls operatorlaridan foydalanilsa, impuls funksiyalarining operatorlar orqali tuzilgan ifodasiga kelinadi. Ushbu natija shuni ko‘rsatadiki, har qanday koordinata va impulslarning murakkab funksiyasi bo‘lgan mexanik kattaliklar mos operatorlar orqali ifoda qilinishi kerak.

2.3. Operatorlarning xususiy funksiyalari va xususiy qiymatlari

Avvalgi paragrafdagi olingan formulalar yordamida fizik kattalikning $\bar{L}$ o‘rtacha qiymati va $(\Delta\bar{L})^2$ o‘rtacha kvadratik og‘ishini hisoblaydigan formulalarni olgan edik. Ammo bu formulalar L kattalikning alohida o‘lchashlardagi qiymatlari to‘g‘risida biror ma’lumotni bera olmaydi. Bu masalani hal qilish maqsadida shunday ψ_L holatga murojaat qilaylikki, bu holatda qiziqtiruvchi kattalik bitta L qiymatni qabul qilsin. Bunday holatda, o‘rtacha kvadratik og‘ish $(\Delta\bar{L})^2 = 0$ bo‘ladi. (2.11) dan ma’lumki, bu holatlar uchun

$$\int \left|\Delta\hat{L}\psi_L\right|^2 dx = 0 . \qquad (2.13)$$

Integral ostidagi kattalik musbat bo‘lganligi sababli

$$\left|\Delta\hat{L}\psi_L\right|^2 = 0$$

kelib chiqadi. Kompleks sonning moduli faqat shu holatdagina nolga teng bo‘lishi uchun, shu sonning o‘zi nolga teng bo‘lishi kerak. Shuning uchun

$$\Delta\hat{L}\psi_L = 0 \qquad (2.14)$$

bo‘ladi. (1.87) dagi $\Delta L = L - \bar{L}$ ekani eslansa va ko‘rilayotgan holatda $\bar{L} = L$ hisobga olinsa, (2.14) dan

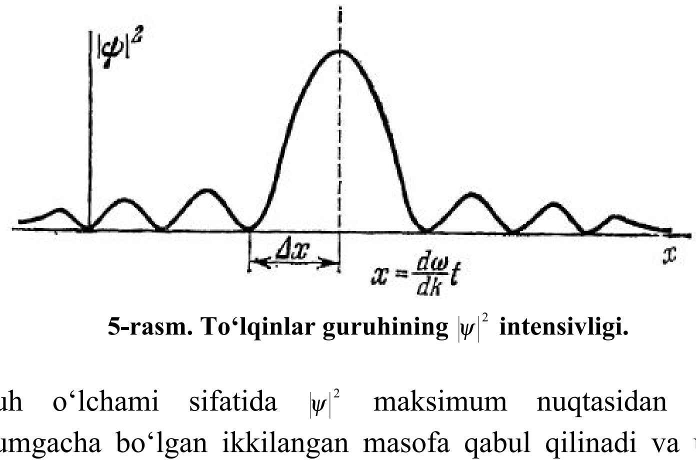
$$\hat{L}\psi_L = L\psi_L \qquad (2.15)$$

natijaga kelinadi. Shunday qilib, berilgan holatning ψ_L to‘lqin funksiyasini aniqlab beruvchi chiziqli tenglama hosil qilindi, bu holatda $\hat{L}$ operator bilan tavsiflangan kattalik yagona L qiymatni qabul qiladi. Ko‘pchilik hollarda $\hat{L}$ operator differensial operator bo‘lganligi sababli, (2.15) tenglama ham chiziqli bir jinsli differensial tenglama bo‘ladi.

Matematika kursidan ma’lumki, faqatgina chegaraviy shartlar mavjud bo‘lgan holdagina differensial tenglama yagona yechimga ega bo‘lishi mumkin. Ikkinchi tomondan, berilgan chegaraviy shartlarda $\hat{L}\psi_L = L\psi_L$ chiziqli differensial tenglama L parametrning barcha qiymatlarida emas, balki faqat tanlangan $L = L_1, L_2, ... L_n ...$ qiymatlaridagina trivial bo‘lmagan yechimga ega bo‘ladi. Ushbu tanlangan $L_1, L_2, ... L_n ...$ parametrlar xususiy qiymatlar deyiladi, va shu qiymatlarga mos bo‘lgan tegishli $\psi_1, \psi_2, ... \psi_n ...$ yechimlar esa xususiy funksiyalar nomi bilan ataladi.

$$\psi(x,t)=2c(k_0)\frac{Sin\left\{\left[\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t-x\right]\Delta k\right\}}{\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t-x}e^{i(\omega_0 t-k_0 x)}. \quad (1.91)$$

Ixtiyoriy vaqt momemtida bunday to‘lqinlar guruhidagi $|\psi|^2$ intensivligi 5-rasmda keltirilgan.



5-rasm. To‘lqinlar guruhining $|\psi|^2$ intensivligi.

Guruh o‘lchami sifatida $|\psi|^2$ maksimum nuqtasidan birinchi minimumgacha bo‘lgan ikkilangan masofa qabul qilinadi va uni $2\Delta x$ orqali belgilanadi. (1.91) dan ma’lumki, $\Delta x=\pi/\Delta k$ yoki

$$\Delta x\cdot\Delta k=\pi \quad (1.92)$$

Bu ifoda to‘lqinlar uchun xos munosabat bo‘lib, ixtiyoriy to‘lqinlar uchun o‘rinlidir va to‘lqin guruhlarining chiziqli o‘lchamlarini shu to‘lqinlardan tashkil topgan to‘lqin sonlarining intervaliga bo‘lgan ko‘paytmasi o‘zgarmas kattalik bo‘lib, bu ko‘paytma π ga teng bo‘ladi.

Kvant mexanikasida esa $p_x=\hbar k$ de-Broyl tenglamasida k kattalik Δk oralig‘ida o‘zgaradi va p impuls

$$\Delta p_x=\hbar\,\Delta k \quad (1.93)$$

o‘raliqda o‘zgaradi. Agarda (1.90) dagi to‘lqinlar guruhini de-Broyl to‘lqinlar guruhi sifatida qarasak va (1.92) formulani ikkala tomonini $\hbar$ Plank doimiysiga ko‘paytirilsa, u holda (1.93) formulani nazarda tutib, quyidagi natijaga kelinadi:

ξ ning haqiqiy qiymatlarida (1.102) ifoda barcha sohalarda manfiy bo‘la o‘lmaydi:

$$I(\xi)=0. \quad (1.103)$$

Shuning uchun (1.103) tenglamaning ildizlari kompleks qiymatlarga ega bo‘ladi. Bu shartning bajarilishi faqatgina

$$4AC\geq B^2 \quad (1.104)$$

shart bajarilganda amalga oshiriladi. Olingan tengsizlikka A, B, va C qiymatlar qo‘yilsa, $\overline{(\Delta x)^2}$ va $\overline{(\Delta p_x)^2}$ orasidagi munosabatga kelinad:

$$\overline{(\Delta p_x)^2}\cdot\overline{(\Delta x)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4} \quad (1.95)$$

Shunday qilib, umumiy ko‘rinishdagi noaniqlik munosabatlari hosil qilindi. Kvant mexanikasida Geyzenberg noaniqlik munosabatlarining mavjudligi quyidagi umumiy xulosaga olib keladi: zarrachaning holatini tavsiflovchi koordinata va impulsini bir vaqtda aniq belgilab bo‘lmaydi. Mana shu jihati bilan kvant nazariyasi, zarracha har qanday momentda aniq koordinata va aniq impulsga ega bo‘la oladi deydigan klassik mexanikadan prinsipial farq qiladi. Klassik mexanikada zarrachaning koordinata va impulslari bir vaqtning o‘zida istalgan aniqlikda o‘lchash mumkin deyiladi. Kvant nazariyasi esa, Geyzenberg noaniqlik munosabatlari mavjudligi tufayli, bunday imkoniyat bo‘lishlini prinsipial inkor etadi.

1.13. I bobga oid savol va masalalar

1. *Klassik fizika tushuntira olmagan fizikaviy muammolarni ko‘rsatib bering.*

2. *Kvant mexanikasining paydo bo‘lishiga sabab bo‘lgan nazariy va eksperimental ishlarni sanab o‘ting.*

3. *Fotoeffektning qizil chegarasiga mos keluvchi to‘lqin uzunligi biror metallni ikkinchi metal bilan almashtirganda ortadi. Bu ikkala metallarning chiqish ishi to‘g‘risida nima deyish mumkin?*

4. *Rentgen nurlanishining kvanti (rentgen fotoni) elektron bilan to‘qnashganda sochilish jarayoni vujudga keladi. Ushbu jarayon sodir bo‘lganda uning to‘lqin uzunligining ortishini yoki kamayishini izohlab bering.*

Kelgusida ushbu munosabatlar asos sifatida qo‘llaniladi. Fizik kattaliklarni Kvant mexanikasidagi sistemaning rivojlanishini ifodalash uchun, operator deb nomlangan matematik tushuncha kiritildi. Matematikada operator deb bir funksiyani ikkinchi funksiya bilan taqqoslash usulini ifodalovchi $\hat{L}$ belgiga aytiladi, yani :

$$\hat{L}u(x)=\upsilon(x) \quad (2.1)$$

Masalan, $\hat{L}=x$ bo‘lsin, u holda $\upsilon(x)$ funksiyani olish uchun $u(x)$ funksiyani o‘zining x argumentiga ko‘paytirish kerak, yoki $\hat{L}=\frac{\partial}{\partial x}$ bo‘lsa, u holda $\upsilon(x)$ funksiyani hosil qilishda $u(x)$ funksiyani differensiallash lozim.

Endi operatorlar ustida bajariladigan matematik amallarni ko‘rib chiqaylik. Ikkita $\hat{A}$ va $\hat{B}$ operatorlar berilgan bo‘lsin. To‘lqin funksiyasiga

$$\hat{C}\psi=\hat{A}\psi+\hat{B}\psi \quad (2.2)$$

tarzda ta’sir etuvchi $\hat{C}$ operatorni $\hat{A}$ va $\hat{B}$ operatorlarning yig‘indisi deyiladi va bu operator:

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

ko‘rinishda yoziladi. Ikkala $\hat{A}$ va $\hat{B}$ operatorlarning

$$\hat{D}=\hat{A}\cdot\hat{B}$$

ko‘paytmasi esa

$$\hat{D}\psi=\hat{A}\,(\hat{B}\psi)$$

ma’noni bildiradi, ya’ni ψ funksiyaga $\hat{B}$ operator bilan ta’sir qilishi kerak, so‘ngra hosil bo‘lgan yangi to‘lqin funksiyaga $\hat{A}$ operator bilan ta’sir etish lozim. Muhimi, operatorlarning ko‘paytmasi ko‘payuvchilarning tartibiga bog‘liq. Masalan, agar $\hat{D}=\hat{A}\cdot\hat{B}$ bo‘lsa, u holda $\hat{D}'=\hat{B}\cdot\hat{A}$ deb belgilanadi. Agar $\hat{A}\cdot\hat{B}=\hat{B}\cdot\hat{A}$ bo‘lsa, $\hat{A}$ va $\hat{B}$ operatorlar o‘z-o‘ziga kommutativ operatorlar deyiladi, aks holda, ya’ni $\hat{A}\cdot\hat{B}\neq\hat{B}\cdot\hat{A}$ bo‘lsa, ular komuttativ bo‘lmagan (antikommutativ) operatorlar deyiladi.

$$\hat{F}=\hat{A}\cdot\hat{B}-\hat{B}\cdot\hat{A}$$

operator $\hat{A}$ va $\hat{B}$ operatorlar uchun kommutator deyiladi.

Avvalo, chiziqli operator degan tushuncha bilan tanishib chiqaylik. Agar $\hat{L}$ operator quyidagi shartni

$$\hat{L}(c_1u_1+c_2u_2)=c_1\hat{L}u_1+c_2\hat{L}u_2 \quad (2.3)$$

O‘lchanayotgan fizik kattaliklar bilan operatorlar o‘rtasidagi bog‘lanishni ψ to‘lqin funksiyasi orqali ifodalash uchun ansambldagi L kattalikning o‘rtacha qiymatini hisoblash formulasidan foydalaniladi. Kvant mexanikasida ψ to‘lqin funksiyasi orqali ifodalangan ansambldagi $\hat{L}$ chiziqli va o‘z-o‘ziga qo‘shma operatorga mos keluvchi kattalikning $\overline{L}$ o‘tacha qiymati ushbu

$$\overline{L}=\int\psi^*\hat{L}\psi dx \quad (2.7)$$

formula orqali aniqlanadi. $\hat{L}$ operatorning (2.4) dagi o‘z-o‘ziga qo‘shma xossasiga asoslanib, (2.7) ifodani ekvivalent ko‘rinishda yozish mumkin, ya’ni

$$\overline{L}=\int\psi\hat{L}^*\psi^*dx \quad (2.7')$$

Bu formulani hosil qilishda (2.4) da $u_1^*=\psi^*$, $u_2=\psi$ teng deymiz hamda (2.7) va (2.7’) ni taqqoslash natijasida

$$\overline{L}=\overline{L}^* \quad (2.8)$$

ya’ni o‘z-o‘ziga qo‘shma operator bilan ifodalangan kattalikning o‘rtacha qiymati haqiqiydir. Agarda o‘rtacha kvadratik og‘ishni $(\Delta\hat{L})^2$ operator orqali ifodalansa

$$(\Delta\hat{L})^2=(\hat{L}-\overline{L})^2 \quad (2.9)$$

va o‘rtacha qiymatni hisoblash formulasidan foydalanilsa, uning ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi, ya’ni

$$\overline{(\Delta\hat{L})^2}=\int\psi^*(\Delta\hat{L})^2\psi dx \quad (2.10)$$

natija olinadi. Demak, $\hat{L}$ operator ma’lum bo‘lsa, u holda o‘rtacha kvadratik og‘ishni hisoblash mumkin. $\hat{L}$ operatorning o‘z-o‘ziga qo‘shmalik shartidan foydalanilsa $\overline{(\Delta L)^2}$ kattalikning musbat yoki nolga tengligini isbotlash mumkin. Shu maqsadda (2.4) formuladan foydalanilsa va (2.10) da $\psi^*=u_1^*$ va $(\Delta\hat{L}\psi)=u_2$ desak,

$$\overline{(\Delta\hat{L})^2}=\int(\Delta\hat{L}\psi)(\Delta\hat{L}^*\psi^*)dx=\int|\Delta\hat{L}\psi|^2dx=\int|\Delta\hat{L}\psi|^2dx \quad (2.11)$$

natijaga kelinadi. Ma’lumki, $|\Delta\hat{L}\psi|^2\geq0$, u holda (2.11) dan

$$\overline{(\Delta L)^2}\geq0 \quad (2.12)$$

kelib chiqadi. Shunday qilib, o‘rtacha kvadratik og‘ish har doim musbat kattalikga yoki nolga teng bo‘ladi.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \pi\hbar. \quad (1.94)$$

Olingan (1.94) munosabat p_x impuls va unga mos bo‘lgan x koordinata uchun kvant mexanikasida Geyzenbergning noaniqlik munosabati deyiladi. Bu formulada

Δx va Δp_x kattaliklar mos ravishda x koordinata va p_x impulsni o‘lchashdagi noaniqliklarni ifodalaydi. Aniqlangan alohida o‘lchashlarning qiymatlari $\bar{x}$ atrofida $\pm\Delta x$ noaniqlik bilan olinadi. Agarda shu holatning o‘zida zarrachalarning p_x impulsi o‘lchansa, ularning o‘rtacha qiymati $\bar{p}_x = p_0 = \hbar k_0$ ga teng bo‘ladi va alohida o‘lchashlarning qiymatlari p_0 qiymat atrofida $\pm\Delta p_x$ noaniqlik bilan topiladi.

Noaniqlik munosabatlarini matematik ko‘rinishda yaqqol tasvirlash uchun avval koordinata va impulsning o‘rtacha qiymatlaridan ehtimoliy chetlanishini bildiruvchi kattaliklarni aniqlash kerak. $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ lar $\boldsymbol{p}$ fazodagi $\varphi(\boldsymbol{p},t)$ funksiya joylashgan soha kattaligini bildiradi, $|\varphi(\boldsymbol{p},t)|^2$ esa impuls ehtimolligi ma’nosiga ega, u holda ravshanki, $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ lar impulsni o‘rtacha qiymatlaridan ehtimoliy chetlanish chegarasini aniqlaydi. Boshqacha aytganda, $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ va $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ lar koordinata va impulslarni ularning o‘rtacha qiymatlari atrofida tarqoqligini, ya’ni zarracha koordinata va impulslarining noaniqlik darajasini ko‘rsatadi.

Shuning uchun kvant mexanikasida $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ va $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ larni koordinata va impuls noaniqliklari deb atash qabul qilingan.

Avvalo statistikada keng qo‘llaniladigan $\overline{(\Delta p_x)^2}$ va $\overline{(\Delta x)^2}$ o‘rtacha kvadratik og‘ishlarni hisoblab chiqaylik. Bizga x kattalikning $\bar{x}$ o‘rtacha qiymati berilgan bo‘lsin. Agarda qandaydir individual o‘lchashda x qiymatni olsak, u holda $\Delta x = x - \bar{x}$ qiymat o‘rtacha qiymatdan chetlanishini bildiradi va bu chetlanishning o‘rtacha qiymati har doim nolga teng bo‘ladi:

$$\overline{\Delta x} = \overline{x - \bar{x}} = \bar{x} - \bar{x} = 0.$$

Shu tufayli o‘rtacha qiymatlardan individual o‘lchashlarning chetlanishi sifatida $\overline{\Delta x}$ qiymatni emas balki $\overline{(\Delta x)^2}$ o‘rtacha kvadratik og‘shni olishadi. Yuqoridagi tushuntirishlarga asoslanib:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{\left(x - \bar{x}\right)^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \quad (1.95)$$

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{\left(p_x - \bar{p}_x\right)^2} = \overline{p^2} - \bar{p}^2 \quad (1.96)$$

yozish mumkin. Keyingi hisoblashlarni davom ettirish uchun o‘zimizga qulay koordinatalar sistemasini tanlab olamiz. Ya’ni, koordinatalar boshining $\bar{x}$ nuqtasida tanlab olinadi, u holda $\bar{x} = 0$. Tanlangan koordinatalar sistemasi $\bar{x}$ taqsimlangan markaz bilan birgalikda harakatlansin. Demak, $\bar{p}_x = 0$ bo‘ladi. Ushbu koordinatalar sistemasida (1.95) va (1.96) formulalari o‘rniga

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} \quad (1.97)$$

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p^2} \quad (1.97')$$

larni olinadi. (1.81) va (1.85) ifodalardan foydalanilsa,

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = \int \psi^*(x)\, x^2 \psi(x)\, dx \quad (1.98)$$

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p^2} = (-i\hbar)^2 \int \psi^*(x) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx \quad (1.98')$$

natijaga kelinadi. Hozircha asosiy maqsad $\overline{(\Delta x)^2}$ va $\overline{(\Delta p_x)^2}$ orasidagi munosabatni aniqlashdan iborat. Shuning uchun quyidagi qo‘shimcha integralni ko‘rib chiqiladi:

$$I(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \xi x \psi + \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx. \quad (1.99)$$

Modulning kvadrati ochib chiqilsa,

$$\mathrm{I}(\xi) = \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi|^2 dx + \xi \int_{-\infty}^{\infty} x \left(\frac{d\psi^*}{dx}\psi + \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*}{dx}\frac{d\psi}{dx} dx \quad (1.100)$$

ifoda hosil bo‘ladi. Quyidagi belgilashlarni kiritib, integrallarni hisoblashda bo‘laklab integrallashdan foydalanilsa,

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi|^2 dx = \overline{(\Delta x)^2}. \quad (1.101)$$

$$B = -\int_{-\infty}^{\infty} x \frac{d}{dx}\left(\psi^* \psi\right) dx = \int \psi^* \psi dx = 1. \quad (1.101`)$$

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*}{dx}\frac{d\psi}{dx} dx = -\int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = \frac{\overline{(\Delta p_x)^2}}{\hbar^2}. \quad (1.101``)$$

Ushbu natijaga kelinadi:

$$\mathrm{I}(\xi) = A\xi^2 - B\xi + C \geq 0. \quad (1.102)$$

qanoatlantiradigan bo‘lsa, u chiziqli operator deb ataladi. Bu formulada u_1 va u_2 lar ixtiyoriy funksiyalar bo‘lib, c_1 va c_2 lar esa ixtiyoriy kompleks sonlardir. Koordinataning $\hat{x}$ operatori ham, impulsning $\hat{p}_x$ operatori ham chiziqli operator ekanligiga ishonch hosil qilish qiyin emas:

$$\hat{x}(c_1 u_1 + c_2 u_2) = x(c_1 u_1 + c_2 u_2) = c_1(x u_1) + c_2(x u_2) = c_1(\hat{x} u_1) + c_2(\hat{x} u_2)$$

$$\hat{p}_x(c_1 u_1 + c_2 u_2) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(c_1 u_1 + c_2 u_2) =$$

$$c_1\left(-i\hbar \frac{\partial u_1}{\partial x}\right) + c_2\left(-i\hbar \frac{\partial u_2}{\partial x}\right) = c_1(\hat{p}_x u_1) + c_2(\hat{p}_x u_2).$$

Agar $\hat{A}$ va $\hat{B}$ operatorlar chiziqli bo‘lsa, ularning yig‘indisi ham, ko‘paytmasi ham chiziqli operator bo‘ladi. Shunga binoan $\hat{x}$ va $\hat{p}_x$ operatorlar chiziqli bo‘lganligi sababli, ular o‘rqali algebraik ifodalanuvchi har qanday fizik kattalik ham chiziqli operator bo‘ladi. Demak, fizik kattalikka mos keluvchi operatorlar chiziqli bo‘lishi shart.

Chiziqli $\hat{L}$ operator o‘z-o‘ziga qo‘shma yoki ermit, operator deyiladi, agarda

$$\int u_1^*(x) \hat{L} u_2(x) dx = \int u_2(x) \hat{L}^* u_1^*(x) dx \quad (2.4)$$

tenglik o‘rinli bo‘lsa. Bu shartni qanoatlantiruvchi operatorlar faqat haqiqiy fizik kattaliklarni ifodalaydi. Impuls operatorining $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ o‘z-o‘ziga qo‘shma ekanligini ko‘raylik:

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_1^* \hat{p}_x u_2 dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} u_1^* \frac{\partial u_2}{\partial x} dx = \left[-i\hbar u_1^* u_2\right]_{-\infty}^{+\infty} +$$

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

Bu integralni hisoblashda bo‘laklab integrallash usulidan foydalanildi hamda $u_1^*(\pm\infty) = u_2(\pm\infty) = 0$ teng ekanligi hisobga olindi. Impuls operatorining qo‘shmasi esa $\hat{p}_x^* = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ga teng. Shunday qilib, $\hat{p}_x$ operator chiziqli va o‘z-o‘ziga qo‘shma operator ekan. Tekshirib ko‘rish mumkinki, $\frac{\partial}{\partial x}$ operator chiziqli, ammo o‘z-o‘ziga qo‘shma emas.

Endi fizik kattaliklar operatorlarini tuzishda chiziqli va o‘z-o‘ziga qo‘shma operatorlarning diqqatga sazovor bo‘lgan xususiyatlarini ko‘rib chiqaylik:

A ermit operator deyiladi, agar u o‘z-o‘ziga qo‘shma operatori A$^+$ ga teng bo‘lsa,

$$\hat{A} = \hat{A}^+. \quad (2.5)$$

Aynan shuning uchun ermit operatorlarni o‘z-o‘ziga qo‘shma operatorlar deb yuritiladi.

1. $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ ermit operatorlarning yig‘indisi ham ermit operator bo‘ladi.

2. Ermit operatorining biror bir haqiqiy songa ko‘paytmasi ham ermit operator bo‘ladi.

3. $\hat{D} = \hat{A} \cdot \hat{\mathrm{B}}$ ikki ermit operatorning ko‘paytmasi ermit operator bo‘lishi uchun $\hat{A}$ va $\hat{B}$ operatorlar albatta o‘z-o‘ziga kommutativ bo‘lishi lozim. Shunday qilib, fizik kattaliklar uchun operatorli ifodani tuzishda o‘ta ehtiyotkorlik talab qilinadi.

2.2. Fizik kattaliklarning o‘rtacha qiymatlari va operatorlari orasidagi bog‘lanish

Kvant mexanikasida operatorlar qo‘llanishining asosiy g‘oyasi shundan iboratki, har bir fizik kattalikka uni tavsiflovchi chiziqli va o‘z-o‘ziga qo‘shma operator moslashtiriladi, ya’ni istalgan fizik kattalik biror operator yordamida ifodalanadi:

$$L \to \hat{L}. \quad (2.6)$$

Masalan, **r** radius-vektorga uni ifodalovchi $\hat{\mathbf{r}}$, x o‘qi bo‘yicha impuls komponentasi p_x ga esa $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ operator moslashtiriladi, yoki $L = L(p_x, p_y, p_z, x, y, z)$ impulslar va koordinatalar funksiyasi bo‘lgan L klassik kattalik berilgan bo‘lsa, u holda $\hat{L}$ chiziqli va o‘z-o‘ziga qo‘shma operatorning ko‘rinishi

$$\hat{L} = L(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z, x, y, z)$$

bo‘ladi.

Istalgan fizik kattalikning o‘rtacha qiymatini qanday hisoblash mumkinligini I bobning 1.11- bo‘limida ko‘rib chiqdik, buning uchun zarrachaning holatini tavsiflovchi to‘lqin funksiya va shu fizik kattalikka mos keluvchi operatorni to‘g‘ri tanlab olish kerak.

bir holati mavjud ekan. Ammo zarracha bir vaqtning o‘zida bir nechta fizik kattaliklarning aniq qiymatlariga mos keladigan holatda bo‘la oladimi, degan savol tug‘ilishi tabiiy.

Faraz qilaylik, L va M kattaliklar bir vaqtda aniq qiymatlarga ega bo‘lgan fizik kattaliklar bo‘lsin. Ular bitta holatda bo‘lishi uchun shu holat to‘lqin funksiyasi $\hat{L}$ va $\hat{M}$ operatorlarning umumiy xususiy funksiyasi bo‘lishi kerak. Umuman olganda $\psi_L \neq \psi_M$ bo‘ladi, chunki $\hat{L}$ va $\hat{M}$ operatorlarning xususiy funksiyalar uchun tenglamalarning ko‘rinishi

$$\hat{L}\psi_L = L\psi_L \qquad \text{va} \qquad \hat{M}\psi_M = M\psi_M \tag{2.53}$$

bo'lishi kerak. Shuning uchun, L ning aniq qiymatidagi ψ_L holatda $\left(\overline{(\Delta L)^2} = 0\right)$ M kattalik hech qanday aniq qiymatiga ega bo‘la olmaydi, ya’ni $\overline{(\Delta M)^2} > 0$ ifoda bajariladi va aksincha M ning aniq qiymatidagi ψ_M holatda $\left(\overline{(\Delta M)^2} = 0\right)$ L kattalik hech qanday aniq qiymatiga ega bo‘lmaydi $\left(\overline{(\Delta L)^2} > 0\right)$.

Faqatgina xususiy hollarda, L va M ikkita kattalik bir vaqtning o‘zida aniq qiymatga ega bo‘lishi mumkin, buning uchun $\psi_M = \psi_L$ bo‘lishi kerak. Ikkita kattaliklarning operatorlari o‘z-o‘ziga kommutativ bo‘lsa, unda bu fizik kattaliklarning bir vaqtdagi aniq qiymatlariga to‘g‘ri keluvchi zarrachaning holatini har doim topish mumkin. Boshqacha aytganda, operatorlar uchun quyidagi matematik shart bajarilishi kerak:

$$\hat{L}\hat{M} = \hat{M}\hat{L}. \tag{2.54}$$

Demak, shunday fizik kattaliklarni tanlash mumkinki, ularning qiymatlari bir vaqtning o‘zida berilishi zarracha holatini to‘la aniqlab beradi. Bunday fizik kattliklarga mos bo‘lgan operatorlar o‘z-o‘ziga kommutativ bo‘lishi shart, ana shunda ularni bir vaqtning o‘zida kuzatish yoki o‘lchash mumkin.

2.6. Zarrachaning koordinata va impuls operatorlari

Avvalgi paragraflarda ko‘rib chiqilganidek, kvant mexanikasida har bir fizik kattalikka ma’lum operatorni mos qo‘yish mumkin. Bu operatorlar chiziqli va o‘z-o‘ziga qo‘shma bo‘lishi shart.

Operatorlarning chiziqlilik xossasi superpozitsiya prinsipining bajarilishidan kelib chiqadi, o‘z-o‘ziga qo‘shmaligi esa, fizik kattaliklar operatorlarining haqiqiy sonlar bilan ifodalanishi kerakligi bilan bog‘liqdir. Har bir fizik kattalik operatorini tanlab olishda umumiy xarakterga ega bo‘lgan fizik mulohazalardan foydalanish zarur, bunday operatorlar yordamida olingan dinamik o‘zgaruvchilarni tajriba natijalari bilan moslashtirishadi.

Klassik mexanikada muhim dinamik xarakteristikalar sifatida moddiy nuqtaning koordinatasi, uning tezligi, energiyasi kabi kattaliklar tanlab olinadi. Kvant mexanikasida esa zarrachaning tezligi uning impuls bilan almashtiriladi, energiya esa impulslar orqali ifodalangan bo‘ladi.

Endi kvant mexanikasida muhim rol o‘ynaydigan fizik kattaliklarga mos operatorlarning ko‘rinishini aniqlaylik. Asosiy operatorlarning ko‘rinishi avvalo Dekart koordinatalar sistemasida beriladi, keyinchalik esa boshqa koordinatalar sistemasidagi ko‘rinishlariga ham to‘xtalinadi.

Operator tushunchasidan foydalangan holda, koordinata va unga bog‘liq bo‘lgan fizik kattalikning o‘rtacha qiymatini (1.83) formula orqali yozish mumkin:

$$\bar{r} = \int \psi^*(\mathbf{r},t)\hat{r}\psi(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}$$

Bundagi $\hat{r}$ operator quyidagi ma’noda tushuniladi:

$$\hat{x}\psi(\mathbf{r},t) = x\psi(\mathbf{r},t), \ \hat{y}\psi(\mathbf{r},t) = y\psi(\mathbf{r},t), \ \hat{z}\psi(\mathbf{r},t) = z\psi(\mathbf{r},t). \tag{2.55}$$

Demak, koordinata operatorlarini holat funksiyasiga ta’siri shu holat funksiyasiga koordinatani ko‘paytirish orqali amalga oshiriladi.

Berilgan koordinatalarga mos holda impuls operatorlarinig ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{2.56}$$

Yuqoridagi ikkala operatorning vektor ko‘rinishlari esa, –

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \ \text{va} \ \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$$

bo‘ladi, bunda ∇ – gradiyent operatori bo‘lib, Dekart koordinatalar sistemasida

$$\nabla = \mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z}$$

ko‘rinishga ega.

va hammasi bo‘lib $(2l+1)$ta qiymatga ega bo‘ladi. $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ funksiya umumlashgan Lejandr polinomi deyiladi va u quyidagi ifodaga teng:

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}}P_l(\xi), \quad \xi = \cos\theta. \tag{2.83}$$

Bu yerda $P_l(\xi)$ Lejandr polinomi deyiladi va u

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{d\xi^l}\left[(\xi^2-1)^l\right] \tag{2.84}$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. (2.81) formuladagi $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ oldidagi ko‘paytma shunday tanlab olinadiki, $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ funksiyalar ortogonal bo‘lishi bilan bir qatorda ular sfera sirtida birga normalashgan bo‘lishi kerak, ya’ni

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{l'm'}^* Y_{lm}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta_{l'l}\delta_{m'm}. \tag{2.85}$$

Yuqorida olingan natijalarni ko‘rilayotgan masala uchun qo‘llaniladi. Avval qayd etilganidek, (2.79) tenglama yechimining chekli, bir qiymatli va uzluksiz bo‘lishi uchun $\lambda = l(l+1)$ shartni qanoatlantirishi kerak. (2.78) va (2.80) formulalardan impuls momenti kvadrati operatorning xususiy qiymatlari

$$M_l^2 = \hbar^2 l(l+1), \ l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots \tag{2.86}$$

ga teng bo‘lishi kerak. Bu qiymatlarga tegishli bo‘lgan xususiy funksiyalar esa,

$$\psi_{lm}(\theta,\varphi) = Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad m = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \pm3,\ \ldots,\ \pm l \tag{2.87}$$

ga teng. Yuqoridagi (2.86) va (2.87) ifodadan impuls momentining kvadrati $(2\ell+1)$ karrali ayniganligi ko‘rinib turibdi. Bu aynishining mohiyatini tushuntirish oson. $\hat{\mathbf{M}}^2$ operatorning xususiy funksiyalarini bir vaqtning o‘zida $\hat{M}_z$ operatorning ham xususiy funksiyasidir, ya’ni

$$\hat{M}_z\psi = M_z\psi \tag{2.88}$$

$\hat{M}_z$ ning qiymatini (2.71) formuladan (2.88) formulaga qo‘yilsa

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial z} = M_z\psi \tag{2.89}$$

Yuqorida ko‘rib chiqilgan talablar asosida (2.15) tenglamaning yechimlari ko‘p holatlarda barcha L qiymatlar uchun mavjud emas, balki (2.15) tenglamaning yechimlari faqat tanlangan ba’zi-bir $L = L_1, L_2, \ldots L_n \ldots$ qiymatlar uchun o‘rinlidir. Shu tariqa zarrachalarning sonini saqlanishidan kelib chiqadigan tabiiy talablar asosida (2.15) tenglamaning xususiy funksiyalari va xususiy qiymatlari masalasiga kelamiz.

Kvant mexanikasida quyidagi postulat o‘rinlidir: $\hat{L}$ operatorning xususiy qiymatlari bo‘lgan $L_1, L_2, \ldots L_n \ldots$ to‘plam $\hat{L}$ operator bilan tavsiflangan L mexanik kattalikni o‘lchash natijalari to‘plami bilan taqqoslanadi.

$L_1, L_2, \ldots L_n \ldots$ xususiy qiymatlarga mos bo'lgan holatlar $\psi_1, \psi_2, \ldots \psi_n \ldots$ to‘lqin funksiyalari bilan aniqlanadi. Bu holatlarning har birida $\overline{(\Delta L)^2} = 0$ bajariladi va L kattalik $L_1, L_2, \ldots L_n \ldots$ dan faqat bitta kattalikni qabul qiladi. Ixtiyoriy kattalik qiymatlari to‘plamini shu kattalikning spektri deyiladi. Spektr ikki xil bo‘lishi mumkin: uzlukli, ya’ni diskret va uzluksiz. Agar spektrda $L_1, L_2, \ldots L_n \ldots$ alohida qiymatlar mavjud bo‘lsa, u holda diskret spektr bilan ishlanadi va bu holda fizik kattalik kvantlangan qiymatlarni qabul qiladi. Agar L barcha qiymatlarni qabul qilsa, u holda spektr uzluksiz bo‘ladi.

Fizik kattaliklarni tavsiflovchi operatorlarning muhim bir xususiyatini ko‘rishga o‘taylik. Bu xususiyatning mavjudligi, fizik kattaliklarning o‘rtacha qiymarlari haqiqiy sonlar bilan ifodalanishi kerakligi bilan, ya’ni ular uchun

$$\bar{L} = \bar{L}^*$$

shart bajarilishi bilan bog‘liqdir.

2.4 Xususiy funksiyalarning asosiy xossalari

Hozir diskret spektrga ega bo‘lgan o‘z-o‘ziga qo‘shma operatorlarning ba’zi-bir muhim xossalari ko‘rib chiqiladi. Masalani soddalashtirish maqsadida ikkita U_1 va U_2 kompleks funksiyalardan foydalaniladi. Agarda

$$\int U_1^* U_2 dx = 0 \tag{2.17}$$

bo‘lsa va integral o‘zgaruvchilarning o‘zgarishi butun soha bo‘yicha bo‘lsa, u holda bu funksiyalarni ortogonal funksiyalar deyiladi.

O‘z-o‘ziga qo‘shma operatorlarning har xil xususiy qiymatlariga mos keluvchi xususiy funksiyalar ortogonal ekanligi ko‘rsatiladi, ya’ni

$$\int \psi_m{}^* \psi_n dx = 0 \tag{2.18}$$

shart bajarilishi kerak. Operatorning xususiy funksiyalari xossasiga binoan,

$$\hat L \psi_m = L_m \psi_m \text{ va } \hat L \psi_n = L_n \psi_n . \tag{2.19}$$

Birinchi tenglamaning qo‘shmasi hosil qilinadi:

$$\hat L^* \psi_m{}^* = L_m \psi_m{}^* . \tag{2.19’}$$

Bu yerda eslatib o‘taylik $L_m = L_m{}^*$. (2.19) tenglamaning ikkinchisini $\psi_m{}^*$ ga, (2.19’) tenglamani esa ψ_n ga ko‘paytiriladi, keyin esa birinchi tenglamadan ikkinchisi ayiriladi. Natijada

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

Bu tenglikni o‘zgaruvchilarni butun soha o‘zgarishi bo‘yicha integrallansa,

$$\int \psi_m{}^* \hat L \psi_n dx - \int \psi_n \hat L^* \psi_m{}^* dx = (L_n - L_m)\int \psi_m{}^* \psi_n dx \tag{2.20}$$

natijani olinadi. $\hat L$ operatorlarning o‘z-o‘ziga qo‘shmalik shartini hisobga olinsa, ya’ni

$$\int \psi_m{}^* \hat L \psi_n dx = \int \psi_n \hat L^* \psi_m{}^* dx$$

bo‘ladi va (2.20) tenglikning chap tomoni nolga teng. Demak,

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

va $L_n \neq L_m$ bo‘lgani uchun,

$$\int \psi_m{}^* \psi_n dx = 0 \tag{2.21}$$

ortogonallik sharti kelib chiqadi.

Ikkinchi tomonidan diskret spektrga tegishli funksiyalar har doim kvadratik integrallanuvchidir, shu tufayli ularni 1 ga normallashtirish mumkin, ya’ni

$$\int \psi_n{}^* \psi_n dx = 1 . \tag{2.22}$$

Oxirgi tenglikni (2.21) tenglik bilan birlashtirib yozish mumkin.

$$\bar L = \int \psi^* \hat L \psi dx = \iint C^*(L')\psi^*(x,L')dL' \hat L \int C(L)\psi(x,L)dLdx \tag{2.44}$$

$\psi(x,L)$ funksiya $\hat L$ operatorning xususiy funksiyasi bo‘lganli sababli quyidagi

$$\hat L \psi(x,L) = L\psi(x,L) \tag{2.45}$$

tenglik o‘rinli. $\bar L$ ni hisoblash uchun (2.45) ifodani (2.44) ga qo‘yilsa va integrallash tartibini o‘zgartirilsa, quyidagi natijaga kelinadi:

$$\bar L = \iint C^*(L')C(L)L'dL' \int \psi^*(x,L')\psi(x,L)dLdx . \tag{2.46}$$

Endi (2.42) dan foydalanilsa,

$$\bar L = \iint C^*(L')C(L)LdL'dL\delta(L'-L)$$

ifodaga kelinadi. δ -funksiyalarning xossasidan esa

$$\bar L = \int |C(L)|^2 LdL \tag{2.47}$$

natija olinadi. Endi (2.28) formuladan foydalanib, holat vektorining 1 ga normallash shartini qator koeffitsiyentlari orqali ifodalaylik:

$$1 = \int \psi^* \psi dx = \int dx \int C^*(L')\psi^*(x,L')dL' \cdot \int C(L)\psi(x,L)dL$$
$$= \iint C^*(L')C(L)dL'dL\delta(L'-L) = \iint |C(L)|^2 dL \tag{2.48}$$

ya’ni

$$\int |C(L)|^2 dL = 1 . \tag{2.49}$$

Agar ixtiyoriy uzluksiz kattalikning qiymati L va $L+dL$ oraliqda joylashgan bo‘lsa, u holda uning ehtimolligi $w(L)dL$ ga teng bolib, o‘rtacha qiymatning umumiy ifodasiga binoan

$$\bar L L = \int w(L)dL \tag{2.50}$$

bo‘ladi, agar

$$\int w(L)dL = 1 \tag{2.51}$$

shart bajarilsa.

(2.50) va (2.51) formulalarni (2.48) va (2.49) bilan taqqoslansa

$$w(L)dL = |C(L)|^2 dL \tag{2.52}$$

natijaga kelinadi. Oxirgi ifodadan ko‘rinib turibdiki, $|C(L)|^2$ kattalik $\psi(x,L)$ holatda zarrachaning uzluksiz spektridagi ($L, L+dL$) intervalda topilish ehtimolligini bildiradi.

Endi yana bir qiziqarli masalani ko‘rib chiqaylik. Ma’lum bo‘ldiki, har qanday fizik kattalikning aniq qiymati uchun zarrachaning ma’lum

Klassik mexanikada zarrachani xarakterlovchi kattaliklardan eng muhimi koordinata va impuls bo‘lganligi sababli, ularni kvant mexanikasida operatorlar bilan almashtiriladi. Bu operatorlarni $\psi(x,y,z)$ to‘lqin funksiyasiga ta’sirini ko‘rib chiqaylik:

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

$$\hat P_x(\hat x \psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar\psi - i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Ikkinchi qator birinchidan ayirilsa, quyidagi natijaga kelinadi:

$$(x\hat P_x - \hat P_x x)\psi = i\hbar\psi$$

yoki

$$x\hat P_x - \hat P_x x = i\hbar \tag{2.57}$$

Shunga o‘xshash quyidagilarni ham olish mumkin:

$$y\hat P_y - \hat P_y y = i\hbar , \tag{2.57’}$$

$$z\hat P_z - \hat P_z z = i\hbar . \tag{2.57’’}$$

Ushbu almashtirish qoidalari Geyzenbergning o‘rin almashtirish munosabatlari deyiladi. Ko‘rinib turibdiki,

$$x\hat P_y - \hat P_y x = 0 , \; y\hat P_z - \hat P_z y = 0 , \; z\hat P_y - \hat P_y z = 0 . \tag{2.58}$$

Shunga o‘xshash yo‘l bilan, ixtiyoriy $F(\mathbf{r})$ funksiya uchun o‘rin almashtirish munosabatlarini keltirib chiqarish mumkin:

$$F\hat P_x - \hat P_x F = i\hbar \frac{\partial F}{\partial x} , \tag{2.59}$$

$$F\hat P_y - \hat P_y F = i\hbar \frac{\partial F}{\partial y} , \tag{2.59’}$$

$$F\hat P_z - \hat P_z F = i\hbar \frac{\partial F}{\partial z} . \tag{2.59’’}$$

Yuqorida keltirib chiqarilgan munosabatlardan shu narsani qayd etish mumkinki, kvant mexanikasida bir vaqtning o‘zida impuls va koordinata aniq qiymatlarga ega bo‘ladigan holat mavjud emas. Boshqacha aytganda, (2.57) va (2.59) munosabatlar ma’lum bo‘lgan Geyzenbergning noaniqlik munosabatlarining operator formasidagi ko‘rinishini bildiradi.

Endi $\hat P_x$ operator uchun xususiy funksiyalar va xususiy qiymatlar masalasini ko‘rib chiqaylik. Bu holda ushbu tenglikka egamiz:

2.8. Impuls moment kvadrati operatorininig xususiy qiymati va xususiy funksiyalari

Kvant mexanikasida impuls moment kvadrati operatori fundamental ahamiyatga ega ekanligidan, uning xususiy qiymatini va xususiy funksiyasini aniqlash masalasi dolzarb masalalardan biri hisoblanishi kelib chiqadi. Avvalgi paragrafda $\hat M^2$ operator uchun olingan (2.73) ifodani faqat θ va φ burchaklarga ta’sir qilishini hisobga olinsa, u holda to‘lqin funksiyasining ushbu burchaklarning o‘ziga bog‘liq qisminigina qarash mumkin, ya’ni

$$\psi = \psi(\theta, \varphi) \tag{2.76}$$

$\hat{\mathbf{M}}^2$ operatorning xususiy qiymatlarini aniqlab beruvchi tenglama esa

$$\hat{\mathbf{M}}^2 \psi = \mathbf{M}^2 \psi \tag{2.77}$$

ko‘rinishda bo‘ladi. (2.73) dagi $\hat{\mathbf{M}}^2$ ning qiymatini (2.77) qo‘yilsa va

$$\lambda = \frac{M^2}{\hbar^2} \tag{2.78}$$

belgilash kiritilsa, (2.77) tenglama quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \lambda\psi = 0 . \tag{2.79}$$

Matematik fizika tenglamalari kursidan ma’lumki, (2.79) tenglama sferik funksiyalar tenglamasi hisoblanadi. Bu tenglamaning yechimlari ($\psi(\theta,\varphi)$ to‘lqin funksiyasi) $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \varphi \le 2\pi$ oraliqlarda chekli, bir qiymatli va uzluksiz bo‘lishi kerak. To‘lqin funksiyasiga qo‘yilgan yuqoridagi shartlarni bajarilishi uchun λ quyidagi tenglikni qanoatlantirishi kerak:

$$\lambda = l(l+1) \tag{2.80}$$

bunda l - butun nomanfiy son bo‘lib, $l = 0,1,2,...$ qiymatlarni qabul qiladi va l sonining har bir qiymati uchun (2.79) tenglama $(2l+1)$ ta ildizga ega bo‘ladi. Bu ildizlar sferik funksiyalarning o‘zginasidir:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(l-|m|)(2l+1)}{4\pi(l+|m|)}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi} . \tag{2.81}$$

Bunda *m*–butun son bo‘lib, quyidagi qiymatlarni qabul qiladi:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, ... \pm l \tag{2.82}$$

$$\int \psi_m^{\,*} \psi_n dx = \delta_{mn} \qquad (2.23)$$

bunda δ_{mn} –Kroneker belgisi bo‘lib, u quyidagicha aniqlanadi.

$$\delta_{mn} = 1, \text{ agarda } n = m$$
$$\delta_{mn} = 0, \text{ agarda } n \neq m \qquad (2.24)$$

(2.23) shartni qanoatlantiruvchi funksiyalar sistemasini ortogonal va normallashtirilgan funksiyalar sistemasi deyish mumkin.

Shuni aytish kerakki, birgina L_n xususiy qiymatga bir nechta chiziqli bog‘lanmagan $\psi_{n_1}, \psi_{n_2}, ... \psi_{n_f}$ xususiy funksiyalar mos kelishi mumkin. Bunday hollarda, agar bu chiziqli bog‘lanmagan xususiy funksiyalarning soni f bo‘lsa, unda L_n xususiy qiymatni f marta aynigan deyiladi va f karrali aynish to‘g‘risida gap yuritish mumkin. Modomiki, $\hat{L}$ chiziqli operator ekan, unda shu funksiyalarning har qanday chiziqli kombinatsiyasi ham L_n bilan berilgan tenglamani qanoatlantiradi. Xususiy funksiyalarni shunday tanlash mumkinki, ulardan ortogonal bo‘lgan xususiy funksiyalar sistemasini tuzish mumkin:

$$\int \psi_{nk'}^{\,*} \psi_{nk} dx = \delta_{k'k}\,. \qquad (2.25)$$

Diskret spektrli operatorlar misolida ko‘rilayotgan muammoning asosiy negizini bayon etgandan so‘ng, olgan xulosalarni uzluksiz spektrli operatorlarga ham tatbiq qilish qiyin emas. Bunday umumlashtirish, matematikada isbotlangan uzluksiz spektrga mos bo‘lgan xususiy funksiyalarning quyidagi xossalari bilan bog‘liqdir.

$$\int \psi^*(x, L')\psi(x, L)dx = \delta(L' - L) \qquad (2.26)$$

bunda $\delta(L' - L)$ - Dirak delta (δ) funksiyasi deyiladi.

δ - funksiya odatdagi funksiya emas, uni rasmiy jihatdan quyidagicha tushuntirish mumkin:

$$\delta(L - L') = \begin{cases} \infty, & \text{agar } L = L' \\ 0, & \text{agar } L \neq L' \end{cases} \qquad (2.27)$$

ammo uni shunday “g‘alati” ko‘rinishga egaligiga qaramay, uning uchun ushbu shart bajariladi:

$$\int \delta(L - L')dL' = 1\,. \qquad (2.28)$$

$$\sum_n |C_n|^2 = 1$$

Endi ko‘rilayotgan $\hat{L}$ operator fizik kattaligining o‘rtacha qiymatini hisoblash formulasidan foydalanib:

$$\bar{L} = \sum_n w(L_n)L_n \qquad (2.39)$$

ifoda olinadi. Bu yerda $w(L_n)$ kattalik L_n holatning ehtimolligi bo‘lib, quyidagi shartga bo‘ysunadi:

$$\sum_n w(L_n) = 1\,. \qquad (2.40)$$

Yuqorida hisoblashlardan muhim hulosaga kelinadi: (2.39) va (2.40) dagi formulalarni (2.37) va (2.38) formulalar bilan taqqoslanganda

$$w(L_n) = |C_n|^2 \qquad (2.41)$$

natija kelib chiqadi. Shunday qilib, (2.41) tenglikdan ko‘rinib turibdiki, qator koeffitsiyentlari modulining kvadrati $|C_n|^2$ - ko‘rilayotgan ψ holatidagi L fizik kattalikning L_n xususiy qiymatiga mos keluvchi ψ_n holatda zarrachaning topilish ehtimolidir. Agar C_n koeffitsiyentlarga berilgan bunday izohni qabul qilsak, u holda L fizik kattalikni faqat diskret qiymatlaridan iboratligini tan olish lozim. Demak, har qanday fizik kattalik ehtimollik taqsimotini qanday topish mumkinligi ham ravshanlashdi. Buning uchun, shu fizik kattalik operatorining xususiy qiymatlari masalasini hal qilish va ko‘rilayotgan holatdagi ψ to‘lqin funksiyani xususiy funksiyalari bo‘yicha qatorga yoyish kerak ekan. Qator koeffitsiyentlarining moduli kvadrati esa qidirilayotgan ehtimollik taqsimotini beradi.

Diskret spektrli operatorlar misolida ko‘rilayotgan muammoning asosiy negizini bayon etgandan so‘ng, olgan xulosalarni uzluksiz spektrli operatorlarga ham tadbiq qilish qiyin emas. Bunday umumlashtirish, matematikada isbotlangan uzluksiz spektrga mos bo‘lgan xususiy funksiyalarning quyidagi xossalari bilan bog‘liqdir:

$$\int \psi^*(x, L')\psi(x, L)dx = \delta(L' - L)\,. \qquad (2.42)$$

Ko‘rilayotgan ψ holatni $\hat{L}$ operatorning $\psi(x, L)$ xususiy funksiyalari bo‘yicha integral almashtirish ko‘rib chiqiladi:

$$\psi(x) = \int C(L)\psi(x, L)dL \quad \text{va} \quad \psi^*(x) = \int C^*(L)\psi^*(x, L)dL\,. \qquad (2.43)$$

ψ holatdagi L ning o‘rtacha qiymati hisoblanadi:

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

bunda p_x qiymat $\hat{P}_x$ operatorning xususiy qiymatini bildiradi. $\hat{P}_x$ operatorning ko‘rinishidan foydalanib,

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = p_x\psi$$

tenglamaga kelinadi. Bu tenglamani integrallash natijasida quyidagi yechimni olish mumkin:

$$\psi_{p_x} = N\exp\left(i\frac{p_x \cdot x}{\hbar}\right)$$

bunda N – doimiy son. Barcha sohalarda bu yechim uzluksiz, bir qiymatli va chekli bo‘lishi uchun p_x ning haqiqiy son bo‘lishi yetarli. Shu tufayli p_x xususiy qiymatlarning spektri uzluksiz spektr bo‘ladi va uning o‘zgarish sohasi

$$-\infty < p_x < +\infty$$

bo‘ladi. ψ_{p_x} funksiyani δ – funksiyaga normallashganligini talab qilinsa, to‘lqin funksiyasidagi doimiy $N = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}$ ga teng bo‘ladi. Shunday qilib, $\hat{P}_x$ operatorning normallashgan va ortogonal xususiy funksiyalarining ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(i\frac{p_x \cdot x}{\hbar}\right)$$

va

$$\int \psi_{p_x}^*(x)\psi_{p_x}(x)dx = \delta(p_x' - p_x)$$

ya’ni ψ_{p_x} impuls operatorining xususiy funksiyalari de-Broyl to‘lqinlarining o‘zginasi ekan.

2.7. Zarracha impuls momentining operatori

Zarracha yoki butun yopiq sistemaning eng muhim xarakteristikalaridan biri harakat miqdori momenti ya’ni impuls momenti hisoblanadi. Klassik mexanikada zarrachaning impuls moment, deb maydon markazidan zarrachagacha o‘tkazilgan radius-vektor **r** ni zarracha impulsiga (harakat miqdoriga) vektor ko‘paytmasi tushuniladi:

$$\hat{M}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right). \qquad (2.69)$$

Shunga o‘xshash hisoblashlarini amalga oshirib, quyidagi formulalarni ham keltirib chiqarish mumkin:

$$\hat{M}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (2.70)$$

$$\hat{M}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \qquad (2.71)$$

(2.69), (2.70) va (2.71) tengliklar sferik koordinatalar sistemasidagi impuls moment operatorining r, θ, φ komponentalari orqali ifodalanishidir.

Endi impuls momentining kvadrati uchun ifoda aniqlaniladi. Kvant mexanikasida impuls momenti kvadrati operatori uning koordinata o‘qlaridagi proyeksiyalari kvadrati operatorlarining yig‘indisiga teng:

$$\hat{\mathbf{M}}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 \qquad (2.72)$$

Yuqoridagi (2.69) – (2.71) formulalarni e’tiborga olib, impuls momenti kvadratining operatori uchun

$$\hat{\mathbf{M}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \qquad (2.73)$$

ifoda hosil qilinadi.

Olingan (2.73) ifodani Laplas operatori $\nabla^2_{\theta,\varphi}$ orqali yozish mumkin. Sferik koordinatalar sistemasini ikki komponentasi θ, φ uchun Laplas operatori

$$\nabla^2_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad (2.74)$$

bo‘lgani uchun

$$\hat{\mathbf{M}}^2 = -\hbar^2\nabla^2_{\theta,\varphi} \qquad (2.75)$$

teng bo‘ladi.

Shunday qilib, sferik koordinatalar sistemasida zarracha harakati uchun impuls momenti proyeksiyalarining operatorlari va impuls momenti kvadrati operatori uchun ifodalari aniqlab berildi.

Bu ta'rifdan ajoyib xususiyat kelib chiqadi, agar $L=L'$ nuqta $[a,b]$ intervalning tashqarida bo'lsa,

$$\int_a^b f(L')\delta(L-L')dL'=0 \qquad (2.29)$$

ifodalanadi. Agar $L=L'$ nuqta $[a,b]$ intervalning ichida joylashgan bo'lsa,

$$\int_a^b f(L')\delta(L-L')dL'=f(L) \qquad (2.30)$$

kelib chiqadi. Demak, uzluksiz spektr uchun δ - funksiya diskret spektrdagi δ_{mn} Kroneker belgisi rolini o'ynaydi.

Matematikadan ma'lumki, faqat diskret spektrga ega bo'lgan o'z-o'ziga qo'shma operatorlarning barcha ortonormallashgan xususiy funksiyalari Gilbert fazosida to'liq to'plamni tashkil etadi. Soddaroq qilib aytganda, istalgan kvadratik integrallanuvchi funksiyani operatorning xususiy funksiyalari bo'yicha qatorga yoyish mumkin:

$$\psi(x)=\sum_n C_n\psi_n(x). \qquad (2.31)$$

(2.31) formuladan foydalangan holda C_n qator koeffitsiyentlarini oson aniqlash mumkin. (2.31) tenglikning ikkala tomonini chapdan $\psi_m^*(x)$ skalar ravishda ko'paytiriladi va butun fazo bo'ylab integrallanadi:

$$\int\psi_m^*(x)\psi(x)dx=\sum_n C_n\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx \qquad (2.32)$$

ψ_n funksiyani ortogonalligini va normallashganligi hisobga olinsa, (2.32) ifodaning o'ng tomonidagi yig'indi belgisi ichida turgan integral $_{mn}$ bo'ladi, shunday qilib

$$\sum_n C_n\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=\sum_n C_n\delta_{mn}=C_m$$

Indeks *m* ni *n* ga almashtirilsa, quyidagi

$$C_n=\int\psi_n^*(x)\psi_m(x)dx \qquad (2.33)$$

koeffitsiyent aniqlanadi va (2.32) dagi barcha C_n koeffitsiyentlarni topish mumkin.

2.5. O'lchash natijalarining ehtimolligini hisoblash

Avvalgi paragraflarda $\hat{L}$ operator bilan tavsiflanuvchi ixtiyoriy kattalikning $\bar{L}$ o'tacha qiymatini hisoblashni va shu kattalikning

$L_1, L_2 ... L_n$ ixtiyoriy qiymatlarini aniqlash masalasini hal etgan edik. Endi ko'rilayotgan $\Psi(x)$ holatdagi L fizik kattalikning $L=L_n$ qiymatini topilish ehtimolligini hisoblash masalasini ko'rib chiqaylik. Hisoblashlarning asosiy g'oyasi shu holatlarning superpozitsiya prinsipiga bo'ysunishiga asoslangan. $\hat{L}$ operatorning xususiy funksiyalari $\psi_n(x)$ bo'lsin. Ermit operatorning har xil xususiy qiymatlariga mos keluvchi xususiy funksiyalarning ortogonalligi hamda normallashganligidan foydalanilsa, istalgan kvadratik integrallanuvchi funksiyani operatorning xususiy funksiyasi bo'yicha qatorga yoyish mumkin:

$$\psi(x)=\sum_n C_n\psi_n(x). \qquad (2.34)$$

Kompleks qo'shma funksiya uchun esa

$$\psi^*(x)=\sum_m C^*_m\psi^*_m(x) \qquad (2.34')$$

ga ega bo'linadi. Bu formulalarda *n* va *m* lar bir xil qiymatlarni qabul qiladi.

Olingan ψ va ψ^* ifodalarni L kattalikning o'rtacha qiymatini hisoblash formulasiga qo'yilsa, quyidagi natijaga kelinadi:

$$\bar{L}=\int\psi^*\hat{L}\psi dx=\sum_n\sum_m C_m^*C_n\int\psi_m^*\hat{L}\psi_n dx \qquad (2.35)$$

ψ_n funksiya $\hat{L}$ operatorning xususiy funksiyasi bo'lganligi hisobga olinsa, u holda

$$\hat{L}\psi_n=L_n\psi_n \qquad (2.36)$$

bo'ladi. (2.36) formuladan, hamda ψ^*_m va ψ_n funksiyalarning ortogonalligidan foydalanilsa, (2.35) formula o'rniga

$$\bar{L}=\sum_n\sum_m C_m^*C_nL_n\delta_{mn}=\sum_n C_n^*C_nL_n$$

ifodaga ega bo'linadi, ya'ni

$$\bar{L}=\sum_n|C_n|^2L_n. \qquad (2.37)$$

Ikkinchidan, (2.34) ni (2.34') ga ko'paytirib, o'zgaruvchilarning butun fazo o'zgarishni bo'yicha integrallab:

$$1=\int\psi^*\psi dx=\sum_n\sum_m C_m^*C_n\int\psi_m^*\psi_n dx=\sum_m\sum_n C_m^*C_n\delta_{mn}=\sum_n|C_n|^2, \qquad (2.38)$$

quyidagi natijani olinadi:

$$\mathbf{M}=[\mathbf{rp}]. \qquad (2.60)$$

Kvant mexanikasida qabul qilingandek, (2.60) ifodani operator ko'rinishda quyidagicha yozish mumkin:

$$\hat{\mathbf{M}}=[\hat{\mathbf{r}}\,\hat{\mathbf{p}}] \qquad (2.61)$$

bunda $\hat{\mathbf{r}}$ – radius-vektor operatori, $\hat{\mathbf{p}}$ – impuls operatori.

Markaziy simmetrik maydonda impuls momenti harakat integrali bo'ladi va saqlanuvchi kattalik bo'lib hisoblanadi. Ma'lumki, markaziy simmetrik maydonda markazdan chiquvchi hamma yo'nalishlar o'z-o'ziga teng kuchli bo'ladi. Shuning uchun sistemaning bunday maydondagi harakatida maydon markaziga nisbatan impuls momenti saqlanadi. Shuningdek, biror o'qqa nisbatan simmetrik maydonda impuls momentining simmetriya o'qiga proyeksiyasi ham saqlanadi. Impuls momenti proyeksiyalarining operator ko'rinishdagi ifodalari quyidagicha yoziladi:

$$\begin{aligned}\hat{M}_x&=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y=i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial z}\right)\\ \hat{M}_y&=z\hat{p}_x-x\hat{p}_z=i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial x}\right)\\ \hat{M}_z&=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x=i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\end{aligned} \qquad (2.62)$$

Bu tenglamalar Dekart koordinatasidagi *x, y, z* komponentalari uchun yozilgan. Dekart koordinatalari sistemasi sferik koordinatalar sistemasi bilan quyidagicha bog'langan:

$$\begin{aligned}x&=r\sin\theta\cos\varphi & r&=\sqrt{x^2+y^2+z^2}\\ y&=r\sin\theta\sin\varphi & \theta&=\arccos\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\\ z&=r\cos\theta & \varphi&=\mathrm{arctg}\frac{y}{x}\end{aligned} \qquad (2.63)$$

(2.62) tenglamalarni sferik koordinatalar sistemasida r,θ,φ komponentalari orqali yozish mumkin. Misol tariqasida impuls momenti operatorining $\hat{M}_x$ komponentasini sferik koordinatalar sistemasidagi ko'rinish keltirib chiqariladi.

Ma'lumki,

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial z}. \qquad (2.64)$$

Bu formulada $\frac{\partial}{\partial r},\frac{\partial}{\partial\theta}$ va $\frac{\partial}{\partial\varphi}$ lar sferik koordinata komponantalari bo'yicha olingan xususiy hosilalarni bildiradi. Agarda $r^2=x^2+y^2+z^2$ ekanligi hisobga olinsa,

$$\frac{\partial r}{\partial z}=\frac{z}{r}=\cos\theta \qquad (2.65)$$

bo'ladi. $\cos\theta=\frac{z}{r}$ tenglikdan foydalanilsa, yana bitta formulaga ega bo'linadi:

$$\frac{\partial\theta}{\partial z}=-\frac{\sin\theta}{r} \qquad (2.66)$$

va nihoyat

$$\frac{\partial\varphi}{\partial z}=0.$$

Shunday qilib (2.65) va (2.66) larni (2.64) qo'yilsa, quyidagi natijaga kelinadi.

$$\frac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}. \qquad (2.67)$$

Xuddi shunday usulni $\frac{\partial}{\partial y}$ hosila uchun qo'llanilsa,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial y}&=\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial y}=\\ &=\sin\varphi\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\end{aligned} \qquad (2.68)$$

ifoda hosil bo'ladi. Olingan (2.67) va (2.68) formulalarni (2.62) dagi birinchi formulaga olib borib qo'yilsa va (2.63) almashtirishlardan foydalanilsa, elementar algebraik hisoblashlardan so'ng ushbu natija olinadi:

tenglama hosil qilinadi va ψ_{lm} funksiyani $e^{im\varphi}$ ga proporsionalligini hisobga olinsa,

$$-i\hbar im\psi_{lm} = M_z\psi_{lm}$$

ifodaga kelinadi, ya'ni ψ_{lm} funksiya (2.89) tenglamani qanoatlantiradi va $\hat{M}_z$ operatorning xususiy qiymatlari

$$M_z = \hbar m, \qquad m = 0, \pm1, \pm2, ... \pm l \qquad (2.90)$$

ga teng bo'ladi, ya'ni hammasi bo'lib $(2l+1)$ ta har xil qiymatga ega bo'ladi.

Shunday qilib, l holatga to'g'ri kelgan impuls momentga mos bo'lgan energiya sathi $(2l+1)$ karrali aynigan bo'lib, bu aynishni, odatda, moment yo'nalishlari bo'yicha aynish deb ataladi, boshqacha aytganda, impuls momenti tanlangan z yo'nalish bo'yicha $(2l+1)$ ta xususiy qiymatga ega bo'lar ekan. (2.86) va (2.90) tengliklar mos holda impuls momenti kvadratining va impuls momentining z o'qiga proyeksiyasining xususiy qiymatlarining kvantlangan qiymatlarga ega ekanligini ko'rsatadi.

Biror tanlangan holatlarda $\mathbf{M}^2$ va M_z lar aniq qiymatlarni qabul qilsa, M_x va M_y proeksiyalari shu holatlarda aniq qiymatlarga ega emas. Haqiqatan ham, (2.81) to'lqin funksiyalari $\hat{M}_x$ va $\hat{M}_y$ operatorlarning xususiy fuksiyalari bo'la olmaydi. Bu natija, ikkinchi tomondan, $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ operatorlarning o'z-o'ziga kommutativ emasligidan ham kelib chiqadi.

2.9. Energiya operatori. Gamiltonian

$\hat{T}$ **kinetik energiya operatori.** Erkin zarracha kinetik energiyasining ko'rinishi fazoning bir jinsliligi va izotropliligi hamda Galileyning nisbiylik prinsipi bilan bog'liq bo'lgan umumiy talablar asosida aniqlanadi. Klassik mexanikada bu talablar zarracha kinetik energiyasining zarracha impulsiga kvadratik bog'liq bo'lshiga olib keladi:

$$T = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) \qquad (2.91)$$

bundagi o'zgarmas m zarracha massasi.

14. Masala. $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x}$ *funksiya orqali ifodalangan zarrachaning koordinatasi va impulsining o'rtacha qiymatlari aniqlansin.*

Yechish. *Ma'lumki,* $\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{x}\psi dx$ *va* $\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{p}\psi dx$ *formulalar orqali mos holda zarrachaning koordinatasi va impulsining o'rtacha qiymatlarini hisoblash mumkin.*

$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}}dx = a\sqrt{\pi}$ *integralni va* $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ *ekanligini hisobga olinsa*

$$\overline{x} = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\frac{x^2}{a^2}}dx = |A|^2\left\{xa\sqrt{\pi}\Big|_{-\infty}^{\infty} - a\sqrt{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dx\right\} = |A|^2\cdot 0 = 0$$

va

$$\overline{p} = \int\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dx = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}}\left(\hbar k_0 - \frac{i\hbar x}{a^2}\right)dx = \hbar k_0,$$

natijaga kelinadi, chunki $|A|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}$.

Demak zarracha koordinatasining o'rtacha qiymati $\overline{x} = 0$ *va zarracha impulsining o'rtacha qiymati* $\overline{p} = \hbar k_0$ *ga teng ekan.*

15. *Kvant mexanikasida sistemaning holati qaysi yol bilan beriladi?*

16. *Kvant mexanikasida qanday operatorlar:*

a) Koordinata;

b) Impuls;

d) dekart koordinatarida M_z impuls momentning proyeksiyasi;

c) sferik koordinatarida M_z impuls momentning proyeksiyasi;

f)sferik koordinatarida $\mathbf{M}^2$ impuls momentning kvadratiga mos keladilar?

III bob
VAQT O'TISHI BILAN HOLATLARNING O'ZGARISHI

3.1. Shredinger tenglamasi

Avvalgi boblarda, zarrachaning biror vaqt momentidagi to'lqin funksiyasi ma'lum bo'lgan holda, uning shu momentdagi har qanday fizik kattalikning ehtimollik taqsimotini aniqlash mumkin deb gap yuritgan edik. Lekin hozircha eng muhim narsani, ya'ni vaqt o'tishi bilan to'lqin funksiyasining o'zgarishini va shu bilan birga fizik kattalikning ehtimollik taqsimotlari vaqt davomida qanday o'zgarishini bilmaymiz. Aniqki, zarracha holatining vaqt bo'yicha o'zgarishi, unga ta'sir qiluvchi kuchga bog'liq bo'lishi kerak. Shuning uchun kvant mexanikasida to'lqin funksiyasini vaqt bo'yicha o'zgarishini boshqaruvchi, klassik mexanikadagi Nyuton qonunlaridek, dinamik qonun topish zarur. Shu sababli, klassik mexanikaning asosiy prinsiplarini yana bir marta eslab o'tish ortiqchalik qilmaydi. Klassik mexanikada zarrachaning holatlarini ta'riflovchi fizik kattaliklar ichida koordinata va impuls alohida rol o'ynaydi. Sababi, bu kattaliklarning biror vaqt momenti uchun berilishi, zarrachaning keyingi harakatini to'liq aniqlab beradi, bu esa bevosita Nyuton qonunlaridan kelib chiqadi:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} = -\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}.$$

Bu tenglamalardan ko'rinib turibdiki, $\mathbf{r}$ va $\mathbf{p}$ kattaliklarning vaqt bo'yicha o'zgarish tezligi shu kattaliklarning o'zi bilan aniqlanar ekan. Aynan shu bog'lanish tufayli zarrachaning turli vaqtdagi holatlari orasidagi sababiy bog'lanish mavjuddir. Yana shuni aytish kerakki, klassik mexanikada zarrachaning holati $\mathbf{r}$ va $\mathbf{p}$ kattaliklar bilan to'liq aniqlanadi, ya'ni bu ikki kattalikni biror momentda berilishi ularni istalgan momentda bir qiymatli aniqlash uchun yetarlidir. Shuning uchun ham barcha fizik kattaliklar shu asosiy kattaliklar orqali ifodalanadi.

Kvant mexanikasida esa zarrachaning holati to'lqin funksiya orqali to'liq aniqlanadi. Agar tabiatda haqiqatan ham zarrachaning turli momentdagi holatlari orasida sababiy bog'lanish mavjud bo'lsa, bu hol

chastota bilan vaqtga garmonik bog'liq bo'ladi. (3.19) tenglamaning chiziqliligidan uning umumiy $\psi(x,t)$ yechimini ixtiyoriy va doimiy amplitudalarga ega bo'lgan statsionar holatlarning superpozisiyasi sifatida tasvirlash mumkin:

$$\psi(x,t) = \Sigma c_n\psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}, \qquad (3.26)$$

bu tenglamadagi c_n amplitudalar $\psi(x,0)$ bo'shlang'ich funksiyalar orqali aniqlanadi va ψ_n funksiyalarning ortogonalligidan kelib chiqadi:

$$c_n = \int\psi(x,0)\psi_n^*(x)dx. \qquad (3.27)$$

3.4. Operatorlarni vaqt bo'yicha differensiallash

Shredinger tenglamasi asosida sodda qoidalarni o'rnatish imkoniyati tug'iladi, ular yordamida cheksiz kichik vaqt ichida u yoki bu mexanik kattalikning o'rtacha qiymatining o'zgarishini hisoblash mumkin. Ya'ni, L kattalikning $\overline{L}$ o'rtacha qiymatidan vaqt bo'yicha olingan $\frac{\partial\overline{L}}{\partial t}$ hosilani hisoblashimiz mumkin va o'rtacha qiymatlarning vaqt o'tishi bilan o'zgarishini ko'rib chiqishimiz mumkin. Ma'lumki, kvant mexanikasida fizik kattaliklarning o'rtacha qiymatlari ushbu formula yordamida aniqlanadi:

$$\overline{L}(t) = \int\psi^*(x,t)\hat{L}\psi(x,t)dx, \qquad (3.28)$$

bunda $\hat{L}$ – operator ko'rilayotgan fizik kattalik operatori bo'ladi.

O'rtacha qiymatning vaqt bo'yicha o'zgarish tezligi ifodasini yozaylik va (3.28) dan vaqt bo'yicha hosila olaylik:

$$\frac{\partial\overline{L}}{\partial t} = \int\psi^*\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}\psi dx + \int\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\hat{L}\psi dx + \int\psi^*\hat{L}\frac{\partial\psi}{\partial t}dx \qquad (3.29)$$

Birinchi had $\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}$ qiymatning o'rtacha qiymati bo'lib, $\hat{L}$ vaqtga oshkor bog'liq bo'lmasa $\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}$ nolga teng bo'ladi. Ikkinchi va uchinchi integrallarni Shredinger tenglamasidan foydalanib, soddaroq ko'rinishda yozish mumkin:

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

Kvant mexanikasida shu talablarning o‘zi kinetik energiya va impulsning xususiy qiymatlari o‘rtasida xuddi shunday munosabat o‘rnatadi. Erkin zarracha uchun bu xususiy qiymatlar bir vaqtning o‘zida aniq o‘lchanadigan va saqlanuvchi kattaliklardir. Lekin (2.91) munosabat energiya va impulsning barcha xususiy qiymatlarida o‘rinli bo‘lishi uchun u energiya va impuls operatorlari uchun ham o‘rinli bo‘lishi kerak:

$$\hat{T}=\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m}=\frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2+\hat{P}_z^2) \qquad (2.92)$$

Bu ifodadagi $\hat{P}_x,\hat{P}_y,\hat{P}_z$ impuls operatorlarining qiymatlarini qo‘yib, erkin harakatlanayotgan zarracha uchun kinetik energiya operatorining ko‘rinishi topiladi:

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad (2.93)$$

bunda ∇^2 – Laplas operatori va u Dekart koordinatalar sistemasida

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

ko‘rinishga ega. $\hat{T}$ operatorning $\psi(x,y,z)$ xususiy funksiyalarini aniqlash uchun

$$\hat{T}\psi=T\psi \qquad (2.94)$$

tenglama yoziladi. De-Broyl to‘lqinini ifodalovchi funksiya bu tenglamani qanoatlantiradi:

$$\psi_T(x,y,z)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(i\frac{p_x x+p_y y+p_z z}{\hbar}\right) \qquad (2.95)$$

Olingan $\psi_T(x,y,z)$ funksiya impuls operatorining ham xususiy funksiyasi ekanligi hisobga o‘linsa, T kinetik energiyani va p_x, p_y, p_z impulslarni bir vaqtning o‘zida o‘lchash mumkinligi kelib chiqadi.

$\hat{T}$ operatorni kvant mexanikasida ko‘p qo‘llaniladigan sferik koordinatalar sistemasida ham yozish mumkin. Bu sistemada ∇^2 operator

a) $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^2=\hat{A}^2+2\hat{A}\hat{B}+\hat{B}^2$;

b) $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\left(\hat{A}-\hat{B}\right)=\hat{A}^2-\hat{B}^2$.

11. Masala*. Statsionar holatidagi diskret spektrda joylashgan zarracha impuls proyeksiyasining o‘rtacha qiymati nolga tengligi isbotlansin.*

Eslatma*: $\hat{H}$ va x operatorlarining kommutatori orqali berilgan $\hat{p}_x$ operatori qiymatidan foydalanish kerak.*

Yechish*. Ma’lumki, $\hat{H}x-x\hat{H}=-\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$, shuning uchun*

$$\overline{p}_x=\int\psi^*\hat{p}_x\psi dx=-\frac{m}{i\hbar}\int\left(\psi^*\hat{H}x\psi-\psi^*x\hat{H}\psi\right)dx.$$

Gamiltonianning ermitligi hisobga olinsa integral ostidagi ifodani quyidagicha yozish mumkin:

$$x\psi H\psi^*-x\psi^*H\psi=0,\ chunki\ \hat{H}\psi^*=E\psi^*\ va\ \hat{H}\psi=E\psi.$$

12. *Quyidagi operatorlarning xususiy funksiyalari va xususiy qiymatlari topilsin:*

a) $-i\frac{d}{dx}$, *agar* $\psi(x)=\psi(x+a)$ *(bunda a - o‘zgarmas kattalik);*

b) $-\frac{d^2}{dx^2}$ *agar* $x=0$ *va* $x=l$ *da* $\psi=0$ *bo‘lsa.*

13. Masala*.* $\hat{\mathbf{M}}^2$ *impuls moment kvadrati operatorining* $Y(\theta,\varphi)=(\cos\theta+2\sin\theta\cos\varphi)$ *xususiy funksiyasiga mos kelgan* $\hat{M}^2$ *impuls moment kvadrati operatorining xususiy qiymati topilsin.*

Yechish*: Ma’lumki* $\hat{\mathbf{M}}^2Y=M^2Y$ *xususiy funksiyalar va xususiy qiymatlarni aniqlash munosabatdan foydalansak va*

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

ekanligini hisobga olinsa, ushbu operatorni $Y(\theta,\varphi)=(\cos\theta+2\sin\theta\cos\varphi)$ *funksiyaga ta’siri natijasida*

$$\hat{\mathbf{M}}^2Y=2\hbar^2\left(\cos\theta+2\sin\theta\cos\varphi\right)$$

kelib chiqadi. Demak, impuls moment kvadrati operatorining xususiy qiymati $M^2=2\hbar^2$ *ga teng bo‘ladi.*

to‘lqin funksiyasining vaqt bo‘yicha o‘zgarishi orqali ifodalanishi kerak. Matematik jihatdan $\psi(x,0)$ va $\psi(x,t)$ to‘lqin funksiyalari orasida bog‘lanishni aniqlash lozim va kvant mexanikasida ushbu bog‘lanish sababiyat prinsipining talabidan kelib chiqadi.

Berilgan ψ funksiyani $t=0$ vaqtga cheksiz kichik yaqin bo‘lgan Δt vaqt momentida ko‘rib chiqaylik. Uni quyidagi qator ko‘rinishida yozish mumkin:

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

Yuqoridagi fikrlarga asosan $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ kattalik $\psi(x,0)$ dan aniqlanishi kerak, ya’ni

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

$t=0$ vaqt momenti ixtiyoriy olingani sababli, quyidagi munosabatga kelinadi:

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\hat{L}(x,t)\,\psi(x,t) \qquad (3.1)$$

bunda $\hat{L}$ operator – vaqt bo‘yicha siljish operatori deyiladi va bu operator quyidagi postulatlar yordamida aniqlanadi.

1.Superpozitsiya prinsipiga asosan bu operator chiziqli operator bo‘lishi kerak.

2.$\hat{L}$ operatorning tarkibida vaqt bo‘yicha hosilalar va integrallar qatnashmasligi kerak .

3. $\hat{L}$ operatorda vaqt parametr sifatida qatnashishi kerak.

Yuqoridagi shartlarni qanoatlantiruvchi qidirilayotgan $\hat{L}$ operatorni to‘g‘ri tanlab olish uchun **p** impulsi aniq qiymatga ega bo‘lgan zarrachaning erkin harakatini ko‘rib chiqaylik. Bunday harakatning to‘lqin funksiyasi sifatida de-Broyl to‘lqin funksiyasini tanlab olish mumkin,

$$\psi(x,y,z,t)=N\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\left(Et-p_x x-p_y y-p_z z\right)}$$

Bunda

$$E=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)$$

ga teng.

ko‘rinishda bo‘lib, o‘zgaruvchilarni ajratish yo‘li orqali muhim yechimlarni olish mumkin. $\psi(x,t)$ funksiyada x va t o‘zgaruvchilar ajratiladi:

$$\psi(x,t)=\psi(x)f(t). \qquad (3.20)$$

(3.20) ifodani (3.19) tenglamaga qo‘yilsa

$$\frac{i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}}{f}=\frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)}=E$$

tenglama olinadi. Ushbu ifodadan quyidagi ikkita tenglama kelib chiqadi:

$$i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}=\mathrm{E}f(t) \qquad (3.21)$$

$$\hat{H}(x)\psi(x)=\mathrm{E}\psi(x) \qquad (3.22)$$

(3.21) tenglamaning yechimini oshkor ravishda quyidagicha yozish mumkin:

$$f(t)=C\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right). \qquad (3.23)$$

(3.22) tenglama esa Gamilton operatorining xususiy qiymatlarini aniqlab beruvchi tenglama hisoblanadi. (3.22) dagi $\psi(x)$ to‘lqin funksiyalari sistemaning shunday holatlariga mos keladiki, bu holatlarda energiya aniq qiymatlarni qabul qiladi. Aniq energiya qiymatlarga ega bo‘lgan holatlarni kvant mexanikasida statsionar holatlar deb yuritiladi. (3.20), (3.21) va (3.22) ifodalarga binoan statsionar holatlarning to‘lqin funksiyasini

$$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) \qquad (3.24)$$

ko‘rinishda yozish mumkin, bunda $\psi_n(x,t)$ yechim E_n energiyali holatga mos keluvchi to‘lqin funksiya. Yuqoridagi (3.22) tenglama esa statsionar holatlar uchun Shredinger tenglamasi deb yuritiladi.

(3.24) ifodadan quyidagi xulosa kelib chiqadi: aniq $E_n(\overline{(\Delta E)^2}=0)$ energiya qiymatiga ega bo‘lgan holatlar

$$\omega_n=\frac{E_n}{\hbar} \qquad (3.25)$$

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\nabla^2_{\theta,\varphi}}{r^2} \qquad (2.96)$$

ko‘rinishga ega. Endi (2.93) ga (2.96) qo‘yilsa va (2.73) hisobga olinsa

$$\hat{T}=\hat{T}_r+\frac{\hat{\mathbf{M}}^2}{2mr^2} \qquad (2.97)$$

ifoda olinadi, bunda $\hat{\mathbf{M}}^2$– ma’lum bo‘lgan impuls momenti kvadratining operatori, $\hat{T}_r$ esa:

$$\hat{T}_r=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \qquad (2.98)$$

ga teng bo'ladi. $\hat{T}_r$ operatorni radius-vektor bo‘yicha harakatlanuvchi kinetik energiya operatori sifatida va $\hat{\mathbf{M}}^2/2mr^2$ operatorni esa transversal bo‘yicha harakatlanuvchi kinetik energiya operatori deb qarash mumkin.

To‘la energiya operatori. Kvant mexanikasidagi muhim operatorlardan yana biri bu to‘la energiya operatori hisoblanadi va u $\hat{H}$ orqali belgilanadi. Klassik mexanika singari kvant mexanikasida ham to‘la energiya operatori kinetik va potensial energiya operatorlari yi’g‘indisidan iboratdir. Klassik mexanikada zarrachalarning o‘z-o‘ziga ta’siri zarrachalar koordinatalarining funksiyasi hisoblangan $U(x,y,z)$ o‘z-o‘ziga ta’sir potensial energiyasi orqali tavsiflanadi. Kvant mexanikasida ham zarrachalarning o‘z-o‘ziga ta’sirini tavsiflash uchun sistemani to‘la energiya operatori huddi shunday hadga ega bo‘ladi:

$$\hat{H}=\hat{T}+U(x,y,z) \qquad (2.99)$$

(2.99) ifodada birinchi hadni kinetik energiya operatori deb, ikkinchi hadni esa potensial energiya operatori deb qarash mumkin. Kvant mexanikasida zarrachaning to‘la energiyasini kinetik va potensial energiyalarning yig‘indisi sifatida qarash mumkin emas, chunki kinetik energiya impulsning funksiyasi bo‘lsa, potensial energiya esa koordinatalar funksiyasidir. Ma’lumki, aniq impulsga va aniq koordinataga ega bo‘ladigan kvant ansambllarning holatlari bir vaqtning o‘zida mavjud emas. Zarrachani alohida kinetik va potensial energiyalarini o‘lchash orqali, zarrachani to‘liq energiyasini o‘lchash

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\mathbf{P}}^2-\frac{e}{c}\mathbf{A}\hat{\mathbf{P}}+i\hbar\frac{e}{2mc}div\mathbf{A}+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2+eV+U \qquad (2.106)$$

gamiltonian olinadi. Shunday qilib, Gamilton funksiyasi (yoki energiya) operatori ikkita muhim xususiyat bilan bog‘liq, birinchisi, zarrachalarning tabiati bilan bog‘langan bo‘lsa, ikkinchisi esa, ularga ta’sir etuvchi kuchlarning tabiati bilan bog‘liqdir.

Kvant mexanikasi uchun (2.106) da olingan operator asosiy hisoblanadi, chunki kuzatilayotgan sistemaning barcha xususiyatlarining matematik ifodasini shu operator orqali hosil qilinadi.

2.10. II bobga oid savol va masalalar

1. *Kvant mexanikasida qo‘llaniladigan operatorlar qanday xususiyatlarga ega bo‘lishlari kerak?*

2. *Qaysi operatorlar kommutativ operatorlar deyiladi?*

3. *Operatorlarning xususiy funksiyalari va xususiy qiymatlarini aniqlab beruvchi tenglamani ko‘rsatib bering.*

4. *Ortonormallashgan funksiyalarning to‘liq sistemasi qanday hosil qilinadi?*

5. *ψ holatdagi birorta F fizik kattalikning o‘rtacha qiymatini ifodalovchi formulani keltirib chiqaring.*

6. *Quyidagi operator tenglamalarni tekshirib chiqing:*

a) $\frac{d}{dx}x=1+x\frac{d}{dx}$;

b) $x^2\frac{d}{dx}\frac{1}{x}=x\frac{d}{dx}-1$;

c) $\left(1+\frac{d}{dx}\right)^2=1+2\frac{d}{dx}+\frac{d^2}{dx^2}$.

7. $\frac{d^2}{dx^2}x^2$ *va* $\left(\frac{d}{dx}x\right)^2$ *operatorlarning* $\sin x$ *va* e^{2x} *funksiyalarga ta’sirining natijasi aniqlansin.*

8. *Agar* $\hat{A}$ *va* $\hat{B}$ *operatorlar ermit operatorlari bo‘lsa, u holda* $\hat{A}+\hat{B}$ *va* $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ *operatorlarning ermitligi ham ko‘rsatilsin.*

9. $\hat{M}_x,\hat{M}_y,\hat{M}_z$ *operatorlarning ermitligidan kelib chiqqan holda* $\hat{M}^2$ *operatorning ermitligi ko‘rsatilsin.*

10. *Agar* $\hat{A}$ *va* $\hat{B}$ *operatorlar o‘z-o‘ziga kommutativ operatorlari bo‘lsa, u holda quyidagi munosabatlar to‘g‘riligi isbotlansin.*

ψ funksiya uchun yozilgan ifoda quyidagi tenglamani qanoat-lantirishini bevosita tekshirish qiyin emas:

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

yoki

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

Bunda $\hat{H}$ operator sifatida erkin harakatlanuvchi zarrachaning energiya operatorini yoki gamiltonianini tushunish kerak:

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

Demak bu ifodadan erkin harakatni ifodalovchi holat uchun vaqt bo‘yicha siljish operatori

$$\hat{L}=\frac{1}{i\hbar}\hat{H} \qquad (3.2)$$

ko‘rinishida bo‘lishi kerak. Ushbu postulatni asos deb olgan holda to‘lqin funksiyasi uchun (3.1) tenglamani

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\hat{H}(x,t)\psi(x,t) \qquad (3.3)$$

ko‘rinishda ifodalash mumkin. Bu tenglama Shredinger tenglamasi deyiladi va kvant mehanikasi asoslarini tashkil qiluvchi tenglamalar qatoriga kiradi. Hosil bo‘lgan (3.3) tenglamadagi $\hat{H}$ operatorning qiymatini oshkor ravishda va tashqi maydonni hisobga olgan holda yozilganida, Shredinger tenglamasi

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+U(x,y,z,t)\psi \qquad (3.4)$$

ko‘rinishga keladi.

Shredinger tenglamasidagi $\hat{H}$ energiya operatori chiziqli operator bo‘lganligi sababli tenglamaning o‘zi ham chiziqli tenglama bo‘ladi. Bundan Shredinger tenglamasining yechimlari superpozitsiya prinsipiga bo‘ysunishi va shu sababli uning bir nechta yechimlarining yig‘indisidan tashkil topgan yechim ham tenglamani qanoatlantirishi kelib chiqadi. Ikkinchidan, Shredinger tenglamasida $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ hosilaning oldida i mavhum sonning mavjudligi katta ahamiyatga ega. Klassik

Olingan formulalarda ρ_m kattalik moddaning o‘rtacha zichligini, $\mathbf{j}_m$ esa modda tokining o‘rtacha zichligi ma’nosini bildiradi. (3.11) tenglamaga murojaat qilinsa, bu kattaliklar quyidagi uzluksizlik tenglamasiga bo‘ysunadi:

$$\frac{\partial\rho_m}{\partial t}+div\,\mathbf{j}_m=0 \qquad (3.15)$$

ya’ni, cheksiz kichik sohada massaning o‘zgarishi, shu sohani o‘rab olgan sirtga massa oqimining kirishi yoki chiqishi bilan bog‘langan.

Shunga o‘xshash $\mathbf{j}$ va w ni zarrachaning e zaryadiga ko‘paytirilsa, elektr zaryadining o‘rtacha zichligini va elektr tokining o‘rtacha zichligini olish mumkin, ya’ni

$$\rho_e=ew=e|\psi|^2, \qquad \mathbf{j}_e=\frac{ie\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi\right) \qquad (3.16)$$

Hosil bo‘lgan bu kattaliklar uchun ham uzluksizlik tenglamasi olinadi.

$$\frac{\partial\rho_e}{\partial t}+div\,\mathbf{j}_e=0 \qquad (3.17)$$

(3.15) va (3.17) tenglamalar kvant mexanikasida massa va zaryadning saqlanish qonunini ifodalaydi.

Zarrachaning erkin harakatini ko‘rib chiqaylik, bu hol uchun to‘lqin funksiyasini

$$\psi=Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-Et)}$$

yassi to‘lqin ko‘rinishida olinadi. (3.10) formuladan foydalanilsa,

$$\mathbf{j}=\frac{1}{m}\mathbf{p}|A|^2 \qquad (3.18)$$

natijaga kelinadi.

3.3. Statsionar holatlar

Tashqi o‘zgaruvchan maydonlar bo‘lmagan holda $\hat{H}$ gamiltonian vaqtga bog‘liq bo‘lmaydi va u to‘la energiya operatori bilan mos keladi. Bu holda (3.3) dagi Shredinger tenglamasi

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\hat{H}(x)\psi(x,t) \qquad (3.19)$$

mumkin emas. To‘la energiyani yaxlit, yagona kattalik sifatida bevosita o‘lchash zarur. Zarracha to‘la energiyasining qiymatlari $U(x,y,z)$ - potensial energiya ko‘rinishiga, ya’ni zarrachalarning turiga va zarrachalar harakat qilayotgan kuch maydoniga bog‘liq. Aynan shu qiymatlarni aniqlash kvant mexanikasining asosiy masalasini tashkil etadi.

Gamiltonian. Klassik fizikada impulslar va koordinatalar orqali ifodalangan to‘la energiyani Gamilton funksiyasi deyiladi. $\hat{T}$ kinetik energiya operatori kvant mexanikasida impuls operatorlari orqali berilgan, shuning uchun $\hat{H}$ operator

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(x,y,z) \tag{2.100}$$

ni Gamilton funksiyasining operatori yoki qisqacha qilib gamiltonian deyiladi.

Kvant mexanikasida gamiltonianni tuzishda ikkita holni ko‘rib chiqish kerak. Birinchi holda zarrachaga ta’sir etuvchi kuchlar zarrachaning tezligiga bog‘liq emas, demak **F** kuch zarracha koordinatasi hamda vaqtning funksiyasi bo‘lib, biror $U(x,y,z,t)$ fuksiyaning gradiyenti sifatida berilishi mumkin:

$$\mathbf{F}=-\nabla U(x,y,z,t) \tag{2.101}$$

Agarda ta’sir etuvchi kuchlar vaqtga bog‘liq bo‘lmasa, u holda $U(x,y,z)$ zarrachaning potensial energiyasining o‘zginasi. Bu holda Gamilton funksiyasi zarrachaning to‘la energiyasi bilan mos keladi va $T+U(x,y,z)$ ga teng. Umumiy holda esa Gamilton funksiyasi T kinetik energiya va U kuch finksiyasining yig‘indisidan iborat bo‘ladi, ya’ni $H=T+U(x,y,z,t)$ va bu holda potensial energiya bo‘lmaganligi uchun H ham sistemani to‘la energiyasi bo‘la olmaydi.

Endi ikkinchi holni ko‘rib chiqaylik, ya’ni ta’sir etuvchi kuchlar zarrachaning tezligiga bog‘liq bo‘lsin. Misol sifatida elektromagnit maydonda harakatlanayotgan zaryadli zarrachaning gamiltonianini ko‘rib chiqaylik. Klassik nazariyada elektromagnit maydonidagi zaryadli zarrachaning Gamilton funksiyasi

$$H=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+eV \tag{2.102}$$

ko‘rinishga ega. Bunda e – zarrachaning zaryadi, V–maydonning skalar potensiali, m – zarrachaning massasi, $\boldsymbol{p}$ – umumlashgan impuls bo‘lib, $\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}=m\mathbf{v}$ ga teng bo‘ladi. Bunda $\mathbf{A}$ – vektor potensial. Kvant mexanikasida gamiltonianni olish uchun, $\boldsymbol{p}$ vektor o‘rniga $\hat{\mathbf{P}}=-i\hbar\nabla$ impuls operator yoziladi va bu hol uchun gamiltonian quyidagicha bo‘ladi:

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{P}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+eV. \tag{2.103}$$

Agarda elektromagnit kuchlardan tashqari U funksiya bilan ifodalangan boshqa kuchlar ham mavjud bo‘lsa, u holda gamiltonianning umumiy ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{P}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+eV+U \tag{2.104}$$

(2.104) ifodadagi $\left(\hat{\mathbf{P}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2$ operator quyidagi ko‘rinishda ochib chiqiladi:

$$\left(\hat{\mathbf{P}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2=\left(\hat{P}_x-\frac{e}{c}A_x\right)^2+\left(\hat{P}_y-\frac{e}{c}A_y\right)^2+\left(\hat{P}_z-\frac{e}{c}A_z\right)^2. \tag{2.105}$$

Operatorlar ko‘paytmasining ta’rifiga asoslanib, (2.105) tenglikning o‘ng tomonidagi birinchi hadi hisoblaniladi:

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

Ma’lumki, Geyzenberg munosabatlari

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

ko‘rinishga ega, ulardan foydalanib, quyidagi ifoda hosil qilinadi:

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

(2.105) formuladagi qolgan ikki had uchun shunga o‘xshash hisoblashlarni bajarib, olingan natijalarni qo‘shgandan so‘ng

fizikada vaqt bo‘yicha birinchi tartibli, xususiy hosilali tenglamalarning yechimlari davriy emasligi aniq, chunki ular qaytmas jarayonlarni ifodalaydi: diffuziya hodisasini yoki issiqlik tarqalish hodisasini bunga misol qilib ko‘rsatish mumkin. Vaqt bo‘yicha birinchi tartibli, xususiy hosilali differensial Shredinger tenglamasida $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ ning oldida i mavhum sonning mavjudligi tufayli bu tenglama davriy yechimlarga ega bo‘ladi.

Shunday qilib, o‘z oldimizga qo‘yilgan masalani, ya’ni vaqt o‘tishi bilan to‘lqin funksiyasining o‘zgarishini va shu bilan birga fizik kattalikning ehtimollik taqsimotlari vaqt davomida qanday o‘zgarishini topish usuli aniqlandi. Ushbu usulning mohiyati olingan vaqtga bog‘liq Shredinger tenglamasini yechishdan iboratdir.

3.2. Ehtimollik oqimi va zichligi

Shredinger tenglamasidan foydalanib, zarrachalar sonini saqlanish qonunini ifodalovchi uzluksizlik tenglamasini keltirib chiqarish mumkin, ya’ni:

$$\frac{\partial w}{\partial t}+div\mathbf{j}=0 \tag{3.5}$$

bunda $w-(x,y,z)$ nuqtadagi zarrachalar sonining o‘rtacha zichligini, – $\mathbf{j}$– esa zarrachalar oqimining o‘rtacha zichligi bildiradi.

Bu tenglamani hosil qilish uchun (3.4) tenglamaning kompleks qo‘shma tenglamasi yoziladi:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*+U\psi^* \tag{3.6}$$

(3.4) tenglamani ψ^* ga, (3.6) tenglamani esa ψ ga ko‘paytirib va olingan natijalarni bir-biridan ayirsak, natijada quyidagi ifodaga kelinadi:

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right). \tag{3.7}$$

Hosil bo‘lgan tenglamani quyidagi ko‘rinishda yozish mumkin:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi\psi^*\right)=\frac{i\hbar}{2m}div\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right). \tag{3.8}$$

(3.8) tenglamada $\psi^*\psi$ ko‘paytma w ehtimollik zichligini bildiradi, ya’ni

$$w=\psi^*\psi. \tag{3.9}$$

Agar quyidagi belgilash kiritsak

$$\mathbf{j}=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi\right) \tag{3.10}$$

u holda (3.8) tenglamani

$$\frac{\partial w}{\partial t}+div\mathbf{j}=0 \tag{3.11}$$

ko‘rinishida yozish mumkin. Demak, $\mathbf{j}$ vektori ehtimollik oqimining zichligi bo‘ladi. Agarda (3.11) tenglamada $w=\psi^*\psi$ ni zarrachalarning o‘rtacha zichligi sifatida qaralsa, u holda $\mathbf{j}$ ni 1 sek da 1 sm^2 yuzadan o‘tadigan zarrachalarning o‘rtacha oqimi sifatida qarash mumkin. Shuning uchun, odatda (3.11) tenglamani zarrachalar sonini saqlanish qonuni ma’nosida talqin qilinadi. (3.11) tenglamani V chekli hajm bo‘yicha integrallab, so‘ngra Gauss teoremasidan foydalanib,

$$\frac{\partial}{\partial t}\int wdV=-\int div\mathbf{j}dV=-\int\mathbf{j}_n d\mathbf{S} \tag{3.12}$$

natija olinadi. (3.12) dagi oxirgi integral V hajmni chegaralab turuvchi S yuza bo‘yicha olinadi.

Agarda integral chegarasidagi hajm sifatida butun fazo olinadigan bo‘linsa, ya’ni $V\to\infty$ bo‘lsa, u holda fazoning cheksiz uzoqlikda joylashgan sirtlarida to‘lqin funksiyalari hamda oqim zichligining nolga tengligidan

$$\frac{d}{dt}\int wdV=\frac{d}{dt}\int\psi^*\psi dV=0 \tag{3.13}$$

natija olinadi. Demak, fazoning biror nuqtasida zarrachani to‘liq topilish ehtimolligi vaqtga bog‘liq bo‘lmaydi, shuning uchun ham zarrachalarning soni o‘zgarmaydi. Ikkinchidan (3.13) ifoda vaqt o‘tishi bilan to‘lqin funksiyasi normallashuvining o‘zgarmas ekanligini bildiradi.

Olingan $\mathbf{j}$ va w ni zarrachaning massasi m ga ko‘paytirilsa, quyidagi tengliklarga kelinadi:

$$\rho_m=mw=m|\psi|^2, \qquad \mathbf{j}_m=\frac{i\hbar}{2}\left(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi\right). \tag{3.14}$$

Olingan ifodalarni (3.29) tenglikka qo‘yilsa

$$\frac{d\bar{L}}{dt}=\frac{\partial\bar{L}}{\partial t}-\frac{1}{i\hbar}\int(\hat{H}^*\psi^*)(\hat{L}\psi)dx+\frac{1}{i\hbar}\int\psi^*(\hat{L}\hat{H}\psi)dx \qquad (3.30)$$

natija hosil bo‘ladi. Birinchi integralni $\hat{H}$ operatorning o‘zaro qo‘shmalik xossasidan, ya’ni quyidagi

$$\int u_1^*(x)Lu_2(x)dx=\int u_2(x)\hat{L}^*u^*{}_1(x)dx$$

ayniyatdan foydalangan holda boshqacha yozish mumkin. Ushbu tenglikda $\psi^*=u_1^*,\ \hat{L}\psi=u_2$ almashtirish bajarilishi orqali quyidagicha yozish mumkin:

$$\int(\hat{H}^*\psi^*)(\hat{L}\psi)dx=\int(\hat{H}^*u_1^*)u_2dx=\int u_2\hat{H}^*u_1^*dx=\int u_1^*\hat{H}u_2dx=\int\psi^*(\hat{H}\hat{L}\psi)dx$$

Hosil bo‘lgan ifodani (3.30) ga olib borib qo‘ysak, quyidagi ko‘rinishdagi natijani olinadi:

$$\frac{d\bar{L}}{dt}=\frac{\partial\bar{L}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}\int\psi^*(\hat{L}\hat{H}-\hat{H}\hat{L})\psi dx \qquad (3.31)$$

Agarda quyidagicha belgilash kiritilsa:

$$[\hat{H},\hat{L}]=\frac{1}{i\hbar}(\hat{L}\hat{H}-\hat{H}\hat{L}), \qquad (3.32)$$

usbu tenglik hosil qilinadi:

$$\frac{d\bar{L}}{dt}=\frac{\partial\bar{L}}{\partial t}+\overline{[\hat{H},\hat{L}]}. \qquad (3.33)$$

Kvant mexanikasida (3.32) operatorni Puasson kvant qavslari deyiladi. Demak, L kattalikning $\bar{L}$ o‘rtacha qiymatidan vaqt bo‘yicha olingan hosila $\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}+[\hat{H},\hat{L}]$operator orqali ifodalangan qandaydir kattalikning o‘rtacha qiymatini beradi. Shuning uchun $\hat{L}$ operator bilan ifodalangan L kattalikning $\frac{dL}{dt}$ vaqt bo‘yicha olingan hosilasini $\frac{d\hat{L}}{dt}$ operatori sifatida olish kerak, ya’ni:

$$\frac{d\hat{L}}{dt}=\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}+[\hat{H},\hat{L}]. \qquad (3.34)$$

Operatorga bunday ta’rif berilishi quyidagi ifodaga olib keladi:

$$\frac{d}{dt}(\bar{L})=\frac{d\bar{L}}{dt}=\int\psi^*\frac{d\hat{L}}{dt}\psi dx \qquad (3.35)$$

Bu formulaga kirgan $\hat{\mathbf{M}}^2$ operatori va bu operator tarkibidagi $\hat{M}_x,\hat{M}_y,\hat{M}_z$ operatorning proyeksiyalari faqat θ va φ burchaklarga bog‘liqligini eslaylik, shu tufayli ular **r** ga bog‘liq bo‘lgan funksiyalarga ta’sir etmaydi. Ikkinchi tomondan (3.57) formulaga asosan $\hat{\mathbf{M}}^2$ operator $\hat{M}_x,\hat{M}_y,\hat{M}_z$ operatorlar bilan kommutativ. Shuning uchun $\hat{\mathbf{M}}^2,\hat{M}_x,\hat{M}_y,\hat{M}_z$ operatorlar $\hat{\mathbf{H}}$ operator bilan kommutativ bo‘ladi. Demak,

$$\left[\hat{\mathbf{H}},\hat{\mathbf{M}}^2\right]=0 \qquad \frac{d\hat{\mathbf{M}}^2}{dt}=0 \qquad (3.59)$$

va

$$\left.\begin{aligned}&\left[H,\hat{M}_x\right]=\left[H,\hat{M}_y\right]=\left[H,\hat{M}_z\right]=0\\&\frac{d\hat{M}_x}{dt}=\frac{d\hat{M}_y}{dt}=\frac{d\hat{M}_z}{dt}=0\end{aligned}\right\} \qquad (3.60)$$

Shunday qilib, agar zarracha markaziy simmetrik maydonda harakatlanayotgan bo‘lsa, fazoda markazdan chiquvchi hamma yo‘nalishlar teng kuchli bo‘ladi va shuning uchun bu maydonda joylashgan zarracha harakatining maydon markaziga nisbatan impuls momenti saqlanadi. Umuman olganda, tashqi maydonda joylashgan sistemaning impuls momenti saqlanmaydi.

Juftlikni saqlanish qonuni. Yuqorida qayd etilgan saqlanish qonunlari, ya’ni energiya, impuls va impuls momentining saqlanish qonunlari, klassik mexanikaga xos bo‘lgan saqlanish qonunlarining kvant mexanikasidagi ekvivalenti deb qarash mumkin. Lekin, kvant mexanikasida o‘ziga xos bo‘lgan saqlanish qonunlari ham mavjud va bu qonunlar klassik mexanikada mavjud emas. Shunday qonunlardan biri umumiy xarakterga ega bo‘lib, fazoning xossalari bilan chambarchas bog‘langandir. Boshqacha aytganda, koordinata o‘qlarini parallel ko‘chirish va burulish bilan bir qatorda yopiq sistema uchun gamiltonianni o‘zgartirmay qoldiruvchi yana bir almashtirish mavjud. Demak, yopiq sistemaning gamiltoniani koordinatalari quyidagi almashtirishlarga nisbatan o‘zgarmasligi kerak:

1. sistemani ixtiyoriy masofaga parallel ko‘chirganda;–
2. sistemani bir butunligicha ixtiyoriy o‘q atrofida ixtiyoriy burchakka burganda;

3. barcha koordinatalarning ishoralarini baravariga o‘zgartirishdan, ya’ni hamma koordinata o‘qlarining yo‘nalishlarini teskari ishoraga o‘zgartirishdan iborat bo‘ladi. Bunday almashtirishni inversiya deb ataluvchi almashtirish deyiladi.

Birinchi ikkita almashtirishlar bilan impuls va impuls momentinig saqlanish qonunlari bog‘langandir. Kvant mexanikasida inversiya almashtirishlari bilan ya’na bir saqlanish qonuni bog‘langan. Klassik mexanikada Gamilton funsiyasining inversiyaga nisbatan invariantligi ma’lum. Kvant mexanikasida esa ahvol batamom boshqacha bo‘ladi. Koordinatalar ishorasini o‘zgartirishni ifodalovchi tegishli $\hat{I}$ inversiya operatorini kiritaylik, ya’ni

$$\hat{I}\psi(\mathbf{r},t)=\alpha\psi(-\mathbf{r},t) \qquad (3.61)$$

bunda α–qandaydir doimiydir. Inversiya operatorini ikki marotaba ketma-ket funksiyaga ta’sir qilsak, dastlabki holatga kelinadi, ya’ni funksiya argumenti umuman o‘zgarmaydi. Boshqacha aytganda

$$\hat{I}^2\psi(\mathbf{r},t)=\hat{I}(\hat{I}\psi(\mathbf{r},t))=\hat{I}(\alpha\psi(-\mathbf{r},t))=\alpha^2\psi(\mathbf{r},t)$$

hosil bo‘ladi, ya’ni $\alpha^2=1$, demak,

$$\alpha=\pm1. \qquad (3.62)$$

Shunday qilib, ushbu operator ta’sirida inversiya operatorning xususiy funksiyalari umuman o‘zgarmaydi, yoki ularning faqat ishorasini o‘zgartiradi. Birinchi holda

$$\hat{I}\psi(\mathbf{r},t)=\psi(-\mathbf{r},t)$$

bo‘lganida, zarrachalar musbat ichki juftlikga ega bo‘ladi. Ikkinchi holda

$$\hat{I}\psi(\mathbf{r},t)=-\psi(-\mathbf{r},t)$$

bo‘lganida zarrachalar manfiy ichki juftlikka ega bo‘ladi.

$\hat{H}$ Gamilton operatorining inversiyaga nisbatan invariantligi juftlikning saqlanish qonunini ifodalaydi, ya’ni $\hat{H}$ va $\hat{I}$ operatorlar o‘zaro kommutativ operatorlar bo‘ladi, ya’ni

$$\hat{I}\hat{H}=\hat{H}\hat{I}$$

Shunday qilib, agar yopiq sistema holati ma’lum musbat yoki manfiy juftlikka ega bo‘lsa, u holda bu juftlik vaqt o‘tishi bilan saqlanadi.

Dekart koordinatalar sistemasidagi inversiya almashtirishi $x\to-x,y\to-y,z\to-z$ ning o‘rniga sferik koordinatalar sistemasida

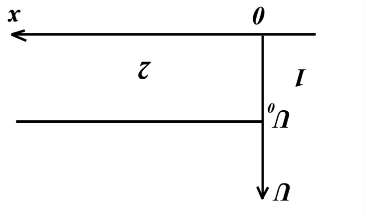
Klassik mexanika nuqtai nazaridan potensial o‘rada harakatlanuvchi zarracha teng ehtimollik bilan o‘raning ixtiyoriy nuqtasida joylashishi mumkin (6-rasmdagi to‘g‘ri chiziq). Kvant sonlarining katta qiymatlarida kvant ehtimollik zichligi taqsimoti klassik holdagi qiymatiga o‘tadi. Bu (4.7) ifodadagi garmonik funksiya kvadratining (0, *l*) oraliqdagi integrali katta *n* larda, aniqrog‘i $n\to\infty$ da 1/2 qiymatga yaqinlashishi bilan bog‘liq.

Kvant mexanikasi nuqtayi nazaridan esa quyidagi umumiy xarakterga ega bo‘lgan natijalarga kelinadi:

1) potensial o‘rada harakatlanuvchi zarrachaning energiyasi diskret qiymatlarni qabul qiladi;
2) asosiy holatda ham, ya’ni $E=E_1$ da zarracha to‘liq tinch holatda bo‘lmaydi;
3) harakat sodir bo‘layotgan kichik sohalarda va zarrachalarning massasi kichik bo‘lganida energetik sathlarning diskret harakteri namoyon bo‘ladi;
4) kvant sonlarining katta qiymatlarida kvant mexanikasi munosabatlari klassik fizika formulalariga o‘tadi.

4.2. Potensial to‘siqdan o‘tish va qaytish

Zarrachaning bir o‘lchovli harakatining muhim xususiyatlaridan biri uning potensial to‘siqdan o‘tishidir. Bu holda zarrachaga ta’sir etuvchi kuchlar fazoning biror bir cheklangan sohasidagina ta’sir etadi. Ushbu sohadan tashqarida esa zarracha erkin harakatlanadi deb qarash mumkin. Oddiy ko‘rinishdagi to‘siq sifatida maydondagi zarrachaning harakatini o‘rganish kvant mexanikasining bir qator muhim va prinsipial jihatdan yangi xossalarni keltirib chiqaradi.



7-rasm. To‘g‘ri burchakli cheksiz uzunlikdagi bir o‘lchamli potensial to‘siq.

Dastlab 7-rasmda tasvirlangan to‘g‘ri burchakli cheksiz uzunlikdagi bir o‘lchamli potensial to‘siqdan zarrachaning o‘tishi tekshirib chiqiladi.

Zarrachaning *U(x)* potensial energiyasi *x* o‘qining $x>0$ sohasida ya’ni, o‘rtacha qiymatdan vaqt bo‘yicha olingan hosila vaqt bo‘yicha hosilaning o‘rtacha qiymatiga tengdir. Agarda L kattalik oshkor ravishda vaqtga bog‘liq bo‘lmasa, u holda (3.33) va (3.34) formulalar ancha soddalashadi, ya’ni

$$\frac{d\overline{L}}{dt} = \overline{[\hat{H},\hat{L}]} \qquad (3.36)$$

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \left[\hat{H},\hat{L}\right] \qquad (3.37)$$

natija olinadi.

3.5. Kvant mexanikasida harakat tenglamalari

Ushbu paragrafda koordinata va impuls o‘rtacha qiymatlarining vaqt bo‘yicha hosilalarini hisoblab, bu kattaliklarning vaqt bo‘yicha o‘zgarish qonunlar keltirib chiqariladi. Impuls va koordinatalar vaqtga oshkor ravishda bog‘liq bo‘lmagan kattaliklardir. Shuning uchun (3.37) ga asosan , ushbu kattaliklarning vaqt bo‘yicha o‘zgarishi Puassonning kvant qavslari orqali ifodalanadi, ya’ni ushbu kattaliklarning operatorlari va qaralayotgan mexanik sistemaning gamiltoniani orqali ifodalanadi. Umuman olinganda, gamiltonian shu operatorlar va vaqtning funksiyasi bo‘ladi:

$$\hat{H} = \hat{H}(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z, \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, t) \qquad (3.38)$$

va (3.38) dagi gamiltonianni (3.37) ga qo‘yilsa izlanayotgan tenglamalarni operator shaklida yozish mumkin:

$$\frac{d\hat{X}}{dt} = [\hat{H},\hat{X}]\ , \qquad (3.39)$$

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = [\hat{H},\hat{P}_x]. \qquad (3.39')$$

Hosil bo‘lgan operator shaklidagi tenglamalar klassik mexanikadagi Gamilton tenglamalariga mos bo‘ladi va Gamiltonning kvant tenglamalari deyiladi. Klassik mexanikada saqlanish qonunlari yoki harakat tenglamalarining integrallari bilan tanishib chiqqan edik. Ma’lumki, harakat tenglamalari deganda koordinata bilan ularining vaqt bo‘yicha olingan birinchi tartibli hosilalari orasidagi shunday munosabatlar tushuniladiki, bu munosabatlar butun harakat davomida

$$\hat{M}_y\hat{M}_x = y\hat{p}_x z\hat{p}_z - yx\hat{p}_z^2 - z^2\hat{p}_x\hat{p}_y + x\hat{p}_y\hat{p}_z z$$

teng bo‘ladi. Birinchi tenglikdan ikkinchisi ayirilsa

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

natija olinadi. Endi (2.57’’) ifodadan foydalanilsa

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

hosil bo‘ladi. $x,\ y,\ z$ koordinatalarni siklik ravishda o‘rinlari almashtirilsa, yana ikkita tenglikni hosil qilish mumkin. Shunday qilib, impuls momenti proyeksiyalarining operatorlari uchun uchta o‘rin almashtirish qoidalarini keltirib chiqarish mumkin:

$$\begin{aligned}
\hat{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y &= i\hbar\hat{M}_x,\\
\hat{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z &= i\hbar\hat{M}_y,\\
\hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x &= i\hbar\hat{M}_z.
\end{aligned} \qquad (3.56)$$

Demak, yuqoridagi o‘rin almashtirish qoidalardan quyidagi natija kelib chiqadi: zarrachaning $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ impuls momenti proyeksiyalari operatorlari antikommutativ bo‘ladi, shuning uchun bir vaqtning o‘zida ular aniq qiymatga ega bo‘la olmaydi. Lekin $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ operatorlari $\hat{\mathbf{M}}^2$ impuls momentining kvadrati operatori bilan o‘zaro kommutativ bo‘lishadi, ya’ni quyidagi munosabatlar o‘rinlidir:

$$\begin{aligned}
\hat{M}_x\hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{\mathbf{M}}^2\hat{M}_x &= 0,\\
\hat{M}_y\hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{\mathbf{M}}^2\hat{M}_y &= 0,\\
\hat{M}_z\hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{\mathbf{M}}^2\hat{M}_z &= 0.
\end{aligned} \qquad (3.57)$$

Demak, (3.57) ifodalar harakat miqdori momenti kvadrati va shu impuls momenti proyeksiyalaridan birortasi bir vaqtning o‘zida aniq qiymatlarni qabul qila olishini korsatadi.

Endi zarrachaning markaziy kuch maydonidagi harakatini tekshirib chiqaylik. Markaziy kuch maydonida impulsning momenti harakat integralli bo‘ladi, chunki markaziy kuch maydonida fazoning izotropligi saqlanib qoladi. Ma’lumki, bu holda, ya’ni markaziy kuch maydonida, U potensial energiya faqat kuch markazidagi masofaning funksiyasidir, $U=U(r)$, bu $\hat{\mathbf{H}}$ gamiltonianning ko‘rinishini quyidagicha yozish mumkin:

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{T}}_r + \frac{\hat{\mathbf{M}}^2}{2mr^2} + U(\mathbf{r}). \qquad (3.58)$$

$$z \to z, \theta \to \pi - \theta, \varphi \to \varphi + \pi) \qquad (3.63)$$

almashtirish olinadi. Koordinatalarning bunday almashtirishlarida θ burchakka bog‘liq bo‘lgan zarrachaning muayyan impuls momentiga ega bo‘lgan to‘lqin funksiyasi $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ sferik funksiya orqali beriladi. Berilgan (3.63) inversiya almashtirishlarida

$$e^{im\varphi} \to e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m e^{im\varphi}$$

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) \to P_l^{|m|}(-\cos\theta) = (-1)^{m+l} P_l^{|m|}(\cos\theta)$$

ga ega bo‘linadi. Shunday qilib, sferik funksiya $(-1)^l$ songa ko‘payadi, va

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) \to (-1)^l Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (3.64)$$

ga o‘tadi, ya’ni berilgan l kvant sonidagi holat juftligi

$$\alpha = (-1)^l$$

bo‘ladi. Yuqoridagi ifodalardan ravshanki, holat juftligi m kvant soniga bog‘liq emas, balki faqat l kvant soniga bog‘liq bo‘lar ekan.

Demak, $(-1)^l = +1$ ($l-$juft) bo‘lganida holatlar juft, yoki musbat juftlikka ega bo‘lgan holatlar deyiladi, agar $(-1)^l = -1$ ($l-$toq) bo‘lganida holatlar toq holatlarda bo‘lib, manfiy juftlikga ega bo‘lishadi.

3.7. III bobga oid savol va masalalar

1. *Vaqt bo‘yicha holatlarning o‘zgarishi qaysi tenglama orqali ifodalanadi?*

2. *Elektromagnit maydonda harakatlanuvchi zarracha uchun Shredinger tenglamasini ko‘rinishi qanday bo‘ladi?*

3. *Stasionar holatidagi to‘lqin funksiyasining vaqtga bog‘liqligi qanday ko‘rinishda bo‘ladi?*

4. Masala: $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$ *tenglamaning ikkita yechimlari*

$$\Psi_1 = \psi_1 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_1 t\right) va\, \Psi_2 = \psi_2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_2 t\right)$$ *manjud bo‘lsin,*

bunda

$E_1 \neq E_2$ *bo‘lsin.* $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$ *chiziqli kombinatsiya berilgan tenglamaning yechimi bo‘la oladimi?*

Shunday qilib, cheksiz chuqur potensial o‘radagi zarrachaning energiya sathlari hisoblash masalasini osonlik bilan oxirigacha yetkazish mumkin.

Endi cheksiz chuqur potensial o‘ra ichida to‘lqin funksiya ko‘rinishini aniqlanadi. (4.3) formulaga va boshlang‘ich shartlarga asosan n – energetik sathga tegishli bo‘lgan to‘lqin funksiyasining ko‘rinishi

$$\psi_n = A_n \sin\frac{\pi n}{l}x \qquad (4.7)$$

bo‘ladi. A_n doimiyni normallashtirish sharti:

$$\int_0^l |\psi_n|^2 dx = 1$$

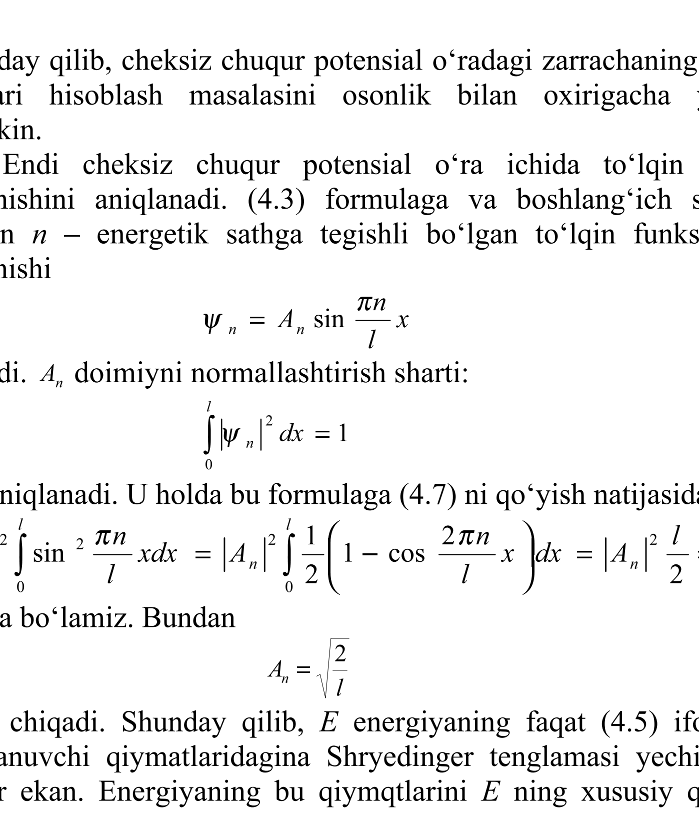
dan aniqlanadi. U holda bu formulaga (4.7) ni qo‘yish natijasida

$$|A_n|^2 \int_0^l \sin^2\frac{\pi n}{l}x dx = |A_n|^2 \int_0^l \frac{1}{2}\left(1 - \cos\frac{2\pi n}{l}x\right)dx = |A_n|^2 \frac{l}{2} = 1$$

ga ega bo‘lamiz. Bundan

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \qquad (4.8)$$

kelib chiqadi. Shunday qilib, E energiyaning faqat (4.5) ifoda bilan aniqlanuvchi qiymatlaridagina Shryedinger tenglamasi yechimga ega bo‘lar ekan. Energiyaning bu qiymqtlarini E ning xususiy qiymatlari deb, tenglamaning ularga mos kelgan (4.7) yechimlarni esa masalaning xususiy funksiyalari deb ataladi. Turli energetik holatlar uchun potensial o‘radagi har xil nuqtalarda zarrachaning topilish ehtomollik zichligi 6-rasmda tasvirlangan.



6-rasm. Potensial o‘ra ichidagi turli nuqtalarda zarrachaning topilish ehtimollik zichligi.

o‘z qiymatlarini o‘zgartirmaydi. Harakat tenglamalarining birinchi integrallari tezliklar va impulslar orasidagi munosabatlarini o‘rnatadi, ikkinchi guruh integrallari esa impulsning vaqt bo‘yicha o‘zgarish qonunlarini ifodalaydi. Kvant mexanikasida xuddi shunday ma’noni Gamiltonning kvant tenglamalari beradi. Yuqoridagi fikrlarni tasdiqlash uchun Puassonning qavslarini oshkor ravishda ochib chiqish lozim. Agar magnit kuchlari hisobga olinmasa, Gamiltonian quyidagi ko‘rinishga ega bo‘ladi:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) + U(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}, t). \qquad (3.40)$$

To‘lqin funksiyasini zarrachaning x, y, z koordinata va t vaqtning funksiyasi sifatida qaraladi, operatorlarni quyidagicha yozish mumkin:

$$\hat{X} = x, \quad \hat{Y} = y, \quad \hat{Z} = z \qquad (3.41)$$

$$\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \qquad (3.42)$$

Endi (3.40) va (3.41) formulalarni (3.39) ga qo‘yib $\frac{d\hat{X}}{dt}$ hisoblanadi:

$$\frac{d\hat{X}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left(\hat{X}\hat{H} - \hat{H}\hat{X}\right) = \frac{1}{2mi\hbar}\left(\hat{X}\hat{P}_x^2 - \hat{P}_x^2\hat{X}\right) \qquad (3.43)$$

natijaga kelinadi, chunki $\hat{X}$ operator $\hat{P}_y$, $\hat{P}_z$ va $U(x,y,z,t)$ operatorlar bilan kommutativdir. Agarda $\hat{X}$ va $\hat{P}_x$ operatorlarining o‘rin almashtirish qoydasi (2.57) dan foydalanilsa

$$\hat{P}_x^2\hat{X} = \hat{P}_x\left(\hat{P}_x\hat{X}\right) = \hat{P}_x\left(\hat{X}\hat{P}_x - i\hbar\right) = \left(\hat{P}_x\hat{X}\right)\hat{P}_x - i\hbar\hat{P}_x =$$
$$= \left(\hat{X}\hat{P}_x - i\hbar\right)\hat{P}_x - i\hbar\hat{P}_x = \hat{X}\hat{P}_x^2 - 2i\hbar\hat{P}_x \qquad (3.44)$$

ifodaga kelinadi va buni (3.43) ga qo‘yilsa

$$[\hat{H}, \hat{X}] = \frac{1}{m}\hat{P}_x \qquad (3.45)$$

natijaga kelinadi. Qolgan y va z koordinatalar uchun shunga o‘xshash natijani o‘lish mumkin va

$$\frac{d\hat{X}}{dt} = \frac{1}{m}\hat{P}_x, \quad \frac{d\hat{Y}}{dt} = \frac{1}{m}\hat{P}_y, \quad \frac{d\hat{Z}}{dt} = \frac{1}{m}\hat{P}_z$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. Impulsning saqlanish qonuni keltirib chiqarish uchun (3.39’) formuladan foydalaniladi va

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = [\hat{H}, \hat{P}_x] = 0 \qquad (3.54)$$

ekanligidan quyidagi natijaga kelinadi:

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt} = 0. \qquad (3.55)$$

Huddi shunday impuls operatorining boshqa komponentalari uchun ham quyidagi natijalarini olish mumkin:

$$\frac{d\hat{P}_y}{dt} = 0, \; \frac{d\hat{P}_z}{dt} = 0. \qquad (3.55’)$$

(3.55) va (3.55’) ifodalarni umumiy holda quyidagi vektor ko‘rinishda yozish mumkin:

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} = 0. \qquad (3.55’’)$$

Demak, kvant mexanikasida zarrachaning impulsi saqlanuvchi kattalik bo‘ladi va (3.55’’) formula kvant mexanikasidagi impuls saqlanish qonunini ifodalaydi.

Impuls momentining saqlanish qonuni. Impulsning saqlanish qonunini ifodalanilganda, fazoning bir jinsligidan foydalanilgan edi, fazo bir jinslilik bilan bir qatorda izotroplik xossasiga ham egadir, ya’ni fazoning barcha yo‘nalishlari o‘zaro teng kuchli bo‘ladi. (2.61) formuladan ma’lumki, kvant mexanikasida impuls momenti operatori

$$\hat{\mathbf{M}} = [\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}]$$

ga teng. Impuls moment proeksiyalari uchun o‘rin almashtirish qoidalarini keltirib chiqaraylik. Avvalo shu narsaga e’tiborni qaratish lozimki, koordinataning turli o‘qlariga bo‘lgan impuls momenti proeksiyalarining operatorlari o‘zaro kommutativ bo‘lmaydi. Masalan, $\hat{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x$ kommutatorni hisoblab chiqaylik, M_x va M_y larning qiymatlarini (2.62) dan olinsa, u holda

$$\hat{M}_x\hat{M}_y = \left(\hat{p}_z y - \hat{p}_y z\right)\;\left(\hat{p}_x z - \hat{p}_z x\right) =$$
$$= \hat{p}_z y\hat{p}_x z - \hat{p}_z y\hat{p}_z x - \hat{p}_y z\hat{p}_x z + \hat{p}_y z\hat{p}_z x =$$
$$= y\hat{p}_x\hat{p}_z z - yx\hat{p}_z^2 - z^2\hat{p}_x\hat{p}_y + x\hat{p}_y z\hat{p}_z$$

ga ega bo‘linadi. Ikkinchi tomondan

bunda $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ga teng.

To‘lqin tenglama ko‘rinishidagi (4.2) tenglamaning umumiy yechimi ham turg‘un to‘lqin xarakteriga ega bo‘ladi va quyidagi ko‘rinishga ega:

$$\psi = A\sin(kx + \alpha). \qquad (4.3)$$

(4.3) tenglamadagi noma’lum bo‘lgan α va A kattaliklar aniqlanadi. (4.1) dagi boshlang‘ich shartlarga asosan $x=0$ nuqtada $\psi=0$ ligidan $\alpha=0$ ekanligi kelib chiqadi. (4.1) dagi ikkinchi shartga binoan $\psi(l)=0$ ligidan

$$kl = \pi n \qquad (4.4)$$

shart kelib chiqadi, bunda n noldan katta bo‘lgan butun son. Keyinchalik bu n ni kvant soni deyiladi. $n=0$ bo‘lganidaψ to‘lqin funksiyasining nolga tengligi kelib chiqadi, bu esa butun sohada zarrachaning yo‘qligini bildiradi. Olingan k ning ifodasini bilgan holda va (4.4) munosabatdan foydalanib, zarrachaning qabul qilishi mumkin bo‘lgan barcha energetik qiymatlarini aniqlab olish mumkin, ya’ni:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \qquad (4.5)$$

formulaga ega bo‘linadi. (4.5) formuladan ko‘rinib turibdiki, zarrachaning energiyasi (4.2) tenglamaning ma’lum diskret xususiy qiymatlariga teng bo‘lgan qiymatlar qabul qila olar ekan, boshqacha aytganda, Shredinger tenglamasi faqat shunday yechimlarga ega bo‘ladiki, bu yechimlar ma’lum diskret qiymatlarni qabul qila olgandagina (4.2) tenglama chegaraviy shartlarini qanoatlantiradi. Shunday qilib, cheksiz chuqur potensial o‘radagi zarrachaning energiyasi diskret qiymatlarni qabul qiladi, ya’ni energiya kvantlangan bo‘ladi. Energiyaning diskretligi o‘z - o‘zidan tabiiy ravishda kelib chiqadi. Zarracha energiyasining bu qiymatlari ***energetik sathlar*** deb ataladi. Zarrachani qabul qila oladigan eng kichik energiyali holati asosiy holat deyiladi, qolgan yuqoriroq energiyali holatlar esa ***uyg‘ongan holatlar*** deyiladi. Cheksiz chuqur potensial o‘radagi zarrachaning asosiy holatdagi energiyasi (4.5) formula orqali n=1 ga teng bo‘lgan holda kelib chiqadi:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}. \qquad (4.6)$$

Yechish. *Berilgan* $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$ *chiziqli kombinatsiya* $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$ *tenglamaning yechimi bo‘la oladi, chunki* $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = c_1\left(i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\right) + c_2\left(i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right)$ *va* $\hat{H}\Psi(x,t) = c_1\hat{H}\Psi_1(x,t) + c_2\hat{H}\Psi_2(x,t)$ *bo‘ladi. Hosil bo‘lgan bu ifodadan* $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$ *natija kelib chiqadi.*

5. *Puasson kvant qavsi klassik mexanikadagi qavslar bilan qanday farq qiladi?*

6. *L kattalikning harakat integrali bo‘lish shartini yozing.*

7. *Vaqtga oshkor bog‘liq bo‘lmagan harakat integrallari uchun Puasson qavslari qanday bo‘ladi?*

8. *Gamiltonian qachon to‘la energiya operatoriga mos keladi?*

9. *Harakat integrali kuch maydoniga bog‘liqmi?*

10. *Impuls saqlanishini ifodalaydigan formulani yozib ko‘rsating.*

11. *Tashqi maydonda joylashgan sistemaning impuls momenti saqlanadimi? Nima uchun?*

12. *Klassik mexanikadagi saqlanish qonunlaridan farq qiluvchi kvant mexanikasidagi saqlanish qonunlariga misollar keltiring.*

13. *Markaziy kuch maydonida qaysi kattalik harakat integralli bo‘ladi va bunda fazoning izotropligi saqlanadimi?*

14. *Impuls saqlanish qonuni fazoning qaysi xususiyatidan kelib chiqadi? Energiya va impuls momentining saqlanish qonunichi?*

15. *Siljish operatori qaysi postulatlar asosida aniqlanadi?*

natijaga kelinadi, ya'ni tezlik operatori zarrachaning massasiga bo'lingan impuls operatoriga tengdir. Bo'shqacha aytganda, tezlik va impuls operatorlarning orasidagi munosabat klassik mexanikadagidek, tegishli kattaliklar o'rasidagi munosabat kabi bo'ladi.

Endi $\frac{d\hat{P}_x}{dt}$ operator hisoblab chiqiladi, buning uchun (3.39') formuladan va (2.59) o'rin almashtirishdan foydalanilsa,

$$[\hat{H},P_x]=\frac{1}{i\hbar}(\hat{P}_x\hat{H}-\hat{H}\hat{P}_x)=\frac{1}{i\hbar}(\hat{P}_xU-U\hat{P}_x)=-\frac{\partial U}{\partial x}$$

yoki

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt}=-\frac{\partial U}{\partial x} \qquad (3.46)$$

natija o'linadi. Ma'lumki, $-\frac{\partial U}{\partial x}$ kattalik kuchning x o'qiga bo'lgan proeksiyasining operatoridir. Demak, (3.46) ni

$$\frac{d\hat{P}_x}{dt}=\hat{F}_x \qquad (3.47)$$

ko'rinishda yozish mumkin, ya'ni impuls operatoridan vaqt bo'yicha olingan hosila kuch operatoriga tengdir. Boshqacha aytganda, (3.47) formulani Nyuton tenglamasining operator ko'rinishi sifatida qarash mumkin.

3.6. Saqlanish qonunlari

Fizikaning boshqa sohalari kabi, kvant mexanikasida ham zarrachaning holatini va bu holat o'zgarishini ifodalovchi dinamik kattaliklarning bir qator saqlanish qonunlari fundamental ahamiyatga egadir. Bunday saqlanish qonunlari qatoriga energiya, impuls va impuls momenti saqlanish qonunlaridan tashqari faqat kvant mexanikasiga xos bo'lgan juftlikning saqlanish qonunini ham kiritish mimkin. Ma'lumki, klassik mexanikada saqlanish qonunlari vaqtning bir jinsligidan va fazoning bir jinsligi hamda izotropligidan kelib chiqadi, aniqrog'i vaqtning bir jinsligidan energiyani saqlanish qonuni, fazoning bir jinsligidan impuls saqlanish qonuni va fazoning izotropligidan impuls momentining saqlanish qonuni kelib chiqadi. Kvant mexanikasida ushbu saqlanish qonunlari ko'rib chiqiladi.

Energiyaning saqlanish qonuni. Klassik mexanikasiga o'xshab kvant mexanikasida ham harakat integrallari mavjud va ular saqlanadi. (3.34) formulaga binoan

$$\frac{d\hat{L}}{dt}=\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}+[\hat{H},\hat{L}]\equiv 0 \qquad (3.48)$$

bo'lganida L kattalik harakat integrali bo'ladi. Agarda L oshkor ravishda vaqtga bog'liq bo'lmasa, u holda

$$\frac{d\hat{L}}{dt}=[\hat{H},\hat{L}]\equiv 0 \qquad (3.49)$$

bo'ladi. Demak, vaqtga oshkor ravishda bog'liq bo'lmagan harakat integrallari uchun Puasson qavslari nolga teng bo'ladi. Olingan (3.48) formulani gamiltonianga qo'llanilishi ko'rib chiqiladi. Operator $\hat{L}=\hat{H}$ bo'lganida

$$\frac{d\hat{H}}{dt}=\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}+[\hat{H},\hat{H}]=\frac{\partial\hat{H}}{\partial t} \qquad (3.50)$$

ifodaga kelinadi. Agarda gamiltonian oshkor holda vaqtga bog'liq bo'lmasa, u holda $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$ ga teng bo'ladi va

$$\frac{d\hat{H}}{dt}=0 \qquad (3.51)$$

natija olinadi, demak

$$\hat{H}=const \qquad (3.52)$$

Bu holda gamiltonian to'la energiya operatoriga mos keladi hamda vaqtga bog'liq bo'lmagan kuch maydonlarida to'la energiya harakat integrali bo'ladi, yoki (3.51) ifoda kvant mexanikasida energiyaning saqlanish qonunini ifodalaydi.

Impuls saqlanish qonuni. Kuch maydonining turiga qarab harakat integrallarining ko'rinishi o'zgaradi. Erkin harakatlanayotgan zarracha uchun potensial energiya $U\ (x,\ y,\ z,\ t)=0$ teng bo'ladi va Gamiltonian

$$\hat{H}=\hat{T}=\frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2+\hat{P}_z^2) \qquad (3.53)$$

IV bob
BIR O'LCHAMLI MASALALAR

4.1. Cheksiz chuqur potensial o'radagi harakat

Ushbu bobda Shredinger tenglamasini bir necha masalalarni yechishga qo'llaniladi, chunki Shredinger tenglamasi sodda potensial maydonlar uchungina aniq yechimlarga ega. Bu xildagi oddiy masalalarni yechishdan maqsad, Shredinger tenglamasining matematik apparatini mukammalroq egallashdan iborat. Dastlab, zarrachaning bir o'lchovli oddiy harakati ko'rib chiqiladi. Potensial energiyasi

$$U(x)=\begin{cases}0 & \text{agar } 0<x<l\\ \infty & \text{agar } x\le 0 \quad va\ x\ge l\end{cases}$$

orqali ifodalangan potensial maydonda zarrachaning bir o'lchamli harakati tekshirib chiqiladi. Bunday potensial maydonni cheksiz potensial o'ra deyiladi va ravshanki bunday o'rada zarracha faqat $0\le x\le l$ oraliqda harakatlanishi mumkin. Bu masala asosan uch jihatdan qiziqtiradi:

1) cheklab qo'yilgan zarracha harakatini ifodalovchi Shredinger tenglamasini qanday yechish mumkin;
2) shu tenglama yechimining xarakterli xossalarini aniqlash;
3) masalaning kvant mexanikasi hamda klassik mexanikasi yordamida olingan yechimlarini o'zaro taqqoslash.

Mazkur potensial o'rada klassik zarrachaning harakatini ko'rib chiqaylik. Ma'lumki, potensial o'radagi klassik zarrachaning energiyasi ixtiyoriy qiymat qabul qila olishi mumkin. Agar zarrachaning to'la energiyasi $0\le E\le U(x)$ oraliqda joylashgan bo'lsa, u holda zarracha potensial o'radan chiqib keta olmaydi. Chunki zarracha potensial o'radan chiqib keta olishi uchun u to'la energiyadan katta potensial to'siqni yengib o'tib, shu qiymatli potensial energiyaga teng bo'lgan to'la energiyaga ega bo'lib qolishi kerak. Lekin bu holda zarrachaning kinetik energiyasi manfiy qiymatga ega bo'lib qoladi va tabiiyki bu mumkin emas. Yuqorida aytib o'tilgan tasdiq, albatta, klassik zarracha harakati uchun mumkin bo'lmagan hol bo'ladi: hech qanday zarracha manfiy kinetik energiya bilan harakat qila olmaydi. Shuning uchun, potensial o'ra chekkasiga yetgan klassik zarracha uning devoridan

qaytadi va teskari yo'nalishda harakatlanadi, o'raning qarama-qarshi devoriga yetib borgandan so'ng, yana orqaga qaytadi va hokazo. Shunday qilib, klassik fizika qonunlariga asosan zarracha potensial o'ra tashqarisida bo'la olmaydi va o'ra ichida har qanday nuqtada bir xil ehtimol bilan qayd qilinishi mumkin.

Kvant mexanikasi qonunlariga bo'ysunadigan zarrachaning potensial o'radagi harakati butunlay boshqacha bo'ladi. Kvantlanishning asosiy shartiga ko'ra, zarracha harakatining to'lqin funksiyasi uzluksiz va bir qiymatli bo'lishi kerak. Demak, zarrachaning to'lqin funksiyasi x - o'qining musbat yo'nalishi bo'ylab koordinataning x>0 sohasida tekis o'zgarishi uchun potensial o'raning o'ng devoridan tashqi qismida ham davom ettirilishi kerak. Potensial energiya cheksiz katta bo'lgan holida, ya'ni potensial o'raning chap devoridan tashqi qismida zarrachaning harakati ko'rib chiqiladi. Shredinger tenglamasini yechmasdan turib, zarrachaning chap devordan tashqi sohadagi harakatiga quyidagicha izoh berish mumkin: kvant mexanikasi nuqtayi nazaridan, zarrachaning mutlaqo o'tib bo'lmaydigan $x<0$ sohaga kira olish ehtimoli zarracha qancha katta bo'lsa, shuncha kichik bo'ladi.

Potensial o'radagi zarracha harakatiga oid Shredinger tenglamasini yechishdan avval bu masala uchun chegaraviy shartlarini ifodalanadi. Zarracha potensial o'ra tashqarisida joylasha olmasligini hisobga olsak, uning $0\le x\le l$ oraliqdan tashqarida to'lqin funksiyasi nolga teng bo'ladi. Ikkinchidan, uzluksizlik shartidan $x=0$ va $x=l$ nuqtalarida to'lqin funksiyasi nolga teng bo'lishi kerakligi kelib chiqadi, ya'ni

$$\psi(0)=\psi(l)=0. \qquad (4.1)$$

Olingan (4.1) dagi shart potensial o'raning ichida zarracha harakatini ifodalovchi Shredinger tenglamasining yechimi uchun chegaraviy shart bo'lib hisoblanadi. Bizga ma'lum bo'lgan (3.22) formulaga asosan $0\le x\le l$ sohadagi statsionar holat uchun bir o'lchamli Shredinger tenglamasi quyidagicha ko'rinish oladi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi.$$

Bu tenglamani boshqacha ko'rinishda ham yozish mumkin, ya'ni

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0. \qquad (4.2)$$

ma'lum o'zgarmas U_0 musbat kattalikka va $x \le 0$ sohada u nolga teng bo'lsin. $U(x)$ potensial energiya x o'qining pog'onali funksiyasi bo'lgani uchun x ning musbat yo'nalishdagi o'zgarish sohasi ajratiladi, manfiy yo'nalishda esa bitta o'zgarish sohasi bo'ladi. U holda Shredinger tenglamasini yechish osonlashadi, chunki o'zgaruvchi x ning bu ikkita sohadagi qiymatlariga $U(x)$ ning mos o'zgarmas qiymatlari to'g'ri keladi, ya'ni:

$$U(x)=\begin{cases}0, & x \le 0\\ U_0, & x>0\end{cases} \tag{4.9}$$

x ning $x \le 0$ sohasini 1-soha deb ataladi va bu sohada Shredinger tenglamasining yechimini mos holda 1 indeks bilan belgilanadi, x ning $x>0$ sohani esa 2-soha deb belgilanadi va shu sohaga tegishli yechimlarni mos holda 2 indeks bilan belgilanadi. Har bir sohada Shredinger tenglamalarining yechimlari, ya'ni ψ_1 va ψ_2 lar aniqlanadi va x ning butun sohasida to'lqin funksiya uzluksiz va bir qiymatli bo'lishi uchun bu ikkala yechimlarning o'zlari va birinchi tartibli hosilalari uchun x=0 nuqtadagi chegaraviy shartlari yoziladi, ya'ni:

$$\psi_1(0)=\psi_2(0), \quad \psi'_1(0)=\psi'_2(0). \tag{4.10}$$

Yuqorida qayd etilgan ikkala sohalar uchun statsionar holatdagi Shredinger tenglamasi:

$$\left.\begin{aligned}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+k^2\psi_1=0, \quad x\le 0\\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2}+q^2\psi_2=0, \quad x>0\end{aligned}\right\} \tag{4.11}$$

ko'rinishga ega. Bu tenglamalarda:

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{va} \quad q^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0) \tag{4.12}$$

kabi belgilashlar kiritildi. (4.11) tenglamalarning yechimlarini quyidagicha yozish mumkin:

$$\left.\begin{aligned}\psi_1=A_1e^{ikx}+B_1e^{-ikx},\\ \psi_2=A_2e^{iqx}+B_2e^{-iqx}.\end{aligned}\right\} \tag{4.13}$$

$$D=|A_3|^2=\frac{4k^2\chi^2}{\left(k^2+\chi^2\right)^2 sh^2\chi a+4k^2\chi^2}. \tag{4.35}$$

Shunday qilib, (4.35) formuladan ko'rinib turibdiki, o'tish koeffitsiyenti zarrachaning energiyasi, potensial to'siqning balandligi va kengligining murakkab funksiyasi orqali ifodalanadi. Hisoblashlarni soddalashtirish maqsadida, $\chi a \gg 1$ olish mumkin, u holda $sh\chi a \approx \frac{1}{2}e^{\chi a}$ bo'ladi va (4.35) formula soddalashadi. Shunday qilib, bu holda

$$D\approx\frac{16k^2\chi^2}{\left(k^2+\chi^2\right)^2}e^{-2\chi a} \tag{4.36}$$

bo'ladi. To'siqning kengligi va balandligi bilan o'tish koeffitsiyentining bog'liqligi (4.36) formuladagi eksponensial ko'phadga bog'liqdir. Eksponenta oldidagi ko'phadni D_0 orqali belgilansa,

$$D=D_0\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}a\sqrt{2m\left(U_0-E\right)}\right\} \tag{4.37}$$

natijaga kelinadi. Agarda

$$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m\left(U_0-E\right)}\le 1 \tag{4.38}$$

bo'lganda, to'siqdan o'tish ehtimolligi yetarli darajada kichik emas. (4.38) shart faqat mikrohodisalar sohasidagina bajariladi. Agarda (4.38) formulada yadro o'lchamlari tartibidagi kattaliklardan foydalanilsa, ya'ni $a\approx 10^{-13}sm$, $m\approx 10^{-24}g$ (nuklonning massasi), $U_0-E\approx 10MeV$ bo'lsa, u holda hisoblashlar natijasida $D\approx e^{-1}$ olinadi. Shunday qilib, to'siqning balandligi zarrachaning energiyasidan 5-10 MeV ga ortiq bo'lishiga qaramasdan zarracha ma'lum ehtimollik bilan to'siqdan o'tishi mumkin. Agar $a\approx 1sm$ bo'lganda mutlaqo boshqa natijaga kelinadi va bu holda $D\approx 10^{-13}$ bo'ladi. Demak, makroskopik hodisalar sohasida tunnel effekti mutloqa mavjud bo'lmaydi.

4.4. Chiziqli garmonik ostsillator

Atom fizikasida keng foydalaniladigan muhim modellardan biri chiziqli garmonik ostsillator modeli hisoblanadi. Chiziqli garmonik tebranish deb sistemaning o'z muvozanat holati potensial atrofida energiyasi koordinataning kvadratiga proporsianal bo'lgan holda yuz beradigan erkin tebranishga aytiladi. Sistemaning garmonik tebranishiga

misol tariqasida prujinaga osilgan yukning, suyuqlik yuzida suzib yuruvchi jismning yoki kristall panjara atomining tebranishini keltirish mumkin. Sistemaning muvozanat holatda garmonik tebranishi uning potensial energiyasining minimum qiymati atrofida ro'y beradi. Bir o'lchovli kichik tebranishdagi sistemaning potensial energiyasini minimum atrofida qatorga yoyilsa,

$$U(x)=U(0)+\frac{1}{1!}\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)x+\frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)x^2+\frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 U}{\partial x^3}\right)x^3+...$$

ifoda hosil bo'ladi. Bunda x– muvozanat holatidan qancha masofaga og'ishni bildiradi. Potensial energiya – $U(x)$ ning x bo'yicha birinchi hosilasi nolga teng bo'ladi, chunki ushbu hosila potensial energiya funksiyasi – $U(x)$ ning minimum nuqtasida olinmoqda. Agar muvozanat nuqtasini sanoq boshi deb qabul qilinsa, $U(0)$ ham nolga teng bo'ladi. Zarracha muvozanat nuqta atrofida kichik tebranma harakat qilayotgan bo'lsa, yuqoridagi qatorning x^2 ga proporsional birinchi noldan farqli hadiga nisbatan keyingi hadlari nolga cheksiz yaqin bo'ladi. Shuning uchun, garmonik tebranayotgan sistemaning potensiyal energiyasini quyidagi ko'rinishda olinadi.

$$U(x)=\frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{4.39}$$

bunda $\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_{x=0}=m\omega^2$ ga teng.

Garmonik ostsillator to'g'risidagi masala uchun Shredinger tenglamasi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi=E\psi \tag{4.40}$$

ko'rinishga ega bo'ladi, bunda ψ to'lqin funksiya $x\to\pm\infty$ bo'lganda $\psi(x)=0$ bo'lishi va to'lqin funksiyasiga qo'yilgan hamma qolgan standart shartlarni ham qanoatlantirishi kerak. (4.40) tenglamani yechish uchun quyidagi o'lchamsiz kattaliklarga o'tish maqsadga muvofiqdir:

$$\xi=\frac{x}{x_0}, \quad x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{4.41}$$

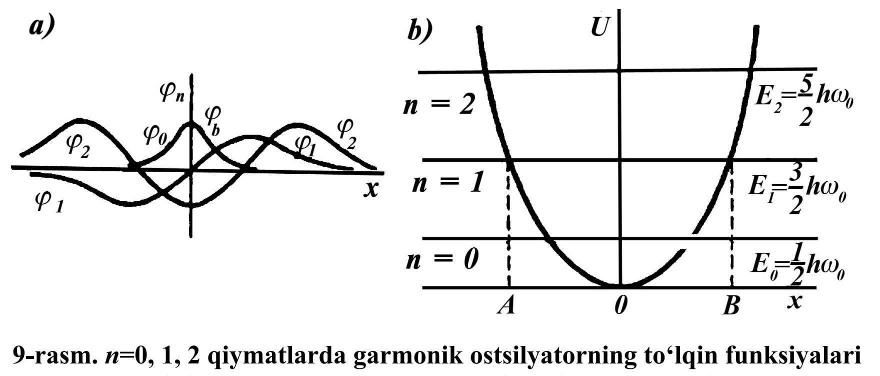
bo'ladi. Kichik kvant sonlar sohasida, masalan n = 0, 1, 2 qiymatlariga mos energiyaning xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalari quyidagicha bo'ladi:

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega, \quad \psi_0=A_0\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right),$$

$$E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega, \quad \psi_1=A_1 2\xi\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right),$$

$$E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega, \quad \psi_2=A_2\left(4\xi^2-2\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right).$$

Keltirilgan qiymatlar 9-rasmda tasvirlangan.



9-rasm. n=0, 1, 2 qiymatlarda garmonik ostsilyatorning to'lqin funksiyalari ko'rinishi (a) va E_n kvant sathlarning diagrammalari (b).

(4.62) formuladan nolinchi holatni batafsil tekshirib chiqaylik, uning xususiy funksiyasi

$$\psi_0(x)=\frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

ga teng bo'ladi va unga mos ehtimollik zichiligi esa

$$|\psi_0(x)|^2=w_{kv}=\frac{1}{x_0\sqrt{\pi}}\exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right)$$

ko'rinishda bo'ladi. $|\psi_0(x)|^2$ ni tasvirlovchi egri chiziq Gauss xatoliklar egri chizig'i tipidadir va bu ehtimollik 10-rasmda tasvirlangan.

Olingan (4.13) dagi formulalarda e^{ikx} va e^{iqx} ko‘rinishdagi hadlar x o‘qining musbat yo‘nalishida tarqaluvchi yassi to‘lqinlarni, e^{-ikx} va e^{-iqx} esa teskari yo‘nalishda tarqaluvchi yassi to‘lqinlarni tavsiflaydi. A_1, B_1, A_2, B_2 doimiylar (4.10) shartlarni qanoatlantirishi va qo‘yilgan masala uchun olingan yechimlarga mos kelishi kerak. 1-sohada ham tushayotgan to‘lqin, ham qaytayotgan to‘lqin tarqalayotganini e’tiborga olinsa, (4.13) formulada A_1 koeffitsiyent tushayotgan to‘lqinning intensivligini, B_1 qaytayotgan to‘lqinning intensivligini ifodalaydi.

Potensial to‘siqga tushayotgan zarrachalarning oqimini ifodalovchi kattalik kiritaylik va j_0 orqali tushayotgan zarrachalar oqimining zichligi belgilanadi. U holda (3.18) ga binoan:

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m}|A_1|^2. \qquad (4.14)$$

Masalani soddalashtirish maqsadida, zarrachalarning oqimi shunday tanlab olinganki, A_1=1 bo‘lsin. Qolgan o‘zgarmaslarni aniqlash uchun x=0 nuqtada 1-, 2-sohalarning chegarasida to‘lqin funksiyasining holatini ko‘rib chiqaylik. Yuqoridagi (4.10) shartlardan B_1 va A_2 lar aniqlanadi. Biz ko‘rayotgan holda 2-sohada faqat o‘tayotgan to‘lqin tarqalishini hisobga olsak to‘lqin cheksizlikdan qaytmaydi, shuning uchun (4.13) formulada B_2=0 deb olish lozim. Zarrachning 1-sohadan 2-sohaga o‘tish shartlarini ko‘rib chiqaylik. Dastlab zarrachaning E to‘la energiyasi uning 2-sohadagi U_0 potensial energiyasidan katta bo‘lganida, ya’ni E > U_0 bo‘lganda ko‘rib chiqaylik. Bu holda q haqiqiy kattalik bo‘lib, e^{-iqx} - tegishli bo‘lgan to‘lqin funksiyasidagi had teskari yo‘nalishda tarqaluvchi yassi to‘lqinni ifodalaydi. 1-sohada x o‘qining manfiy yo‘nalishida qaytgan to‘lqin tarqaladi. 2-sohada esa qaytuvchi to‘lqinning o‘zi yo‘q, demak o‘ngdan chapga tarqaluvchi to‘lqin ham bo‘lmaydi. Agarda $E<U_0$ bo‘lsa, (4.12) formulaga asosan q mavhum kattalik bo‘ladi, u holda e^{-iqx} funksiya $x \to -\infty$ da exsponensial ravishda o‘suvchi funksiya bo‘ladi, bu esa o‘z navbatida to‘lqin funksiyani chekli bo‘lishiga yo‘l qo‘ymaydi. Shu tufayli B_2 koeffitsiyent q mavhum bo‘lganda ham nolga teng bo‘lishi kerak.

Agar $E>U_0$ bo‘lsa, (4.10) dagi munosabatlardan (4.13) ni hisobga olib, B_1 va A_2 ga nisbatan quyidagi tenglamalar sistemasi hosil qilinadi:

Endi energiya E<U_0 shartga bo‘ysungandagi hol ko‘rib chiqiladi. Agarda zarrachalar klassik mexanika qonunlariga bo‘ysunganda edi x=0 nuqtada zarrachalarning hammasi potensial to‘siqdan qaytib ketgan bo‘lardi. Kvant mexanikasida esa zarrachalarning harakati mutlaqo boshqacha bo‘ladi. $E<U_0$ shartda q – aniq mavhum kattalik bo‘ladi va (4.31) formulada $q = i\chi$ desak, $\chi = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$ bo‘ladi va bundan

$$A_3 = \frac{4ik\chi e^{ika}}{(k+i\chi)^2 e^{\chi a} - (k-i\chi)^2 e^{-\chi a}} \qquad (4.34)$$

munosabatga kelinadi. Zarracha energiyasi potensial to‘siq balandligidan kichik bo‘lganiga qaramay, to‘siq orqasidagi sohada yassi to‘lqinning amplitudasi noldan farqli bo‘ladi. Buni faqat tunnel effektining oqibati sifatida qarash mumkin, ya’ni zarracha ma’lum ehtimollik bilan potensial to‘siqdan o‘tishi mumkin. Zarrachalarning tunnel o‘tishlari hozirgi vaqtda bir qator tajribalarda tasdiqlanib, fizikaning barcha sohalarida, shu jumladan yadro fizikasida ham fundamental rol o‘ynaydi. Umuman olganda, radioaktiv yadrolarning α-yemirilishi, uran yadrosining o‘z-o‘zidan parchalanishi va hokazo hodisalar zarrachalarning tunnel effekti bilan bog‘langan. O‘tish koeffitsiyentini hisoblash uchun (4.34) ifoda va uning qo‘shmasidan:

$$A^*_3 = \frac{-4ik\chi e^{-ika}}{(k-i\chi)^2 e^{\chi a} - (k+i\chi)^2 e^{-\chi a}}$$

foydalanish kerak. A_3 va A^*_3 larni giperbolik funksiyalar

$$chx = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \qquad shx = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

yordamida yozilsa

$$A_3 = \frac{i2k\chi e^{ika}}{(k^2-\chi^2)sh\chi a - 2ik\chi ch\chi a},$$

$$A^*_3 = \frac{-i2k\chi e^{-ika}}{(k^2-\chi^2)sh\chi a - 2ik\chi ch\chi a}$$

ko‘rinishga keladi. $ch^2x - sh^2x = 1$ ekanligini e’tiborga olinsa va elementar o‘zgartirishlarni bajarilsa, bu holdagi zarrachalarning to‘siqdan o‘tish D koeffitsiyentini hisoblash mumkin:

Yangi kiritilgan o‘zgaruvchilar uchun Shredinger tenglamasi sodda ko‘rinishga keladi:

$$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi^2\psi = \lambda\psi. \qquad (4.42)$$

Yuqorida ko‘rib chiqilgan misollardan ostsillatorning muhim farqli tomoni shundan iboratki, bu hol uchun zarrachaning harakati biron bir devor bilan chegaralanmagan, oldingi misollarda ko‘rilgan chegaraviy shartlar bu yerda mavjud emas. To‘lqin funksiyasiga qo‘yiladigan birdan-bir talab, uning kvadratik integrallanuvchi funksiya bo‘lishi kerakligidir.

To‘lqin funksiyaning asimptotikasini aniqlash maqsadida (4.42) tenglamada x ning juda katta ($\xi >> 1$) bo‘lgan chegaraviy holi qaraladi. U holda (4.42) tenglamada ξ^2 ga nisbatan λ ni e`tiborga olinmasa ham bo‘ladi:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi = 0 \qquad (4.43)$$

$\xi >> 1$ bo‘lganida (4.43) tenglamaning yechimi

$$\psi = f(\xi)\exp\left(\pm\frac{\xi^2}{2}\right) \qquad (4.44)$$

ko‘rinishda bo‘ladi, bu yerda $f(\xi)$-biror, hali noma’lum bo‘lgan funksiya. Yechimning eksponensial qismida bo‘lishi mumkin bo‘lgan ikki ishoradan bu yerda minus ishorani saqlab qolish lozim, chunki plus ishorali $\psi \approx \exp\left(+\frac{\xi^2}{2}\right)$ yechim $x \to \infty$ bo‘lganda cheksiz ortadi, bu esa ψ funksiyaga qo‘yiladigan tabiiy shartlarga zid keladi. Qaralayotgan chegaraviy holni e’tiborga olib, (4.43) tenglamaning yechimini

$$\psi = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)f(\xi) \qquad (4.45)$$

ko‘rinishda izlanadi, $f(\xi)$ funksiyani (4.42) tenglamani qanoatlantiradigan qilib tanlab olish kerak. (4.45) yechimni (4.42) tenglamaga qo‘yiladi, buning uchun dastavval quyidagi hosilalar topiladi:

shart bajariladi. Agarda m=n bo‘lsa, u holda $\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2{}_n(x)dx$ chekli qiymatga ega bo‘lib, bu natijadan normallovchi A_n ko‘paytuvchini hisoblash uchun foydalanish mumkin. Normallash sharti quyidagidan iborat:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2{}_n(x)dx = 1. \qquad (4.60)$$

Bu ifodaga funksiyaning (4.55) qiymatini qo‘yib,

$$A_n^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}H_n^2(\xi)\,d\xi = 1.$$

tenglik hosil qilinadi. Integral ostidagi Ermit polinomlarining bittasini o‘rniga (4.56) ifodani qo‘yib, oxirgi tenglik quyidagicha yoziladi,

$$A_n^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}(-1)^n\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)H_n(\xi)d\xi = 1$$

Bu integralni n marotada bo‘laklab integrallansa,

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}A_n^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}\frac{d^nH_n(\xi)}{d\xi^n}d\xi = 1$$

natija hosil qilinadi. Ermit polinomlari uchun

$$\frac{d^n}{d\xi^n}H_n(\xi) = 2^n n!$$

va

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}d\xi = \sqrt{\pi}$$

tengliklarni e’tiborga olinsa, normallovchi ko‘paytuvchi uchun quyidagi ifoda hosil qilinadi:

$$A_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}. \qquad (4.61)$$

Shunday qilib, chiziqli garmonik ostsillyator uchun to‘lqin funksiyaning ko‘rinishi

$$\psi_n(\xi) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\sqrt{\frac{1}{2^n n!}}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi) \qquad (4.62)$$

$$1 + B_1 = A_2,$$
$$k\left(1 - B_1\right) = qA_2.$$

Bu tenglamalardan A_2 va B_1 amplitudalar aniqlab olinadi:

$$B_1 = \frac{k-q}{k+q} \quad , \quad A_2 = \frac{2k}{k+q}. \tag{4.15}$$

(4.15) dan ko‘rinib turibdiki, qaytgan to‘lqinning B_1 amplitudasi, $E>U_0$ bo‘lganiga qaramasdan noldan farqlidir. Bunday xususiyat zarrachaning to‘lqin xususiyatlari bilan chambarchas bog‘liq. To‘lqin qisman 2-sohaga o‘tganiga qaramay, qisman qaytadi. Qaytgan zarrachalar oqimining zichligini tushayotgan zarrachalar oqimining zichligiga nisbati qaytarshish koeffitsiyenti deyiladi va R orqali belgilanadi. Agar qaytgan zarrachalar oqimining zichligi

$$j_R = \frac{\hbar k}{m}\left|B_1\right|^2$$

ekanligini va (4.14) hisobga olinsa izlayotgan qaytarish koeffitsiyenti uchun

$$R = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 \tag{4.16}$$

ifodaga kelinadi. Boshqacha aytganda, qaytarish koeffitsiyenti qaytayotgan va tushayotgan to‘lqinlar amplitudalari kvadratining nisbatiga teng bo‘ladi, yoki tushayotgan to‘lqin amplitudasi A_1 , shartga ko‘ra, birga tengligi e’tiborga olinsa, (4.16) formula olinadi. Shunga o‘xshash, 2-sohaga o‘tayotgan zarrachalar dastasining zichligi

$$j_D = \frac{\hbar q}{m}\left|A_2\right|^2$$

ekanligi hisobga olinsa, u holda o‘tayotgan zarrachalar oqimining zichligini tushayotgan zarrachalar oqimining zichligiga nisbati o‘tish koeffitsiyenti deyiladi va D orqali belgilanadi, ya’ni:

$$D = \frac{4kq}{(k+q)^2} \tag{4.17}$$

natijaga kelinadi. (4.16) va (4.17) formulalardan ko‘rinib turibdiki:

$$D + R = 1$$

va bu zarrachalar sonini saqlanish qonunini ifodalaydi. Boshqacha aytganda, $D+R=1$ ekanligi ehtimollarni qo‘shish teoremasi asosida kelib chiqadigan ifodaning aynan o‘zi, chunki zarracha sohalar

$$\psi_2(a) = \psi_3(a), \qquad \psi_2{}'(a) = \psi_3{}'(a).$$

Olingan (4.24) – (4.26) munosabatlarni (4.27) ga qo‘yilsa, B_1, A_2, B_2 va A_3 amplitudalar uchun quyidagi tengliklar olinadi:

$$1 + B_1 = A_2 + B_2, \tag{4.28}$$
$$k(1 - B_1) = q(A_2 - B_2), \tag{4.28'}$$
$$A_2 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = A_3 e^{ika}, \tag{4.28''}$$
$$A_2 e^{iqa} - B_2 e^{-iqa} = \frac{k}{q} A_3 e^{ika}. \tag{4.28'''}$$

Energiya uchun $E>U_0$ shart bajarilganda A_3 koeffitsiyentga nisbatan (4.28)-(4.28''') sistemani yechish kerak. (4.28) va (4.28') tenglamalardan:

$$2 = A_2(1 + \frac{q}{k}) + B_2\left(1 - \frac{q}{k}\right) \tag{4.29}$$

munosabat kelib chiqadi. (4.28'') va (4.28''') tenglamalardan esa A_2 va B_2 larni aniqlash mumkin:

$$\left.\begin{aligned} A_2 &= \frac{1}{2} A_3 e^{-iqa} e^{ika}\left(1 + \frac{k}{q}\right) \\ B_2 &= \frac{1}{2} A_3 e^{iqa} e^{ika}\left(1 - \frac{k}{q}\right) \end{aligned}\right\} \tag{4.30}$$

Topilgan A_2 va B_2 doimiylarning qiymatlarini (4.29) munosabatga qo‘yilsa,

$$A_3 = \frac{4kqe^{-ika}}{(k+q)^2 e^{-iqa} - (k-q)^2 e^{iqa}} \tag{4.31}$$

natija olinadi. A_3 koeffitsiyentni hisoblash davom ettirilsa

$$A_3 = \frac{2kqe^{-ika}}{2kq\cos(qa) - i\left(q^2 + k^2\right)\sin(qa)} \tag{4.32}$$

ifodaga kelinadi. Demak, $E>U_0$ bo‘lganida, potensial to‘siqdan o‘tish koeffitsienti mazkur holda to‘g‘ridan-to‘g‘ri A_3 ning moduli kvadratiga teng, chunki 1- va 3-sohalarda to‘lqin uzunligi bir xildir, ya’ni:

$$D = \left|A_3\right|^2 = \frac{4k^2q^2}{4k^2q^2\cos^2 qa + \left(q^2 - k^2\right)^2 \sin^2 qa} \tag{4.33}$$

natija kelib chiqadi.

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \left(-\xi f + \frac{df}{d\xi}\right)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(-f - 2\xi\frac{df}{d\xi} + \xi^2 f + \frac{d^2 f}{d\xi^2}\right)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

(4.42) tenglamaga ψ va $\frac{d^2\psi}{d\xi^2}$ o‘rniga ularning ifodalarini qo‘yib, sodda almashtirishlardan va $\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$ga qisqartishdan so‘ng ushbu munosabat olinadi:

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} - 2\xi\frac{df}{d\xi} + (\lambda - 1) f = 0 \tag{4.46}$$

$\xi = 0$ nuqta (4.46) tenglamaning maxsus nuqtasi bo‘lmaganligi sababli bu tenglamaning yechimini

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \tag{4.47}$$

darajali qator shaklida qidiriladi:

Avvalo $\frac{df}{d\xi}$ va $\frac{d^2 f}{d\xi^2}$ lari hisoblab chiqiladi:

$$\frac{df}{d\xi} = \sum ka_k \xi^{k-1}, \quad \frac{d^2 f}{d\xi^2} = \sum k(k-1) a_k \xi^{k-2} \tag{4.48}$$

(4.48) dagi qatorlarni (4.46) tenglamaga qo‘yib quyidagi natija olinadi:

$$\sum k(k-1) a_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum ka_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1)\sum a_k \xi^k = 0 \tag{4.49}$$

$\sum_n a_n \xi^n$ ko‘rinishdagi darajali qator aynan nolga teng bo‘lishi uchun, uning hamma a_n koeffitsiyentlari nolga teng bo‘lishi kerak. (4.49) tenglamadagi birinchi yig‘indidagi indeks k ni l + 2 ga, ikkinchisida esa l ga almashtiriladi va o‘zgaruvchilarning bir xil darajalarini to‘plab quyidagi

$$\sum\left[(l+2)(l+1)a_{l+2} - (2l + 1 - \lambda)a_l\right]\xi^l = 0$$

ko‘rinishdagi munosabatga kelinadi. Bu tenglik bajarilishi uchun ξ^l ning koeffitsiyentlari uchun rekurrent formulaga ega bo‘linadi:

(4.54) ga binoan noldan farqli bo‘lib, $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ teng bo‘ladi va E_0 qiymatni “nolinchi energiya” deb ataladi. Bu nomning kelib chiqishi $\frac{1}{2}\hbar\omega$ energiyaning hatto absolut nol temperaturada ham yo‘qolmasligi bilan bog‘liqdir. Hosil qilingan (4.54) formuladan kelib chiqadigan yana bir xulosa ostsillyator energiyasining kvantlanishi ham to‘lqin funksiyasining butun fazoda chekli bo‘lishining tabiiy sharti natijasidir. Mana shunday tabiiy shartlarning sodda natijasi sifatida kvantlanish hosil qilish imkoniyati Shredinger tenglamasining ajoyib xususiyatlaridan biridir. Chiziqli ostsillyator energiyasining har bir xususiy qiymatiga ((4.54) ga qarang)

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} f_n(\xi) \tag{4.55}$$

xususiy funksiya mos keladi, bunda A_n –o‘zgarmas normallovchi ko‘paytuvchi, $f_n(\xi)$ esa n-darajali polinom bo‘lib, uning koeffitsiyentlari $\lambda = 2n+1$ bo‘lganida (4.50) rekurrent formula yordamida hisoblab topiladi. $f_n(\xi)$ polinomlari Chebishev-Ermit polinomlari deb ataladi va $H_n(\xi)$ orqali belgilanadi, ularni quyidagi soddaroq ko‘rinishda ifodalash mumkin:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2}), \tag{4.56}$$

ular quyidagi differensiyal tenglamani qanoatlantiradi:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0. \tag{4.57}$$

Bu tenglamani (4.53) ni hisobga olgan holda (4.46) tenglamadan keltirib chiqarish mumkin. Chebishev–Ermit polinomlarning bir necha dastlabki polinomlarini hosil qilamiz:

$$H_0(\xi) = 1, \; H_1(\xi) = 2\xi, \; H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,$$
$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \; H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12. \tag{4.58}$$

Chiziqli ostsillyatorning xususiy funksiyalari quyidagi muhim xossaga egadir, ular $-\infty$ dan $+\infty$ gacha bo‘lgan oraliqda ortogonaldir, ya’ni $m \neq n$ bo‘lganida

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m(x)\psi_n(x)dx = 0 \tag{4.59}$$

chegarasidan yoki qaytadi, yoki o‘tib ketadi, deb ishonchli ravishda tasdiqlash mumkin.

Endi $E<U_0$ bo‘lganida klassik mexanika bo‘yicha 1-sohadan 2-sohaga o‘tish mumkin emas. Kvant mexanikasi qonunlaridan foydalanib, R hisoblaniladi. q kattalik mavhum va uni $q=i\chi$ orqali yozish maqsadga muvofiq bo‘ladi, u holda

$$\chi = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} \tag{4.18}$$

bo‘ladi. Qaytgan to‘lqinning B_1 amplitudasi kompleks kattalik bo‘ladi va R qaytish koeffitsiyenti esa quyidagicha ifodalanadi:

$$R = |B_1|^2 = \left|\frac{k-i\chi}{k+i\chi}\right|^2 = 1 \tag{4.19}$$

Demak, $E<U_0$ bo‘lganida qaytish koeffitsiyenti birga teng, ya’ni to‘la qaytish bo‘ladi. Bu kutilgan natijaga tamomila mos keladi.

Shredinger tenglamasining 1-soha uchun yechimini qaytgan to‘lqin

$$\psi_R = \frac{k-i\chi}{k+i\chi}e^{-ikx} = e^{-i(kx+\delta)} \tag{4.20}$$

ko‘rinishida yozish mumkin, ya’ni u qaytish to‘lqin fazasining siljishiga olib keladi. (4.20) dan shu siljishni topish mumkin:

$$\delta = arctg\frac{2k\chi}{k^2-\chi^2}. \tag{4.21}$$

Qaytish mavjud bo‘lishiga qaramay, 2-sohadagi to‘lqin funksiyasi noldan farqli bo‘ladi va u:

$$\psi_2(x) = A_2e^{-\chi x} = \frac{2k}{k+i\chi}e^{-\chi x} \tag{4.22}$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. Qaytish to‘la bo‘lsa ham, zarrachani ikkinchi sohada topishning ma’lum ehtimolga ega bo‘lishi kutilmagan holdir. Shunday qilib, x>0 sohada x nuqtadagi zarrachaning ehtimollik zichligi

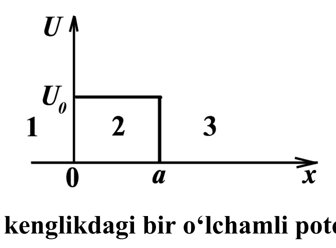
$$|\psi(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2+\chi^2}e^{-2\chi x} \tag{4.23}$$

ga teng bo‘ladi. Hosil bo‘lgan (4.23) formuladan ko‘rinib turibdiki, kvant zarralarning xususiyatlari klassik zarralardan keskin ajralib turadi. Klassik mexanikaning qonunlariga bo‘ysinuvchi harakatlanayotgan zarracha uchun $E<U_0$ bo‘lganda x>0 sohaga o‘tish mumkin emas edi.

Kvant qonuniyatlariga bo‘ysinuvchi, harakatlanayotgan zarracha esa x>0 sohada ma’lum ehtimollik bilan o‘tishi mumkin. Yopiq energetik sohalarga zarralarni o‘tishi kvant mexanikasidagi spetsifik hodisa bo‘lib, tunnel effekti degan nom olgan.

4.3. Kengligi cheklangan potensial to‘siq

To‘siqlar to‘g‘risidagi masalani tekshirishni davom ettiriladi va 8-rasmda tasvirlangan kengligi cheklangan bir o‘lchamli potensial to‘siqdan zarrachalarning o‘tishi ko‘rib chiqiladi. Zarracha maydonda chapdan o‘ngga x o‘qiga parallel yo‘nalishida harakat qiladi. Tekshirilayotgan maydonni uch sohaga ajratiladi.



8-rasm. Chekli kenglikdagi bir o‘lchamli potensial to‘siq.

Avvalgi 4.2-paragrafdagi natijalardan va belgilashlardan foydalanilsa, uchala soha uchun to‘lqin funksiyasini yozish mumkin:

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + B_1e^{-ikx}, \quad x<0, \quad U=0, \quad \mathbf{1} \tag{4.24}$$

$$\psi_2(x) = A_2e^{iqx} + B_2e^{-iqx}, \quad 0\le x\le a, \quad U=U_0, \quad \mathbf{2} \tag{4.25}$$

$$\psi_3(x) = A_3e^{ikx}, \quad x>a, \quad U=0, \quad \mathbf{3} \tag{4.26}$$

Tekshirilmoqchi bo‘lgan potensial to‘siqni bilgan holda (potensial to‘siqning kengligi cheklangan), bunda har doim zarrachaning 2-soha ichidan o‘tib, 3- sohaga chiqishi ma’lum ehtimolga ega bo‘lishi ko‘rsatiladi. Bu holda ham tushayotgan to‘lqinning amplitudasini birga tenglashtirganmiz va 3-sohada qaytgan to‘lqin bo‘lmaganligi sababli, yechim sifatida faqat bitta x o‘qining yo‘nalishidagi to‘lqin olingan. Sohalarning chegaralaridagi to‘lqin funksiyasi va uning birinchi tartibli hosilasi uchun uzluksizlik shartlari yozib chiqiladi:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \qquad \psi_1'(0) = \psi_2'(0), \tag{4.27}$$

$$a_{l+2} = \frac{2l+1-\lambda}{(l+2)(l+1)}a_l. \tag{4.50}$$

Hosil bo‘lgan formula (4.47) qatorning hamma hadlarini bittadan hadma-had hisoblab chiqish imkonini beradi. Qator $l=0$ darajadan, yoki $l=1$ darajadan boshlanishi mumkin bo‘lganligi uchun mazkur rekurrent formula ikki qatordan iborat bo‘ladi, ulardan biri faqat juft darajali qatordan

$$a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + ... + ... = \sum_{k=0} a_{2k}\xi^{2k} \tag{4.51}$$

tashkil topgan bo‘ladi. Ikkinchisi esa faqat toq darajali qatordan

$$a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + ... + ... = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+1}\xi^{2k+1} \tag{4.52}$$

tashkil topgan bo‘ladi. Bu ikki qator (4.46) tenglamaning o‘zaro bir-biriga bog‘liq bo‘lmagan ikki xususiy yechimini tashkil etadi. Qatorlarining hadlari soni cheksizlikka intilsa, ya’ni ξ ning katta bo‘lganida qator o‘zini $\exp(\xi^2)$ kabi tutishini ko‘rsatiladi. Ma’lumki, eksponentani darajali qatorga yoyish natijasida quyidagi ifoda olinadi:

$$e^{\xi^2} = 1 + \frac{\xi^2}{1!} + \frac{\xi^4}{2!} + ... + \frac{\xi^n}{\left(\frac{n}{2}\right)!} + \frac{\xi^{n+1}}{\left(\frac{n}{2}+1\right)!} + ... =$$

$$= b_0 + b_2\xi^2 + b_4\xi^4 + ... + b_n\xi^n + b_{n+2}\xi^{n+2} + ...$$

ξ yetarlicha katta bo‘lganida bu yig‘indining birinchi hadlari yuqori hadlariga nisbatan muhim ahamiyatga ega ekan. $(n+2)$ darajali had koeffitsiyentini n-darajali had koeffitsiyentiga nisbati

$$\frac{b_{n+2}}{b_n} = \frac{\left(\frac{n}{2}\right)!}{\left(\frac{n}{2}+1\right)!} = \frac{1}{\frac{n}{2}+1}$$

bo‘ladi. Yetarlicha katta n uchun ushbu nisbat

$$\frac{b_{n+2}}{b_n} \approx \frac{2}{n}$$

ga teng bo‘ladi. Bu esa (4.50) rekurrent formulaga binoan (4.51) qator hadlarining yetarlicha katta bo‘lgan holida mos hadlari koeffitsiyentlarining nisbati kabidir, ya’ni

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \approx \left.\frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)}\right|_{n\to\infty} = \frac{2}{n}$$

Demak, (4.51) qator haqiqatan ham ξ ning $\exp(\xi^2)$ kabi funksiyasidir. U holda bu xususiy yechimga mos (4.45) ψ funksiya quyidagicha ifodalanadi:

$$\psi = \exp(-\xi^2/2)f(\xi) = \exp(-\xi^2/2)\exp(\xi^2) = \exp(\xi^2/2)$$

ya’ni, asimptotada $\psi(\xi\to\infty) = \infty$ bo‘ladi. Bu hol to‘lqin funksiyaga qo‘yilgan cheklilik shartiga zid keladi. Demak, qatorning hadlar soni chekli bo‘lishi kerak, ya’ni qator biror chekli darajali polinom bo‘lishi kerak, chunki faqat shu holdagina to‘lqin funksiya cheklilik talabini qanoatlantiradi, boshqacha aytganda $f(\xi)$ funksiya polinomga keltirilsa, u holda eksponensial ko‘paytuvchining mavjud bo‘lishi, $\xi\to\infty$ bo‘lganida to‘lqin funksiyani nolga aylanishini ta’minlaydi. Shunday qilib, (4.51) va (4.52) qatorlar polinomlarga aylangan hollardagina to‘lqin funksiyasiga qo‘yiladigan standart talablarni qanoatlantiruvchi yechimlar olinadi. Agar

$$2n+1-\lambda = 0 \tag{4.53}$$

bo‘lsa, u holda (4.50) rekurrent formula asosida n-darajali had bilan tugallanuvchi polinom hosil qilinadi. (4.53) formuladan topilgan λ qiymatini (4.41) ga qo‘yib, quyidagi hosil qilinadi:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0,1,2,... \tag{4.54}$$

Hosil bo‘lgan (4.54) formuladan ko‘rinib turibdiki, ostsillator energiyasi faqat diskret qiymatlarni qabul qilishi mumkin, va ostsillyator uchun energetik sathlar bir-biridan bir xil masofada joylashadi.

Shunday qilib, ostsillyatorning to‘lqin tenglamasining yechimi bo‘lgan to‘lqin funksiyalari, faqat ostsillyator energiyasi qiymatlarining (4.54) dagi formula bilan ifodalangan diskret qatoriga mos keladiganlarigina chegaraviy shartlarni qanoatlantiradi. Olingan (4.54) formula Bor postulatlaridagi $E_n = \hbar\omega$ formulasidan farq qilishiga e’tibor qaratish kerak. Kvant ostsillyator energiyasining eng kichik qiymati

Olingan (5.6) tenglama faqat bitta r o‘zgaruvchiga bog‘liq bo‘lganligi uchun $\psi(r,\theta,\varphi)$ to‘lqin funksiyasini quyidagi ko‘rinishda izlanadi:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (5.7)$$

bunda $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ funksiya $\hat{\mathbf{M}}^2$ operatorning xususiy funksiyasi. Olingan $\psi(r,\theta,\varphi)$ funksiya ham (5.5), ham (5.6) tenglamalarning yechimi bo‘ladi va ushbu ikkita tenglamalarni qanoatlantiradi. Agarda (5.7) funksiyani (5.6) tenglamaga qo‘ysak va $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ga bo‘lib yuborilsa, *R(r)* funksiya uchun Shredinger tenglamasining radial qismi hosil qilinadi:

$$\hat{T}_r R+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}R+U(\mathbf{r})R=ER. \qquad (5.8)$$

Eslatib o‘taylikki, $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ funksiya $\hat{\mathbf{M}}^2$ operatorning xususiy funksiyasi bo‘lib, bir vaqtning o‘zida impuls momenti bitta proyeksiyasining ham xususiy funksiyasi bo‘ladi, koordinatalar sistemasini shunday tanlaymizki, nazarda tutilayotgan proyeksiya M_z proyeksiyasi bo‘lsin. Shu sababdan markaziy kuch maydonida energiyaning saqlanish qonunidan tashqari yana ikkita saqlanish qonuni mavjud bo‘ladi, ya’ni harakat miqdori momentining saqlanish qonuni va fazodagi ixtiyoriy ravishda yo‘naltirilgan z – o‘qiga moment proyeksiyasining saqlanish qonunlaridir. Boshqacha aytganda, markaziy simmetrik maydonda to‘liq energiya, impuls momentining kvadrati va z– o‘qiga impuls momenti proyeksiyasi bir vaqtning o‘zida o‘lchab bo‘ladigan kattaliklarni tashkil qiladi.

To‘lqin funksiyaning radial tashkil etuvchisi uchun hosil bo‘lgan (5.8) tenglamani batafsil tekshirib chiqaylik. Olingan (5.8) tenglamaning yechimi quyidagi ko‘rinishda izlanadi:

$$R(r)=\frac{1}{r}\chi(r) \qquad (5.9)$$

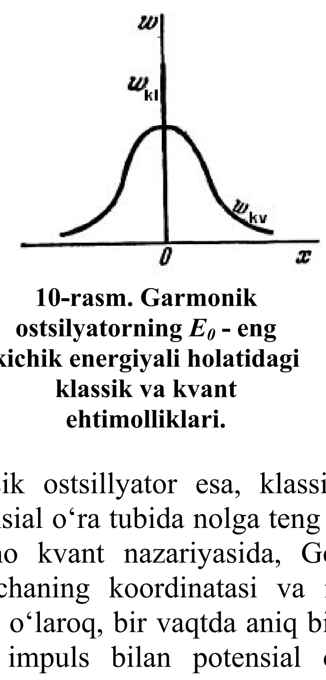
va (5.9) ni (5.8) ga qo‘yib,

$$\hat{T}_r R=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r\chi'-\chi)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2\chi}{dr^2} \qquad (5.10)$$

ni hisobga olgan holda, $\chi(r)$ funksiya uchun quyidagi ko‘rinishdagi tenglamani hosil qilinadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\chi+U(r)\chi=E\chi \qquad (5.11)$$

Olingan egri chiziqning ko‘rsatishicha, ostsillyatorning nolinchi holatida zarracha vaziyatini ko‘p marta aniqlaganimizda, uni har doim ko‘proq muvozanat vaziyati *(x=0)* atrofida topiladi. Bu holatning xususiyati shundan iboratki, ostsillyatorning energiyasi nolga teng bo‘lmay, balki $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ teng bo‘lishidadir. Shunga muvofiq ravishda, kvant ostsillyator absolut nolda tinch turmaydi.



10-rasm. Garmonik ostsilyatorning E_0 - eng kichik energiyali holatidagi klassik va kvant ehtimolliklari.

Klassik ostsillyator esa, klassik fizika va Bor nazariyasiga binoan potensial o‘ra tubida nolga teng energiya bilan harakatsiz holda bo‘ladi. Ammo kvant nazariyasida, Geyzenberg noaniqlik prinsipiga ko‘ra, zarrachaning koordinatasi va impulsini, klassik ostsillyator holidan farqli o‘laroq, bir vaqtda aniq bilish mumkin emas. Zarrachaning nolga teng impuls bilan potensial o‘ra tubida aniq joylashishiga kvant mexanikasining noaniqlik prinsipi yo‘l qo‘ymaydi. Hozir noaniqlik munosabatlarini qanoatlantirishi uchun $\frac{1}{2}\hbar\omega$-nolinchi energiyani ostsillyatorning eng minimal energiyasi ekanligi ko‘rsatiladi.

Zarracha vaziyatining noaniqligi sifatida o‘rtacha kvadratik xato qabul qilinadi:

$$\overline{\Delta x}=\sqrt{\overline{x^2}}.$$

Klassik ostsillyator uchun $x=\cos\omega t$, shu formula bilan ifodalangan harakat davriy harakat bo‘ladi, chunki vaqt bu formulaga davriy funksiya orqali kiradi. Demak ,

$$\overline{\Delta x}=\sqrt{\overline{x^2}}=\sqrt{a^2\cos^2\omega t}=\sqrt{\frac{1}{2}a^2} \qquad (4.63)$$

bo‘ladi,chunki

$$S_1'(x)=\frac{1}{2}i\frac{S_0''}{S_0'}=\frac{1}{2}i\frac{d}{dx}\ln S_0' \qquad (4.86)$$

va (4.86) ni integralash natijasida

$$S_1(x)=\frac{1}{2}i\ln S_0'-\ln c=\frac{1}{2}i\ln p-\ln c \qquad (4.87)$$

ifoda olinadi. Shunday qilib, tanlab olgan yaqinlashishida $S(x)$ funksiya

$$S(x)=\pm\int_{x_0}^{x}pdx+i\ln\sqrt{p}-\ln c \qquad (4.88)$$

bo‘ladi. $S(x)$ uchun hosil bo‘lgan ifodani (4.79) ga qo‘yib

$$\psi(x)=c\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\pm\int_{x_0}^{x}pdx+i\ln\sqrt{p}\right)\right\}$$

$$=\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\pm\int_{x_0}^{x}pdx\right)\right\} \qquad (4.89)$$

ni olinadi. (4.89) dagi “+” va “–” ishoralarga tegishli bo‘lgan yechimlar o‘zaro bog‘liqmasdir. Shu tufayli taqriban olingan umumiy yechimning ko‘rinishi

$$\psi(x)=\frac{c'}{\sqrt{p}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int pdx\right\}+\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int pdx\right\} \qquad (4.90)$$

bo‘ladi, yoki boshqa ko‘rinishda

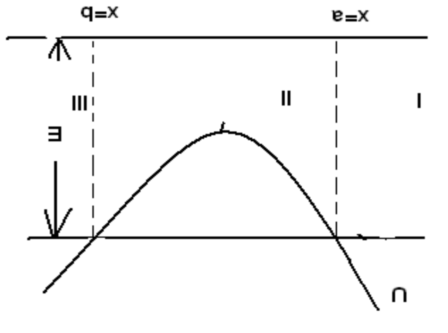
$$\psi=\frac{c}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}pdx+\theta\right) \qquad (4.91)$$

bo‘lishi mumkin, bunda c', c va θ – o‘zgarmaslar bo‘lib, ular berilgan masala uchun chegaraviy shartlardan topiladi. Hosil bo‘lgan (4.90) va (4.91) taqribiy yechimlar VKB yechimlari deyiladi.

4.7. Kvaziklassik yaqinlashishda potensial o‘radagi harakatni o‘rganish

Endi olingan natijalarni konkret masalalar yechimiga tatbiqini ko‘rib chiqaylik. Misol tariqasida bir o‘lchamli potensial o‘radagi zarrachalar harakatini tekshiraylik. Ushbu rasmda tasvirlangan va bitta

minimumga ega bo‘lgan potensial energiyali o‘rada zarracha harakatlansin.



11-rasm. Bir o‘lchamli potensial o‘ra.

II sohada, ya’ni to‘la energiya potensial energiyadan katta bo‘lgan holda, zarracha faqat finit harakat sodir etadi va uning energiyasi kvantlanadi. Bir o‘lchamli harakatning umumiy hossalariga asosan ushbu zarrachaning energiyasiga yagona, ya’ni bitta energetik sath mos keladi. Ushbu satxning potensial egri chiziq bilan kesishgan nuqtalarida, ya’ni $x=a$ va $x=b$ nuqtalarda, o‘ra ichidagi zarrachaning harakatida klassik mexanikaga asosan burilish nuqtalari mavjud bo‘ladi, bu nuqtalarda kinetik energiya nolga teng, to‘la energiya esa potensial energiyaga teng bo‘ladi va zarracha, klassik mexanika qonunlariga bo‘ysingan holda, qarama qarshi tomonga harakat qila boshlaydi.

Kvant mexanikasida esa ahvol boshqacha bo‘ladi. $|x|>a$ bo‘lganida, U potensial energiya kinetik energiyadan katta bo‘ladi, ya’ni $U>E$, zarrachaning impulsi $p=\sqrt{2m(E-U)}=i\sqrt{2m(U-E)}$ mavhum kattalik bo‘ladi. (4.90) formuladagi eksponenta kattaliklari haqiqiy bo‘ladi va $x\to\infty$ da bittasi cheksiz kamayadi, bittasi esa cheksiz o‘sib boradi

$$\psi=\frac{c'}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int|p|dx\right)+\frac{c''}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int|p|dx\right)$$

$$\overline{\cos^2 \omega t} = \frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} \cos^2 \omega t dt = \frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} \frac{1+\cos 2\omega t}{2} dt = \frac{1}{2}.$$

Keltirilgan (4.63) formulada a – klassik ostsillyator tebranishining amplitudasini ifodalaydi. Biroq ostsillyatorning to‘la energiyasi

$$E_0 = \frac{1}{2} m a^2 \omega^2$$

bo‘lganligi uchun $a^2 = \frac{2E_0}{m\omega^2}$ bo‘ladi, shuning uchun (4.63) formula quyidagicha yoziladi:

$$\overline{\Delta x} = \sqrt{\frac{E_0}{m\omega^2}}. \qquad (4.64)$$

Ikkinchi tomonidan, shunga o‘xshash hisoblashlarni impulsni noaniqligi uchun bajariladi va quyidagi natija olinadi:

$$\overline{\Delta p} = \sqrt{\overline{p^2}} = \sqrt{m^2 a^2 \omega^2 \overline{\sin^2 \omega\, t}} = \sqrt{\frac{1}{2} m^2 a^2 \omega^2} = \sqrt{mE_0}. \qquad (4.65)$$

Shunday qilib,

$$\overline{\Delta x}\ \overline{\Delta p} = \sqrt{\frac{E_0}{m\omega^2}}\sqrt{mE_0} = \frac{E_0}{\omega}. \qquad (4.66)$$

Lekin noaniqlik munosabatlariga ko‘ra $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$ bo‘lganligi sababli va o‘rtacha kvadratik xatolar ko‘paytmasi esa

$$\overline{\Delta x} \cdot \overline{\Delta p_x} \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (4.67)$$

ekanligini eslasak, (4.67) formulada tenglik ishorasi olinsa, ya’ni xatolar ko‘paytmasining quyi chegarasi tanlab olinsa, u holda (4.66) ni (4.67) bilan taqqoslab, ushbu tenglikni topish mumkin:

$$\frac{E_0}{\omega} = \frac{\hbar}{2}, \text{ va } E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

Shunday qilib, kvant ostsillyatorning nolinchi energiyasi haqiqatan ham minimal energiya bo‘ladi. Noaniqlik munosabatlarining bajarilishini ta’minlash uchun, ostsillyator nolinchi holatda joylashgan bo‘lsa ham noldan farqli bo‘lgan eng kam energiyaga ega bo‘lishi kerak.

θ - radius vektor $\boldsymbol{r}$ bilan z o‘qi tashkil qilgan burchagi va

$$\varphi = arctg\frac{y}{x}$$

bo‘lib, r radius-vektorning (x,y) tekisligiga proyeksiyasini x o‘qi bilan tashkil qilgan burchagini ifoda qiladi.

Shredingerning (5.2) tenglamasini sferik koordinatalarda yozish uchun Laplas operatorining sferik koordinatalardagi ifodasi, ya’ni (2.74) va (2.96) ifodalardan foydalaniladi va quyidagi tenglama hosil qilinadi:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(r)\right]\psi=0$$

(2.74), (2.75) va (2.97) ifodalardan foydalanib,

$$\hat{H} = \hat{T}_r + \frac{\hat{\mathbf{M}}^2}{2mr^2} + U(\mathbf{r}) \qquad (5.3)$$

tenglik hosil qilinadi. Demak, markaziy maydondagi statsionar holatlar uchun Shredinger tenglamasi

$$\hat{T}_r\psi + \frac{\hat{\mathbf{M}}^2}{2mr^2}\psi + U(\mathbf{r})\psi = E\psi \qquad (5.4)$$

ko‘rinishga ega ekan.

Bu tenglamadagi ψ to‘lqin funksiyasini r, θ, φ sferik koordinatalar funksiyasi sifatida izlash tabiiydir. (5.4) tenglamaning r, θ, φ o‘zgaruvchilarning butun o‘zgarish sohasida, ya’ni $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$ va $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ sohalarda bir qiymatli, chekli va uzluksiz ψ yechimlarni topish lozim. $\hat{H}$ va $\hat{\mathbf{M}}^2$ operatorlar kommutativ bo‘lganligi sababli, ular umumiy xususiy funksiyalarga ega bo‘lishlari kerak, shu tufayli ψ to‘lqin funksiyasi uchun ikkinchi tenglama quyidagicha bo‘ladi:

$$\hat{\mathbf{M}}^2\psi = \mathbf{M}^2\psi \qquad (5.5)$$

Ushbu tenglamadagi $\hat{\mathbf{M}}^2$ ning xususiy qiymatlari $\hbar^2 l(l+1)$ ga teng bo‘ladi va (5.4) tenglamada $\hat{\mathbf{M}}^2\psi$ o‘rniga $\hbar^2 l(l+1)\psi$ kattalikni qo‘yish mumkin. U holda quyidagi tenglamaga kelinadi:

$$\hat{T}_r\psi + \frac{\hbar^2 l(l+1)\psi}{2mr^2} + U(\mathbf{r})\psi = E\psi \qquad (5.6)$$

bu yerda biz $|p| = \sqrt{2m(U-E)}$ haqiqiy kattalikni belgiladik. $|x| \geq a$ sohasida o‘suvchi hadni tashlab yuborsak ($c'' = 0$ deb tanlab olish yo‘li bilan) I soha uchun yechim

$$\psi_I = \frac{c'}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx\right) \qquad (4.92)$$

ko‘rinishda bo‘ladi. Shunga o‘xshash III soha uchun ham yechimni quyidagicha yozishimiz mumkin

$$\psi_{III} = \frac{c''}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|dx\right) \qquad (4.93)$$

Bizni qiziqtiruvchi II soha uchun echim

$$\psi_{II} = \frac{c}{\sqrt{|p|}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int pdx + \theta\right) \qquad (4.94)$$

ko‘rinishda bo‘ladi. Faqat $x=a$ va $x=b$ nuqtalarida bu yechimni biz ishlata olmaymiz chunki bu nuqtalarda $U = E$ bo‘ladi va:

$$\frac{1}{\sqrt{p}} = \frac{1}{\sqrt{2m(E-U)}} \to \infty$$

II sohaning tashqarisida burulish nuqtalari atrofida (4.92) va (4.93) eksponensial yechimlar $\sqrt{p} = \sqrt{2m(E-U)}$ kattalik nolga intilishi sababli cheksiz ravishda ortib boradi. Asosiy masala shundan iboratki, hosil bo‘lgan ikkita taqribiy yechimlar, ya’ni I va III sohadagi eksponensial yechim va II sohadagi tebranuvchi yechim $x=a$ va $x=b$ nuqtalarda Sredinger tenglamasining xususiy yechimiga mos kelishi kerak. Bu masala matematik nuqtai nazardan kvant mexannikasi bo‘yicha yozilgan turli darslikda batafsil yoritilgan va quyidagi natija olingan:

$$\psi(x) = \frac{c'}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx\right\} \qquad |x| \geq a \qquad (4.95)$$

$$\psi(x) = \frac{c'}{\sqrt{|p(x)|}}2\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx - \frac{\pi}{4}\right\} \qquad |x| \leq a \qquad (4.96)$$

va shunga o‘xshash analogik ravishda

$$\psi''(x) = \frac{c''}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_x^b |p|dx\right\} \qquad |x| \geq b, \qquad (4.97)$$

$$\psi = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(x)\right\} \qquad (4.79)$$

ko‘rinishda izlanadi. Bu yechimni (4.78) ga qo‘yilsa

$$i\hbar S'' - S'^2 + 2m(E-U) = 0 \qquad (4.80)$$

tenglama hosil qilinadi. (4.80) ifoda aniq tenglama bo‘lganligi uchun $\hbar$ ni kichik parametr deb tanlab olib, tenglamaning yechimlarini kichik parametr bo‘yicha qator shaklida qidiriladi, ya’ni:

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) + ...$$

Bizning hisoblashlarimizda birinchi ikkita had bilan chegaralanish yetarlidir:

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) \qquad (4.81)$$

Hosil bo‘lgan taqribiy yechimni (4.80) ifodaga olib borib qo‘yib,

$$2m(E-U) - S_0'^2(x) + \hbar\left[iS_0''(x) - 2S_0'S_1'\right] = 0 \qquad (4.82)$$

ni hosil qilinadi. (4.82) tenglama aynan nolga teng bo‘lishi uchun uning $\hbar$ bo‘yicha alohida hadlari nolga teng bo‘lishi kerak, ya’ni $\hbar$ qatnashmaydigan hadlar va $\hbar$ ning oldidagi ko‘paytuvchu uchun:

$$2m(E-U) - S_0'^2(x) = 0 \qquad (4.83)$$

$$iS_0''(x) - 2S_0'S_1'(x) = 0 \qquad (4.84)$$

ifodalarni olish mumkin. Avvalo $\hbar = 0$, ya’ni nolinchi yaqinlashishga tegishli bo‘lgan (4.83) shartni ko‘rib chiqaylik. Bunda

$$S_0'(x) = \pm\sqrt{2m(E-U)}$$

natija olinadi. $\sqrt{2m(E-U)}$ kattalik klassik mexanikadagi p impulsni ifodalaydi, bundan

$$S_0'(x) = \pm\sqrt{2m(E-U)} = \pm p$$

$$S_0(x) = \pm\int_{x_0}^{x} pdx \qquad (4.85)$$

ifodalar hosil bo‘ladi. Shunday qilib, nolinchi yaqinlashishda klassik mexanikaning oddiy yechimini hosil qilar ekanmiz.

Yuqoridagi (4.84) tenglama orqali $S_1(x)$ ni topish mumkin

4.5. Klassik mexanikasiga o‘tish

Kvant mexanikasidagi zarrachaning harakatini tasvirlovchi Shredinger tenglamasini vaqtga bog‘liq bo‘lgan ko‘rinishini 3-bobda hosil qilgan edik, ya’ni

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

Endi $\hbar\to 0$ intilganda Shredinger tenglamasi klassik mexanikaning asosiy tenglamasiga o‘tishini ko‘rib chiqaylik.

Klassik mexanikadan ma’lumki, zarrachaning harakatini ifodalovchi tenglamalar turli xil matematik ko‘rinishda berilishi mumkin. Bu Lagranj tenglamalari yoki Gamilton tenglamalari bo‘lishi mumkin, ya’ni:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0 \qquad \text{Lagranj tenglamasi}$$

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i},\quad \dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad \text{Gamilton tenglamalari}$$

Gamiltonning kanonik tenglamalar sistemasi yechimlarini bitta xususiy hosilali differensial tenglamani yechish orqali ham topish mumkin. Ushbu ikkinchi darajali birinchi tartibli xususiy hosilali tenglamani klassik mexanikada Gamilton -Yakobi tenglamasi deyiladi. Bu tenglama yordamida klassik mexanika doirasida berilgan barcha masalalarni yechish imkoniyati mavjud.

Kvant mexanikasining asosiy dinamik tenglamasi Shredinger tenglamasi bo‘lib, o‘zining strukturasi, xarakteri va aniqlanish usuli bilan Gamilton –Yakobi tenglamasiga yaqin turadi.

Klassik mexanikadagi Gamilton –Yakobi tenglamasi

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2\right]+U=-\frac{\partial S}{\partial t} \tag{4.68}$$

ko‘rinishda, yoki kompakt ko‘rinishda,

$$\frac{1}{2m}(grad\,S)^2+U=-\frac{\partial S}{\partial t} \tag{4.69}$$

bo‘ladi. Bunda S - ta’sir funksiyasi deyiladi va u koordinata hamda vaqtning funksiyasidir.

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(gradS)^2+U+\frac{i\hbar}{2m}\Delta S=0 \tag{4.75}$$

Klassik mexanikaga mos kelishi uchun $\hbar\to 0$ bo‘lishi kerak, buning uchun (4.75) tenglamada $\hbar=0$ deb olinadi va

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(gradS)^2+U=0 \tag{4.76}$$

tenglamaga kelinadi. Bitta x koordinata uchun

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+U=0 \tag{4.77}$$

tenglama hosil qilinadi. Shunday qilib, $\hbar\to 0$ da klassik mexanikadagi (4.76) yoki xususiy holda (4.77) Gamilton–Yakobi tenglamasini hosil qildik.

4.6. Kvaziklassik yaqinlashish

Avvalgi paragrafda $\hbar\to 0$ da Shredinger tenglamasi Gamilton – Yakobi tenglamasiga uzluksiz ravishda o‘tishi ko‘rsatildi. Ikkinchi tomondan Bor kvantlash shartiga asosan

$$\int pdq=n\hbar$$

bo‘ladi va Bor atomining statsionar orbitalari de-Broyl to‘lqinlarining $\lambda=\frac{\hbar}{p}$ butun sonlari mos keluvchi orbitalar hisoblanadi.

Yuqorida keltirilgan faktlarga asoslangan holda ketma-ket yaqinlashish usuli yordamida Shredinger tenglamasidan Bor nazariyasi orqali klassik mexanikaga o‘tish mumkin. Ayniqsa bu o‘tish bir o‘lchamli harakat misolida quyida keltirilgan Vensel-Kramers-Brillyuen (yoki qisqacha VKB) yaqinlashish metodi yordamida kvaziklassik yaqinlashish deb nomlangan yaqinlashishda yaqqol ko‘rinadi.

Bir o‘lchamli Shredinger tenglamasi

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0$$

ni quyidagi ko‘rinishda yozish qulay bo‘ladi:

$$\hbar^2\psi''+2m(E-U)\psi=0 \tag{4.78}$$

(4.78) tenglama yechimi

$$\psi''(x)=\frac{c''}{\sqrt{p(x)}}2\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_x^b pdx-\frac{\pi}{4}\right\} \quad |x|\le b. \tag{4.98}$$

Ikki yechimni taqqoslash natijasida Bor-Zommerfeld kvantlash shartidan kelib chiqadigan natija bilan mos kelishini ko‘rib chiqaylik. Ma’lumki, $x=a$ va $x=b$ nuqtalarda ikkala yechim bitta E energiya uchun to‘g‘ri kelishi va bir-biriga teng bo‘lishi kerak, ya’ni

$$\frac{c'}{\sqrt{|p(x)|}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx-\frac{\pi}{4}\right\}=\frac{c''}{\sqrt{|p(x)|}}\cos\left\{\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x)\,dx-\frac{\pi}{4}\right\}. \tag{4.99}$$

Ushbu tenglik bajarilishi uchun fazalar yig‘indisi π butun karrali songa teng bo‘lishi kerak va $c''=(-1)^n c'$. Shunday qilib,

$$\left\{\frac{1}{\hbar}\left[\int_a^x p(x)dx+\int_x^b p(x)dx\right]-\frac{\pi}{2}\right\}=\pi n$$

yoki

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

bo‘lishi kerak. Ammo

$$J=\oint p(x)dx=2\int_a^b p(x)dx$$

bo‘lganligi sababli:

$$J=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\cdot 2\pi=\left(n+\frac{1}{2}\right)h$$

hosil bo‘ladi. Bunda $\hbar\cdot 2\pi=h$. Shunday qilib, kvant nazariyasining kvant shartlari hosil qilinadi. Ushbu shartlar Bor nazariyasidagi statsionar holatlarni aniqlovchi kvantlash qoidasining aynan o‘zidir. Demak, Bor nazariyasi kvaziklassik yaqinlashish doirasida to‘g‘ri natijalarga olib kelar ekan.

4.8. IV bob ga oid savol va masalalar

1. *Dekart koordinatalarida erkin zarracha to‘lqin funksiyasining ko‘rinishi yozing.*

2. *Kvant mexanikasida zarrachani potensial to‘siqdan o‘tish hodisasining mohiyatini ochib bering.*

V bob
MARKAZIY SIMMETRIK MAYDONDAGI HARAKAT

5.1. Shredinger tenglamasining radial qismi

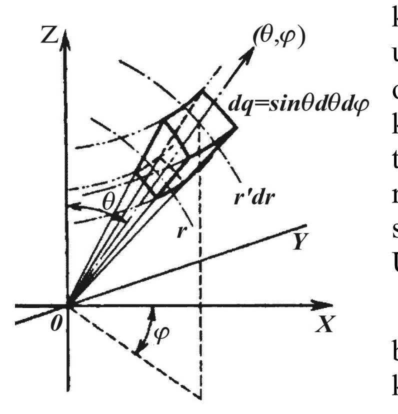
Markaziy kuch maydonidagi zarrachaning harakatini o‘rganish potensial o‘radagi zarrachaning harakati, garmonik ossilyator masalasi kabi kvant mexanikasining fundamental masalalarini tashkil etadi. Markaziy kuch maydonida harakatlanayotgan zarrachaning potensial energiyasi faqat masofaning funksiyasi

$$U=U(\mathbf{r}) \tag{5.1}$$

bo‘lib, markaziy simmetrik maydon hosil qiladi. U(**r**) potensial energiyali simmetrik maydondagi harakatlanuvchi zarrachaning statsionar holatlari uchun Shredinger tenglamasi

$$\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(\mathbf{r})\right]\psi=0 \tag{5.2}$$

ko‘rinishga ega, bunda $\Delta=\nabla^2$ – Laplas operatori. Tenglamadan ko‘rinib turibdiki, Laplas operatori va ψ funksiya x, y, z koordinatalariga bog‘liq, ammo potensial energiya U(**r**) Dekart koordinatalari x, y, z ning emas, balki **r** masofaning funksiyasidir. Potensial energiyaning (5.1) ko‘rinishdagi markaziy simmetrik holi uchun r, θ, φ sferik koordinatalarga o‘tish, Laplas operatorini sferik koordinatalar orqali ifodalash (5.2) tenglamani yechishni osonlashtiradi. 13-rasmda sferik va Dekart koordinatalar sistemalarining bog‘lanishi tasvirlangan. Ushbu rasmda



13-rasm. Dekart va sferik koordinatalar orasidagi bog‘lanish.

$$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

bo‘lib, $\boldsymbol{r}$ – koordinata boshidan kuzatilayotgan nuqtagacha o‘tkazilgan radius vektorning uzunligi,

$$\theta=\arccos\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

Kvant mexanikasida energiyaning saqlanish qonunini

$$H(q_1,...q_n,\ p_1,...p_n)=E$$

orqali yozish mumkin. Chap tomondagi q_i va p_i kattaliklarni ularning operatorlari ko'rinishidagi ifodalari bilan almashtiriladi:

$$q_i\to\hat{q}_i,\ \ p_i\to\hat{p}_i=-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i},$$

o'ng tomondagi energiya doimiysini esa vaqt bo'yicha differensiallash operatori bilan almashtiriladi:

$$E\to-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}.$$

Endi ikkala tenglamani tuzish sxemalarini, ya'ni klassik mexanikadagi Gamilton –Yakobi tenglamasini va kvant mexanikasidagi vaqtga bog'liq bo'lgan Shredinger tenglamasini hosil bo'lish sxemasini keltirib chiqaraylik.

Klassik mexanikada	Kvant mexanikada	
$E\to-\dfrac{\partial S}{\partial t}$,	$E\to-\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial t}$,	(4.70)
$q_i\to q_i$,	$q_i\to\hat{q}_i$,	
$p_i\to\dfrac{\partial S}{\partial q_i}$,	$p_i\to\hat{p}_i=\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial q_i}$.	(4.71)

Energiyani saqlanish qonuni tenglamasi

$$E=H(q_1,...q_n,\ p_1,...p_n)$$

dan foydalanilsa,

Gamilton -Yakobi tenglamasi Shredinger tenglamasi

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=H(q_1,...,q_n,\ \frac{\partial S}{\partial q_l},...,\frac{\partial S}{\partial q_n})\qquad -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}(q_1,...,q_n,\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_l},...,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_n})\Psi$$

tenglamalar hosil bo'ladi. Yuqorida keltirilgan sxemaga asosan bitta zarracha uchun Shredinger tenglamasini tuzib chiqaylik. Dekart koordinatalar sistemasida energiyaning saqlanish qonuni

$$E=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+U(x,y,z)$$

ko'rinishda bo'ladi. Ushbu ifodada umumiy sxema bo'yicha (4.70) va (4.71) formulalardan foydalangan holda va ψ funksiyaga operatorlarning ta'sirini hisobga olib, izlayotgan tenglamani hosil qilamiz, ya'ni:

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+U\psi. \tag{4.72}$$

Endi yuqoridagi ikki tenglama orasidagi bog'lanishni, ya'ni $\hbar\to0$ da Shredinger tenglamasi Gamilton–Yakobi tenglamasiga o'tishini ko'rib chiqaylik. Agar Shredinger tenglamasiga to'g'ridan-to'g'ri $\hbar=0$ qo'yilsa, u holda bu tenglama hech qanday ma'noga ega bo'lmay qoladi. Shuning uchun (4.72) tenglamada $\hbar\to0$ limitga o'tiladi va Shredinger tenglamasining yechimi

$$\psi(x,y,z)=A\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right) \tag{4.73}$$

ko'rinishda izlanadi, bu yerda

$$S=S(x,y,z,t) \tag{4.74}$$

funksiya ta'sir o'lchamiga ega bo'lib, Gamilton–Yakobi klassik tenglamasining yechimi bilan bog'liqligini ko'rsatadi. *A=const* bo'lganida hosilalarni osongina hisoblash mumkin:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}A\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right),$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}A\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right),$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\left[-\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+\frac{i}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right]A\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right).$$

Huddi shunday y va z koordinatalari bo'yicha ham o'xshash ifodalarni olish mumkin. Olingan ifodalarni (4.72) tenglamaga qo'yiladi va $A\exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$ ga qisqartirib, quyidagi tenglama hosil qilinadi:

o'rinishga keltirilsin, bunda $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

$E\geq\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$ energiyaning qiymati uchun energetik spektrning diskretligi asoslab berilsin.

Yechish. Ikkala soha uchun Shredinger tenglamasining ko'rinishi quyidagicha

$$0\le x\le a,\quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2}+k^2\psi_1=0,\ \text{bu yerda}\ k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$x\ge a,\quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2}-\mu^2\psi_2=0,\ \text{bu yerda}\ \mu^2=\frac{2m}{\hbar^2}(U_0-E).$$

Chegaraviy shartlarni qanoatlantiruvchi bu tenglamalarning yechimlari quyidagicha bo'ladi:

$$\psi_1(x)=A\sin kx \quad \text{agarda}\quad 0\le x\le a$$

$$\psi_2(x)=Be^{-\mu x} \quad \text{agarda}\quad x\ge a.$$

$x=a$ nuqtadagi to'lqin funksiyasi va uning birinchi tartibli hosilasi uzluksizligidan

$$A\sin kx=Be^{-\mu x}\ \text{ va }\ Ak\cos kx=-B\mu e^{-\mu x}$$

tengliklar kelib chiqadi. Ushbu tengliklardan quyidagi olinadi:

$$ctgka=-\frac{\mu}{k}\ \text{ yoki }\ \sin ka=\pm\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{1}{2mU_0}}ka.$$

3. Potensial to'siqdan zarracha o'tganida shaffoflik va qaytish koeffitsiyentlarini aniqlab bering.

4. Chiziqli garmonik ostsillyator uchun Shredinger tenglamasining ko'rinishi qanday bo'ladi?

5. Kvant mexanikasi nuqtai nazaridan potensial o'rada harakatlanuvchi zarracha uchun qanday umumiy xarakterga ega bo'lgan natijalar kelib chiqadi?

6. Chiziqli garmonik ostsillyator uchun Shredinger tenglamasining xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalarini toping.

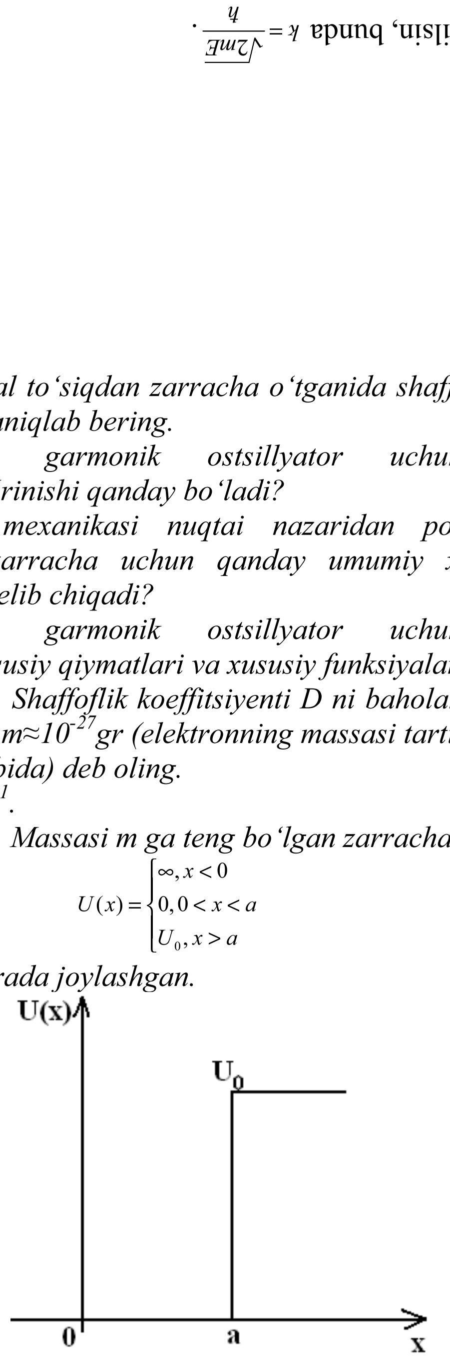
*7. **Masala**. Shaffoflik koeffitsiyenti D ni baholang bunda $D_0\approx1$, va U_0-E≈10^{-11} erg, m≈10^{-27}gr (elektronning massasi tartibida), l≈10^{-8} sm (atom radiusi tartibida) deb oling.*

***Javobi**:D~e^{-1}.*

*8. **Masala**. Massasi m ga teng bo'lgan zarracha quyidagi*

$$U(x)=\begin{cases}\infty, x<0\\ 0, 0<x<a\\ U_0, x>a\end{cases}$$

potensial o'rada joylashgan.



12-rasm.

$E<U_0$ sohada zarracha energiyasining xususiy qiymatlari spektrini aniqlovchi tenglama hosil qilinsin va uni

$$\sin ka=\pm\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{1}{2mU_0}}ka$$

bo‘lishi uchun, r ning darajalari bo‘yicha tuzilgan qator r^{l+1} haddan boshlanishi kerak. Shuning ucnun $f(\rho)$ ni quyidagi ko‘rinishda izlanadi:

$$f(\rho)=\rho^{l+1}\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\rho^\nu \qquad (5.35)$$

bunda a_ν lar hozircha no‘malum bo‘lgan koeffitsiyentlar. Hosil qilingan (5.28) va (5.33) tengliklardan ma’lumki,

$$R(\rho)=\frac{e^{-\alpha\rho}f(\rho)}{\rho} \qquad (5.28')$$

radial funksiya ρ ning cheksizga intilishida chekli bo‘lish sharti bilan aniqladi. (5.35) dagi noma’lum a_ν koeffitsiyentlarni topish uchun (5.35) ni (5.34) ga qo‘yib,

$$\sum_{\upsilon=0}^{\infty}(\nu+l+1)(\nu+l)a_\nu\rho^{\nu+l-1}-2\alpha\sum_{\upsilon=0}^{\infty}(\nu+l+1)a_\nu\rho^{\nu+l}+\left(\frac{2Z}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\rho^{\nu+l+1}=0$$

yoki

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}(\nu+l+1)(\nu+l)a_\nu\rho^{\nu+l-1}-2\alpha\sum_{\nu=0}^{\infty}(\nu+l+1)a_\nu\rho^{\nu+l}+2Z\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\rho^{\nu+l}-l(l+1)\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\rho^{\nu+l-1}=0$$

tenglama hosil qilinadi. Oxirgi ifodadagi birinchi va to‘rtinchi hadda ν ni $\nu+1$ ga almashtirib, ρ ning bir xil darajalari hosil qilinadi. Shunday qilib,

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}\left\{a_{\nu+1}\left[(\nu+l+2)(\nu+l+1)-l(l+1)\right]+a_\nu\left[2Z-2\alpha(\nu+l+1)\right]\right\}\rho^{\nu+l}=0 \qquad (5.36)$$

tenglamaga kelinadi. (5.35) qator (5.34) tenglamaning yechimi bo‘lishi uchun ρ ning barcha qiymatlarida (5.36) ifoda noldan cheksizlikkacha aynan qanoatlantirilishi kerak. Bu esa faqat ρ oldida turgan koeffitsiyentlar alohida-alohida nolga teng bo‘lgandagina o‘rinlidir, ya’ni ν ning barcha qiymatlarida

$$a_{\nu+1}\left[(\nu+l+2)(\nu+l+1)-l(l+1)\right]+a_\nu\left[2Z-2\alpha(\nu+l+1)\right]=0 \qquad (5.37)$$

shart bajarilishi kerak. Bu talabdan a_ν va $a_{\nu+1}$ orasida quyidagi rekurrent formula kelib chiqadi:

$$a_{\nu+1}=\frac{2\alpha(\nu+l+1)-2Z}{(\nu+l+2)(\nu+l+1)-l(l+1)}a_\nu,\quad \nu=0,1,2,3,....... \qquad (5.38)$$

Birinchi a_0 koeffitsiyent ixtiyoriy ravishda tanlab olinishi kerak. Bu koeffitsiyentga qandaydir qiymat berib, (5.38) dan a_1 ni topish mumkin, a_1 orqali a_2 aniqlanadi va hokazo. Barcha a_ν larni hisoblab, ρ darajalari bo‘yicha qator shaklidagi izlanayotgan yechimni topish mumkin. Rekurrent formuladan ko‘rinib turibdiki, (5.35) qator Z va α o‘zgarmaslar o‘rtasidagi munosabatga bog‘liq ravishda cheksiz darajali yoki chekli darajali kabi qatorga, ya’ni polinomga aylanadi. Agarda

$$\lambda=\frac{Z}{\alpha}\quad \text{va}\quad S=2l+1$$

kabi belgilash kiritilsa, (5.38) formulani

$$a_{\nu+1}=\frac{2\alpha}{\nu+1}\,\frac{(\nu+\frac{s+1}{2})-\lambda}{\nu+l+1}a_\nu$$

ko‘rinishda yozish mumkin bo‘ladi. Agar qator uzilmasa va $\nu\to\infty$ intilsa, quyidagi formulaga ega bo‘linadi:

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu}\to\frac{2\alpha}{\nu+1}.$$

Bu xil rekurrent formula eksponenta ko‘rinishidagi funksiyalar uchun o‘rinlidir. Haqiqatdan ham:

$$e^{2\alpha\rho}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(2\alpha\rho)^n$$

bo‘lganligi uchun qatorning ρ^n va ρ^{n+1} hadlari oldidagi koeffitsiyentlarining nisbati:

$$\frac{b_{n+1}}{b_n}=\frac{(2\alpha)^{n+1}}{(n+1)!}:\frac{(2\alpha)^n}{n!}=\frac{2\alpha}{n+1}$$

ga teng bo‘ladi. Demak (5.35) qator chekli bo‘lmasa, ν ning katta qiymatlarida $f(\rho)$ funksiyani tavsiflovchi qator, $e^{2\alpha\rho}$ funksiya kabi o‘zgaradi va ρ ning cheksizlikka intilishida chekli bo‘lish sharti qo‘yilgan R radial funksiya uzoqlashuvchi asimptitotikaga ega bo‘lib qoladi, ya’ni $\rho\to\infty$ da $R\to\frac{\exp(\alpha\rho)}{\rho}$. Fizik haqiqatni aks ettira olmaganligi sababli bu yechimning ahamiyati yo‘q. $\rho\to\infty$ da yechim

spektroskopik chastota c yorug‘lik tezligiga bo‘lingan oddiy ν chastotaga teng bo‘ladi:

$$\nu_{spektr}=\frac{1}{\lambda}=\frac{\nu}{c}=\frac{\omega}{2\pi c}sm^{-1}. \qquad (5.57)$$

To‘lqin sonlarida ifodalangan Ridberg doimiysi

$$R=\frac{e^4m}{4\pi\hbar^3c}=109737,30sm^{-1} \qquad (5.58)$$

ga teng bo‘ladi. Ushbu o‘lchamlardagi vodorod atomining termlari

$$\frac{R}{n^2}=\frac{1,09\cdot10^5}{n^2},n=1,2,3,... \qquad (5.59)$$

ko‘rinishda bo‘ladi.

(5.54) ifodadagi n' ning muayyan qiymatida yutilayotgan (yoki nurlanayotgan) elektromagnit nurlanishlarning chastotalari to‘plami spektral seriya deb yuritiladi. Masalan, vodorod atomi uchun quyidagi seriyalar mavjud:

1) $n'=1$ bo‘lgandagi o‘tishlar Layman seriyasi deb yuritiladi;

2) $n'=2$ bo‘lgandagi o‘tishlar Balmer seriyasi deb yuritiladi va bu seriyaga mos nurlanishlar optik diapazonda bo‘ladi;

3) $n'=3$ bo‘lgandagi o‘tishlar Pashen seriyasi deb yuritiladi;

4) $n'=4$ bo‘lgandagi o‘tishlar Brekket seriyasi deb yuritiladi.

(5.50) formula yordamida aniqlangan $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ xususiy funksiyalarni va kvant holatlarini batafsil tekshirib chiqaylik. Uchta n,l,m kvant sonlari bilan berilgan ixtiyoriy ma’lum holat bir vaqtning o‘zida uchta o‘lchab bo‘ladigan kattaliklarning xususiy holatini tavsiflaydi. Bir vaqtning o‘zida bu uchta o‘lchab bo‘ladigan kattaliklarni – energiya, impuls momentining kvadrati va impuls momentining proyeksiyalari tashkil etadi. ψ_{nlm} holatida bu kattaliklar quyidagi qiymatlarga ega bo‘ladilar, ya’ni

$$E_n=-\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \qquad (5.60)$$

$$M_l^2=\hbar^2l(l+1),\quad l=0,1,2,...,n-1, \qquad (5.61)$$

$$M_z=\hbar m,\quad m=0,\pm1,\pm2,...,\pm l. \qquad (5.62)$$

Shunday qilib, n,l,m kvant sonlarining asosiy ma’nosi shundan iboratki, n-bosh kvant soni E_n energiya qiymatini belgilaydi, l orbital kvant soni- M_l^2 impuls momentining kvadratini, va nihoyat m magnit

$r=0$ nuqtadagi to‘lqin funksiyasining chekli bo‘lishi:

$$\chi(0)=0 \qquad (5.12)$$

shartga olib keladi. (5.11) dagi radial funksiya uchun tenglama

$$U_{eff}(r)=U(r)+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2} \qquad (5.13)$$

effektiv potensial energiyali bir o‘lchamli harakat tenglamasiga keladi. Klassik mexanikaga o‘xshash $\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}$ kattalik markazdan qochma energiya deyiladi. $U(r)$ potensial energiyani ko‘rinishini konkretlashtirmasdan, koordinata boshida va kuch markazidan katta masofalarda to‘lqin funksiyasini holati haqida muayyan mulohazalar keltirib chiqarish mumkin.

Dastavval $r\to0$, ya’ni kichik masofalar sohasi tekshirib chiqiladi va koordinata boshi atrofida $U(r)$ o‘zaro ta’sir potensial energiyasini juda kam o‘zgarishini ta’kidlash kerak ,ya’ni:

$$\lim_{r\to0}r^2U(r)=0 \qquad (5.14)$$

bo‘ladi. Bu shartning bajarilishi $r\to0$ intilganda $U(r)$ funksiya $\frac{1}{r^2}$ funksiyaga nisbatan kamroq o‘sib borishini bildiradi. Bunday holat yadroning Kulon maydonida joylashgan elektron uchun bajariladi. Demak, (5.11) tenglamada $r\to0$ intilganda $E\chi$ va $U(r)\chi$ hadlarni $\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}\chi$ hadga nisbatan hisobga olinmasa ham bo‘ladi. U holda (5.11) tenglamadan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}\chi=0 \qquad (5.15)$$

tenglama hosil qilinadi. Olingan tenglamaning yechimi

$$\chi=Ar^\gamma$$

ko‘rinishda izlanadi. Bu ifoda (5.15) tenlamaga qo‘yilsa:

$$\gamma(\gamma-1)=l(l+1) \qquad (5.16)$$

tenglikka kelinadi va (5.16) tenglama ikkita ildizga ega bo‘ladi,ya’ni

$$\gamma_1=l+1,\gamma_2=-l.$$

Ikkinchi ildizni yoki boshqacha aytganda ikkinchi $\chi_2=Ae^{-l}$ yechimni tashlab yuboriladi, chunki $r\to0$ intilganda R funksiya cheksiz orta boradi. Shunday qilib, kichik masofalarda $\chi(r)\approx r^{l+1}$ bo‘lib, to‘lqin funksiyasining radial qismi esa

$$R(r)=Ar^{l} \tag{5.17}$$

orqali ifodalanadi. Kuch markazidan r berilgan masofada θ va φ burchaklarga bog‘liq bo‘lmagan holda zarrachani topish ehtimolligi radial funksiya modulining kvadrati bilan beriladi, ya’ni $|R|^2 r^2 dr$ ga proporsional kattalik bilan. (5.17) tenglamadan ko‘rinib turibdiki, kichik r masofalarda zarrachani topish ehtimolligi $r^{2l+2}dr$ ga proportsional bo‘ladi va l kattalashgan sari bu ehtimollik berilgan masofada kamayib boradi, boshqacha aytganda, markazdan qochma kuch zarrachani markazdan uloqtirib tashlashga harakat qiladi.

Endi to‘lqin funksiyani koordinata boshidan katta masofalarda asimptotik holatini tekshirib chiqaylik. Katta masofalarda zarrachaga ta’sir etuvchi kuch nolga yaqinlashib boradi va $U(r)$ potensial energiyaning boshlanishi deb hisoblanadi, u holda

$$\lim_{r\to\infty} U(r)=0$$

bo‘lishi kerak. Demak, (5.11) tenglamada r ning katta qiymatlarida $E\chi$ hadga nisbatan $U\chi$ va $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\chi$ hadlarni hisobga olinmasa ham bo‘ladi, u holda (5.11) tenglama

$$\frac{d^2\chi}{dx^2}-k^2\chi=0, \quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \tag{5.18}$$

ko‘rinishga keladi. Olingan (5.18) tenglamaning yechimi

$$\chi=C_1e^{ikr}+C_2e^{-ikr} \tag{5.19}$$

ko‘rinishda izlanadi, bunda C_1 va C_2– integrallash doimiylaridir.

Avvalo E energiyaning musbat qiymatlariga javob beradigan yechimlarni tekshirib chiqaylik. $E>0$ bo‘lganida (5.18) formula orqali berilgan k kattalik haqiqiy qiymatga ega bo‘ladi.

(5.19) to‘lqin funksiyaning radial qismi ikkita funksiya yig‘indisidan iborat bo‘ladi:

$$R(r)=C_1\frac{e^{ikr}}{r}+C_2\frac{e^{-ikr}}{r}. \tag{5.20}$$

Kuch markazidan uzoq masofalarda radial funksiya yaqinlashuvchi va uzoqlashuvchi sferik to‘lqinlarning superpozitsiyasini ifodalaydi. Zarrachani topish ehtimolligi katta r larda ham noldan farqli bo‘ladi,

Ushbu ko‘rilayotgan hol elektronning yadroga tortishish holiga mosdir. Shuning uchun markaziy simmetrik maydonidagi harakatning umumiy nazariyasiga asosan (oldingi paragrafga qarang) biz $E>0$ bo‘lganida uzluksiz energetik spektrga va $E<0$ bo‘lganida diskret spektrga ega bo‘linadi. Maqsadimiz yuqorida ta’riflangan diskret spektrni va R radial funksiyalarni aniqlashdan iborat. Tenglamaning yechimini olish uchun o‘lchamsiz kattaliklar quyidagicha kiritiladi:

$$\rho=\frac{r}{a} \quad \text{va} \quad \varepsilon=\frac{E}{E_1}, \tag{5.30}$$

bunda

$$a=\frac{\hbar^2}{me^2}=0,529\cdot10^{-8}sm,\ E_1=\frac{me^4}{2\hbar^2}=\frac{e^2}{2a}=13,55eV \tag{5.31}$$

bo‘ladi. Kiritilgan (5.30) belgilashlarni (5.29) tenglamaga qo‘yilsa, $m,e,\hbar$ atom doimiylari qatnashmaydigan quyidagi

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+(\varepsilon+\frac{2Z}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2})\chi=0 \tag{5.32}$$

tenglamaga kelinadi.

Dastavval (5.32) tenglama yechimining asimptotikasi o‘rganiladi. 5.1-paragrafdagi χ funksiyasining asimptotik holatini tekshirishdan kelib chiqqan natijadan foydalanib, (5.32) tenglamaning yechimi quyidagi ko‘rinishda izlanadi:

$$\chi(\rho)=e^{-\alpha\rho}f(\rho),\quad \alpha=\sqrt{-\varepsilon}. \tag{5.33}$$

Bunda noma’lum $f(\rho)$ funksiyaning oshkor korinishi asimptotada $e^{-\alpha\rho}$ dan tez o‘smaydigan bo‘lishi kerak. (5.33) yechimni (5.32) tenglamaga qo‘yilsa, f funksiya uchun quyidagi differensial tenglama hosil bo‘ladi:

$$\frac{d^2f}{d\rho^2}-2\alpha\frac{df}{d\rho}+\left(\frac{2Z}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)f=0. \tag{5.34}$$

(5.34) tenglamaning yechimi – f funksiyaning oshkor ko‘rinishini, yuqoridagi shartga ko‘ra, darajali qator shaklida izlanadi. Umumiy nazariyadan ma’lumki, (5.29) tenglamaning yechimi $r=0$ da chekli

chekli bo‘lishi uchun qator biror ν hadda uzilishga ega bo‘lishi kerak. U holda $f(\rho)$ qator ko‘phad bo‘lib qoladi va $\rho\to\infty$ bo‘lganida ham $R\to0$ bo‘ladi. Hosil qilingan bunday yechim tekshirilayotgan tenglamaning xususiy funksiyasi bo‘lib, $\rho=0$ dan to $\rho=\infty$ gacha bo‘lgan intervalda chekli va bir qiymatli bo‘ladi.

Endi (5.35) qator biror ν hadida uzilishga to‘g‘ri keladigan shart aniqlanadi. Qator uzilish uchun (5.38) ning o‘ng tomonidagi kasr surati nolga aylanishi lozim, ya’ni

$$2\alpha(n_r+l+1)-2Z=0$$

yoki

$$\alpha=\frac{Z}{n_r+l+1} \tag{5.39}$$

bo‘lishi kerak. Hosil qilingan (5.39) tenglikdan ayonki, bu shart bajarilganda a_{n_r+1} koeffitsiyentning o‘zi va undan keyingi koeffitsiyentlarning barchasi nolga teng bo‘lishi kerak. Demak, $f(\rho)$ yechim ko‘phadga aylanishi uchun va shu bilan birga $R(\rho)$ funksiya butun intervalda chekli bo‘lishi uchun (5.39) ifoda yetarli va zaruriy shart sifatida bajarilishi kerak.

$$n=n_r+l+1,\ n_r=0,1,2,3 \tag{5.40}$$

belgilash kiritib, (5.39) ga qo‘yilsa hamda (5.33) dagi α ning qiymati hisobga olinsa, quyidagi natijani olinadi, ya’ni

$$\varepsilon=-\frac{Z^2}{n^2}. \tag{5.40'}$$

Shu bilan birga (5.30) dagi ε ni E orqali ifodasini hisobga olib, quyidagi muhim natijaga kelinadi, ya’ni izlanayotgan R – chekli va bir qiymatli yechimlar faqatgina elektronning quyidagi diskret energiya qiymatlaridagina mavjuddir:

$$E_n=-\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{5.41}$$

Boshqacha aytganda, olingan formula vodorodsimon atomlar uchun mumkin bo‘lgan energetik sathlarni aniqlashga imkon yaratadi. Bunda n– butun musbat son bo‘lib,

$$n=1,\ 2,\ 3,\ \ldots, \tag{5.42}$$

qiymatlarni qabul qiladi va u bosh kvant soni deb atalib, elektronning energiyasini aniqlaydi. l va n_r kattaliklar mos holda orbital va radial

noldan emas balki E_1 eng kichik sathdan hisoblangan. Bosh kvant soni n oshgan sari sathlar orasidagi masofa kamayib boradi va $n=\infty$ da $E_\infty=0$ bo‘ladi. Keyinchalik ionlashgan atomga xos bo‘lgan $E>0$ uzluksiz spektr sohasi keltirilgan. Vodorod atomning ionizatsiya energiyasi

$$J=E_\infty-E_1=-E_1=\frac{me^4}{2\hbar^2}=13.55eV \tag{5.52}$$

ga teng bo‘ladi. Bunda m–elektronning massasini ifoda qiladi. Endi 16-rasmning o‘ng tomonida tasvirlangan raqamlarga e’tibor qarataylik. E_{nlm} sathdan $E_{n'l'm'}$ sathga o‘tganimizda ω chastotali yorug‘lik nurlanadi va bu nurlanish

$$\hbar\omega=E_{nlm}-E_{n'l'm'} \tag{5.53}$$

formula yordamida hisoblanadi. Agar (5.41) dan E_{nlm} qiymatlari qo‘yilsa,

$$\omega=\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right) \tag{5.54}$$

natijaga kelinadi. Bu formula $Z=1$ da vodorod atomi tomonidan nurlanayotgan yoki yutiladigan yorug‘likning chastotasini beradi. $\frac{1}{\hbar}E_{nlm}$ kattalik “spektral term” deb ataladi. Termlarning ayirmasi yorug‘likning chastotasini beradi. Vodorod atomi uchun term

$$\frac{E_n}{\hbar}=\frac{e^4m}{2\hbar^3}\frac{1}{n^2},\ n=1,2,3,\ldots \tag{5.55}$$

teng bo‘ladi va

$$R=\frac{e^4m}{4\pi\hbar^3}=3,27\cdot10^{15}sek^{-1} \tag{5.56}$$

kattalik esa Ridberg doimiysi deyiladi. Bu kattalik birinchi marotaba N. Bor tomonidan nazariy jihatdan hisoblangan.

Optikaning spektroskopiya bo‘limida termlarning kattaliklarini $\frac{E}{\hbar}$ chastotalarda emas, balki 1 sm uzunlikda nechta λ to‘lqin uzunligi joylashadigan to‘lqin sonlari bilan belgilanadi. Agarda yorug‘likning siklik chastotasi ω orqali belgilansa, u holda oddiy chastota $\nu=\frac{\omega}{2\pi}$ ga teng bo‘ladi. Aynan shu chastotani $\frac{1}{\lambda}$ qiymatida o‘lchanadi va ya'ni r va $r+dr$ oralig'ida zarrachaning topish ehtimolligi $|R|^2$ va shar qatlamining $4\pi r^2 dr$ hajmiga proporsional bo'ladi:

$$W(r)\,dr \approx R^2 4\pi r^2 dr = 4\pi \left|C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr}\right|^2 dr.$$

Bunday holatlar klassik mehanikada aperiodik orbitalarga mos keladi, bu holatlarda zarracha cheksizlikdan kuch markazi tomoniga harakatlanadi va keyinchalik yana cheksizlikka qarab harakatni davom ettiradi , ya'ni infinit harakatga kelinadi. Tekshirilayotgan holat statsionar holatga tegishli bo'lganligi uchun kelayotgan zarrachalarning oqimi ketayotgan zarrachalarning oqimiga teng bo'lishi kerak.Demak, kelayotgan va ketayotgan to'lqinlarning C_1 va C_2 amplitudalarining modullari teng bo'lishi shart. Agarda $C_1 = \frac{1}{2i} A e^{i\alpha}$ va $C_2 = -\frac{1}{2i} A e^{-i\alpha}$ deb qabul qilinsa hamda A va α larning qiymatlari haqiqiy qiymat ekanligi hisobga olinsa, (5.20) ning asimtotik yechimini

$$R = A\frac{\sin(kx+\alpha)}{r} \qquad (5.21)$$

turg'un sferik to'lqin shaklida yozish mumkin.

Endi $E<0$ manfiy energiyalar sohasini tekshirib chiqaylik. Zarrachalarning kinetik energiyasi har doim musbat bo'lganligi sababli zarracha faqat markazga tortilish holatidagina to'liq energiya manfiy qiymatlarni qabul qiladi. Agarda $E<0$ bo'lsa, k kattalik mavhum qiymatlarni qabul qiladi, ya'ni $k = i\mu$, va $\mu = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ bo'lganida (5.20) radial funksiya

$$R = C_1\frac{e^{-\mu r}}{r} + C_2\frac{e^{\mu r}}{r} \qquad (5.22)$$

ko'rinishda yoziladi.Endi $r\to\infty$ da to'lqin funksiya chekli bo'lish shartini qanoatlantirish uchun biz C_2 doimiyni nolga teng deb olish kerak va

$$R = C_1\frac{e^{-\mu r}}{r} \qquad (5.23)$$

natijaga kelinadi. (5.23) dan ko'rinib turibdiki $r\to\infty$ da R to'lqin funksiya nolga intiladi va u chekli bo'ladi. Bunday holatlar uchun zarrachaning topilish ehtimolligi

$$w(r)dr \approx 4\pi|C_1|^2 e^{-2\mu r} dr$$

tushuntirib berishga imkon yaratib berdi. Bu nazariya elementlar davriy sistemasining kelib chiqish negizini, barqaror molekulalar tuzilishida atomlar o'zaro ta'sirining xarakterini, qattiq jismlarning mexanik, elektr va magnit xossalarini va mikrodunyoning bir qator muammolarini mukammal tushuntirib bera oldi.

Kvant mexanikasidagi eng sodda masalalardan biri yadroning Kulon maydonida elektronning harakati to'g'risidagi masaladir. Bunday masalani vodorod atomi H da, bir marta ionlashtirilgan va zaryad soni $z=2$ ga teng geliy He^+ ionida, ikki marta ionlashtirilgan va zaryad soni $z=3$ ga teng litiy Li^{++} ionida va shunga o'xshash vodorodsimon atomlar deb nomlangan ionlarda uchratiladi.

Demak, vodorod va vodorodsimon atomlar, ya'ni yadro maydonida bittagina elektron bo'lgan atomlar, elementlar davriy sistemasidagi eng sodda sistemalar qatoriga kiradi. Vodorod atomi elektr zaryadi $+e$ ga teng bo'lgan zarra – protondangina iborat bo'lgan yadrodan va manfiy $-e$ zaryadli elektrondan tuzilgan. Proton va elektron o'zaro elektrostatik tortishish kuchi orqali ta'sirlashadi. Kulon tortishish kuchi ta'siridagi bitta elektronning potensial energiyasi

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (5.27)$$

ga teng bo'ladi. Bunda Ze – yadroning zaryadi, elementlar davriy sistemasida Z– yadroning nomeri, vodorod atomi uchun $Z=1$, r– yadro bilan elektron orasidagi masofa. Vodorod atomi holida proton maydonida harakatlanayotgan elektron uchun kvant sathlarini topish uchun Shredinger tenglamasining radial qismini yechish kerak bo'ladi.Ushbu radial funksiya

$$R = \frac{\chi}{r} \qquad (5.28)$$

ko'rinishda olinsa, avvalgi paragrafda hosil qilingan (5.11) tenglama olinadi. Bu tenglamaga (5.27) dagi U ning qiymati qo'yilsa va elektronning massasini m desak, markaziy simmetrik maydonda statsionar harakat qilayotgan elektron to'lqin funksiyasining radial qismi uchun yozilgan tenglamaga kelinadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\chi - \frac{Ze^2}{r}\chi = E\chi. \qquad (5.29)$$

kvant sonlari deb yuritiladi. Shu narsani alohida qayd qilib o'tish joizki, vodorod atomi elektronining statsionar holatlari energiyasi uchun kvant mehanikasi asosida aniqlangan (5.41) ifoda shu hol uchun Bor nazariyasida $n=0$ qiymatning qabul qila olmasligini alohoda uqtirib keltirilgan edi. Kvant mehanikasida esa bu muammo o'z-o'zidan bartaraf qilinadi, chunki $l=0,1,2,\ldots$, qiymatlarni qabul qiladi va n_r esa (5.35) qator hadining nomeri bolib uning eng kichik qiymati nolga teng bo'ladi va (5.40) ga asosan bosh kvant soni nol qiymatni qabul qila olmaydi.

5.3. Vodorodsimon atomning to'lqin funksiyasi

To'lqin funksiyaga qo'yilgan cheklilik shartidan (5.34) tenglama yechimini chekli darajali polinom bo'lishi aniqlandi. $\alpha = \frac{Z}{n}$ xususiy yechimlar uchun (5.38) formula sezilarli darajada soddalashadi, ya'ni

$$a_{\nu+1} = -\frac{2Z}{n}\frac{n-(l+\nu+1)}{(\nu+1)(2l+\nu+2)}a_\nu \qquad (5.43)$$

bo'ladi. Bu formula yordamida a_ν koeffitsiyentlarni ketma-ket hisoblab chiqib, (5.35) formulaga qo'yilsa:

$$f(\rho) = a_0\rho^{l+1}\left[1 - \frac{n-l-1}{1!(2l+2)}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right) + \frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^2 + \ldots + (-1)^{n_r}\frac{(n-l-1)(n-l-2\ldots)}{n_r!(2l+2)(2l+3)\ldots(2l+n_r+1)}\left(\frac{2Z\rho}{n_r}\right)^{n_r}\right] \qquad (5.44)$$

ifoda hosil qilinadi. Bu formulada yangi ξ o'zgaruvchini

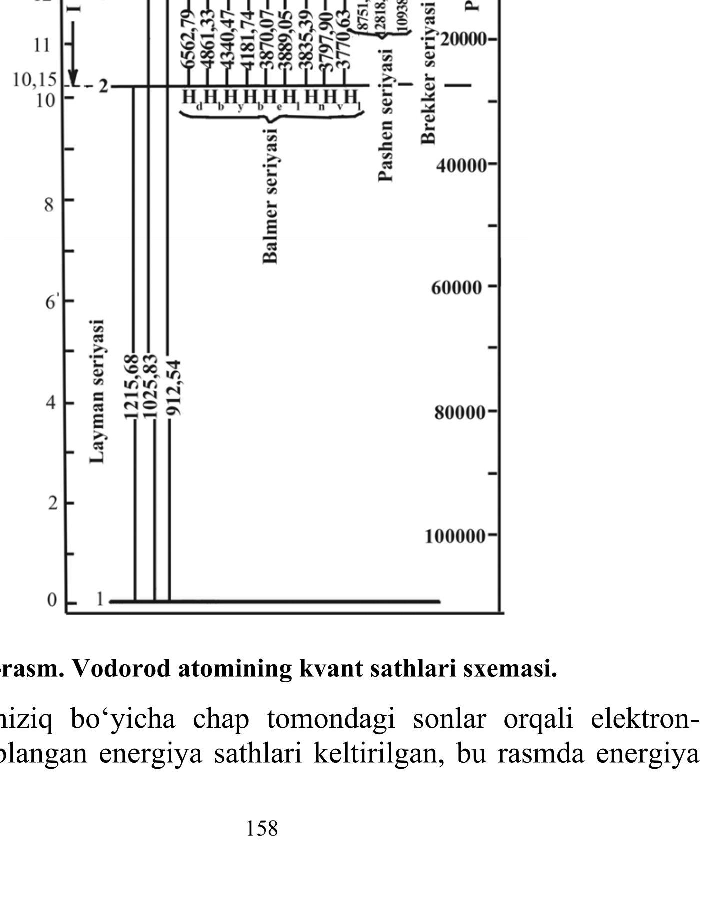
$$\xi = \frac{2Z\rho}{n} = \frac{2Z}{na}r \qquad (5.45)$$

ko'rinishda kiritish va barcha doimiy ko'phadlarni bitta N_{nl} orqali belgilash natijasida (5.28') formuladan n va l kvant holatlarga tegishli bo'lgan $R_{nl}(\rho)$ funksiya uchun quyidagi formulaga kelinadi:

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl}e^{-\frac{1}{2}\xi}\xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi) \qquad (5.46)$$

5.4. Statsionar holatidagi vodorod atomining fazoviy taqsimoti

Oldingi paragrafda Kulon maydonida harakatlanayotgan elektron uchun Shredinger tenglamasi yechilgan edi. Olingan natijalardan foydalanib, vodorod atomining fazaviy strukturasi va boshqa bir qator xossalari to'g'risada xulosalar chiqarish mumkin. Elektronning energiyasini hisoblash uchun hosil qilingan (5.41) formulaga e, m va $\hbar$ universal doimiy qiymatlarni qo'yib, yadroning Kulon maydonida harakatlanuvchi elektronning kvant sathlarini hisoblash mumkin. 16-rasmda Z=1 bo'lganida vodorod atomining sathlari keltirilgan.

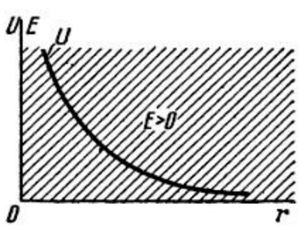


16-rasm. Vodorod atomining kvant sathlari sxemasi.

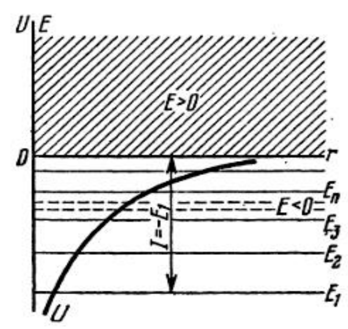
Vertikal chiziq bo'yicha chap tomondagi sonlar orqali elektron-voltlarda hisoblangan energiya sathlari keltirilgan, bu rasmda energiya ga teng boʻladi. Demak, kuch markazidan cheksiz katta masofalarda zarrachani topish ehtimolligi nolga teng boʻladi, boshqacha aytganda $r \to \infty$ da $w(r) \to 0$ boʻladi, ya'ni zarrachani kuch markazi atrofidagina topish mumkin. Bunday holatlar klassik mehanikada davriy orbitalarga mos keladi, boshqacha aytganda zarracha kuch markazi atrofida harakatlanadi, ya'ni finit harakatga keltiriladi.

$E<0$ boʻlganda energetik spektr toʻgʻrisida fikrlashib oʻtaylik. Yuqorida qayd etilganidek, bunday energiyalarga finit harakat mos keladi va tegishli boʻlgan toʻlqin funksiyalar kvadratik integrallanuvchi toʻlqin funksiyalar boʻladi. Bunday toʻlqin funksiyalar diskret spektrga tegishlidir. Demak, $E<0$ boʻlganda diskret energetik spektrga ega boʻlamiz.

Endi $U(\vec{r})$ potensial energiyaning bir nechta tipik hollarini koʻrib chiqaylik. Cheksizlikda potensial energiya nolga teng deb hisoblanadi. 14-rasmda zarrachaning itarishish holi uchun $U(\vec{r})$ potensial energiya tafsiflangan.



14-rasm. Itarishish holati uchun potensial energiya koʻrinishi. Energetik spektr uzluksiz.



15-rasm. Markazga tortishish holi uchun potensial energiya koʻrinishi. $E>0$ uchun energetic spektr uzluksiz boʻladi. $E<0$ hol uchun esa energetic spektr alohida sathlardan iborat boʻladi. I – ionizatsiya energiyasi.

Bu holda zarrachaning toʻla energiyasi musbatdir. $E>0$ boʻlganda energetik spektr uzluksizdir. Demak, itarishish kuchlar mavjud boʻlgan holda energiyaning noldan boshlab $+\infty$

gacha barcha qiymatlari mavjuddir. 15-rasmda esa tortishish holatlari uchun potensial energiya tavsiflangan.

Bu holatda ikki imkoniyatni ajratish zarurdir, ya'ni $E>0$ va $E<0$ boʻlganida. Birinchi holatda energetik spektr uzluksiz qiymatlarni qabul qiladi, ikkinchi holatda esa biz E_1, E_2, ... E_n diskret, uzlukli qiymatlar spektriga ega boʻlinadi. Uzlukli va uzluksiz spektrlardan tashkil topgan umumiy energetik spektr Kulon qonuniga binoan yadro bilan elektronning oʻzaro ta'sirini ifodalavchi energetik spektrga tegishlidir. Yuqorida koʻrsatib oʻtilganidek, diskret sathlar atomdagi elektronning harakatiga tegishlidir. Aksincha uzluksiz, diskret boʻlmagan, tutash spektr ionlashgan atomning energiyasiga mos keladi, chunki bu holatda elektron atomdan yetarli darajada uzoqlashgan va toʻla energiyasi musbat qiymatga ega boʻladi. Keltirilgan diagrammadan ionizatsiya uchun zarur boʻlgan energiyani hisoblab chiqish mumkin. Normal holatda, ya'ni uygʻonmagan holatida, elektron E_1 energiyaga ega boʻladi. Atomni ionlashtirish uchun shu atom elektronining energiyasi noldan katta boʻlishi kerak, shuning uchun normal holatdagi atomni ionlashtirish uchun sarflangan minimal ish

$$I = 0 - E_1 = -E_1 \qquad (5.24)$$

teng boʻlishi kerak.

Umuman olganda (5.2) dagi Shredinger tenglamasining umumiy yechimi (5.7) dagi toʻlqin funksiyalari superpozitsiyasi orqali berilishi mumkin,ya'ni:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \sum_{l,m} B_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (5.25)$$

koʻrinishda boʻladi. Xususiy holda φ burchakka bogʻliq boʻlmagan yechimlar uchun biz $m=0$ holatlarning superpozitsiyasiga mos keluvchi oddiy ifodaga kelamiz,ya'ni:

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l} C_l R_l(r) P_l(\cos\theta) \qquad (5.26)$$

boʻladi.

5.2. Kulon maydonidagi harakat

Kvant mexanikasining yaratilishi bilanoq, atomning kvantomexanik nazariyasi rivojlantirildi va bu nazariya tabiat hamda uning tuzilishi haqidagi bilimlarimizni tubdan oʻzgartirdi hamda bir qator hodisalarni

bunda L_{n+l}^{2l+1} kattalik orqali (5.44) formuladagi kvadrat qavs ichidagi koʻphad belgilangan. Matematika kursidan ma'lumki, (5.44) dagi koʻphad Lagerr polinomlari

$$L_k(\xi) = e^{\xi}\frac{d^k}{d\xi^k}(e^{-\xi}\xi^k) \qquad (5.47)$$

dan olingan hosilalar orqali ifodalanishi mumkin. Umumiy holda $L_k^s(\xi)$ koʻphad deganda

$$L_k^s(\xi) = \frac{d^s}{d\xi^s}L_k(\xi) = e^{\xi}\frac{d^k}{d\xi^k}(e^{-\xi}\xi^k) \qquad (5.48)$$

koʻphadni tushinish kerak va (5.48) dagi ifodani, odatda, umumlashgan Lagerr polinomi deyiladi. Agarda $k=n+l$ va $s=2l+1$ desak, (5.44) dagi kvadrat qavslarning ichidagi koʻphad olinishi va ushbu olingan (5.47) va (5.48) formulalar yordamida $R_{nl}(\xi)$ funksiyani hisoblash mumkin.

(5.46) formuladagi N_{nl} normallovchi koeffitsiyentni normirovka sharti yordamida aniqlanadi:

$$\int_0^{\infty} R_{nl}^2 r^2 dr = 1 \qquad (5.49)$$

yoki:

$$\int_0^{\infty} e^{-\xi}\xi^{2l}\left[L_{n+l}^{2l+1}(\xi)\right]^2 \xi^2 d\xi = \frac{2n\left[(n+l)!\right]^3}{(n-l-1)!}$$

ekanligini hisobga olib, pirovardida vodorod atomi energiya operatorining normallashgan xususiy funksiyalari uchun

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (5.50)$$

ifoda olinadi, bunda

$$R_{nl}(r) = -\left\{\left(\frac{2Z}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\left[(n+l)!\right]^3}\right\}^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\xi}{2}}\xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi) \qquad (5.51)$$

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2}, \qquad \xi = \frac{2Z}{na}r.$$

(5.51) ifodadagi $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ – normallashgan sferik funksiya boʻlib, (2.81) formula orqali aniqlangan, a esa Bor radiusidir. Birinchi uchta radial

funksialarning koʻrinishini (5.51) formula yordamida hisoblab chiqish mumkin. Ular

$$R_{10}(r) = (\frac{Z}{a})^{\frac{3}{2}}(2 - \frac{Zr}{a})e^{-\frac{Zr}{a}}$$

$$R_{20}(r) = (\frac{Z}{2a})^{\frac{3}{2}}(2 - \frac{Zr}{2a})e^{-\frac{Zr}{2a}}$$

$$R_{21}(r) = (\frac{Z}{2a})^{\frac{3}{2}}\frac{Zr}{a\sqrt{3}}e^{-\frac{Zr}{2a}}$$

ga teng boʻladi. Shunday qilib, umumiy holda hisoblashlar koʻrsatadiki, Kulon maydonida elektron energiyasi faqat bosh kvant soniga bogʻliq boʻladi. Elektron energiyasi orbital va radial kvant sonlarining har biriga alohida-alohida emas, balki ularning yigʻindisigagina, ya'ni $n = n_r + l + 1$ ga bogʻliq boʻladi. Demak, orbital kvant soni faqat $l=0,1,2,3$,n-1 qiymatlarni qabul qila oladi, chunki $l=0$ holi uchun $n = n_{r+1} + 1$ boʻladi. $n=1$ da $l = n_r = 0$ boʻlishi kerak.

Ma'lumki, berilgan l ning qiymatida m magnit kvant soni quyidagi qiymatlarni qabul qiladi:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, ... \pm l$$

Agar toʻlqin funksiya umumiy holda $\psi_{nlm} = R_{nl}Y_{lm}$ kabi n, l, m kvant sonlariga alohida bogʻliq ekanligi eslansa, n ning ma'lum bir qiymati bilan xarakterlanuvchi energiya sathiga l boʻyicha n ta va har bir m boʻyicha $-l$ dan $+l$ gacha oʻzgaruvchi toʻlqin funksiyalar toʻgʻri keladi, boshqacha aytganda n- chi energiya sathiga

$$\sum_{l=1}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l} m = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2\frac{n(n-1)}{2} + n = n^2.$$

holatrlar mos keladi. Shunday qilib, har bir E_n kvant sathiga n^2 turlicha holatlar toʻgʻri keladi va bu holda n^2 - karrali aynish mavjud boʻladi. Demak, har bir E_n energetik sathga n^2 ta turli toʻlqin funksiyalar mos keladi. m kvant soni boʻyicha aynish har qanday markaziy kuch maydoni uchun xarakterlidir, boshqacha aytganda koordinata boshidan oʻtuvchi har qanday yoʻnalishlarning teng huquqliligini bildiradi. Magnit kvant soni boʻyicha aynish faqat Kulon maydoni uchungina hosdir.

dagi integral $|\psi_{nlm}|^2$ butun hajmdan olingan integral bo'lib, normallashish shartiga binoan birga teng bo'ladi. Demak, magnit momentning biror Z – o'qiga proyeksiyasi

$$\Xi_z = -\frac{e\hbar m}{2m_e c} = -\Xi_B m \qquad (5.86)$$

ga teng bo'ladi va

$$\Xi_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 9.27\cdot 10^{-21}\,\frac{erg}{Gs} \qquad (5.87)$$

kattalik Bor magnetoni deb ataladi.

Shunday qilib, magnit momentining Z – o'qiga proyeksiyasi kvantlangan qiymatlarni qabul qilib, butun sondagi Bor magnetoniga teng bo'ladi. Boshqacha aytganda, orbital harakat miqdori momenti ham va u bilan bog'langan magnit momenti ham bitta umumiy m kvant soni orqali aniqlanadi. Shuningdek, momentlar proyeksiyasi ham bitta umumiy m kvant soni orqali aniqlanadi. Mexanik momenti va uning proyeksiyasi hamda magnit momenti va uning proyeksiyasi o'rtasidagi farq faqat o'lchov birliklaridagina namoyon bo'ladi. Mexanik momentlar $\hbar$ birligida ifodalansa, magnit momentlar esa Bor magnetoni birliklarida o'lchanadi. Demak, yuqoridagi hisoblashlar natijasida quyidagi xulosaga kelinadi: faqat $M_z \neq 0$ bo'ladigan holatlardagina atomlarda elektronning yadro atrofida harakatlanishida aylanma tok vujudga keladi, ushbu tok (5.86) da ifodalangan magnit momentini hosil qiladi, shu bilan atomni magnit dipol sifatida qarash mumkin. Ξ_z magnit moment proyeksiyasini M_z mexanik moment proyeksiyasiga nisbati

$$\frac{\Xi_z}{M_z} = \frac{e}{2m_e c} \qquad (5.88)$$

ga teng bo'ladi va klassik fizikadagi yopiq orbita bo'ylab manfiy zaryadlangan elektronning orbital harakatining giromagnit yoki magnitomexanik nisbati deb ataladi. Klassik nuqtayi nazardan esa orbita bo'ylab harakatlanuvchi elektronni aylanma tok deb qarash mumkin. Elektrodinamika qonunlariga binoan, bunday aylanma tok muayyan magnit momentga ega bo'lishi kerak, ya'ni magnit maydonda o'zini magnit dipol kabi tutishi kerak. Ikkinchidan, mexanika niqtayi nazardan, elektronning tez aylanishi natijasida elektronning aylanma

toki pirildoq xossalariga ega bo'lishi kerak. Ma'lumki, elektron orbitasining magnit xossalari magnit momenti orqali ifoda qilinadi, orbitaning mexanik xossalari esa harakat miqdori momenti bilan xarakterlanadi. Elektron orbitasining magnit xossalari bilan uning mexanik xossalari orasida muayyan munosabat mavjuddir va bu munosabatni keltirib chiqaraylik. Elektrodinamika kursidan ma'lumki, berk tokning magnit momenti

$$\Xi = \frac{1}{c}JS \qquad (5.89)$$

ga teng bo'ladi, bunda J – tok kuchi, S – tok o'tayotgan sirt va c – yorug'lik tezligi. Agar elektronning aylana orbita bo'ylab aylanishilari soni $\nu = \frac{1}{T}$ bo'lsa, bu yerda T – aylanish davri ekanligi hisobga olinsa, u holda

$$J = -e\nu = -e\frac{1}{T}. \qquad (5.90)$$

Shuning uchun

$$\Xi = -\frac{1}{c}e\nu\pi r^2 \qquad (5.91)$$

formula hosil qilinadi. $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$ tenglikka asosan siklik chastotasini kiritilsa

$$\Xi = -\frac{e}{2c}\omega r^2$$

natija olinadi. $mr^2\omega = mr^2\dot{\varphi}$ ifodadan, elektronning orbitasi M harakat miqdori momentidan iboratdir. Shunday qilib,

$$\mathbf{\Xi} = -\frac{e}{2m_e c}\mathbf{M} \qquad (5.92)$$

izlanayotgan munosabat hosil qilindi. Orbital mexanik va magnit momentlar vektor kattalik bo'lib, musbat zaryadlangan zarracha uchun bir xil yo'nalishga ega bo'lishadi, manfiy zaryadlangan zarracha uchun esa qarama-qarshi yo'nalishga egadir.

ermit qo'shma matritsa-qator mos keladi va nihoyat , agarda $A^+ = \mathbf{A}$ bo'lsa , u holda **A** matritsa Ermit, yoki, o'z-o'ziga qo'shma matritsa deyiladi. Kvant mexanikasida bunday matritsalar ko'p uchraydi.

6.2 Matritsa shakldagi Shredinger tenglamasining ko'rinishi.

Kvant mexanikasidagi bir qator konkret fizik masalalar yechilganda matritsa ko'rinishdagi Shredinger tenglamasidan foydalanish ancha qulayliklarga olib keladi. Ushbu ko'rinishdagi tenglamani yozish uchun ψ(x,t) to'lqin funksiyasini $\psi_n(x)$ funksiyalar bo'yicha qatorga yoyish kerak:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(x). \qquad (6.15)$$

Agar (6.15) yoyilmani (3.3) tenglamaga qo'yilsa natijada quyidagi ifodani hosil qilgan bo'lamiz, ya'ni

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n c_n(t)\psi_n(x) = \hat{H}\sum_n c_n(t)\psi_n(x) \qquad (6.16)$$

Bu formuladagi $\hat{H}$ gamiltonian vaqtga oshkor ravishda bog'liq emasligi eslansa, (6.16) ifodani quyidagi ko'rinishda yozish mumkin:

$$i\hbar\sum\psi_n(x)\frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_n c_n(t)\hat{H}(x)\psi_n(x) \qquad (6.17)$$

Hosil bo'lgan tenglamaning ikkala tamonini $\psi_m^*(x)$ ga ko'paytirib, x ning butun o'zgarish sohasi bo'yicha integrallansa va ifodaning chap tomonida ψ_n funksiyalarning ortonormallashganligi xususiyatidan foydalanilsa, u holda m raqamli hadidan tashqari barcha hadlar nolga teng bo'ladi, ya'ni

$$i\hbar\frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_n H_{mn}c_n(t) \qquad (6.18)$$

tenglamaga ega bo'lamiz, bu yerdagi H-gamiltonian matritsasining H_{mn} elementi quyidagiga teng:

$$H_{mn} = \int\psi_m^*(x)\hat{H}\psi_n(x)dx. \qquad (6.19)$$

Shunday qilib, (6.18) tenglama matritsa ko'rinishdagi Shredinger tenglamasi bo'lib, boshlang'ich momentda berilgan $c_n(0)$ lar bo'yicha vaqtning keyingi momentlaridagi $c_n(t)$ larni aniqlab beradi.

kvant soni oz o'qining ixtiyoriy yo'nalishga M_z impuls momentining proyeksiyasini belgilaydi. Ushbu E_n, M_l^2 va M_z uchta kattaliklar to'la to'kis ψ_{nlm} to'lqin funksiyasini aniqlaydi va shuning uchun bu kattaliklar to'liq sistemani hosil qiladi.

Markaziy kuch maydonida harakat qilayotgan elektronning fazodagi o'rnini xarakterlovchi ehtimollik zichligini quyidagicha yozish mumkin:

$$W_{nlm}(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta drd\theta d\varphi = |\psi(r,\theta,\varphi)|r^2\sin\theta drd\theta d\varphi. \qquad (5.63)$$

Kvant mexanikasida vodorod atomining r,θ,φ kattaliklarning aniq biror qiymatlariga teng bo'lishi ehtimoliy xarakterga egadir. Shuning uchun ham fazoning har xil sohalarida elektronni qayd qilinishi ehtimoliy hodisadir. Xususiy funksiya modulining kvadrati $|\psi_{nlm}|^2$ yadroga nisbatan elektronning taqsimotini beradi va vaqtga bog'liq bo'lmagan holda, fazoning har bir sohasida qat'iy qiymat qabul qilgan holda o'zgaradi. Shuning uchun, elektronning massasini va zaryadini atom yadrosi atrofidagi fazoda taqsimlangandek tasvirlash mumkin. U holda elektronning massasi va zaryadini fazoning har bir nuqtasidagi zichligini fazoning xuddi shu nuqtasida elektronning mavjud bo'lish ehtimolligiga proporsional deb olish mumkin bo'ladi. Shu sababdan, ba'zan, elektron buluti – zichlik taqsimoti – haqida fikr yuritiladi.

Yuqoridagi ehtimollikni yaqqol tasavvur qilish maqsadida, 13-rasmda tasvirlangan sferik koordinatalar sistemasiga murojat qilinadi. oz o'qi shu narsa bilan ajralib turadiki, aynan shu yo'nalishga $M_z = \hbar m$ impuls momenti proyeksiyalanadi. Agarda $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ orqali fazoviy burchak elementi belgilansa, (5.63) dagi ehtimollikni:

$$W_{nlm}(r,\theta,\varphi)r^2drd\Omega = R_{nl}^2(r)r^2dr|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2d\Omega \qquad (5.64)$$

ko'rinishda yozish mumkin.

Agarda (5.64) ifodani $d\Omega$ ning barcha burchaklari bo'yicha integrallansa, radiuslari r va $r+dr$ shar qatlamining qalinligi bo'yicha taqsimlangan elektronning topish ehtimolligi aniqlanadi. Ushbu ehtimollik

$$W_{nlm}(r)dr = R_{nl}^2(r)r^2dr \qquad (5.65)$$

orqali belgilanaladi.

Endi to'lqin funksiyasining burchaklar bo'yicha taqsimotini ko'rib chiqaylik. Agarda (5.63) ifodani r-radius vektor bo'yicha noldan cheksizlikkacha integrallansa, u holda $W_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega$ - elektron $d\Omega$ fazoviy burchak ichida joylashish ehtimolligi hosil qilinadi. R_{nl} funksiyalarning normallashganligi tufayli

$$W_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega = \left|Y_{lm}(\theta,\varphi)\right|^2 d\Omega \qquad (5.66)$$

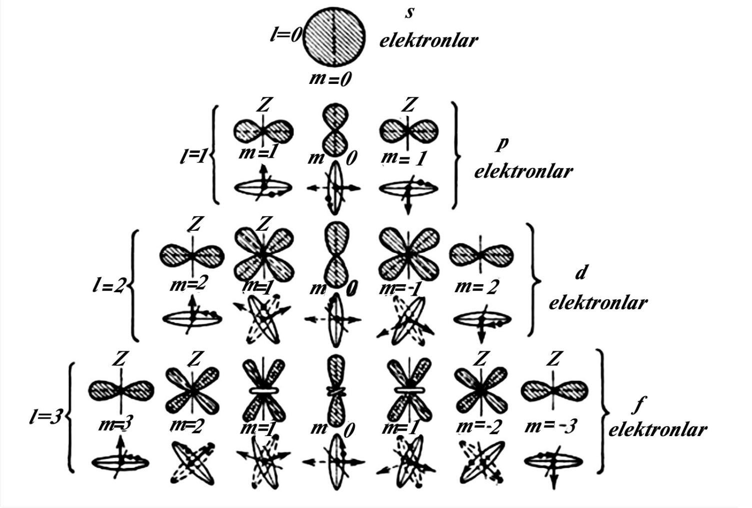
ga kelinadi. $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ funksiyaning ko'rinishidan ma'lumki, olingan ehtimollik φ burchakka bo'gliq bo'lmaydi va

$$W_{lm}(\theta,\varphi)rd\Omega = N_{lm}^2\left[P_l^{|m|}(\cos\theta)\right]^2 d\Omega \qquad (5.67)$$

orqali ifoda qilinadi. Bu yerda

$$N_{lm}^2 = \frac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!4\pi}$$

ga teng. Hosil bo'lgan natijadan ma'lumki, OZ-o'qiga nisbatan elektron uchun ehtimollik zichligi simmetrik bo'lib, uning kvant holatiga bo'g'liq emas, boshqacha aytganda elektron qanday holatda bo'lmasin uni qayd qilish ehtimolligi φ burchakning har qanday qiymatida bir xil bo'ladi. 17-rasmda l va m larning turli holatlarida ehtimollik grafiklari berilgan, ya'ni o'zgarmas radial zichlikda elektronlarning $W_{lm}(\theta,\varphi)$ burchak taqsimotlari berilgan.

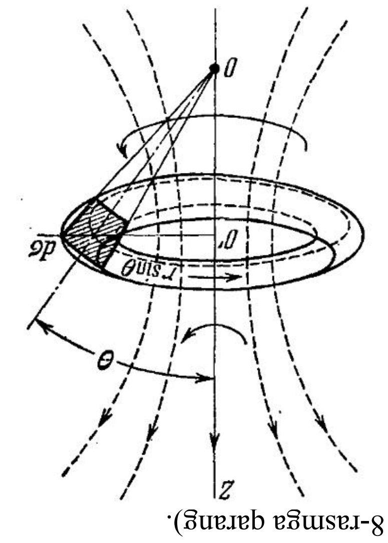


17-rasm. s, p, d va f holatlar uchun elektronlarning $W_{lm}(\theta,\varphi)$ burchak taqsimoti.

ga teng bo'ladi. Ushbu tokning natijasida hosil bo'layotgan magnit momenti

$$d\Xi_z = \frac{dJ}{c}S = \frac{J_\varphi S}{c}d\sigma \qquad (5.83)$$

ga teng bo'ladi. Bu yerda S aylanma tok qamrab olgan yuza bo'lib, u $\pi r^2 sin^2\theta$ ga teng (18-rasmga qarang).



18-rasm. M^2 aylanma moment va uning M_z proyeksiyasi berilgan holat uchun atomdagi toklar.

Shuning uchun

$$d\Xi_z = \frac{\pi r^2 sin^2\theta}{c}J_\varphi d\sigma = -\frac{\pi r^2 sin^2\theta}{c}\frac{e\hbar m}{m_e r sin\theta}\left|\psi_{nlm}\right|d\sigma \qquad (5.84)$$

bo'ladi va bu formulada m- magnit kvant sonini ifodalaydi. To'la moment Ξ_z ni hosil qilish uchun barcha yassi orbitalar bo'ylab harakatlanayotgan elektronning magnit momentlarining yig'indisini olish kerak. U holda

$$\Xi_z = -\frac{e\hbar m}{2m_e c}\int 2\pi r\ sin\ \theta d\sigma\left|\psi_{nlm}\right|^2 \qquad (5.85)$$

bo'ladi, $2\pi r\ sin\ \theta\ d\sigma$ kattalik yassi orbitaning hajmini beradi va bu orbita ichida $\left|\psi_{nlm}\right|^2$ kattalik doimiy qiymatlarni qabul qiladi. (5.85)

5.6. V bobga oid savol va masalalar

1. *Markaziy maydon deb nimaga aytiladi? Misollar keltiring.*

2. *Markaziy maydonda zarracha to'lqin funksiyasining burchakka bog'liq qismi qanday ko'rinishda bo'ladi?*

3. *Energiyaning qanday qiymatlarida elektron atomda joylashadi?*

4. *Vodorod atomidagi elektron energiyasi uchun ifodani yozing.*

5. *n,l,m kvant sonlari qanday qiymatlar qabul qiladi va ular qanday nomlanadi?*

6. *Vodorod atomidagi elektron energiyasini va to'lqin funksiyasini keltiring.*

7. *Bor magnetoni nima?*

8. *Keltirilgan massa deb nimaga aytiladi?*

9. Masala*. Radiusi r_0 va devorlari cheksiz bo'lgan sferik-simmetrik potensial qutida joylashgan massasi m_0 va nolinchi orbital momentga ega bo'lgan zarracha to'lqin funksiyalari va energetik sathlari aniqlansin.*

Yechish*. Nolinchi orbital moment(l=0)ga ega zarrachaning radial funksiyasi R(r) uchun Shredinger tenglamasi quyidagicha ko'rinishda bo'ladi:*

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2m_0E}{\hbar^2}R=0.$$

$R(r)=\frac{\chi(r)}{r}$ *almashtirishdan foydalanilsa,* $\chi(r)$ *funksiya uchun quyidagi tenglama olinadi:*

$$\chi''(r)+k^2\chi=0,$$

$$k^2=\frac{2m_0E}{\hbar^2}.$$

Ushbu tenglamaning yechimi

$$\chi(r)=A\sin(kr+\alpha),$$

ko'rinishda bo'lib, bu yerda A va α-integrallash doimiysi. $r\to 0$ *da R(r) funksiyaning chekliligidan,* $\alpha=0$ *ga kelinadi. Chegaraviy shart* $R(r_0)=0=\frac{A\sin kr_0}{r_0}$ *dan* $kr_0=\pi n$ *(bunda* $n=1,2,3,...$*) kelib chiqadi.*

Demak,

Dioganal matritsalar ichida ***I*** birlik matritsa kvant mexanikasida alohida o'rin tutadi, ya'ni bu matritsada barcha dioganal bo'lmagan elementlar nolga teng bo'lib, dioganal elementlar esa birga teng bo'ladi:

$$I\equiv(I)_{jk}=\delta_{jk}=\begin{pmatrix}1 & 0 & \dots & 0\\ 0 & 1 & \dots & 0\\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots\\ 0 & 0 & \dots & 1\end{pmatrix} \qquad (6.9)$$

birlik matritsa Kroneker belgisi bilan mos keladi.

Agarda **A** matritsadagi ustunlar va qatorlar o'rinlar almashtirilsa, u holda **Ã -** transponirlangan matritsani hosil qilgan bo'lamiz, ya'ni

$$(\tilde{A})_{jk}=(A)_{kj}. \qquad (6.10)$$

bu yerdan ravshanki, agar **A** matritsa $m\times n$ tartibga ega bo'lsa , u holda **Ã** matritsa $n\times m$ tartibli bo'ladi.

Agarda **Ã=A** bo'lsa , u holda **A** matritsa simmetrik matritsa deyiladi. **A** matritsadagi barcha elementlarning kompleks qo'shmasi olinsa, u holda **A** matritsaga nisbatan **A*** kompleks qo'shma matritsani hosil qilgan bo'lamiz:

$$(A^*)_{jk}\equiv A^*_{jk}. \qquad (6.11)$$

Agar $\mathbf{A}^*$**=A** bo'lsa , u holda **A** matritsa haqiqiy matritsa deyiladi , chunki uning barcha elementlari haqiqiydir.

A^+ matritsani **A** matritsadan hosil qilish uchun , avvalo **A** matritsani transponirlash kerak, keyinchalik kompleks-qo'shmasini olish kerak, ya'ni **A** matritsaga nisabatan Ermit qo'shma matritsani hosil qidik:

$$(A^+)_{jk}=[(\tilde{A})_{jk}]^*=(A)^*_{kj}. \qquad (6.12)$$

Agarda **A** matritsa $m\times n$ tartibga ega bo'lsa, u holda A^+ matritsaning tartibi $n\times m$ bo'ladi. Xususiy holda

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\\ \psi_n\end{pmatrix} \qquad (6.13)$$

matritsa-ustunga

$$\psi^+=(\psi_1^*,\psi_2^*,\dots,\psi_n^*) \qquad (6.14)$$

Matritsalarning ko‘paytmasi murakkab operatsiya hisoblanadi. Masalan, $m\times n$ tartibli $\boldsymbol{A}$ matritsani $n\times l$ tartibli $\boldsymbol{B}$ matritsaga ko‘paytmasi deganda shunday $m\times l$ tartibli $C\equiv AB$ matritsa tushuniladiki, bu hosil bo‘lgan $\boldsymbol{C}$ matritsaning *í, j* indeksli elementi $\boldsymbol{A}$ matritsaning í-qatorining barcha elementlarini $\boldsymbol{B}$ matritsaning *j*-ustunining barcha elementlariga ketma-ket ko‘paytmalarining yig’indisiga teng bo‘ladi, ya’ni

$$C_{ij}=\sum_{k=1}^{n}A_{ik}B_{kj} \tag{6.6}$$

$$\begin{pmatrix} i=1,2,\dots,m \\ j=1,2,\dots,l \end{pmatrix}$$

Demak, matritsalarning ko‘paytmasi faqat $\boldsymbol{A}$ matritsaning ustunlar soni $\boldsymbol{B}$ matritsaning qatorlar soniga teng bo‘lgandagina mavjud bo‘ladi.

Yuqorida keltirilgan umumiy ta’rifni ikkita $n\times n$ tartibli kvadratik matritsalarning ko‘paytmasiga qo‘llab ko‘raylik. U holda

$$(AB)_{jk}=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} A_{11}B_{11}+A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12}+A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11}+A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12}+A_{22}B_{22} \end{pmatrix}$$

ifodaga ega bo‘linadi. Endi xuddi shu matritsalarning ko‘paytirish tartibini o‘zgartiraylik va bu holda,

$$(BA)_{jk}=\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} B_{11}A_{11}+B_{12}A_{21} & B_{11}A_{12}+B_{12}A_{22} \\ B_{21}A_{11}+B_{22}A_{21} & B_{21}A_{12}+B_{22}A_{22} \end{pmatrix}$$

natija olinadi. Demak, ushbu yuqorida keltirilgan matritsalarning ko‘paytirish natijalari bir biriga teng emas, ya’ni ular bir biriga kommutativ emas,

$$AB\neq BA. \tag{6.7}$$

Kvadratik matritsalar ichida, ko‘p hollarda, dioganal matritsalar qiziqtiradi, ya’ni bu matritsalarda faqat bir xil indeksli elementlar noldan farqli bo‘ladi, qolgan barcha elementlar nolga teng bo‘ladi, ya’ni

$$(A)_{jk}=\begin{pmatrix} A_{11} & 0 & 0\dots & 0 \\ 0 & A_{22} & 0\dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0\dots & A_{nn} \end{pmatrix} \tag{6.8}$$

Ushbu rasmda keltirilgan burchak taqsimotini batafsil o‘rganib chiqaylik.

1. *l=0* va *m=0* holatida (5.67) formulaga binoan

$$w_{00}(\theta)=\left[P_0^0\right]^2=\frac{1}{4\pi} \tag{5.68}$$

ga teng bo‘ladi, demak ehtimollik zichligi o‘zgarmas θ burchakning qiymatiga bo‘g‘liq bo‘lmaydi. Impuls momenti nolga teng bo‘lgan holatni, ya’ni *l=0* bo‘lganida, *s*-holat deb ataladi, unga tegishli bo‘lgan term esa *s*-term deyiladi. s-holatda yadrodan hamma yo‘nalishlar bo‘yicha muayyan *r* masofada elektron zichligi bir xil bo‘ladi, ya’ni *r* radiusli sfera markazida yadro joylashgan va shu sfera bo‘ylab elektron bir xil taqsimlangan bo‘ladi.

2. *l=1, m=0, ±1* holat *p*-holat deb ataladi, unga tegishli bo‘lgan term esa *p*-term deyiladi. Bu holatdagi ehtimollik $P_l^1(\cos\theta)$ va $P_l^0(\cos\theta)$ funksiyalar orqali aniqlanadi va bularning qiymatlarini (5.67) formulaga binoan olinsa, quyidagi ehtimolliklarga ega bo‘linadi:

$$w_{1,\pm1}=\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta, \tag{5.69}$$

$$w_{1,0}=\frac{3}{4\pi}\cos^2\theta. \tag{5.70}$$

17-rasmda $w_{1,\pm1}$ va $w_{1,0}$ ehtimolliklar va ularga tegishli bo‘lgan Bor orbitalari tasvirlangan. Keltirilgan rasmlardan ayonki, Bor nazariyasiga binoan *m=±1* holatida elektroni topish ehtimolligi $\theta=\frac{\pi}{2}$ teng bo‘lganidagina, ya’ni orbitalarni tekisligida, noldan farqli bo‘ladi. Kvant mexanikasi nazariyasiga ko‘ra ehtimolliklarning qiymati zenit burchagi θ ning boshqa qiymatlarida ham noldan farqlidir. Bu ikkala nazariyalarning bir biriga mos kelishi, ehtimolliklarning maksimumi ikkala nazariyada ham $\theta=\frac{\pi}{2}$ bo‘lganidagina namoyon bo‘ladi. Shunga o‘xshash moslik *m=0* holati uchun ham bajariladi, bu holda ehtimollik maksimumga $\theta=0$ bo‘lganida erishadi.

3. *l=2, (m=0, ±1,±2)* holat *d*-holat deyiladi va unga tegishli bo‘lgan term esa *d*-term deyiladi 17-rasmda w_{21} ehtimolliklar taqsimoti keltirilgan. (5.67) formuladan keltirib chiqarish mumkinki,

formulada *e* oldida minus ishorasi olinadi va elektronning zaryadini $e=4,778\cdot10^{-10}$ SGSE birlikda olinadi. Ikkinchi tomonidan, **J** vektorni hisoblashda sferik koordinatalar sistemasiga o‘tish ancha qulayliklar yaratadi. Sferik koordinatalar sistemasida ∇ gradiyent operatorining proeksiyalari $\frac{\partial}{\partial r},\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}$ va $\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ ga teng bo‘ladi. Demak, **J** vektorning radius, meridian va kenglikga bo‘lgan proeksiyalari mos ravishda

$$J_r=-\frac{ie\hbar}{2m_e}\left(\psi_{nlm}\frac{\partial\psi^*_{nlm}}{\partial r}-\psi^*_{nlm}\frac{\partial\psi_{nlm}}{\partial r}\right) \tag{5.79}$$

$$J_\theta=-\frac{ie\hbar}{2m_e}\left(\psi_{nlm}\frac{\partial\psi^*_{nlm}}{\partial\theta}-\psi^*_{nlm}\frac{\partial\psi_{nlm}}{\partial\theta}\right) \tag{5.80}$$

$$J_\varphi=-\frac{ie\hbar}{2m_e}\left(\psi_{nlm}\frac{\partial\psi^*_{nlm}}{\partial\varphi}-\psi^*_{nlm}\frac{\partial\psi_{nlm}}{\partial\varphi}\right) \tag{5.81}$$

ga teng bo‘ladi. Olingan (5.77) formuladagi to‘lqin funksiyasining ifodasidan foydalangan holda, (5.79) va (5.80) formulalarni hisoblaganda $J_r=J_\theta=0$ natija kelib chiqadi. (5.81) formulani hisoblashda esa

$$J_\varphi=-\frac{ie\hbar}{m_e r\sin\theta}\left|\psi_{nlm}\right|^2 \tag{5.81'}$$

ifoda olinadi. $J_r=J_\theta=0$ natijaning kelib chiqishi R_{nl} va $P_l^{|m|}$ funksiyalar r va θ o‘zgaruvchilarning haqiqiy funksiya ekanligidan kelib chiqadi. J_φ ning noldan farqli bo‘lishi esa ψ_{nlm} funksiya $e^{im\varphi}$ ga proporsionalligidan kelib chiqadi. Shunday qilib, statsionar holatlarda radius va meridianga bo‘lgan tok zichliklarining proyeksiyalari nolga teng bo‘lar ekan.

Endi (5.81') dagi tok zichligi formulasiga asoslangan holda, atomning Ξ_z magnit momentini topish mumkin. $d\sigma$ yuza orqali o‘tayotgan *dJ* tok kuchi

$$dJ=J_\varphi d\sigma \tag{5.82}$$

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0r_0^2}n^2$$

bo‘ladi. s holat uchun zarrachaning to‘lqin funksiyasi

$$\psi_{n,0,0}=R(r)Y_{0,0}(\theta,\varphi)=C\frac{1}{r}\sin\frac{\pi n}{r_0}r$$

ga teng.

Normallashtirish shartidan

$$C^2\cdot4\pi\int_0^{r_0}\frac{1}{r^2}\left(\sin^2\frac{\pi n}{r_0}r\right)r^2dr=1$$

***C** doimiy topiladi:*

$$C=(2\pi r_0)^{-\frac{1}{2}}.$$

U holda

$$\psi_{n,0,0}=\frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi n}{r_0}r$$

bo‘ladi.

$$w_{2,1}(\theta)=N_{21}^2\left[P_1^2(cos\theta)\right]^2=\frac{15}{8}sin^2\theta cos^2\theta. \qquad (5.71)$$

Bor nazariyasiga binoan $l=2$ va $m=1$ holatlarda bir qator orbitalarga ega bo‘linadi. Bu orbitalar oz o‘qi bilan 60^0 teng bo‘lgan burchakni hosil qiladi va ehtimolliklarni maksimumlari 60^0 teng bo‘lgan konusning burchagi ichida joylashadi. Kvant mexanikasiga binoan bu holatlarda ushbu maksimumlar 45^0 burchakda joylashgan bo‘ladi.

Shunday qilib, 17-rasmda keltirilgan ehtimolliklarning ko‘rinishi turli holatlardagi atomning formasi to‘g‘risida qandaydir tassavurni hosil qilishga imkoniyat yaratadi. Bu atomning formasi l orbital kvant sonining qiymati bilan aniqlanadi, m magnit kvant sonning qiymati esa atomning fazodagi yo‘nalishini aniqlaydi.

Endi avval kiritilgan a uzunlik qiymatining ma’nosini tekshirib chiqaylik. (5.46) dagi $R_{nl}(\rho)$ funksiyalarining ko‘rinishidan ma’lumki, $r\to\infty$ da R_{nl} radial funksiya:

$$R_{nl}(\rho)=N_{nl}e^{-\frac{Zr}{na}}\left(\frac{2Zr}{na}\right)^{n-1}+... \qquad (5.72)$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. r ning katta qiymatlarida $W_{nl}(r)$ ehtimollik quyidagiga teng bo‘ladi:

$$W_{nl}(r)=N^2{}_{nl}e^{-\frac{2Zr}{na}}\left(\frac{2Zr}{na}\right)^{2n}. \qquad (5.73)$$

Demak, (5.73) formuladan ko‘rinib turibdiki, $na/2z$ kattalik atom o‘lchamlarini belgilovchi uzunlik sifatida olinishi mumkin.

Vodorod atomi asosiy holati, ya’ni $n=1$, uchun radial to‘lqin funksiyani aniqlaylik. Bu holda (5.46) ma’lumki:

$$R_{10}(\rho)=N_{10}e^{-\frac{1}{a}r}. \qquad (5.74)$$

Demak,

$$w_{10}(r)=N_{10}^2e^{-\frac{2}{a}r}\left(\frac{r}{a}\right)^2. \qquad (5.75)$$

Vodorod atomning asosiy holatida elektronning fazoviy taqsimotini xarakterlovchi $R_{10}^2(\rho)r^2$ funksiya koordinata boshida r^2 kabi nolga aylanadi va r ning katta qiymatlarida esa eksponensial ravishda nolga intiladi. Shunday qilib, yadrodan istalgan masofada elektronni topish

ehtimolligi mavjuddir. Ehtimollik zichligi maksimum qiymatiga to‘g‘ri keluvchi ifodani r bo‘yicha birinchi hosilasini nolga tenglashtiriladi:

$$2r-2r^2\frac{1}{a}=0$$

ya’ni, $r_{max}=a$ teng bo‘ladi.

Demak vodorod atomning $n=1(l=m=0)$ asosiy holatida

$$r_{max}=a=\frac{\hbar^2}{me^2}=0,529\cdot10^{-8}sm \qquad (5.76)$$

qiymatida elektronni topish ehtimolligi eng katta bo‘ladi. Hosil bo‘lgan ifodani Bor orbitasi radiusi formulasining $n=1$ holi bilan solishtirilsa, ularning bir-biriga teng ekanligiga ishonch hosil qilinadi. Shuning uchun ham (5.76) ifodadagi $a=r_{max}$ kattalik vodorod atomining birinchi Bor orbitasi deb ataladi. Son jihatdan birinchi Bor orbitasi asosiy holatdagi atomning o‘lchamini beradi.

5.5. Atomdagi toklar

Atomdagi magnetizmning manbayi atomdagi elektronlarning orbita bo‘ylab harakati, elektronning xususiy magnit momenti va yadroning xususiy magnit momenti kabi uchta sababga bog‘liq ravishda vujudga keladi. Elektronning orbita bo‘yicha harakatida orbital mexanik moment yuzaga keladi. Elektron massaga va zaryadga ega bo‘lganligi sababli uning orbital harakatida mexanik moment bilan birgalikda magnit moment ham vujudga keladi. Yadro atrofida harakatlanayotgan elektron tok halqasini namoyon qilib, magnit maydonini vujudga keltiradi. Statsionar holatda bo‘lgan va $M_z=\hbar m$ impuls momenti proyeksiyasining muayyan qiymatiga ega bo‘lgan elektronning yadro atrofida orbita bo‘ylab harakati natijasida paydo bo‘ladigan atomdagi elektr tok zichligini hisoblab chiqaylik. Bu holatdagi to‘lqin funksiya

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi} \qquad (5.77)$$

teng bo‘ladi. ψ_{nlm} holatdagi elektr tokining zichligi esa

$$\mathbf{J}=-\frac{ie\hbar}{2m_e}(\psi_{nlm}\nabla\psi^*_{nlm}-\psi^*_{nlm}\nabla\psi_{nlm}) \qquad (5.78)$$

formula orqali belgilanadi va tok aylana bo‘yicha oqadi (18-rasm). Ushbu formulada m_e elektronning massasini ifodalaydi. Olingan (5.78)

VI bob
KVANT MEXANIKASINING MATRITSA SHAKLI

6.1. Matritsalar algebrasining asoslari

Avvalgi boblarda keltirib chiqarilgan kvant mexanikasining hisoblash metodi, ya’ni chiziqli va ermit operatorlarning metodi, kvant mexanikasida qo‘llaniladigan yagona hisoblash metodi emas. 1925-yilda M.Born,V.Geyzenberg va P.Iordanlar kvant mexanikasida mavjud bo‘lgan qarama-qarshiliklarni bartaraf etishga erishdilar va kvant nazariyasining yopiq sxemasini yaratishga muvaffaq bo‘ldilar. Ushbu nazariyaning asosiy tenglamalari 3.5-paragrafda ko‘rilgan tenglamalarga o‘xshash bo‘lib, ular oddiy son kattaliklar yoki operatorlar yordamida ifodalanmasdan, balki matritsalar ko‘rinishida berilgan. Shuning uchun Born–Geyzenberg–Iordan nazariyasi matritsa shaklidagi kvant mexanikasi deb ataladi.

Bir necha vaqt o‘tgach E.Shredinger mutlaqo boshqa tasavvurlardan kelib chiqqan holda to‘lqin shaklidagi kvant mexanikasini asoslab berdi va uning nazariyasini asosiy obyektlari bo‘lib **ψ**-to‘lqin funksiyasi va dinamik o‘zgaruvchilarga mos kelgan operatorlar tanlab olindi. Keyinchalik, 1926-yilda E.Shredinger o‘zi bu ikki nazariyani bir-biriga to‘la ekvivalent ekanligini ko‘rsatdi va matritsa shakldagi kvant mexanikasidan to‘lqin shaklidagi kvant mexanikasiga o‘tish mumkinligini ko‘rsatib berdi, shuning bilan bir qatorda teskari o‘tishni ham ifodalab berdi. Matritsa ko‘rinishdagi kvant mexanikasini ifodalashdan avval, matritsalarning qisqacha matematik nazariyasi ko‘rib chiqiladi.

Quyidagi jadvalni tashkil etuvchi kattaliklar to‘plamini $\boldsymbol{A}$ matritsa deyiladi:

$$A\equiv(A_{jk})=\begin{pmatrix}A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{1n}\\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ A_{m1} & A_{m2} & \cdots & A_{mn}\end{pmatrix} \qquad (6.1)$$

Umimiy holda jadvalda keltirilgan qatorlar va ustunlar sonlari bir-biriga teng bo‘lmasligi ham mumkin. Jadvalda keltirilgan har bir kattalik matrik element deyiladi va ikkita indeks bilan belgilanadi.

Birinchi indeks qatorning tartib raqamini bildirsa, ikkinchisi esa ustunning tartib raqamini ifodalaydi. Umuman olganda, matritsalar haqida tushuncha n-o‘lchovli fazodagi vektorlarning chiziqli almashtirishi natijasida kiritiladi. Kvant mexanikasida uch xil tipdagi matritsalar bilan ish yuritiladi:

1) $n\times n$ tartibli kvadrat matritsalar:

$$A=\begin{pmatrix}A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{1n}\\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn}\end{pmatrix}; \qquad (6.2)$$

2) bitta ustunga ega bo‘lgan $m\times1$ tartibli matritsa-ustunlar:

$$\psi\equiv(\psi_j)=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\\ \psi_m\end{pmatrix}; \qquad (6.3)$$

3) bitta qatorga ega bo‘lgan $1\times n$ tartibli matritsa-qatorlar

$$\tilde{\psi}\equiv(\tilde{\psi}_j)=(\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n) \qquad (6.4)$$

bilan ish yuritiladi.

Birinchi tipdagi matritsalar Evklid fazosidagi chiziqli operatorlarni ifodalaydi, ikkinchichilari esa shu fazodagi vektorlarni va nihoyat uchinchi tipdagi matritsalar kompleks qo‘shma fazodagi vektorlarni belgilaydi.

Endi bevosita matritsalar bilan bajariladigan algebraik operatsiyalar ustida to‘xtab o‘taylik.

Ikkita matritsa teng matritsalar deyiladi, agarda ularning tartiblari bir biriga teng bo‘lsa va ularning tegishli matrik elementlari ham o‘zaro teng bo‘lsa. Masalan, 2×2 tartibli ikkita $\boldsymbol{A}$ va $\boldsymbol{B}$ matritsalar uchun $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$ tenglik

$$a_{11}=b_{11},a_{12}=b_{12},a_{21}=b_{21},a_{22}=b_{22}$$

tengliklarni anglatadi.

Ikkita teng tartibli $\boldsymbol{A}$ va $\boldsymbol{B}$ matritsalarning yig’indisi deb, shu tartibdagi shunday $C\equiv A+B$ matritsaga aytiladiki, bunda

$$C_{jk}=A_{jk}+B_{jk} \qquad (6.5)$$

bo‘ladi.

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(x,t)}{\partial t}=-\hat{H}_o\varphi(x,t)+e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t}\left[\hat{H}_o+\hat{W}(x,t)\right]\psi(x,t)$$

$$=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t}\hat{W}(x,t)\psi(x,t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t}\hat{W}(x,t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_o t}\varphi(x,t)$$

tenglamaga ega bo‘linadi. Agar (6.42’) tenglamani hisobga olinsa, u holda

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(x,t)}{\partial t}=\hat{W}(x,t)\varphi(x,t) \qquad (6.43)$$

natija olinadi. Shunday qilib, $\hat{W}(x,t)$ Gamiltoniani uchun Shredinger tenglamasini hosil qilsh imkoniyati yaratildi.

Demak, o‘zaro ta’sir tasavvurida operatorlar ham, to‘lqin funksiyalari ham vaqtga bog’liq bo‘ladi. Bu manzarada to‘lqin funksiyalari (6.43) dagi tenglama orqali o‘zgarsa, vaqt bo‘yicha operatorlarning o‘zgarishi quyidagi shartni qanoatlantiradi, ya’ni

$$\frac{\partial\hat{A}_{o'}(t)}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_o\hat{A}_{0'}-\hat{A}_{0'}\hat{H}_o)=\left[\hat{H}_o,\hat{A}_{0'}\right]. \qquad (6.44)$$

Shunday qilib, o‘zaro ta’sir tasavvurida to‘lqin funksiyaning vaqtga bog’liqligi o‘zaro ta’sir operatori bo‘lgan $\hat{W}$ operator orqali aniqlandi, shu bilan birgalikda $\hat{H}_o$ operator bilan bog’langan vaqtga bog’liqlik bevosita operatorlarning o‘zlariga o‘tkazilgan. O‘zaro ta’sir tasavvuri fizik mohiyati jihatidan avvalgi ikkita tasavvurlarga ekvivalentdir va g’alayonlanish nazariyasiga asoslangan taqribiy hisoblashlarda, kvantlangan maydon nazariyasidagi bir qator masalalarni yechishda keng qo‘llaniladi.

6.4 Garmonik ossilyator masalasini turli xil tassavurlarda yechish

Ushbu darslikda ko‘rilayotgan Shredinger nazariyasidagi ψ to‘lqin funksiya fazoviy koordinatalarga bog’liq holda tanlab olinadi. Kvant mexanikasida qabul qilingan statistik talqinga binoan, to‘lqin funksiyasi modulining kvadrati fazoning ixtiyoriy nuqta atrofida zarrachani topish ehtimolligi bilan chambarchas bog’langandir. Bu holda to‘lqin funksiyasi va barcha dinamik o‘zgaruvchilarning operatorlari koordinata tasavvurida berilgan deb gapirish mumkin. Bir qator konkret masalalarni yechganimizda ushbu tassavur ancha qulayliklarlarga olib

keladi va shu to‘g’risida bir necha isbotlashlar ko‘rib chiqiladi. Lekin kvant mexanikasida koordinata tassavuridan tashqari, energetik, yoki matrik va impuls tasavvurlari ham mavjuddir.

Kvant mexanikasida keng tarqalgan modellardan biri bo‘lgan garmonik ossilyator modeli misolida bu masalalarni kengroq yoritishga harakat qilamiz. Avvalo, garmonik ossillyator harakatini ifodalovchi Gamiltonian yozib chiqiladi va bu Gamiltonianda koordinata va impuls orasidagi bog’lanishni klassik mexanikasidagi kabi bo‘lishini eslab o‘taylik:

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}x^2.$$

Ikkinchidan, impuls va koordinatalarni (2.57) – o‘zaro o‘rin almashtirish qoiqalariga bo‘ysunishlarni eslatib o‘taylik. Bu munosabat o‘rinli bo‘lishi uchun kvant mexanikasida turli xil usullar mavjuddir. Ular to‘lqin funksiyasini yoki koordinatalarga, yoki impulslarga bog’liqligi bilan farqlanadi. Garmonik ossillyator misolida ushbu bog’lanishlar ustida to‘xtalib o‘tamiz.

1. Koordinata tassavuri (*x*-tassavuri)

Bu tasavvurda $\hat{p}$ impuls operatorini

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

ko‘rinishda olinadi va u q - son qiymatiga ega bo‘ladi, x koordinata esa oddiy c son orqali belgilanadi. U holda (2.57) ning chap tomonini yagona operator sifatida tanlab olish mumkin, $i\hbar$ esa bu operatorning xususiy qiymati bo‘ladi, ya’ni

$$(x\hat{p}_x-\hat{p}_x x)\psi(x)=i\hbar\psi(x). \qquad (6.45)$$

Ikkinchidan bir o‘lchamli garmonik ossilyatorning Gamiltoniani

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2}{2}x^2$$

ko‘rinishga ega ekanligi ma’lum. Demak, x- tasavvurida garmonik ossilyatorining Shredinger tenglamasi

$$(-B\frac{d^2}{dx^2}+Ax^2)\psi(x)=E\psi(x)$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. Bu yerda

$$P_{mn}=\begin{pmatrix}P_{00}&P_{01}&P_{02}&P_{03}&\cdots\\P_{10}&P_{11}&P_{12}&P_{13}&\cdots\\P_{20}&P_{21}&P_{22}&P_{23}&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{pmatrix}=\mu\omega x_0\begin{pmatrix}0&-i\sqrt{\frac{1}{2}}&0&0&\cdots\\i\sqrt{\frac{1}{2}}&0&-i\sqrt{\frac{2}{2}}&0&\cdots\\0&i\sqrt{\frac{2}{2}}&0&-i\sqrt{\frac{3}{2}}&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{pmatrix} \qquad (6.78)$$

Endi bu matritsalarni bir biriga avval shundoq keyin esa ularning o‘rnini almashtirib ko‘paytiriladi, so‘nra ikkinchi ko‘paytmani birinchisidan ayiramiz.

$$(px)_{mn}=\sum_{k=0}^{\infty}P_{mk}x_{kn} \qquad (6.79)$$

$$(px)_{mn}-(xp)_{mn}=\sum_k(P_{mk}x_{kn}-x_{mk}P_{kn})=-i\hbar\delta_{mn} \qquad (6.80)$$

ya’ni hosil bo‘lgan tenglikning o‘ng tomoni $-i\hbar$ ga ko‘paytirilgan birlik matritsani tashkil etadi. Shuning uchun kvant nazariyasida (6.75) munosabat bajariladi.

Endi (6.76) dagi matrik elementni hisoblab chiqaylik va u

$$H_{mn}=\sum_k\left(\frac{1}{2m}P_{mk}P_{kn}+\frac{m\omega^2}{2}x_{mk}x_{kn}\right)$$

ga teng bo‘ladi. Bu ifodaga (6.77) va (6.78) dagi tengliklardan koordinata va impulsning matrik elementlarining qiymatlari qo‘yilsa

$$H_{mn}=\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2})\delta_{mn}$$

natija olinadi. Shunday qilib, H_{mn} matrik elementi quyidagi dioganal matritsani hosil qiladi:

$$H_{mn}=\hbar\omega\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&0&0&\cdots\\0&\frac{3}{2}&0&\cdots\\0&0&\frac{5}{2}&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{pmatrix}$$

(6.81)

Boshqacha aytganda, agarda ψ funksiya $\hat{H}$ operatorning xususiy funksiyalari bo‘lganda, $\hat{F}$ operatorning

$$F_{mn}=\int\psi_m^*\hat{F}\psi_n dx$$

Agarda $\hat{H}$ operator to‘la energiya operatori bo‘lsa , u holda $\hat{H}$ operatorning xususiy funksiyalari $\psi_n(x)$ funksiyalar bo‘lib, $c_n(t)$ lar esa statsionar holatlarning amplitudasi bo‘ladi va (6.19) dagi H_{mn} matritsa dioganal matritsa bo‘lib qoladi:

$$H_{mn}=\int\psi_m^*\hat{H}\psi_n dx=\int\psi_m^*E_n\psi_n dx=E_n\delta_{mn}. \qquad (6.20)$$

Olingan (6.20) dagi natijani (6.18) ga qo‘yilsa, bu holni aks ettiruvchi Shredinger tenglamasi hosil qilinadi:

$$i\hbar\frac{dc_m}{dt}=E_m c_m. \qquad (6.21)$$

Bu tenglamaning yechimi

$$c_m(t)=c_m(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} \qquad (6.22)$$

bo‘ladi, ya’ni statsionar holatlardagi amplitudalar vaqtga garmonik ravishda bog’liq bo‘ladi.

Endi hosil bo‘lgan matritsa ko‘rinishdagi Shredinger tenglamasidan foydalanib, operatorning vaqt bo‘yicha o‘zgarishi hisoblab chiqiladi. Buning uchun ψ(x, t) funksiyani xususiy funksiya sifatida tanlab olinadi. U holda bu funsiyani (6.15) qator orqali yozish mumkin va kompleks ko‘rinishdagi ifodasini ham

$$\psi^*(x,t)=\sum_m c_m^*\psi_m^*(x,t) \qquad (6.23)$$

yozish mumkindir. Bu ikkita ifodani

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

formulaga qo‘yilsa

$$L=\sum_n\sum_m c_m^*c_n\int\psi_m^*\hat{L}\psi_n dx \qquad (6.24)$$

yoki

$$\bar{L}=\sum_n\sum_m c_m^*L_{mn}c_n \qquad (6.25)$$

ifodaga kelinadi. Shunday qilib, agar $\hat{L}$ operator matritsa ko‘rinishda berilgan bo‘lsa, u holda L kattalikning $\bar{L}$ o‘rtacha qiymatining ko‘rinishi (6.25) ifoda bilan beriladi.

Endi (6.25) dagi o‘rtacha qiymatning vaqt bo‘yicha o‘zgarishini ko‘rib chiqaylik. Vaqt bo‘yicha (6.25) ni differensiallansa,

$$\frac{d\bar{L}}{dt}=\sum_m\sum_n c_m^*\frac{\partial L_{mn}}{\partial t}c_n+\sum_m\sum_n\frac{dc_m^*}{dt}L_{mn}c_n+\sum_m\sum_n c_m^*L_{mn}\frac{dc_n}{dt}$$

ko‘rinishdagi ifodaga ega bo‘linadi . Agar (6.18) formuladan foydalanilsa,

$$-i\hbar\frac{dc_m^*}{dt}=\sum_k H_{mk}^*c_k^*$$

$$i\hbar\frac{dc_n}{dt}=\sum_k H_{mk}c_k$$

ikkita tenglamani hosil qilish mumkin va bu hosilalar $\frac{d\bar{L}}{dt}$ ifodasiga qo‘yilsa, quyidagi natijaga kelinadi:

$$\frac{d\bar{L}}{dt}=\sum_m\sum_n c_m^*\frac{\partial L_{mn}}{\partial t}c_n+\frac{1}{i\hbar}\sum_m\sum_n\sum_k c_m^*L_{mn}H_{nk}c_k-\frac{1}{i\hbar}\sum_m\sum_n\sum_k H_{mk}^*c_k^*L_{mn}c_n.$$

Olingan tenglikning o‘ng tomonidagi H_{mn} operatorning o‘z-o‘ziga qo‘shmaligidan foydalanilsa, ya’ni

$$H_{mk}^*=H_{km}$$

va m,n,k indekslar bir xil qiymatlarni qabul qilganliklari eslansa,

$$\frac{d\bar{L}}{dt}=\sum_m\sum_n c_m^*\frac{\partial L_{mn}}{\partial t}c_n+\frac{1}{i\hbar}\sum_m\sum_n c_m^*(\sum_k L_{mk}H_{kn}-\sum H_{mk}L_{kn})c_n$$

natijaga kelinadi. Bu ifodada qatnashayotgan matritsalar uchun ko‘paytirish qoidasini qo‘llanilsa:

$$\sum_k L_{mk}H_{kn}=(\hat{L}\hat{H})_{mn}$$

$$\sum_k H_{mk}L_{kn}=(\hat{H}\hat{L})_{mn}$$

bo‘ladi va

$$\frac{d\bar{L}}{dt}=\sum_m\sum_n c_m^*(\frac{\partial L_{mn}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}(\hat{L}\hat{H}-\hat{H}\hat{L})_{mn})c_n \quad (6.26)$$

natijaga ega bo‘linadi. Bu yerda

$$\frac{1}{i\hbar}(\hat{L}\hat{H}-\hat{H}\hat{L})=\frac{1}{i\hbar}\sum_k(L_{mk}H_{kn}-H_{mk}L_{kn})=[\hat{H},\hat{L}]_{mn} \quad (6.27)$$

bilan uzviy ravishda bog’lash mumkin va bu almashtirishlar ko‘rilayotgan nazariyaning asosiy fizikaviy ma’nosini o‘zgartirmaydi. Kvant mexanikasiga tegishli bo‘lgan bir qator darsliklarda bu mulohazalarning tasdig’ini topish mumkin.

3. O‘zaro ta’sir tassavuri

Yuqorida qayd etilishicha, kvant mexanikasida Shredinger va Geyzenberg tassavurlari mavjud va bu manzaralar bir-biriga ekvivalentdir. Shredinger tassavurida sistemaninig dinamikasi holatlar vektorlari orqali ifodalanadi. Geyzenberg tassavurida esa, sistemaninig dinamikasini operatorlar yordamida ifoda qilish mumkin va bu manzarada holat vektori o‘zgarmas kattalik sifatida qaraladi. Kvant mexanikasida bu tassavurlardan tashqari mashhur ingliz fizigi P.Dirak tomonidan kiritilgan o‘zaro ta’sir tassavuri ham mavjyud bo‘lib, ko‘p holatlarda, xususan murakkab sistemalar bilan ish ko‘rishda, bu tassavurdan keng foydalanadi. Murakkab sistemalarning Gamiltoniani ikki qismga ajratish mumkin. Birinchi qismi (uni $\hat{H}_0$ orqali belgilansa) sistemaning o‘ziga tegishli bo‘lgan Gamiltonianni ifodalaydi va u vaqtga bog‘liq bo‘lmaydi. Ikkinchi qismi esa (uni $\hat{W}(x,t)$ orqali belgilaydi) berilgan sistemani boshqa sistemalar yoki tashqi maydonlar bilan o‘zaro ta’sirini ifodalaydi. Demak, sistemalarning Gamiltoniani

$$\hat{H}(t)=\hat{H}_0+\hat{W}(x,t)$$

ko‘rinishda yozish mumkin. Bu holda to‘lqin funksiyani

$$\varphi(x,t)=\exp(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t)\psi(x,t) \quad (6.42)$$

ko‘rinishda olish mumkin. O‘zaro ta’sir tassavuridagi ixtiyoriy $\hat{A}$ operatorni quyidagicha ifodalash mumkin:

$$\hat{A}_{0'}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0t} \quad (6.42')$$

Avvalgi kiritilgan (6.39) almashtirish formulalardagi Gamiltonianda $\hat{H}_0$ Gamiltoniani qatnashadi. Endi $\varphi(x,t)$ to‘lqin funksiyani qanoatlantiruvchi tenglamani hosil qilish kerak. Ushbu masalani hal qilish uchun (6.42) dagi munosabatni vaqt bo‘yicha differensiallash va Shredinger tenglamagasidan foydalanish kerak. U holda

$$A=\frac{m\omega_0^2}{2},\qquad B=\frac{\hbar^2}{2m}.$$

Endi

$$\lambda=\frac{E}{\sqrt{AB}}=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

teng deb olinsa, hamda

$$x_0=\sqrt[4]{\frac{B}{A}}=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

kattaliklarni kiritilsa, hamda $\lambda=2n+1$ tengligini eslasak,

$$E_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$$

ni hosil qilinadi. Garmonik ossilyatorning xususiy funksiyalari esa (4.62) ga ko‘ra

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}x_0}}e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \quad (6.46)$$

ga teng bo‘ladi va to‘lqin funksiyalariga qo‘yiladigan barcha talablarni qanoatlantiradi. Ma’lumki kvant nazariyasining asosiy prinsiplariga binoan kuzatuvchi kattaliklar sifatida tekshirilayotgan kattaliklarning tegishli operatorlarining o‘rtacha qiymatlari hisoblanadi. Xususan, garmonik ossilyatorning misolida esa koordinata va impulslarning

$$\mathrm{X}_{mn}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*{}_m(x)\hat{x}\psi_n(x)dx \quad (6.47)$$

va

$$\mathrm{P}_{mn}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*{}_m(x)\hat{\mathrm{P}}_x\psi_n(x)dx \quad (6.48)$$

matrik elementlari muhim ahamiyat kasb etadi. (6.47) ifodaga garmonik ossilyatorning (6.46) dagi to‘lqin funksiyasini qo‘yilsa va

$$\xi=\frac{x}{x_0}\quad,\qquad c_n=\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}x_0}}$$

belgilash kiritilsa , biz matrik element uchun

$$X_{mn}=x_0^2c_mc_n\int e^{-\xi^2}H_m(\xi)\xi H_n(\xi)d\xi \quad (6.49)$$

natijaga kelinadi. Endi asosiy vazifa (6.48) integralni hisoblashdan iborat. Garmonik ossilyatorning masalasini yechganimizda ma’lum

Ma’lumki, (6.46) funksiyaning Fur’ye almashtirishi o‘z-o‘ziga o‘tadi, faqat $\sqrt{2\pi}(-i)^n$ koeffitsiyentga ko‘paytirish kerak. Demak,

$$\varphi_n(p)=\frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}p_0}}H_n\left(\frac{p}{p_0}\right)e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{p_0}\right)^2}. \quad (6.72)$$

Impulslar sohasida $\varphi_n(p)$ to‘lqin funksiyasini aniqlab olgandan keyin, koordinata va impulslarning matrik elementlarini hisoblash mumkin:

$$X_{mn}=\int\varphi^*{}_m\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi_n dp, \quad (6.73)$$

va

$$p_{mn}=\int\varphi_m^*p\varphi_n dp \quad (6.74)$$

3. Matrik tassavuri.

Agarda impuls va koordinata operatorlarini matritsa yordamida ifodalanilsa, ular ham (2.57) munosabatni qanoatlantirishi mumkin. Garmonik ossilyatorning Gamiltoniani va (2.57) dagi munosabatning matrik elementlarini m va n indekslar orqali belgilanadi, u holda

$$(px)_{mn}-(xp)_{mn}=-i\hbar I \quad (6.75)$$

$$H_{mn}=\frac{(p^2)_{mn}}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}(x^2)_{mn} \quad (6.76)$$

bo‘ladi , bunda I-birlik matritsa. Avvalo garmonik ossilyator uchun aniqlangan matrik elementlarning qiymatlaridan foydalanib, bu elementlar (6.75) tenglamani qanoatlantirishini ko‘rsatiladi, keyinchalik (6.76) dan foydalanib energiyaning spektri topiladi.

(6.75) tenglamaning yechimi sifatida x - tassavvurdagi koordinata va impulsdan tuzilgan va matrik elementlardan tashkil topgan matritsalar olish mumkin. U holda (6.60) dagi va (6.62) matrik elementlarni quyidagi ko‘rinishda yozish mumkin:

$$x_{mn}=\begin{pmatrix}x_{00}&x_{01}&x_{02}&x_{03}&\cdots\\x_{10}&x_{11}&x_{12}&x_{13}&\cdots\\x_{20}&x_{21}&x_{22}&x_{23}&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{pmatrix}=x_0\begin{pmatrix}0&\sqrt{\frac{1}{2}}&0&0&\cdots\\\sqrt{\frac{1}{2}}&0&\sqrt{\frac{2}{2}}&0&\cdots\\0&\sqrt{\frac{2}{2}}&0&\sqrt{\frac{3}{2}}&\cdots\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{pmatrix} \quad (6.77)$$

$$\Phi(x)=\hat{U}^{-1}(t)\psi(x,t)=\psi(x,0) \qquad (6.38)$$

bo‘ladi va bunda $\Phi(x)$ – Geyzenberg tasavvuridagi to‘lqin funksiyasi bo‘lib, u faqat koordinataga bog‘liq bo‘ladi.

$$\hat{U}^{-1}(t)=\hat{U}^{+}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

ni hisobga olib, hamda (6.38) ifodadan foydalanib,

$$\Phi(x)=\psi(x,0)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi(x,t)$$

ifoda hosil bo‘ladi. Shunday qilib, Shredinger tasavvurida berilgan ixtiyoriy $\hat{A}$ operator Geyzenberg tasavvurida (uni $\hat{A}_G$ orqali belgilasak) quyidagi ko‘rinishga ega bo‘ladi

$$\hat{A}_G=\hat{U}^{+}(t)\hat{A}\hat{U}(t)$$

yoki

$$\hat{A}_G=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \qquad (6.39)$$

ko‘rinishda yozish mumkin. Endi $\hat{H}$ operatorning xususiy funksiyalaridan foydalangan holda $\hat{A}_G$ operatorning matrik elementlarini aniqlash mumkin. Bu holda

$$\left(\hat{A}_G\right)_{mn}=\sum_{k,l}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)_{mk}A_{kl}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)_{ln}=e^{\frac{i}{\hbar}E_m t}A_{mn}e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}=e^{i\omega_{mn}t}A_{mn} \qquad (6.40)$$

bo‘ladi. Kvant mexanikasining asosiy (6.31) postulatining bajarilishi uchun $\hat{A}$ dinamik kattaliklarning operatorlarini vaqt bo‘yicha o‘zgarishi Geyzenberg tenglamalari qanoatlantirishi kerak, ya’ni

$$\frac{d\hat{A}_G}{dt}=\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}\{\hat{H}(t)\hat{A}(t)-\hat{A}(t)\hat{H}(t)\}=\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}+[\hat{H}(t),\hat{A}(t)]. \qquad (6.41)$$

Olingan tenglama Geyzenberg tassavuridagi harakat tenglamasini ifoda qiladi va bu tenglama Shredinger tassavuridagi tenglamaga ekvivalent bo‘lib, relyativistik bo‘lmagan kvant mexanikasida kam qo‘llaniladi. Ammo relyativistik kvant maydon nazariyasidagi ko‘p masalalar uchun Geyzenberg tassavuridan foydalanish ancha afzalliklarga egadir. Xuddi shu natijani (6.39) tenglamani vaqt bo‘yicha differensiallash orqali ham olish mumkin. Umuman olganda, Shredinger tassavuridagi holatlar va dinamik o‘zgaruvchilarning ifodalanishini unitar almashtirishlar yordamida Geyzenberg tassavuridagi holatlar va dinamik o‘zgaruvchilar

bo‘ldiki, (4.42) differensial tenglamaning yechimlari n–darajali polinom bo‘lishi uchun $\lambda=2n+1$ qiymatga teng bo‘lishi kerak. Agarda n soni juft bo‘lsa, olingan polinomlar juft bo‘lishadi, agarda n soni toq bo‘lsa bu polinomlar ham toq bo‘ladi. Parametr $\lambda=2n+1$ bo‘lganida matematikada Ermit polinomlari bilan nomlangan $H_n(\xi)$ polinomlar uchun (4.57) differensial tenglama hosil qilinadi:

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH_n}{d\xi}+2nH_n=0 \qquad (6.50)$$

Ermit polinomlarini $e^{-S^2+2S\xi}$ funksiyani S bo‘yicha qatorga yoyilganda hosil qilish mumkin, ya’ni:

$$G(\xi,S)=e^{\xi^2-(S-\xi)^2}=e^{-S^2+2S\xi}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}S^n \qquad (6.51)$$

va bu $G(\xi,S)$ funksiyani ***hosil qiluvchi funksiya*** deyiladi. Endi (6.51) yoyilma asosida tuzilgan $H_n(\xi)$ polinomlar (6.50) differensial tenglamani qanoatlantirishi ko‘rsatiladi.

Avvalo (6.51) tenglama ξ bo‘yicha differensiallanadi, u holda

$$2Se^{-S^2+2S\xi}=2S\sum\frac{H_n(\xi)}{n!}S^n=\sum\frac{H_n'(\xi)}{n!}S^n$$

ifodaga kelinadi. Bu yerda shtrix orqali Ermit polinomidan uning argumenti bo‘yicha olingan hosilasi belgilangan. S ning bir xil darajalari bo‘yicha koeffitsiyentlar tenglansa, birinchi rekurrent munosabatga kelinadi:

$$H_n'(\xi)=2nH_{n-1}(\xi) \qquad (6.52)$$

Ikkinchi rekurrent munosabatni chiqarish uchun (6.51) qatorni S bo‘yicha differensiallash kerak, ya’ni

$$(2\xi-2S)e^{-S^2+2S\xi}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)nS^{n-1}}{n!} \qquad (6.53)$$

bo‘ladi va (6.53) ning chap tomoni ochib chiqiladi, u holda (6.50) dan foydalanilsa quyidagi

$$(2\xi-2S)e^{-S^2+2S\xi}=\sum_{n=0}^{\infty}\left(2\frac{H_n(\xi)}{n!}\xi S^n-2\frac{H_n(\xi)}{n!}\xi S^{n+1}\right)$$

tenglikka kelinadi. Demak, (6.53) ifodani quyidagicha yozish mumkin:

$$\left(A_1p^2-B_1\frac{d^2}{dp^2}\right)\varphi(p)=E\varphi(p)$$

tenglamaga kelinadi. Bu yerda

$$A_1=\frac{1}{2m} \quad \text{va} \quad B_1=\frac{m\omega}{2}\hbar^2$$

teng deb qabul qilingan. Endi yangi λ_1 va η o‘zgaruvchilarni kiritib

$$\lambda_1=\frac{E}{\sqrt{A_1B_1}}=\frac{2E}{\hbar\omega},\quad p_0=\sqrt[4]{\frac{B_1}{A_1}}=\sqrt{m\omega\hbar}=\frac{\hbar}{x_0},\quad \eta=\frac{p}{p_0}$$

x-tasavvurdan p-tasavvurga o‘tgan paytda garmonik ossilyator uchun to‘lqin tenglamasi hosil qilinadi va uning ko‘rinishi quydagicha bo‘ladi:

$$\varphi''+(\lambda_1-\eta)\varphi=0 \qquad (6.66)$$

bu yerda shtrix orqali η bo‘yicha hosila belgilangan. Hosil bo‘lgan (6.66) tenglama koordinata tasavvurida olingan (4.42) tenglamaga aynan o‘xshashdir. Shuning uchun olingan yechimlardan foydalanilsa bo‘ladi va p-tasavvurida quyidagilarni yozish mumkin:

$$E_n=\frac{\lambda_1}{2}\hbar\omega=\hbar\omega(n+\tfrac{1}{2}) \qquad (6.67)$$

$$\varphi_n(p)=\frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}\,p_0}}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{p_0}\right)^2}H_n\left(\tfrac{p}{p_0}\right) \qquad (6.68)$$

Olingan formulalarda $\varphi_n(p)$ va $\psi(x)$ funksiyalar Fur’ye almashtirishi orqali bir- biri bilan bog’langan, ya’ni

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\varphi(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp \qquad (6.69)$$

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx \qquad (6.70)$$

(6.70) formuladan foydalangan holda (6.68) formulani hosil qilish mumkin:

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}x_0}}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}e^{-\frac{i}{\hbar}px}H_n\left(\tfrac{x}{x_0}\right)=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{\sqrt{x_0}}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}d\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2}e^{-\frac{i}{\hbar}px_0\xi}H_n(\xi). \qquad (6.71)$$

matritsa ko‘rinishdagi Puasson qavsining elementidir. Shunday qilib, $d\hat{L}/dt$ operatorning matrik elementini quyidagicha yozish mumkin:

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt}\right)_{mn}=\frac{\partial L_{mn}}{\partial t}+[\hat{H},\hat{L}]_{mn} \qquad (6.28)$$

Xususiy holda, agarda $\hat{H}$ gamiltonian vaqtga bog’liq bo‘lmasa, u holda bu Gamiltonian to‘la energiya operatori bo‘ladi va $\hat{H}$ matritsa dioganal matritsa bo‘ladi, ya’ni

$$H_{kn}=E_k\delta_{kn} \quad , \quad H_{mk}=E_m\delta_{mk}.$$

Endi, agar $\hat{L}$ operatorning o‘zi ham vaqtga oshkor ravishda bog’liq bo‘lmasa, (6.27) va (6.28) dan quyidagi formulalar hosil qilinadi:

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt}\right)_{mn}=\frac{1}{i\hbar}(E_n-E_m)L_{mn}$$

yoki

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt}\right)_{mn}=i\omega_{mn}L_{mn} \qquad (6.29)$$

bunda

$$\omega_{mn}=\frac{E_m-E_n}{\hbar}. \qquad (6.30)$$

Bor chastotasidir.

6.3 Kvant mexanikasining turli xil tassavurlari

Ushbu paragrafda kvant mexanikasining matematik apparatini umumlashtirilganligi keyingi rivojlanishi bilan bog’liq bo‘lgan bir qator masalalar ko‘rib chiqiladi, ya’ni boshqacha aytganda, vaqt o‘tishi bilan turli xil jarayonlarning rivojlanishini aks ettiruvchi bir qator tasavvurlar bilan tanishib chiqiladi. Ma’lumki, har bir dinamik nazariyaning asosiy maqsadi ixtiyoriy boshlang’ich vaqt momentida sistemaning berilgan xarakteristikalari qarab, keyingi vaqt momenlarida shu xarakteristikalarini aytib berishidan iborat bo‘ladi. Xususan, kvant mexanikasida t_0 vaqt momentida dinamik o‘zgaruvchilar va ularning o‘rtacha qiymatlarining o‘lchangan natijalari ma’lum bo‘lsa, shu kattaliklarning o‘lchash natijalarini vaqtning keyingi t momentlarida aytib berish imkoniyati mavjud bo‘lishi kerak. Kvant mexanikasida yuqorida aks ettirilgan mulohazalar sababiyat prinsipida mujassamlangan bo‘lib, uning natijasi sifatida 3-bobda hosil qilgan vaqt o‘tishi bilan sistemaning rivojlanishini ifoda qiluvchi dinamik tenglamalar xizmat qiladi. Ushbu tenglamalarni yana bir bor eslaylik: kvant mexanikasida ixtiyoriy fizikaviy sistemaning ψ holatdagi L dinamik kattalik o‘rtacha qiymatining vaqt bo‘yicha o‘zgarishi quyidagi tenglamala bilan beriladi:

$$\frac{d\overline{L}}{dt} = \frac{\partial \overline{L}}{\partial t} + \overline{[\hat{H}, \hat{L}]} \tag{6.31}$$

bunda $\hat{H}$ – sistemaning Gamiltoniani bo‘ladi. (6.31) tenglama, kvant mexanikasining asosiy dinamik postulati bo‘lib, kvant mexanikasining umumiy sxemasida vaqtga bog’liqligini ko‘rsatuvchi bir necha usullarining mavjud ekanligini taqozo qiladi. Bu usullar fizikaviy va formal nuqtai nazardan ekvivalentdir.

1. Shredinger tassavuri

Avvalo kvant mexanikasida keng qo‘llaniladigan va yaqqol ko‘rinishga ega bo‘lgan Shredinger tasavvuri bilan tanishib chiqaylik. Bu tasavvurda kvant sistemasini ifodalovchi operatorlar dinamik kattaliklarga mos kelishi bilan bir qatorda, vaqtga oshkor ravishda bog’liq bo‘lmagan qilib tanlab olingan edi. Sistemaning vaqt bo‘yicha o‘zgarishini yaqqol ko‘rsatish uchun $\psi(x,t)$ to‘lqin funksiya kiritilgan va sistemaning rivojlanishi haqidagi barcha ma’lumotlar ushbu to‘lqin funksiya zimmasiga yuklatilgan. Kiritilgan to‘lqin funksiya (3.3) dagi nostatsionar Shredinger tenglamasini qanoatlantiradi. Shunday qilib, Shredinger manzarasida holatlarning vektorlari vaqt o‘tishi bilan o‘zgarib turadi, dinamik o‘zgaruvchilarning operatorlari esa o‘zgarishsiz qoladi. Bu tasavvurda o‘rtacha qiymatlarning vaqt bo‘yicha o‘zgarishi ma’lum bo‘lgan formula orqali ifodalanadi va u

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

ga teng bo‘lib, (6.31) tenglama bilan mos keladi. Kvant mexanikasidagi Shredinger tasavvuri klassik mexanikadagi keng qo‘llaniladigan Gamilton-Yakobi metodiga mos keladi, ma’lumki bu metodda

Gamilton-Yakobi tenglamasini qanoatlantiruvchi *S(x,t)* ta’sir funksiyasi asosiy rol o‘ynaydi.

2. Geyzenberg tassavuri

Shredinger tasavvuridan tashqari kvant mexanikasida Geyzenberg tasavvuri ham ishlatiladi. Ushbu tasavvurni birinchi bo‘lib Geyzenberg taklif etgan va kvant mexanikasining rivojlanishiga katta hissa qo‘shgan. Geyzenberg tasavvurida sistemaning rivojlanishini vaqtga bog’liq bo‘lgan operatorlar yordamida ifodalanadi va ψ(x) to‘lqin funksiyasi faqat koordinatalarga bog’liq bo‘ladi:

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}. \tag{6.32}$$

Demak, Geyzenbergning tasavvurida, $\hat{L}$ operatorning matrik elementini (6.19) formulaga asosan quyidagicha tuzish mumkin:

$$L_{mn}(t) = \int \psi^*_m(x,t)\hat{L}\psi_n(x,t)dx = L_{mn}e^{i\omega_{mn}t} \tag{6.33}$$

Agar operator vaqtga oshkor ravishda bog’liq bo‘lmasa

$$\left(\frac{d\hat{L}}{dt}\right)_{mn} = \frac{dL_{mn}}{dt} = i\omega_{mn}L_{mn}(t) \tag{6.34}$$

natija olinadi va uni (6.29) formula bilan taqqoslash mumkin bo‘ladi. Ikkinchi tomondan jarayonning vaqt bo‘yicha rivojlanishini to‘lqin funksiyaga ta’sir etuvchi $\hat{U}(t)$ operator orqali ifodalash mumkin, ya’ni

$$\psi(x,t) = \hat{U}(t)\psi(x,0) \tag{6.35}$$

(6.35) ifodani Shredinger tenglamasiga qo‘yilsa, kiritilgan $\hat{U}(t)$ operator uchun quyidagicha tenglama hosil bo‘ladi:

$$i\hbar\frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t). \tag{6.36}$$

Agar $\hat{U}(0)=1$ teng bo‘lsa va $\hat{H}$ operator vaqtga oshkor ravishda bog’liq bo‘lmasa, (6.36) tenglamaning yechimini

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{6.37}$$

shaklda yozish mumkin. Geyzenberg tasavvurida vaqt bo‘yicha sistemaning rivojlanishini ifodalash uchun vaqtga bog’liq bo‘lgan operatorlarning kiritilishi lozimdir. Umuman Geyzenberg tasavvuriga o‘tish jarayoni unitar almashtirish yordamida amalga oshiriladi, ya’ni

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left(-2\frac{H_n(\xi)}{n!}S^{n+1} + 2\frac{H_n(\xi)}{n!}\xi S^n\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)nS^{n-1}}{n!}.$$

Ushbu munosabatdan uchun zarur bo‘lgan ikkinchi rekurrent munosabat kelib chiqadi, ya’ni

$$\xi H_n(\xi) = \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi) + nH_{n-1}(\xi) \tag{6.54}$$

(6.52) dagi birinchi munosabatni yana bir marta differensiallansa

$$H''_n(\xi) = 2nH'_{n-1}(\xi) \tag{6.55}$$

ifodaga kelinadi va (6.55) foydalanib (6.54) munosabatni quyidagicha yozish mumkin bo‘ladi:

$$2nH'_{n-1} = \frac{d}{d\xi}(2\xi H_n) - H'_{n+1} = 2\xi H'_n - 2H_n - H'_{n+1} \tag{6.56}$$

Hosil bo‘lgan munosabatni (6.52) va (6.56) formulalar yordamida oddiy differensial tenglamaga olib kelish mumkin:

$$H''_n(\xi) - 2\xi H'_n(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0 \tag{6.57}$$

va olingan tenglama (6.50) dagi differensial tenglama bilan bir-biriga mos keladi. Shunday qilib, $H_n(\xi)$ Ermit polinomlarini aniqlovchi asosiy formulalar sifatida (6.50) dagi differensial tenglamadan yoki (6.51) hosil qiluvchi funksiyani, yoki (6.51) va (6.54) dagi rekurrent formulalarni qo‘llash mumkin. Hosil bo‘lgan ikkinchi rekurrent munosabatdan foydalanib, (6.49) dagi matrik elementni hisoblash mumkin va u quyidagicha ko‘rinish oladi:

$$X_{mn} = x_0^2 C_m C_n\left\{\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}H_m(\xi)H_{n+1}(\xi)d\xi + n\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\xi^2}H_m(\xi)H_{n-1}(\xi)d\xi\right\}.$$

Endi to‘lqin funksiyalarga yana bir marta murojaat qilib, quyidagicha natijani olish mumkin:

$$X_{mn} = x_0\left\{\frac{1}{2}\frac{C_n}{C_{n+1}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_m(x)\psi_{n+1}(x)dx + n\frac{C_n}{C_{n-1}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_m(x)\psi_n(x)dx\right\}. \tag{6.58}$$

Hosil bo‘lgan ushbu tenglikda $\psi_n(x)$ funksiyalarning ortonormallashganligini hisobga olib,

$$X_{mn} = x_0\left\{\frac{1}{2}\frac{C_n}{C_{n+1}}\delta_{n+1,m} + n\frac{C_n}{C_{n-1}}\delta_{n-1,m}\right\} \tag{6.59}$$

natijaga kelinadi. Endi C_n koeffitsiyentlarning qiymatlari qo‘yilsa, (6.57) dan matrik elementlarni hisoblash uchun formulani hosil qilish mumkin:

$$X_{mn} = x_0\left\{\sqrt{\frac{n+1}{n}}\delta_{n+1,m} + \sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n-1},m\right\}. \tag{6.60}$$

Olingan matritsani ochiq ko‘rinishda yozish mumkin va (6.60) dan ko‘rinib turibdiki bosh dioganalga qo‘shni bo‘lgan hadlargina noldan farqli bo‘ladi:

$$x = x_0\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \tag{6.61}$$

Agarda x – tasavvuridagi impuls operatorining matritsasini hisoblash masalasiga qaytilsa, u holda

$$P_{mn} = -im\omega x_{mn} \tag{6.62}$$

yoki

$$P_{mn} = -im\omega_0(m-n)x_{mn} \tag{6.63}$$

natijaga kelinadi.

2. Impuls tassavuri, yoki *p*-tassavurini hosil qilish uchun (6.44) dagi operator munosabatida p impulsni oddiy c – son deb qabul qilinadi, x koordinatasini esa operator deb hisoblanadi va

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} \tag{6.64}$$

orqali belgilash kiritiladi. Yaqqol ko‘rinib turibdiki, agarda impulsga bog’liq bo‘lgan to‘lqin funksiyasiga ushbu operator ta’sir qilsa , u holda

$$(p\hat{x} - \hat{x}p)\varphi(p) = -i\hbar\varphi(p) \tag{6.65}$$

tenglik bajarilishi kerak. Ushbu munosabatlarni hisobga olgan holda impuls tasavvurdagi garmonik ossillyatorning nazariyasi tuzish mumkin. Hosil qilingan (6.64) dagi operatorni Gamiltonian formulasiga qo‘yilsa, ko‘rinishga ega bo‘ladi. Bunda α - haqiqiy son bo‘lib, ixtiyoriy faza ko‘paytmasi deb yuritiladi. Agar α ni nolga teng deb qabul qilinsa,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

natija hosil qilinadi.

σ_y matritsani aniqlash uchun $i\sigma_y = -\sigma_x\sigma_z$ munosabatdan foydalaniladi va

$$\sigma_y = i\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

ifoda kelib chiqadi. Shunday qilib, **σ** matritsaning uchta komponentalarini aniqlab oldik va ularning ko‘rinishi quyidagicha bo‘lar ekan:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \qquad (7.11)$$

Olingan (7.11) dagi matritsalar elektronning spinini hisobga olgan holda kvant mexanikasida fundamental rol o‘ynaydi va Pauli matritsalari deb yuritiladi. Pauli matritsalari yordamida (7.5) formulaga asoslanib, $\hat{S}_x, \hat{S}_y$ va $\hat{S}_z$ operatorlarning oshkor ravishdagi ko‘rinishini topish mumkin, ya’ni

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}, \ \hat{S}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\hbar}{2} \\ i\frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}, \ \hat{S}_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}. \qquad (7.12)$$

Ushbu spin matritsalarini hosil qilganimizda S_z matritsaning operatorini dioganal ko‘rinishda olganimizni doimo nazarda tutish kerak, ya’ni S_z-tasavvurda olingan matritsalar hosil qilindi. Keyinchalik shu narsaga e’tiborni qaratish kerakki, 1 belgi $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ ga teng bo‘lgan birinchi xususiy qiymatga, 2 belgi esa $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ ga teng bo‘lgan ikkinchisi xususiy qiymatga tegishlidir. Endi (7.12) dan foydalanib elektron spin operatorining kvadratini hisoblash mumkin, ya’ni

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 I. \qquad (7.13)$$

Demak, atomdagi elektronning holatini to‘la to‘kis ko‘rib chiqish uchun elektronning xususiy mexanik momentining mavjudligini hisobga olish kerak. Ikkinchidan, elektron spin operatorining proyeksiyasi faqat ikkita qiymatni qabul qiladi:

$$S_z = \hbar m_s \ , \ m_s = \pm \frac{1}{2}. \qquad (7.14)$$

Olingan (7.14) tenglik elektron spin operatorini kvantlanish shartini ifodalaydi. Uchinchidan, elektron spin operatori kvadratining kvantlanish shartini yozish mumkin, ya’ni

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1) \ , \ s = \frac{1}{2}. \qquad (7.15)$$

Shunday qilib, ikkita m_s va s kvant sonlari kiritdik, birinchisi tanlangan *oz* yo‘nalishga spin proyeksiyasining qiymatini aniqlab bersa, ikkinchisi spin operatori kvadratining xususiy qiymatini aniqlaydi.

Shu paytgacha atomdagi elektron holatini ifodalash uchun uchta dinamik kattalik: *E* energiya, **M** impuls momentining absolut qiymati va impuls momentining Z-o‘qiga bo‘lgan proyeksiyasi - M_z ning, berilishi bilan cheklangan edik. Agarda bu kattaliklarning kvantlanish shartlarini eslansa, biz kvant sonlarining to‘plami yordamida elektron holatini ifodalovchi usulni aniqlagan edik. Avval uchta kvant sonini kiritdik: *n*–bosh kvant soni, *l*–orbital, yoki azimutal kvant soni va *m*–magnit kvant soni. Endi elektron spinini hisobga olgan holda avval kiritilgan uchta kvant soniga to‘rtinchi m_s kvant sonini qo‘shish zarur. Shunday qilib, atomdagi elektron holati to‘rtta kattalik – *E*, M^2, M_z va S_z, yoki, to‘rtta kvant soni – *n, l, m,* m_s bilan ifodalanadi.

7.3. Spin funksiyalari

Avvalgi paragrafda aniqlagandek, atomdagi elektronning holatini to‘liq ifodalash uchun to‘rtta dinamik kattaliklarni kiritish yetarlidir, ya’ni elektronning og’irlik markazi harakatini aniqlovchi uchta kattalik bilan birgalikda elektron spinini hisobga oluvchi ya’na bitta S_z kattalikni

Agar

$$w(x,y,z,t) = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 \qquad (7.43)$$

va

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m_e}\left[\left(\psi_1^*\nabla\psi_1 - \psi_1\nabla\psi_1^*\right) + \left(\psi_2^*\nabla\psi_2 - \psi_2\nabla\psi_2^*\right)\right] - \\ -\frac{e}{m_e c}\mathbf{A}\left(\psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2\right) \qquad (7.44)$$

kabi belgilashlar kiritilsa, hosil bo‘lgan (7.42) tenglamani **J**-zarrachalar oqimining zichligi va w- ehtimolliklar zichligi uchun uzluksizlik tenglamasi ko‘rinishida yozish mumkin u quyidagicha ko‘rinishga ega bo‘ladi:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + div\mathbf{J} = 0. \qquad (7.45)$$

Ushbu ifodalar shuni ko‘rsatadiki, zarrachaning topilish ehtimoli va tok zichligi spini ma’lum yo‘nalishda bo‘lgan elektronlarga tegishli alohida qismlarning yig’indisidan iborat bo‘ladi. Ehtimolliklarning normirovka sharti

$$\int\left(\psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2\right)dxdydz = 1$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. $w_1(x,y,z,t) = \psi_1^*\psi_1$ va $w_2(x,y,z,t) = \psi_2^*\psi_2$ ifodalar spinlar mos holda $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ va $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ bo‘lgan elektronlarning *t* vaqt momentida *(x, y, z)* nuqtada topilish ehtimollik zichliklaridir.

7.6. Zeyeman effekti

Agar nurlanayotgan yoki nurlanish yutayotgan atomni tashqi elektr yoki magnit maydonga joylashtirilsa muhim optikaviy hodisalar ro‘y beradi: qo‘shimcha nurlanish va yutilish spektrlarining vujudga kelishi, yorug’likning qutblanish xarakteristikalarining o‘zgarishi va boshqa turli xil o‘zgarishlar yuz beradi.

Elektromagnit to‘lqinlar, xususan yorug’likning, nurlanish muammosi atom tuzilishi nazariyasida muhim o‘rin tutadi, chunki yorug’lik atomning ichki tuzilishi to‘g’risida eng ko‘p ma’lumot beradi.

Elektronlar kashf etilgandan so‘ng, yorug’lik elektronlarning harakati tufayli nurlanishi aniq bo‘lib qoldi. Magnit maydonining

matritsalar elementlar to‘plamining berilishi $\hat{F}$ operatorning energetik tassavurda berilishi deyiladi.

6.5. VI bob ga oid savol va masalalar

1. Matrik tasavvuridagi operator qanday ko‘rinishga ega bo‘ladi?
2. Transponirlangan matritsaning matrik elementini ko‘rinishi qanday bo‘ladi?
3. Matrik tasavvurdagi operator tenglamasi qanday bo‘ladi?
4. Matritsalar ko‘paytiruv qoidasini ifodalovchi formulani keltiring.
5. **Masala.** Radiusi r_0 ga teng va absolut o‘tkazmaydigan devorlardan iborat bo‘lgan sferik-simmetrik potensial o‘rada joylashgan m_0 massali zarrachaning asosiy holatdagi impulsining turli qiymatlari uchun ehtimolliklar taqsimoti aniqlansin.

Yechish. Asosiy holatdagi (*n=1, l=0 ,m=0*) zarracha quyidagi to‘lqin funksiya bilan aniqlanadi:

$$\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi}{r_0}r$$

Impuls tasavvuriga o‘tilsa

$$\psi(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\frac{2\pi}{\sqrt{2\pi r_0}}\int_0^{r_0}\frac{\sin\frac{\pi}{r_0}r}{r}r^2 dr\int_0^{\pi}e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\sin\theta\, d\theta =$$

$$= \frac{\hbar}{\pi p(r_0\hbar^3)^{1/2}}\int_0^{r_0}\sin\frac{\pi}{r_0}r\sin\frac{pr}{\hbar}dr = \frac{\sqrt{r_0}\sin\frac{pr_0}{\hbar}}{\hbar^{1/2}p\left(\pi^2 - \frac{p^2r_0^2}{\hbar^2}\right)}$$

natijaga kelinadi. Ushbu formula yordamida impuls vektori ehtimolligining zichligi quyidagi ifoda orqali aniqlanadi:

$$|\psi(\mathbf{p})|^2 = \frac{r_0\hbar^3\sin^2\frac{pr_0}{\hbar}}{p^2\left(\pi^2\hbar^2 - p^2r_0^2\right)^2}$$

p va *p+dp* oralig’ida joylashgan zarracha impulsining ehtimolligi quyidagi formula orqali beriladi:

$$W(p)dp = |\psi(\mathbf{p})|^2 4\pi p^2 dp = \frac{4\pi r_0\hbar^3 dp}{\left(\pi^2\hbar^2 - p^2r_0^2\right)^2}\sin^2\frac{pr_0}{\hbar}.$$

VII bob
ZARRACHALARNING SPINI VA ULARNING AYNAN O'XSHASHLIGI

7.1. Elektronning spini

O'tgan paragraflarda bayon qilgan kvant mexanikasi o'zining aniq va soddaligiga qaramay bir necha kamchiliklardan holi emas. Shu kamchiliklardan ikkitasini ko'rib chiqaylik. Asosiy holatdagi vodorod atomi (5.40) tenglamaga binoan birga teng bo'lgan *n* bosh kvant soniga egadir va *n*=1 bo'lganida l orbital kvant soni va n_r radial kvant soni nolga teng bo'lishlari kerak, chunki (5.40) tenglamaga binoan *l* va n_r lar noldan kichik qiymatga teng bo'lishlari mumkin emas. Shunday qilib, vodorod atomining asosiy holati *S*-holat bo'ladi. Ushbu holatdagi vodorod atomlarining dastasini bir jinsli bo'lmagan magnit maydoni orqali o'tkazilganda tajribada dasta ikki simmetrik komponentaga ajraladi. Lekin *l=0* bo'lganida orbital moment bo'yicha atomlar dastasi komponentalarga ajralmasligi kerak edi. Agar dastada uyg'otilgan holatdagi, masalan *l*=1 bo'lgan atomlar ham mavjud bo'lsa, dasta $m_z = 0,\pm 1$ qiymatlar soniga mos ravishda uchta komponentalarga ajralishi kerak edi. Mashhur fiziklar O. Shtern va V.Gerlax tomonidan 1921-yilda o'tkazilgan tajribasi ko'rsatdiki, asosiy holatdagi kumush atomlarining dastasi bitta dastaga ham uchta komponentaga ham ajralmasdan, faqat ikkita komponentaga ajralar ekan. Bu tajriba kvant mexanikasining rivojlanishiga katta hissa qo'shib, fazoviy kvantlanish mavjudligini va elektronlar hamda atomlar magnit momentlarining qiymatlari diskret xarakterga egaligini tasdiqladi. Shunday qilib, atomning holati aslida uchta n, l, m_z kvant sonlari bilangina emas, balki dastaning ajralishini ifodalovchi yana bir kvant soni bilan ham aniqlanadi. Kvant nazariyasi bilan tajriba natijalari o'rtasida mavjud bo'lgan ikkinchi muhim tafovut Zeyemanning anomal effekti bilan bog'langandir.

Yuqorida bayon etilgan atom fizikadagi bir qator kamchiliklarni bartaraf qilish uchun 1925-yilda Ulenbek va Gaudsmit quyidagi g'oyani taklif etishdi. Ularning fikriga binoan, elektron orbital harakat miqdori momentidan tashqari, hususiy harakat miqdori momentiga ham ega. Elektron har qanday chekli o'lchamlarga ega bo'lgan jism kabi uchta

Avvalo, izlanayotgan σ_x matritsa ermit matritsa bo'lishi kerak, chunki bu matritsa dinamik o'zgaruvchini ifodalaydi, uning a_{11} va a_{22} dioganal elementlari haqiqiy bo'lishi kerak, a_{12} va a_{21} elementlari esa bir-biriga kompleks qo'shma bo'lishi kerak, ya'ni σ_x matritsani

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

ko'rinishda olinadi. Ikkinchidan, σ_x va σ_z matritsalarning antikommutativligidan foydalanib, $\sigma_x\sigma_z$ va $\sigma_z\sigma_x$ ko'paytmalar hisoblab chiqiladi va ularning natijalari uchun quyidagilar olinadi:

$$\sigma_x\sigma_z = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix},$$

$$\sigma_z\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix}.$$

Bu ikkala ko'paytmalarning antikommutativligi hisobga olinsa,

$$\begin{pmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix}$$

ifoda kelib chiqadi. Demak, $a_{11} = -a_{11} = 0$ va $a_{22} = -a_{22} = 0$ kelib chiqadi, demak

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}$$

hosil qilinadi. Lekin $\sigma_x^2 = I$, ya'ni birlik matritsaga tengligi hisobga olinsa

$$\sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{12}a_{21} & 0 \\ 0 & a_{21}a_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

natija kelib chiqadi. Demak, $a_{12}a_{21} = 1$ bo'lishi kerak va σ_x matritsa ermit matritsa bo'lganligini hisobga olinsa, uning elementlari bir biriga kompleks ko'shma bo'lishi kerak, ya'ni $a_{12} = a_{21}^*$. Bu ikkita talabni faqat $e^{i\alpha}$ va $e^{-i\alpha}$ sonlar qanoatlantirishadi. Shunday qilib,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}$$

kiritish zarur. Shu tufayli elektronni to'rtta erkinlik darajasiga ega ekanligi to'g'risida gapirish mumkin. Elektronning holatini aniqlovchi ψ to'lqin funksiyasi ham to'rtta o'zgaruvchiga bog'liq bo'lgan to'lqin funksyasi sifatida qarash kerak bo'ladi, bulardan uchtasi elektron og'irlik markazining harakatiga tegishli bo'lsa, to'rtinchisi-S_z bilan bog'langandir. Shuning uchun, koordinata tasavvurida elektronlar holatini ifoda qilish uchun to'lqin funksyasini

$$\psi_1 = \psi(x, y, z, S_z, t) \tag{7.16}$$

ko'rinishda yozish kerak. (7.14) dan ma'lum bo'ldiki, S_z faqat ikkita qiymatni qabul qila olar ekan, shuning uchun (7.16) dagi bitta to'lqin funksiyani ikkita to'lqin funksiyasiga ajratib yoziladi:

$$\psi_1 = \psi(x, y, z, +\frac{\hbar}{2}, t), \tag{7.17}$$

$$\psi_2 = \psi(x, y, z, -\frac{\hbar}{2}, t). \tag{7.17'}$$

Bu ikkita funksiyani bitta ustunga ega bo'lgan matritsa ko'rinishdagi umumiy to'lqin funksiyasi orqali ifodalash mumkin:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 & 0 \\ \psi_2 & 0 \end{pmatrix}. \tag{7.18}$$

Ushbu (7.18) to'lqin funksiyasi uchun qo'shma funksiya Ψ^* ni bitta qatorga ega bo'lgan matritsa korinishida yozish mumkin:

$$\Psi^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{7.19}$$

Kiritilgan ψ_1 va ψ_2 funksiyalarni faqatgina shu holatda bir-biridan ajratish mumkinki, agar elektronning og'irlik markazi harakati va elektronning spini orasidagi bog'lanish mavjud bo'lsa. Ayni vaqtda bunday bog'lanish atom spektirini eksperimental o'rganish natijasida spektr chiziqlarining dublet xarakterga ega ekanligida namoyon bo'ladi, yani atom elektronining spin va orbital harakat miqdori momentlari o'rtasidagi magnit o'zaro ta'sir asosida tushuntiriladi. Masalan, vodorod atomidagi bitta elektron protondan iborat bo'lgan yadroning Kulon maydonida harakatlanayotgan bo'lsa, spin-orbital o'zaro ta'sirning mavjudligini ko'rsatish mumkin. Agarda, atom spektrining murakkab tarkibi hisobga olinmasa, u holda spin-orbital o'zaro ta'sirni ham

uchun tenglama hosil qilinadi, ya'ni $\Psi^+ = (\psi_1^*, \psi_2^*)$ lar uchun quyidagi tenglamani hosil qilish kerak:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi^+}{\partial t} = \hat{H}_0^*\Psi^+ + \frac{e\hbar}{2m_e c}\left((\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})\Psi\right)^+, \tag{7.36}$$

(7.35) tenglamani chap tomondan Ψ^+ ga, (7.36) ning o'ng tomonidan esa Ψ ga ko'paytiriladi hamda birinchi tenglamadan ikkinchisini ayirib, quyidagi ifodaga kelinadi:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^+\Psi\right) =$$

$$= \Psi^+\left(\hat{H}_0\Psi\right) - \left(\hat{H}_0^*\Psi^+\right)\Psi + \frac{e\hbar}{2m_e c}\left[\Psi^+(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})\Psi - \left((\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})\Psi\right)^+\Psi\right]. \tag{7.37}$$

Matritsalar ustida bajariladigan ammallarni bilgan holda:

$$\left((\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})\Psi\right)^+ = \Psi^+\left(\boldsymbol{\sigma}^+\mathbf{H}\right) \tag{7.38}$$

tenglikni hosil qilish mumkin. Ikkinchidan, spin operatorlarining ermitligidan $\sigma^+ = \sigma$ teng bo'ladi. Shunday qilib, (7.37) dagi kvadrat qavs ichidagi ifoda nolga teng bo'ladi. Endi $\boldsymbol{\sigma}$ operatorlar qatnashmagan hadlar hisoblab chiqiladi. (3.8) dan foydalanilsa, va $\hat{H}_0$ uchun quyidagi ifodaga eslansa:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m_e}\hat{\mathbf{P}}^2 + \frac{e}{m_e c}\mathbf{A}\hat{\mathbf{P}} + \frac{i\hbar e}{2m_e c}div\mathbf{A} + \frac{e^2}{2m_e c}A^2 - eV + U \tag{7.39}$$

u holda, quyidagi munosabatlarga kelinadi:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = \Psi^+(\hat{H}_0\Psi) - (\hat{H}_0^*\Psi^+)\Psi. \tag{7.40}$$

Avval (7.40) tenglamaning chap tomonini hisoblab, quyidagi natijaga kelinadi:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1 & 0 \\ \psi_2 & 0 \end{pmatrix} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2\right) \tag{7.41}$$

so'ngra (7.40) ning o'ng tomonini hisoblab, ushbu natijani osongina olish mumkin:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}div\left\{\psi_1^*\nabla\psi_1 - \psi_1\nabla\psi_1^* + \psi_2^*\nabla\psi_2 - \psi_2\nabla\psi_2^*\right\} - \\ -\frac{i\hbar e}{m_e c}div\left[\mathbf{A}\left(\psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2\right)\right]. \tag{7.42}$$

ilgarillanma harakat bilan bir qatorda uch yo‘nalish bo‘yicha aylanma harakat bilan bog‘liq erkinlik darajasiga ham ega bo‘lishi mumkin.

Kvant mexanikasining tuzilishida o‘tkazilgan bir qator tajribalar natijasidan ma’lum bo‘ldiki, elektronning o‘ziga xos bo‘lgan ichki erkinlik darajasi mavjud. Ushbu ichki erkinlik darajasi elektronning orbital harakati bilan emas balki qandaydir xususiy mexanik harakat miqdori momenti bilan bog’langandir. Bu xususiy mexanik harakat miqdori momenti elektronning spini deb ataladi. Spin ingilizcha so‘z bo‘lib, o‘z o‘qi atrofida aylanish degan ma’noni bildiradi. Keyingi paragraflarda ko‘rish mumkinki, spin bilan bog’langan elektronning ichki erkinlik darajasi faqat kvant xarakterga ega bo‘lgan spesifik xususiyatdir, bu tushuncha hech qanday klassik analoglarga ega emas va uni klassik nazariya tomonidan hech qanaqasiga talqin qilish imkoniyati mavjud emas.

Shtern va Gerlax tajribasida kuzatilgan dastaning ikki karrali ajralishi elektronning magnit momentining mumkin bo‘lgan ikkita oriyentatsiyasi to‘g’risida gapirish imkonini beradi. Dastaning ajralish kattaligi bo‘yicha spin magnit momentining qiymatini aniqlash mumkin. Spin zarrachaning harakat miqdori bilan bog’langanligi sababli, u ham har qanday harakat miqdori momenti kabi kvantlanishi kerak. Shuning uchun, agar $\hbar$ birligida mexanik spin momentining qiymati S ga teng bo‘lsa, fazoviy kvantlanish qoidasiga binoan u uchun z-o‘qiga nisbatan 2s+1 ta yo‘nalish mavjud bo‘ladi, ya’ni aytilganlardan

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1)$$

kelib chiqadi. Tanlangan z yo‘nalishi bo‘yicha spinning ($2s$+1) ta proyeksiyalari qiymatlari bir-biridan bir birlikka farq qilishi kerak,ya’ni:

$$S_z = \hbar m_s.$$

Bunda m_s - mexanik spin momenti proyeksiyasini aniqlovchi magnit kvant soni.

Yuqorida qayd etilgan tajribalardan ma’lum bo‘ldiki, spin faqat ikki yo‘nalishgagina ega bo‘lishi mumkin, ya’ni $2s$+1=2, demak, $s=\frac{1}{2}$ ekanligi kelib chiqadi. U holda, Ulenbek va Gaudsmitning g’oyasiga asosan, elektron xususiy mexanik momentining tanlangan z- yo‘nalishga proyeksiyasi $\hbar$ doimiyning yarim butunlarida o‘lchanadi va faqat ikkita qiymat qabul qiladi, ya’ni

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (7.7)$$

u holda, σ_z^2 faqat 1 ga teng bo‘lgan xususiy qiymatga ega bo‘lib, birlik matritsa orqali ifodalanishi kerak. Koordinata sistemasining barcha uchala o‘qlari teng huquqli bo‘lganligi sababli, σ_x^2 va σ_y^2 operatorlarning qiymatlari ham birga teng bo‘lishi kerak, ya’ni

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (7.8)$$

ga teng bo‘ladi. Endi $\boldsymbol{\sigma}$ matritsaning komponentalari uchun quyidagi munosabatlarni keltrib chiqaraylik, σ_z va σ_y^2 lar o‘zaro kommutativ, ya’ni:

$$\sigma_y^2\sigma_z - \sigma_z\sigma_y^2 = 0$$

bo‘lganligi sababli, bu tenglikni quyidagi ko‘rinishda yozish mumkin:

$$\sigma_y(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y) + (\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y)\sigma_y = 0$$

(7.6) munosabatdan foydalanilsa,

$$\sigma_y(2i\sigma_x) + (2i\sigma_x)\sigma_y = 0$$

bo‘ladi, yoki

$$\sigma_y\sigma_x + \sigma_x\sigma_y = 0$$

ya’ni

$$\sigma_y\sigma_x = -\sigma_x\sigma_y \qquad (7.9)$$

munosabatni olish mumkin.(7.9) ko‘rinishdagi munosabatlarni qanoatlantiruvchi matritsalarni antikommutativ matritsalar deyiladi. $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ matritsalarning har biri alohida, (7.6) munosabatlarni hisobga olgan holda, boshqalari bilan antikommutativ bo‘lishi kerak, ya’ni

$$\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y = 2\sigma_y\sigma_z = 2i\sigma_x$$

temglikni hisobga olinsa, quyidagi munosabatlarni olish mumkin:

$$\begin{aligned} \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y, \\ \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z. \end{aligned} \qquad (7.10)$$

σ_z matritsaning ko‘rinishini aniqlagan edik va u (7.7) formula bilan berilgan edi. Endi σ_x va σ_y larning aniq ko‘rinishlarini aniqlab olaylik.

hisobga olmasak bo‘ladi. Shuning uchun, bu yaqinlashishda (7.17) va (7.17’) orqali ifodalangan to‘lqin funksiyalarni

$$\psi_1(x,y,z,t) = \psi_2(x,y,z,t) = \psi(x,y,z,t) \qquad (7.20)$$

ko‘rinishda yozish mumkin. Ammo, bu holatda ham elektronni spinga ega bo‘lgan zarracha ekanligi nazarda tutilsa, u holda (7.16) to‘lqin funksiyani o‘zgaruvchilari ajralgan ikkita funksiya ko‘paytmasi sifatida ko‘rish mumkin:

$$\psi_1 = \psi(x,y,z,S_z,t) = \psi(x,y,z,t)\cdot S_\alpha(S_z). \qquad (7.21)$$

Bu yerda $S_\alpha(S_z)$ orqali spin funksiya belgilangan α indeks ikkita $\pm\frac{1}{2}$ qiymatni qabul qiladi. Kiritilgan $S_\alpha(S_z)$ spin funksiyasi aslida $\hat{S}_z$ operatorning xususiy funksiyalari bo‘lishadi va

$$S_{+\frac{1}{2}}\left(\frac{\hbar}{2}\right)=1\,,\; S_{+\frac{1}{2}}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=0 \qquad (7.22)$$

$$S_{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\hbar}{2}\right)=0\,,\; S_{-\frac{1}{2}}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=1 \qquad (7.22')$$

bo‘ladi.

7.4. To‘la mexanik va magnit moment

Yuqoridagi paragraflardan ma’lum bo‘ldiki, zarracha diskret xususiy qiymat qabul qiluvchi orbital harakat miqdori momenti $\mathbf{M}$ ga va spin harakat miqdori momenti $\mathbf{S}$ ga ega bo‘ladi. Vektor operarotlarni qo‘shish qoidalariga asosan zarrachaning to‘la harakat miqdori momentini $\mathbf{J}$ orqali belgilansa, u holda $\mathbf{J}$ to‘la moment $\mathbf{M}$ orbital va $\mathbf{S}$ spin momentining vektor yig’indisiga teng bo‘ladi:

$$\mathbf{J} = \mathbf{M} + \mathbf{S}. \qquad (7.23)$$

Orbital moment va spin moment operatorlari turli o‘zgaruvchilarga ta’sir qiladi, ya’ni orbital harakat miqdori momenti fazoviy o‘zgaruvchilarga, spin harakat miqdori momenti esa faqat spin o‘zgaruvchilarga tasir qiladi. Shuning uchun, yuqoridagi ikki operatorlar o‘zaro kommutativ bo‘ladi. Demak, to‘la mexanik moment operatorining proyeksiyalari orbital moment proyeksiyalari va spin moment proyeksiyalarini qanoatlantiruvchi kommutatsiya qoidalariga ham bo‘ysinishi kerak, xususan bitta komponentasi uchun:

ga teng bo‘lgan magnit momentga ega bo‘ladi. Ushbu magnit momentning paydo bo‘lishi magnit maydonidagi elektron uchun qo‘shimcha potensial energiyaning vujudga kelishiga olib keladi va uning qiymati

$$\Delta U = -(\boldsymbol{\Xi}\mathbf{H}) \qquad (7.31)$$

ga teng bo‘ladi. Bunda $\mathbf{H}$ – tashqi magnit maydonning kuchlanganligini ifoda qiladi. Qaralayotgan potensial energiya operatorini (7.3) ni hisobga olgan holda quyidagi ko‘rinishda ochib chiqiladi:

$$\Delta U = \frac{e}{m_e c}(\mathbf{SH}) = \frac{e\hbar}{2m_e c}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}). \qquad (7.32)$$

Shunday qilib, elektromagnit maydonida harakatlanuvchi spinga ega bo‘lgan elektron uchun Gamilton operatori quyidagi ko‘rinishda bo‘ladi:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - eV + U + \frac{e\hbar}{2m_e c}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}). \qquad (7.33)$$

(7.33) formulada elektronning zaryadini $-e$ ga teng deb olingan. Hosil qilingan Gamiltonian spinga bog’liq bo‘lganligi sababli, elektronning to‘lqin funksiyasi $\Psi = \Psi(\psi_1, \psi_2)$ ko‘rinishga ega bo‘ladi. Bu to‘lqin funksiyasi uchun magnit maydonidagi to‘lqin tenglamasi birinchi bo‘lib, V.Pauli tomonidan kiritilgan va uning nomi bilan nomlangan. Ushbu tenglamaning ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m_e}\left(\hat{\mathbf{P}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi - eV\Psi + U\Psi + \frac{e\hbar}{2m_e c}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})\Psi \qquad (7.34)$$

bunda $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ matritsa ko‘rinishida olingan.

Pauli tenglamasidan foydalangan holda, ehtimollik oqim zichligi vektorini aniqlash mumkin. Shu maqsadda (7.34) dagi Pauli tenglamasini quyidagi ko‘rinishda yoziladi:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_0\Psi + \frac{e\hbar}{2m_e c}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H})\Psi, \qquad (7.35)$$

bunda $\hat{H}_0$ orqali $\boldsymbol{\sigma}$ - spin operatorlarni o‘z ichiga olmagan hadlar yig’indisi belgilab olingan. Endi (7.35) dan Ψ^+ qo‘shimcha funksiya

$$S_z = \pm\frac{\hbar}{2}. \qquad (7.1)$$

Ushbu g'oyani ular, atom spektrlarini o'rganish borasida olingan tajriba natijalaridan kelib chiqqan holda, elektronning xususiy mexanik momentining mavjudligi bilan bir qatorda elektronning xususiy magnit momenti ham mavjud degan xulosa bilan to'ldirishadi. Elektron spin magnit momentini tashqi magnit maydon yo'nalishiga proyeksiyasi ham faqat ikki qiymatni qabul qila oladi, ya'ni

$$\Xi_z = \pm\Xi_B = \pm\frac{e\hbar}{2m_e c} \qquad (7.2)$$

uning absolyut miqdori butun Bor magnetoniga teng bo'lib chiqdi. Vodorod atomi dastasini bir jinsli bo'lmagan magnit maydonda ikki komponentaga ajralishining sababi ana shu tarzda tushuntiriladi. (7.1) va (7.2) formulalardan ko'rinib turibdiki, spin magnit moment va spin mexanik momentlari orasida quyidagicha bog'lanish mavjud:

$$\mathbf{\Xi} = -\frac{e}{m_e c}\mathbf{S}. \qquad (7.3)$$

(5.88) dan ma'lumki, orbital mexanik va orbital magnit momentlarning nisbati $-\frac{e}{2m_e c}$ ga teng. Ushbu (7.3) formula A. Eynshtein va V. de-Gaaz tomonidan o'tkazilgan tajribalar natijasida xususiy mexanik va xususiy magnit momentlarning nisbatini aniqlashda olingan edi.

O. Shtern va V.Gerlax tajribalaridan keyin fazoviy kvantlanishni kuzatish ustida bir qator tajribalar o'tkazildi va ularning barchasida orbital mexanik moment ham, spin moment uchun ham fazoviy kvantlanish mavjudligi tasdiqlandi. Shunday qilib, spin tushunchasining kiritilishi atom spektr chiziqlarini o'rganishda, Zeyeman effektlarini tushuntirishda muvaffaqiyatli bo'lib qolmasdan, balki makroskopik jismlarning xossalarini tushuntirishda ham katta rol o'ynaydi.

7.2. Elektronning spin operatorlari

Relyativistik kvant mexanikasi asoslarini o'rganishga bag'ishlangan paragraflarda elektron spinining mavjudligini va u bilan bog'liq bo'lgan bir qator xossalarni nazariy jihatdan keltirib chiqarish mumkin. Lekin elektronning spini to'g'risidagi bir qator tushunchalarni

norelativistik kvant mexanikasi nazariyasidan ham keltirib chiqarish va muhim natijalarga kelish mumkin.

Avvalo Ulenbek va Gaudsmit g'oyasining matematik ifodasiga o'taylik. Kvant mexanikasining asosiy prinsiplariga binoan elektronning spinini chiziqli va o'zaro qo'shma operator yordamida ifodalash kerak. Koordinata yo'nalishiga bo'lgan spin operatorlarining proyeksiyalarini S_x, S_y va S_z orqali belgilaylik. Kiritilgan operatorlar proyeksiyalarining ko'rinishini aniqlash uchun oldindan shunday talab qo'yamizki, bu operatorlar $\hat M_x, \hat M_y, \hat M_z$ orbital momentning proyeksiyalari bo'ysinadigan o'zaro o'rin almashtirish qoidalarini qanoatlantirsin. U holda (3.56) da $\hat M$ operatorni $\hat S$ bilan almashtirilsa:

$$\left.\begin{aligned} \hat S_x\hat S_y - \hat S_y\hat S_x &= i\hbar\hat S_z \\ \hat S_y\hat S_z - \hat S_z\hat S_y &= i\hbar\hat S_x \\ \hat S_z\hat S_x - \hat S_x\hat S_z &= i\hbar\hat S_y \end{aligned}\right\} \qquad (7.4)$$

ifodalar hosil qilinadi. Endi $\mathbf{S}$ vektor o'rniga $\boldsymbol{\sigma}$ vektorni kiritaylik va ular o'zaro quyidagicha bog'langan bo'lsin,

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} \qquad (7.5)$$

ya'ni $\boldsymbol{\sigma}$ operatorlarni kiritib, ularni spin matritsalar deb nomlanadi. Olingan (7.5) ifodani (7.4) tenglamalarga qo'yib, $\hbar^2/4$ ga qisqartirilsa, $\boldsymbol{\sigma}$ ning komponentalari uchun quyidagi munosabatlarni aniqlash mumkin:

$$\begin{aligned} \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x &= 2i\sigma_z, \\ \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y &= 2i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z &= 2i\sigma_y. \end{aligned} \qquad (7.6)$$

Asosiy g'oyaga binoan tanlab olingan yo'nalishga spin proyeksiyasi faqat ikkita qiymatni qabul qila oladi, ya'ni $\hat S_z$ operatorning xususiy qiymatlari $+\frac{1}{2}\hbar$ va $-\frac{1}{2}\hbar$ ga teng bo'lishi kerak, u holda σ_z matritsaning xususiy qiymatlari esa +1 va -1 sonlariga teng bo'lishi kerak. Demak, σ_z matritsani diagonal elementlari +1 va -1 bo'lgan ikki qatorli diagonal matritsa shaklida bo'lishi kerak, ya'ni

$$\hat J_x\hat J_y - \hat J_y\hat J_x = (\hat M_x + \hat S_x)(\hat M_y + \hat S_y) - (\hat M_y + \hat S_y)(\hat M_x + \hat S_x) = \hat M_x\hat M_y - \hat M_y\hat M_x + \hat S_x\hat S_y - \hat S_y\hat S_x = i\hbar\hat M_z + i\hbar\hat S_z = i\hbar(\hat M_z + \hat S_z) = i\hbar\hat J_z \qquad (7.24)$$

bo'ladi.

Shunday qilib,

$$\hat J_x\hat J_y - \hat J_y\hat J_x = i\hbar\hat J_z, \qquad (7.25)$$

$$\hat J_y\hat J_z - \hat J_z\hat J_y = i\hbar\hat J_x, \qquad (7.25')$$

$$\hat J_z\hat J_x - \hat J_x\hat J_z = i\hbar\hat J_y. \qquad (7.25'')$$

Endi to'la harakat miqdori momenti operatorining kvadratini hisoblab chiqaylik. Buning uchun quyidagi ifodani hisoblash kerak:

$$\hat{\mathbf J}^2 = (\hat{\mathbf M} + \hat{\mathbf S})^2 = \hat{\mathbf M}^2 + \hat{\mathbf S}^2 + 2\hat{\mathbf M}\hat{\mathbf S} =$$

$$= \hat{\mathbf M}^2 + \hat{\mathbf S}^2 + 2(\hat M_x\hat S_x + \hat M_y\hat S_y + \hat M_z\hat S_z).$$

Olingan munosabatlardan foydalanib, $\hat{\mathbf J}^2\hat J_x - \hat J_x\hat{\mathbf J}^2$ ayirma hisoblab chiqiladi, bunda $\hat M_x$ va $\hat S_x$ operatorlar $\hat{\mathbf M}^2$ va $\hat{\mathbf S}^2$ operatorlar bilan kommutativ ekanligini hisobga olish kerak. U holda,

$$\hat{\mathbf J}^2\hat J_x - \hat J_x\hat{\mathbf J}^2 = 2(\hat M_x\hat S_x + \hat M_y\hat S_y + \hat M_z\hat S_z)(\hat M_x + \hat S_x) -$$

$$-2(\hat M_x + \hat S_x)(\hat M_x\hat S_x + \hat M_y\hat S_y + \hat M_z\hat S_z).$$

Oxirgi tenglikdagi qavslarni ochib,

$$\hat{\mathbf J}^2\hat J_x - \hat J_x\hat{\mathbf J}^2 = 2\Big[(\hat M_y\hat M_x - \hat M_x\hat M_y)\hat S_y + (\hat M_z\hat M_x - \hat M_x\hat M_z)\hat S_z +$$

$$+\hat M_y(\hat S_y\hat S_x - \hat S_x\hat S_y) + \hat M_z(\hat S_z\hat S_x - \hat S_x\hat S_z)\Big]$$

natijaga kelinadi. Bu ifodalarga (3.56) va (7.4) lardagi qavs ichidagi ifodalarning qiymatlarni qo'yib chiqilsa, quyidagi munosabat hosil qilinadi:

$$\hat{\mathbf J}^2\hat J_x - \hat J_x\hat{\mathbf J}^2 = 2\left[-i\hbar\hat M_z\hat S_y + i\hbar\hat M_y\hat S_z - i\hbar\hat M_y\hat S_z + i\hbar\hat M_z\hat S_y\right] = 0.$$

Shunga o'xshash boshqa komponentalar uchun ham huddi shunday munosabatlarni keltirib chiqarish mumkin. Shunday qilib,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf J}^2\hat J_x - \hat J_x\hat{\mathbf J}^2 &= 0, \\ \hat{\mathbf J}^2\hat J_y - \hat J_y\hat{\mathbf J}^2 &= 0, \\ \hat{\mathbf J}^2\hat J_z - \hat J_z\hat{\mathbf J}^2 &= 0. \end{aligned} \qquad (7.26)$$

Har qanday harakat miqdori momenti singari elektronning to'la mexanik momenti $\mathbf J$ ham kvantlanadi va (7.25) munosabatga asosan $\hat{\mathbf J}^2$ operatorning xususiy qiymatlari quyidagi ifoda orqali aniqlangan bo'ladi:

$$\mathbf J^2 = \hbar^2 j(j+1). \qquad (7.27)$$

Bunda j- to'la harakat miqdori momentining qiymatini aniqlovchi kvant soni. Kvant mexanikasida qabul qilingan momentlarni qo'shish qoidasiga binoan berilgan l va s qiymatlarda j soni quyidagi qiymatlarni qabul qiladi:

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots \qquad (7.28)$$

To'la harakat miqdori momentining ixtiyoriy bitta yo'nalishga proyeksiyasi ham kvantlanadi, xususan J_z uchun quyidagi tenglikni yozish mumkin:

$$J_z = \hbar m_j, \quad m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \ldots, \pm j. \qquad (7.29)$$

Bu yerda j kvant soni l orbital va s spin kvant sonlari bilan quyidagi formula orqali ifodalanishi mumkin:

$$j = l + s \quad \text{yoki} \quad j = |l - s|. \qquad (7.30)$$

To'la, orbital va spin momentlari $\mathbf J, \mathbf M$ va $\mathbf S$ bir vaqtning o'zida kvantlanganligi sababli , ular o'zaro faqat biror aniq yo'nalishga ega bo'ladi. Bir elektronli atom holda momentlarning faqat ikkita nisbiy joylashishlari o'rinli bo'ladi, ulardan biri $\mathbf J = \mathbf M + \mathbf S$ ga, ikkinchi $\mathbf J = \mathbf M - \mathbf S$ si ga to'g'ri keladi.

7.5. Pauli tenglamasi

Elektronning xususiy magnit momentining mavjudligini hisobga oluvchi norelativistik to'lqin tenglamasini keltirib chiqarish uchun elektromagnit maydonda harakatlanuvchi electron ko'rib chiqiladi. Spin tushunchasini kiritishda ishlatadigan asosiy g'oyaga binoan, elektron (7.3) ga asosan,

$$\mathbf\Xi = -\frac{e}{m_e c}$$

bunda α – biror haqiqiy o‘zgarmas son. Zarrachalarning o‘rnini yana bir marta almashtirish natijasida sistemaning daslabki holatiga qaytib kelinadi, ya’ni

$$\hat{P}^2\Psi(q_1,q_2)=\hat{P}\Psi(q_2,q_1)=\hat{P}e^{i\alpha}\Psi(q_1,q_2)=e^{2i\alpha}\Psi(q_1,q_2)=\Psi(q_1,q_2) \qquad (7.63)$$

Demak, $\hat{P}^2$ operatorning xususiy qiymati $e^{2i\alpha}=1$ bo‘lishi kerak, $\hat{P}$ operatorning xususiy qiymati esa

$$e^{i\alpha}=\pm 1 \qquad (7.64)$$

ga teng bo‘lishi kerak. Shunday qilib, quyidagi natijaga kelamiz:

$$\Psi(q_1,q_2)=\pm\Psi(q_1,q_2). \qquad (7.65)$$

Bir xil zarrachalarni farq qilib bo‘lmaslik prinsipi to‘lqin funksiyasining o‘ziga xos bo‘lgan simmetriya xususiyatlarini nomoyon qiladi. Olingan (7.65) munosabatga ko‘ra, zarrachalarni o‘rin almashtirish natijasida to‘lqin funksiya uchun faqat ikkita imkoniyat mavjud: to‘lqin funksiyasi o‘zgarmaydi, yoki to‘lqin funksiyasining ishorasi o‘zgaradi. Zarrachalarni o‘rin almashtirish natijasida to‘lqin funksiyasi o‘zgarmasa, u ushbu zarrachalarga nisbatan simmetrik funksiya bo‘ladi va aksincha to‘lqin funksiya o‘rin almashishi natijasida o‘z ishorasini o‘zgartirsa, u holda bunday to‘lqin funksiyasi antisimmetrik funksiya bo‘ladi. Ravshanki, bitta sistemaning hamma holatlarini ifodalovchi funksiyalar bir xil simmetriyaga ega bo‘lishi lozim, ya’ni u yo simmetrik, yo antisimmetrik bo‘lishi darkor .

Olingan natijalarni har qanday ixtiyoriy sondagi bir xil zarrachalardan tashkil topgan sistemalar uchun umumlashtirish mumkin. O‘zaro ta`sir kuchlarini hisobga olmagan holda N ta bir xil zarrachalardan tashkil topgan sistema qarab chiqiladi. Bunday sistemani holatlarini ifodalovchi $\Psi(q_1,q_2,\ldots,q_k,\ldots,q_j,\ldots,q_N,t)$ to‘lqin funksiyalari *(k, j)* juftlik o‘rin almashtirish natijasida o‘z ishorasini o‘zgartirishi yoki o‘zgartirmasligi mumkin. Boshqacha aytganda, agar zarrachalarning biror jufti simmetrik to‘lqin funksiya bilan ifodalanish xossasiga ega bo‘lsa, u holda zarrachalarning boshqa hamma juftlari ham shunday xossaga ega bo‘liadi. Demak, bir xil zarrachalardan tashkil topgan sistema uchun faqat ikkita holat mavjud bo‘lishi mumkin: barcha zarrachalar uchun simmetrik holatlar

$$\hat{P}_{kj}\Psi_s=\Psi_s \qquad (7.66)$$

va barcha zarrachalar uchun antisimmetrik holatlar

$$\hat{P}_{kj}\Psi_a=-\Psi_a. \qquad (7.67)$$

Olingan natijalardan quyidagini ta’kidlash lozim: ushbu (7.66) va (7.67) holatlar orasida bir biriga o‘tish man etiladi, ya’ni agarda ixtiyoriy vaqt momentida sistema biror bir simmetriya (simmetrik yoki antisimmetrik) holatida joylashgan bo‘lsa, u holda bu sistema vaqt o‘tishi davomida ana shu simmetriya (simmetrik yoki antisimmetrik) holatini saqlaydi.

Ushbu mulohazalarni matematik nuqtai nazardan isbotlash mumkin. Buning uchun $\hat{P}_{kj}$ operator bilan $\hat{H}$ gamiltonian operatorini kommutativligini ko‘rsatish kifoya. Ikkita zarrachadan tashkil topgan sistema uchun gamiltonianning ko‘rinishi quyidagicha:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2+U(q_1,t)+U(q_2,t)+U_{12}(q_1,q_2,t), \qquad (7.68)$$

bunda $U_{12}(q_1,q_2,t)$ had zarrachalarning o‘zaro ta’sir energiyasini, $U(q_1,t)$ hamda $U(q_2,t)$ hadlar esa zarrachalarning tashqi maydon bilan o‘zaro ta’sirni ifodalaydi.

Zarrachalarning o‘rnini almashtirish natijasida hosil bo‘lgan gamiltonianning ko‘rinishi

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2+U(q_2,t)+U(q_1,t)+U_{12}(q_2,q_1,t) \qquad (7.69)$$

bo‘ladi. Ushbu yangi gamiltonian eski gamiltoniandan farq qilmaydi, ya`ni zarrachalarni o‘rin almashtirilishi gamiltonianni o‘zgartirmaydi.

Olingan natijani N ta zarrachalardan tashkil topgan sistema uchun ham umumlashtirish qiyin emas. Ko‘rinib turibdiki, zarrachalarning o‘rin almashishi gamiltonianni o‘zgartirmaydi, shuning uchun:

$$\hat{H}\hat{P}_{kj}-\hat{P}_{kj}\hat{H}=0 \qquad (7.70)$$

bo‘ladi. Shunday qilib, sistemaning simmetriya xossalari vaqt o‘tishi bilan saqlanadi va ular harakat integrallari qatoriga kiradi.

7.8. Boze va Fermi zarrachalari. Pauli prinsipi

Avvalgi paragrafdan kelib chiqadigan natijaga asosan zarrachalarning aynan o‘xshashlik prinsipiga binoan kvant mexanikada bir-biri bilan umuman aralashmaydigan ikkita holat guruhi mavjud. Shuning uchun ular sistemani tashkil qiluvchi zarrachalarning tabiati

bitta $2s$ elektron $\left(l=0,m=0,s=\pm\frac{1}{2}\right)$, so‘ngra oltita elektron qo‘shiladi $\left(l=1,m=0,\pm1,s=\pm\frac{1}{2}\right)$. Shunday qilib, davriy sistemaning sakkizta elementidan tashkil topgan ikkinchi davrini ham tuzish mumkin.

Keyinchalik, *Na (Z=11)* – natriy elementidan boshlab, M qobiqni *(n=3)* to‘ldirilish boshlanadi. Ushbu M qobiqda hammasi bo‘lib $2\cdot 3^2=18$ $(l=0,1,2.)$ ta holatlar mavjud bo‘lishi kerak. $l=0$ va $l=1$ ga tegishli bo‘lgan holatlar L qobiqga aynan o‘xshash va *Na* - natriy elementidan boshlab *Ar* - argon gacha to‘ldirib boriladi. *Ar* zaryadini bittaga oshirilsa va bitta elektron qo‘shilsa, K - kaliy elementi hosil bo‘ladi. Davriy sistemaning bosh qismida elektron qobiqlar to‘la to‘ldirilgan bo‘ldi va shuning uchun davrdagi elementlar soni oxirgi element elektronlarining to‘la soniga teng bo‘ladi. Lekin uchinchi davrdan boshlab bu tartib buziladi va keyingi davrlarda qobiqlarning to‘ldirilish jarayoni yanada murakkablashadi.

Ishqoriy metall atomlarida murakkab atom elektronining energiyasi n bosh kvant soni bilan bir qatorda l orbital kvant soniga bog’liqligi yanada yaqqolroq namoyon bo‘ladi. Shuning uchun, elementlar elektron tuzilishi qonuniyatlarini tasvirlashda n bo‘yicha qobiqlarning to‘ldirilish tartibinigina emas, balki l bo‘yicha qobiqchalarning to‘ldirish tartibi ham sezilarli darajada katta ahamiyatga ega bo‘ladi.

Elementlarning elektron tuzilishi tasvirlangan 3-jadvaldan ko‘rinadiki, oraliq guruh elementlari uchun yuqori qobiqning s holatlari pastki qobiqning d va f holatlaridan avval to‘ldirila boshlaydi. Bu effekt birinchi bo‘lib K – kaliy atomida kuzatiladi. Kaliy atomining tashqi elektroni $3d$ holatda emas, balki $4s$ holatda joylashgan. Chunki, optik va kimyoviy jihatdan K atom s-holatda bitta tashqi elektronga ega bo‘lgan *Li* va *Na* atomlariga juda o‘xshash. Shuning uchun, M qobiq bu holatda hali oxirgacha to‘ldirilmaganligiga qaramay, biz n = 4, l = 0 holatga mos keladigan N qobiqqa kaliyning so‘ngi elektroni joylashtirilishi kerak. O‘z navbatida bu hol n = 4, l= 0 holatdagi E_{40} energiya n=3, l=2 holatidagi E_{32} energiyadan kichik bo‘lganligini bildiradi. Shunday qilib,

yorug’lik nurlanishiga ta’siri 1896-yilda Zeyeman kashf etgan effektda yaqqol namoyon bo‘ladi. Boshqacha aytganda, ushbu effektda elektro-magnit qutblari orasiga yorug’lik manbayi joylashtirilganda spektral chiziqlarning ajralishi aniqlangan edi. Har bir spektr chizig’ining uchtagacha chiziqlarga ajralishi bilan bog’liq bo‘lgan hodisa normal Zeyeman effekti va spektr chiziqlarining uchtadan ko‘p chiziqlarga ajralishi bilan bog’liq hodisa anomal Zeyeman effekti deyiladi.

Zeyemanning normal effektini klassik fizika nuqtai nazardan tushuntirish mumkin bo‘lsa, anomal effektini esa faqat kvant mexanikasi asosida tushuntirib berish mumkin. Lorents elektronning klassik nazariyasi asosida ushbu effektni miqdoriy asoslab bergan va maydon yo‘nalishiga perpendikular qaraganda spektral chiziq simmetrik manzara berib uchta komponentaga ajralishi kerak. Nazariyaning barcha fikrlari, ko‘pchilik hollarda, tajribadan olingan natijalar bilan aniq mos kelishi ma’lum bo‘ldi.

Magnit maydonda joylashgan vodorodsimon atomning nurlanish spektrini hisoblash mazkur masalaga oid (7.34) Pauli tenglamasini yechilishini talab qiladi. Avvalo bu tenglamaning o‘ng tomonidagi birinchi hadni kvadratga oshirib, qavslarni ehtiyotkorlik bilan ochib chiqiladi va operatorlarning antikommutativligidan foydalaniladi. Demak,

$$\frac{1}{2m_e}\left(\hat{\mathbf{P}}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi=$$

$$=\frac{1}{2m_e}\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}+\frac{e}{c}A_x\right)^2+\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}+\frac{e}{c}A_y\right)^2+\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}+\frac{e}{c}A_z\right)^2\right]\Psi=$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi-\frac{i\hbar e}{m_e c}\left(A_x\frac{\partial}{\partial x}+A_y\frac{\partial}{\partial y}+A_z\frac{\partial}{\partial z}\right)\Psi- \qquad (7.46)$$

$$-\frac{i\hbar e}{2m_e c}\left(\frac{\partial A_x}{\partial x}+\frac{\partial A_y}{\partial y}+\frac{\partial A_z}{\partial z}\right)\Psi+\frac{e^2}{2m_e c^2}\left(A_x^2+A_y^2+A_z^2\right)\Psi=$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\Psi-\frac{i\hbar e}{m_e c}\mathbf{A}\cdot grad\Psi-\frac{i\hbar e}{2m_e c}(div\mathbf{A})\Psi+\frac{e^2}{2m_e c^2}A^2\Psi.$$

Yuqoridagi hisoblashlarda operatorlarning

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

antikommutativlik shartidan foydalandik. $\mathbf{A}$ - vektor-potensialni tanlashdagi ixtiyoriylikdan foydalanib, $div\mathbf{A}=0$ shartni bajarilishi talab qilinadi. Demak, (7.46) ifodani quyidagicha yozish mumkin:

$$\frac{1}{2m_e}\left(\hat{\mathbf{P}}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\Psi-\frac{i\hbar e}{m_e c}\mathbf{A}\cdot grad\Psi+\frac{e^2}{2m_e c^2}A^2\Psi. \qquad (7.47)$$

Atomdagi elektron bir vaqtning o‘zida magnit maydoni va yadroning elektr maydoni ta’sirida bo‘ladi. Ta’sir etuvchi yadroning elektr maydonini markaziy maydon deb hisoblaymiz va mazkar maydondagi elektronning potensial energiyasini $U(\mathbf{r})$ orqali belgilanadi. Magnit maydonini esa bir jinsli deb qabul qilinadi, uning qiymatini H ga teng deb olamiz va z- o‘qi bo‘yicha yo‘nalgan deb hisoblanadi. Shu tarzda tanlab olingan magnit maydoni $\mathbf{A}$ - vektor-potensiallardan hosil bo‘lib uning komponentalari quyidagicha bo‘ladi:

$$A_x=-\frac{1}{2}\mathsf{H}y,\quad A_y=\frac{1}{2}\mathsf{H}x,\quad A_z=0. \qquad (7.48)$$

Magnit maydoni esa $\mathsf{H}=rot\mathbf{A}$ bo‘lgani uchun uning komponentalari quyidagi ko‘rinishda bo‘ladi:

$$\begin{aligned}\mathsf{H}_x&=(rot\mathbf{A})_x=\frac{\partial A_z}{\partial y}-\frac{\partial A_y}{\partial z}=0,\\ \mathsf{H}_y&=(rot\mathbf{A})_y=\frac{\partial A_x}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial x}=0,\\ \mathsf{H}_z&=(rot\mathbf{A})_z=\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}=\frac{1}{2}\mathsf{H}+\frac{1}{2}\mathsf{H}=\mathsf{H}.\end{aligned} \qquad (7.49)$$

Yuqorida hosil bo‘lgan natijalar hisobga olinsa (7.47) dagi $\mathbf{A}\cdot grad\psi$ had uchun

$$\mathbf{A}\cdot grad\Psi=A_x\frac{\partial\Psi}{\partial x}+A_y\frac{\partial\Psi}{\partial y}+A_z\frac{\partial\Psi}{\partial z}=\frac{1}{2}\mathsf{H}\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial y}-y\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)$$

va $A^2\Psi$ had uchun esa

$$A^2\Psi=\left(A_x^2+A_y^2+A_z^2\right)\Psi=\frac{1}{4}\mathsf{H}^2\left(x^2+y^2\right)\Psi$$

ifodalarni olish mumkin.

konfiguratsiyasi deyiladi. Masalan, $1s^22s^22p^6$ simvol $n=1$, $l=0$ holatda ikkita elektronni, $n=2$, $l=0$ holatda yana ikkita elektronni va $n=2$, $l=1$ holatda oltita elektronni joylashganligini bildiradi. Bosh kvant soni n ning berilgan qiymatida qobiqdagi elektronlarning maksimal soni barcha l qobiqchalardagi elektronlar yig’indisi orqali aniqlanadi, ya’ni

$$\sum_{l=0}^{n-1}2(2l+1)=2n^2. \qquad (7.79)$$

Atom nomerining ortib borishi tartibida qatorga joylashgan elektronlar xossalarining davriy ravishda o‘zgarishi kuzatilgan va ularning tabiatini tushuntirish atom elektron qobiqlarining ketma-ket to‘lib borish xususiyatlarini qarab chiqishni talab qiladi. Bir atomdan ikkinchisiga o‘tganda zaryad bittaga oshadi va qobiqqa bitta elektron qo‘shiladi. Elektronlarning davriy sistemasini tuzilishi n=1 dan boshlanadi. n=1 qobiq bitta qobiqchadan iborat, ya`ni s qobiqchadan, chunki $l=0$. Vodorod atomning bu qobiqchasida (1s holatida) faqat bitta elektron bor. Keyingi element – geliy atomida yana bitta elektron shu 1s holatga qo‘shiladi va shu yangi qo‘shilgan elektron spinining yo‘nalishi oldingisiga nisbatan qarama-qarshi yo‘nalgan bo‘ladi. Lekin, geliy atomida har bir elektronning bog’lanish energiyasi vodorod atomidagi elektronning bog’lanish energiyasidan ancha katta. Bu holni geliy yadrosining zaryadi vodorod yadrosining zaryadidan ikki marta katta bo‘lgani bilan tushuntirish mumkin. Ikki element –vodorod va geliy davriy sistemaning birinchi davrini tashkil etadi.

Litiy atomida Li ($Z=3$) uchinchi elektron 2s holatida joylashadi, chunki 1s holat bir vaqtning o‘zida Pauli prinsipiga binoan 2 tadan ortiq elektron qabul qila olmaydi, shuning uchun bu elektron L ($n=2$) qobiqni to‘ldirishni boshlaydi va 2s holatga tushadi. Berilgan Z da 2s holat 1s holatdan yuqorida joylashgan bo‘ladi. To‘rtinchi elektron 2s holatga joylashadi va beriliy Be ($Z=4$) elementi hosil bo‘ladi. Beshinchi elektronni 2s qobiqchaga joylashtira olmaymiz, chunki bu qobiqcha to‘lgan bo‘ladi. Shuning uchun keyingi 2p qobiqchani to‘ldirish boshlanadi va B ($Z=5$) – bor elementi hosil bo‘ladi. Natijada ketma-ket uglerod $C(Z=6)$, azot $N(Z=7)$, kislorod $O(Z=8)$, ftor $F(Z=9)$ elementlar hosil qilish mumkin. 2p qobiqchani inert gaz neon Ne ($Z=10$) bilan to‘liq yakunlanadi. Demak, Be dan Ne gacha atomlarda ketma-ket avval

bilan bog’liq bo‘ladi. Tajribadan olingan natijalar shuni ta’kidladiki, tabiatda ikkala guruhga ham tegishli bo‘lgan zarrachalar mavjud ekan. Zarracha spini Plank doimiysining butun soniga teng bo‘lsa, ya`ni

$$S=\hbar m,\quad m=0,1,2,3,\ldots \qquad (7.71)$$

bo‘lgan zarrachalar Ψ_s simmetrik funksiyalar orqali ifodalanadi. Bunday zarrachalarga Boze–zarrachalar deb nom qo‘yilgan. Simmetrik funksiyalar bilan tavsiflanadigan zarrachalar Boze-Eynshteyn taqsimotiga bo‘ysunadi va bozonlar deb yuritiladi.

Aksincha, zarracha spini Plank doimiysining yarim butun soniga teng bo‘lsa, ya`ni

$$S=\hbar m,\quad m=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\ldots \qquad (7.72)$$

bo‘lgan zarrachalar Ψ_a antisimmetrik funksiyalar orqali ifodalanadi. Bunday zarrachalarga Fermi-zarrachalar deb nom qo‘yilgan. Antisimmetrik funksiyalar bilan tavsiflangan zarrachalar Fermi-Dirak taqsimotiga bo‘ysunadi va fermionlar deb yuritiladi. Bozonlarga π- va k- mezonlarni misol qilib olsa bo‘ladi, chunki ularning spini 0 ga teng, spini 1ga teng bo‘lgan yagona zarracha bu foton. Fermionlarga misol qilib esa elektron, proton, giperonlar, μ-mezon, neytrinolarni ko‘rsatish mumkin, chunki ularning spinlari $\frac{1}{2}$ ga teng.

Murakkab zarachalarning taqsimoti ularning tarkibiga kiruvchi elementar fermionlar sonining juft yoki toqligiga bog’liq bo‘ladi. Ikkita murakkab zarrachalarning o‘rinlarini o‘zaro almashtirish bir vaqtning o‘zida bir necha juft bir xil elementar zarrachalarning o‘rinlarini o‘zaro almashtirishga ekvivalent bo‘ladi. Bozonlarning o‘rnini o‘zaro almashtirish to‘lqin funksiyasini umuman o‘zgartirmaydi, fermionlarning o‘rnini almashtrish esa ularning ishorasini qarama-qarshisiga o‘zgartiradi. Shuning uchun toq sondagi elementar fermionlardan tashkil topgan murakkab zarrachalar Fermi taqsimotiga, juft sondagi fermionlardan tashkil topgan murakkab zarrachalar esa, Boze taqsimotiga bo‘ysunadi. Masalan, vodorod atomi ikkita Fermi zarrachasidan tashkil topgan: elektron va protondan. Bu zarrachalarning har biri $\pm\frac{\hbar}{2}$ ga teng bo‘lgan spinga ega, demak normal holatda vodorod atomining to‘la spini 0 yoki $\pm\hbar$ ga teng bo‘lishi kerak. Shunday qilib, vodorod atomi simmetrik to‘lqin funksiya orqali tavsiflanadi.

koordinatasini aniqlash mumkin bo‘lsa, noaniqlik prinsipiga ko‘ra, ularning impulslari aniq qiymatga ega bo‘la olmaydi. To‘qnashuv jarayonidan so‘ng, bu elektronlarning harakatini ifodalovchi to‘lqin paketlari o‘zaro bir-birini qoplaydi va zarrachalarning ajratishni imkoniyati bo‘lmaydi. Demak, elektronlar vaziyatini ma`lum vaqt momentida qayd etib, ularni tartib raqamlari bilan belgilab olinsa ham, keyingi vaqt momentida ularni bir biridan ajrata olmaymiz. Shuning uchun, klassik fizikaga qaraganda kvant mexanikasida zarrachalarning fizikaviy xossalari jihatdan bir xilligi ancha chuqur va kengroq ma’noga ega. Kvant mexanikasi doirasida, zarrachalarni bir-biridan umuman farq qilib bo‘lmaydi, ular nafaqat bir xildir, balki ular bir-biriga mutlaqo aynan o‘xshashdir.

Shunday qilib, quyidagi xulosaga kelinadi: kvant mexanikasida bir xil zarrachalarni farq qilib bo‘lmaslik prinsipi bir xil zarrchalardan tashkil topgan sistemalar bilan ish ko‘rayotganda muhim ahamiyat kasb etadi.

Bu prinsipga asosan, bir xil zarrachalardan tashkil topgan sistemalarda shunday holatlar mavjud bo‘la oladiki, ikkita aynan o‘xshash zarrachalar o‘rin almashgan vaqtda, bu holatlar o‘zgarmay qoladi. Ikkita zarrachadan tashkil topgan sistemani yana bir bor qarab chiqaylik. Yuqorida qayd etilganidek, bu zarrachalar aynan o‘xshash bo‘lganligi sababli, zarrachalarning o‘rin almashtirishdan hosil bo‘lgan yangi holat fizikaviy jihatdan avvalgisiga to‘la ekvivalent bo‘lishi kerak. Ixtiyoriy vaqt momentida sistemaning holati $\Psi(q_1,q_2)$ to‘lqin funksiyasi orqali ifodalansin, bunda q_1,q_2 orqali, shartli ravishda, har bir zarrachaga tegishli bo‘lgan uchta koordinata va spin o‘zgaruvchilari belgilanadi. Shu bilan birga $\hat{P}$ o‘rin almashtirish operatorini kiritaylik, uning ta’siri natijasida ikkita zarracha o‘z o‘rinlarini almashtiradi va $\Psi(q_1,q_2)$ to‘lqin finksiyasi o‘rniga $\Psi(q_2,q_1)$ to‘lqin funksiyasi hosil qilinadi. Demak, bir xil zarrachalarni farq qilib bo‘lmaslik prinsipiga asosan hosil bo‘lgan holatni avvalgi holatdan ajrata olmaymiz, bu ikkita holatni ifodalovchi to‘lqin funksiyalar faqat fazaviy ko‘paytuvchigagina farq qiladi. U holda yuqoridagi aytilganlarga ko‘ra:

$$\hat{P}\Psi(q_1,q_2)=\Psi(q_2,q_1)=e^{i\alpha}\Psi(q_1,q_2) \qquad (7.62)$$

elektronning orbitada aylanish burchak chastotasining o‘zgarishi Larmor chastotasiga teng bo‘ladi: $\Omega_L = \frac{e\mathrm{H}}{2m_e c}$. Kvant mexanikasi asosida olingan (7.61) formulada $\hbar$ Plank doimiysi qatnashmaganligi tufayli, bu natija klassik nazariya tomonidan olingan natija bilan mos keladi. Boshqacha aytganda ajralgan chiziqlar orasidagi chastota bo‘yicha masofa Plank doimiysiga hamda kvant sonlariga bog’liq emas.

7.7. Zarrachalarning aynan o‘xshashligi

Ushbu paragrafda bir xil zarrachalardan tashkil topgan sistemalarning to‘lqin funsiyasining tuzilishini aniqlab chiqiladi. Avvalo bir xil zarracha deganda qanday zarrachalarni tushunish kerakligi aniqlab olinadi. Bir xil zarracha deganda massasi, zaryadi, spini va boshqa xarakteristikalari bir xil bo‘lgan zarrachalarni nazarda tutish kerak. Ular bir xil sharoitlarda o‘zlarini bir xil tutishlari lozim. Yuqorida qayd etilgan hollarda kvant mexanikasiga xos bo‘lgan muhim xususiyatlar vujudga keladi.

Klassik mexanikada bir xil zarrachalar fizikaviy xossalarining aynan o‘xshashligiga qaramay, o‘z individualligini saqlab qoladi. Agar boshlang’ich shartlar berilgan bo‘lsa, u holda har bir zarrachaning trayektoriyasi to‘la aniqlangan bo‘ladi va har bir zarrachaning harakatini aniq kuzatish mumkin. Sistema ikkita zarrachadan, masalan, ikkita elektrondan tashkil topgan bo‘lsin. Birinchi elektronni 1 tartib raqami, ikkinchisini esa 2 tartib raqami bilan belgilanadi. Klassik fizikada bu ikkita elektron muayyan trayektoriya bo‘ylab harakatlanadi va elektronlarning harakatini shu trayektoriya bo‘yicha kuzatish mumkin. Berilgan vaqt momentida 1-elektron va 2-elektronning fazoning qaysi sohasida joylashganligi aniq aytib berish imkoniyati mavjud. Bu holda elektronlarni tartib raqamlari bilan belgilab olish aniq ma’noga ega bo‘ladi.

Kvant mexanikasida esa bu jarayon batamom boshqacha ma’no kasb etadi. Geyzenbergning noaniqlik munosabatlariga ko‘ra, zarrachalarning trayektoriyasi haqida gapirish ma’noga ega emas. Misol tariqasida ikkita zarrachaning to‘qnashuv jarayonini kuzatib chiqaylik. To‘qnashuvdan avval, berilgan vaqt momentida, har bir zarrachaning

Yana bir bor o‘zaro ta`sir kuchlarini hisobga olmagan holdagi N ta bir xil zarrachalardan tashkil topgan sistemani ko‘rib chiqaylik. Bunday sistemaning stasionar holatlari uchun Shredinger tenglamasi

$$\sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + U(q_i)\right]\Psi(q_1, q_2, \ldots, q_N) = E\Psi(q_1, q_2, \ldots, q_N) \quad (7.73)$$

ko‘rinishda bo‘ladi. Bu tenglamada har bir zarracha alohida holda bo‘lishi mumkin bo‘lgan statsionar holatlar to‘lqin funksiyalari $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N$ lar bilan berilgan bo‘lsin. Sistemaning holatini butunligicha aniqlash maqsadida alohida olingan zarrachalarning joylashgan holatlarini raqamlar bilan belgilash lozim. Har bir zarracha joylashgan holat raqamini mos holda $n_1, n_2, \ldots, n_N$ orqali belgilansa, bozonlar sistemasi uchun $\Psi(q_1, q_2, \ldots, q_N)$ to‘lqin funksiyasini

$$\psi_{n_1}(q_1)\psi_{n_2}(q_2)\ldots\psi_{n_N}(q_N) \quad (7.74)$$

larning ko‘paytmasi ko‘rinishida ifodalash mumkin. Masalan, har xil holatlarda $(n_1 \neq n_2)$ yotgan ikkita zarrachadan iborat bo‘lgan sistema uchun to‘lqin funksiyaning ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$\Psi(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{n_1}(q_1)\cdot\psi_{n_2}(q_2) + \psi_{n_1}(q_2)\cdot\psi_{n_2}(q_1)\right]. \quad (7.75)$$

Bunda $\frac{1}{\sqrt{2}}$ ko‘paytuvchi normalashtirish natijasida paydo bo‘lgan. (7.75) formulani o‘zaro ta’sirlashmaydigan ixtiyoriy N ta bozonlardan tashkil topgan sistema uchun umumlashtirilsa, normallashtirilgan to‘lqin funksiyaning ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$\Psi(q_1, q_2, \ldots, q_N) = \left(\frac{n_1! n_2! \ldots n_N!}{N!}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_P \psi_{n_1}(q_1)\cdot\psi_{n_2}(q_2)\cdot\ldots\cdot\psi_{n_N}(q_N). \quad (7.76)$$

Bu yerda yig’indi har xil $n_1, n_2, \ldots, n_N$ indekslarning mumkin bo‘lgan hamma o‘rin almashtirishlari bo‘yicha olinadi.

Fermionlar sistemasi uchun Ψ to‘lqin funksiya (7.74) ko‘paytmalarining antisimmetrik kombinatsiyasidan iborat. Masalan, ikkita shunday zarracha uchun to‘lqin funksiya quyidagicha ko‘rinish oladi:

$$\Psi(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{n_1}(q_1)\cdot\psi_{n_2}(q_2) - \psi_{n_1}(q_2)\cdot\psi_{n_2}(q_1)\right]. \quad (7.77)$$

Umuman olganda, asosiy kvant soni n ning qiymatlari bir xil bo‘lgan elektronlar yagona qobiqni tashkil qiladi. Odatda, elektron qobiqlari katta lotin harflari bilan quyidagicha belgilanadi:

1-jadval

n	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**
Qobiq	*K*	*L*	*M*	*N*	*O*
Qobiqdagi elektronlarning maksimal soni	2	8	18	32	50

Muayyan elektron qobig’ida joylashgan har bir elektron energiyasi n ga nisbatan kuchsiz bog’liq bo‘lishi bilan bir qatorda orbital kvant soni l ga ham bog’liqdir. Har bir elektron qobig’ida berilgan l bilan xarakterlanuvchi elektronlar qobiqchalarni tashkil qiladi. Bu qobiqchalardagi holatlar m kvant sonining qiymatlari bilan farq qiladi, aniqrog’i m kvant soni l kvant soni bilan ifodalanuvchi qobiqchada $(2l+1)$ ta qiymat qabul qiladi va shu tariqa unda shuncha miqdorda elektron joylashishi mumkin. Agar elektronning s spin proyeksiyasi ham hisobga olinsa va uning faqat ikkita $\pm\frac{1}{2}$ qiymatni qabul qila olishi eslansa, u holda atomda n va l larning berilgan qiymatlarida l kvant soni bilan tavsiflanuvchi qobiqchada bir vaqtning o‘zida faqat $2(2l+1)$ tagacha elektron joylashishi mumkin. Berilgan n va l bilan xarakterlanuvchi hamma holatlardagi $(2l+1)$ elektronlarning barchasi yopiq qobiqni hosil qiladi.

Bu qobiqchalar kichik lotin harflari bilan belgilanadi:

2-jadval

l	**0**	**1**	**2**	**3**	**4**
Qobiqcha	*s*	*p*	*d*	*f*	*g*
Qobiqchadagi elektronlarning maksimal soni	2	6	10	14	18

Ushbu holatlar n bosh kvant sonining qiymatini ko‘rsatuvchi raqam va undan keyun yoziluvchi l orbital kvant sonining kichik harfi orqali belgilanadi. Har bir qobiqchani ko‘rsatuvchi simvol atomning elektron

Shunday qilib, bu hol uchun Pauli tenglamasining ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\Psi + U(\mathbf{r})\Psi - \frac{i\hbar e}{m_e c}\mathrm{H}\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial y} - y\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) + \\ + \frac{e^2}{8m_e c^2}\mathrm{H}^2\left(x^2 + y^2\right)\Psi + \frac{e\hbar}{2m_e c}\left(\sigma_z\mathrm{H}\right)\Psi. \quad (7.50)$$

Kichik magnit maydonlar bo‘lgan holda (7.50) dagi H^2 hadni hisobga olinmasa ham bo‘ladi. Ikkinchidan

$$i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} = \hat{M}_z \quad (7.51)$$

ifoda orbital moment komponentasining operatoridir. Uchinchidan

$$\hat{H}^0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + U(r) \quad (7.52)$$

belgilash kiritilsa, ya’ni magnit maydoni bo‘lmagan holda elektronning Gamiltonianini $\hat{H}^0$ orqali belgilanadi va quyidagi ifodaga kelinadi:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}^0\Psi + \frac{e\mathrm{H}}{2m_e c}\left(\hat{M}_z + \hbar\sigma_z\right)\Psi. \quad (7.53)$$

Statsionar holatlari ko‘rib chiqiladi, ya’ni to‘lqin funksiyani

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (7.54)$$

ko‘rinishda ifodalab, uni (7.53) tenglamaga qo‘yilsa,

$$\hat{H}^0\Psi + \frac{e\mathrm{H}}{2m_e c}\left(\hat{M}_z + \hbar\sigma_z\right)\Psi = E\Psi \quad (7.55)$$

tenglamaga kelinadi.

Endi σ_z ning Ψ to‘lqin funksiyasiga ta’sirini hisoblab chiqiladi:

$$\sigma_z\Psi = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_1\\ -\psi_2\end{pmatrix}.$$

Hisoblangan natijaga ko‘ra (7.55) dagi statsionar holatlar uchun tenglama ikkita ψ_1 va ψ_2 funksiyalar uchun tenglamalarga ajraladi va ularning ko‘rinishlari quyidagicha bo‘ladi:

$$\hat{H}^0\psi_1 + \frac{e\mathrm{H}}{2m_e c}(\hat{M}_z + 1)\psi_1 = E\psi_1 \qquad (7.56)$$

$$\hat{H}^0\psi_2 + \frac{e\mathrm{H}}{2m_e c}(\hat{M}_z - 1)\psi_2 = E\psi_2. \qquad (7.57)$$

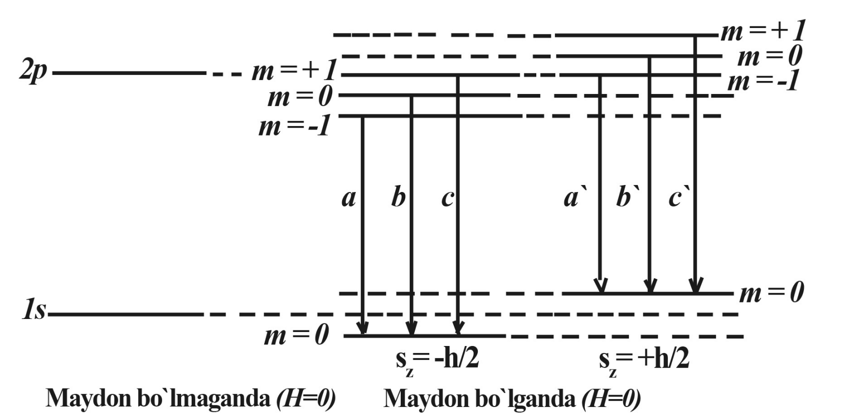
Bu tenglamalarning yechimi, magnit maydon bo‘lmaganda, $s_z = \frac{\hbar}{2}$ spin uchun $\psi'_{nlm} = \begin{pmatrix}\psi_{nlm}\\ 0\end{pmatrix}$ ga teng bo‘ladi, xususiy qiymatlar esa $E = E^0_{nl}$ ga teng bo‘ladi. Agarda elektronning spini $s_z = -\frac{\hbar}{2}$ ga teng bo‘lsa , u holda yechim $\psi_{nlm} = \frac{0}{\psi_{nlm}}$ ga teng bo‘lib, uning xususiy qiymatlari $E = E^0_{nl}$ ligicha qoladi. Bu yechimlarda $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ga tengdir. Magnit maydon ta’sirini hisobga olinsa, to‘lqin funksiyalar, ya’ni xususiy funksiyalarning ko‘rinishi o‘zgarmaydi, faqat xususiy qiymatlar boshqa qiymatlar qabul qiladi. $\hat{M}_z\psi_{nlm} = m\hbar\psi_{nlm}$ ekanligini hisobga olib, (7.56) va (7.57) tenglamalarning quyidagi ikkita yechimiga ega bo‘lamiz:

ψ'_{nlm} uchun xususiy qiymat: $E = E'_{nlm} = E^0_{nl} + \frac{e\hbar\mathrm{H}}{2m_e c}(m+1)$, bunda $s_z = \frac{\hbar}{2}$. (7.58)

ψ''_{nlm} uchun xususiy qiymat: $E = E''_{nlm} = E^0_{nl} + \frac{e\hbar\mathrm{H}}{2m_e c}(m-1)$, bunda $s_z = -\frac{\hbar}{2}$. (7.59)

Olingan (7.58) va (7.59) yechimlardan korinib turibdiki, magnit maydon ta’sirida energetik sathlar ajraladi, ya’ni aynish holati bartaraf etiladi. Elektronning energiyasi magnit maydonga nisbatan harakat miqdori momentining yo‘nalishiga bog’liq bo‘ladi, ya’ni m magnit kvant soniga bog’liq bo‘ladi. To‘lqin funksiyalari esa o‘zgarmaydi, boshqacha aytganda magnit maydonning ta’siri atomning holatini o‘zgartirmaydi. Energetik sathlarning ajralishi orqali kuzatilayotgan spektral chiziqlarning soni ham ortadi. Optik o‘tishlarda m kvant soni faqat ± 1 yoki 0 ga teng o‘zgarishlarnigina qabul qiladi. Bu hodisa Zeyemanning oddiy effekti deyiladi . Spin magnit moment yorug’lik to‘lqini maydoni bilan kuchsiz ta’sirlashgani uchun hisoblashlarga faqat

elektronning spini o‘zgarmaydigan hollargina kiradi. Ushbu o‘tishlar 19-rasmda (a,b,c) va (a',b',c') chiziqlar orqali tasvirlangan.



19-rasm. Spinni hisobga olgan holda s- va p- termlarning kuchli magnit maydonida ajralishi.

O‘tish chastotalari quyidagi formula orqali hisoblanadi:

$$\omega_{n'l'm',n''l''m''} = \frac{E_{n'l'm'} - E_{n''l''m''}}{\hbar} = \frac{E^0_{n'l'} - E^0_{n''l''}}{\hbar} + \frac{e\mathrm{H}}{2m_e c}(m' - m''). \qquad (7.60)$$

Magnit maydon bo‘lmagan holdagi o‘tish chastotasini ω^0 orqali, magnit maydon bo‘lgan holdagi o‘tish chastotasini ω orqali belgilansa, u holda (7.60) quyidagi ko‘rinishga o‘tadi:

$$\omega = \omega^0 + \frac{e\mathrm{H}}{2m_e c}(m' - m''). \qquad (7.61)$$

Endi $m' - m'' = 0, \pm 1$ ekanligini hisobga olib, tashqi magnit maydonda nurlanish yoki yutilish spektr chiziqlari uchun uchta chastotaga ega bo‘linadi: ulardan biri $m' - m'' = 0$ ga to‘g‘ri keluvchi siljimagan ω^0 chastotaga mos kelsa, qolgan ikkitasi esa $m' - m'' = \pm 1$ ga to‘g‘ri keluvchi, asosiy siljimagan chiziqdan $\pm\frac{e\mathrm{H}}{2m_e c}$ birlikka simmetrik siljigan, chiziqlarga mos keladi. Olingan (7.61) dagi natija Zeyeman effektining klassik nazariyasi orqali olingan natija bilan mos keladi. Ma’lumki, klassik nazariyaga asosan, tekisligi maydon yo‘nalishiga perpendikular bo‘lgan elektron orbitasiga magnit maydon ta’sir ko‘rsatadi. Bunda

N ta fermiondan tashkil topgan sistema uchun to‘lqin funksiya quyidagi ko‘rinishdagi determinantdan iborat bo‘ladi:

$$\Psi(q_1,q_2,\ldots,q_N) = \frac{1}{\sqrt{N}}\begin{vmatrix} \psi_{n_1}(q_1) & \psi_{n_1}(q_2) & \ldots & \psi_{n_1}(q_N) \\ \psi_{n_2}(q_1) & \psi_{n_2}(q_2) & \ldots & \psi_{n_2}(q_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_{n_N}(q_1) & \psi_{n_N}(q_2) & \ldots & \psi_{n_N}(q_N) \end{vmatrix}. \qquad (7.78)$$

Ikki fermionning o‘rin almashtirishiga bu determinantning ikki ustunining o‘rin almashtirishi mos bo‘ladi va natijada determinant o‘z ishorasini o‘zgartiradi.

(7.76) va (7.78) da tavsiflangan to‘lqin funksiyalardan bir qator muhim natijalar kelib chiqadi. Fermi zarrachalardan tashkil topgan sistemani ko‘rib chiqaylik. Faraz qilaylik, sistemadagi ikkita zarracha bitta kvant holatida joylashgan bo‘lsin$(n_1 = n_2)$. Demak, bu ikki zarrachaning barcha kvant sonlari bir
xil qiymatlarga ega bo‘ladi. Masalan, markaziy simmetrik maydonda harakatlanuvchi elektronlarning *n, l, m, s* kvant sonlari bir xil qiymatlarga ega bo‘lganida (7.78) dagi determinantning ikki qatori bir xil bo‘lib qoladi va to‘lqin funksiya aynan nolga aylanadi. Demak, bir xil fermionlardan tashkil topgan sistemada aynan bir holatda bir vaqtning o‘zida bittadan ortiq fermion bo‘lishi mumkin emas ekan. Kvant mexanikasida olingan bu natijani Pauli prinsipi deyiladi. Atomlar sathining elektronlar bilan ketma-ket to‘ldirilishini Paulining qonuni ifodalaydi. 1925-yilda V. Pauli tomonidan, kvant mexanikasi hali vujudga kelmay turib, tajriba natijalarining tahlili asosida kashf etilgan prinsipga binoan atomning har qanday statsionar holatida faqat bittagina elektron joylashishi mumkin. Umuman olganda, ko‘p elektronli atomlarda elektronlarning energetik sathlar bo‘yicha taqsimoti quyidagi ikki prinsipga mos kelishi kerak. Birinchi prinsipga asosan, normal holatdagi atomda elektronlar o‘zlari uchun mumkin qadar eng quyi energetik sathda joylashgan bolishi kerak. Ikkinchi prinsip, Pauli prinsipi bo‘lib, atomdagi *n, l, m, s* kvant sonlari to‘plami bilan xarakterlanuvchi ixtiyoriy energetik sathda bittadan ortiq elektron bo‘lishi mumkin emas.

Atom spektriga qarab atom holatlarini va holatlarning kvant sonlarini aniqlash mumkin. Ammo, Pauli prinsipining matematik ma’nosi bir xil zarrachalarni farq qilib bo‘lmaslik prinsipga asoslangan holda keltirib chiqarildi va uning to‘liq kvant mexanik ta’rifini berishga imkoniyat yaratildi.

7.9. Elementlarning davriy sistemasi

Oldingi paragrafda bayon qilingan ma’lumotlar asosida elementlarning davriy sistemasi kvant mexanikasi nuqtai nazaridan asoslab berilishi mumkin. Elementlarning davriy sistemasini tuzishda quyidagi uch qoidaga amal qilish darkor:

- atomlarning strukturasi *Z* atom nomeri (yadroning zaryadi) orqali aniqlanadi;
- atom nomeri ortgan sari va atomdagi elektronlar sonining ko‘payishi natijasida elekrtonlar o‘zlari uchun mumkin bo‘lgan eng quyi energetik sathlarni to‘ldirib borishadi;
- energetik holatlarning to‘ldirilishi Pauli prinsipi bilan belgilanadi.

Kvant mexanikasida elektronlararo o‘zaro ta’sirning mavjudligiga qaramasdan, atomdagi har bir elektornning holati to‘rtta kvant sonlari bilan xarakterlanadi:

$$n = 1, 2, \ldots$$
$$l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$$
$$m = -l, -(l-1), \ldots, (l-1), l$$
$$s = \pm\frac{1}{2}.$$

Bir xil bosh va orbital kvant sonlari (*n* va *l*) bilan harakatlanuvchi elektronlarni yadrodan bir xil masofada joylashgan deb hisoblash mumkin. U holda, bu elektronlar yadro bilan bir xil o‘zaro ta’sirda bo‘ladi va shuning uchun ularning energiyalari bir-biriga taqriban teng. Bunday elektronlar atomning bitta qobig’ida joylashgan bo‘ladi.

7.10. VII bobga oid savol va masalalar

1. O'zining xususiy tasavvurida s_z operatorining ko'rinishi qanday yoziladi?

2. O'zining xususiy tasavvurida s_x operatorning ko'rinishi qanday bo'ladi?

3. $\hat{s}^2$ operator uchun ifodani hosil qiling.

4. s_z operatorining xususiy funksiyalari qanday ko'rinishda bo'ladi?

5. To'la moment operatori qanday tuziladi?

6. $\hat{J}^2$ va $\hat{J}_z$ operatorlarning xususiy qiymatlarini yozing va j, m_j kvant sonlari qanday qiymatlar qabul qiladi?

*7. **Masala.** Pauli matritsalari bilan ifodalangan operatorlarning xususiy funksiyalari va xususiy qiymatlari aniqlansin.*

***Yechish.** Berilgan*

$$\hat{\sigma}_x\chi^{(1)} = \sigma_x\chi^{(1)}, \hat{\sigma}_y\chi^{(2)} = \sigma_y\chi^{(2)}, \hat{\sigma}_z\chi^{(3)} = \sigma_z\chi^{(3)},$$

tenglamalarning yechimlaridan $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ operatorlarning xususiy funksiyalari va xususiy qiymatlari aniqlanadi. Bunda $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ - $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ operatorlarning xususiy qiymatlari va $\chi^{(1)}, \chi^{(2)}, \chi^{(3)}$ - $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ operatorlarning xususiy funksiyalari.

Izlayotgan funksiyalarni $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ matritsa ko'rinishdan ifodalanilsa, yuqoridagi birinchi tenglamadan

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \sigma_x\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

quyidagi natijaga ega bo'lamiz:

$$\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = \sigma_x\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Demak, ikkita matritsa tengligidan foydalanilsa $b = \sigma_x a$, $a = \sigma_x b$ tengliklar hosil bo'ladi va mos ravishda, $\sigma_x^2 = 1$, $\sigma_x = \pm 1$ natija olinadi.

Agarda $\sigma_x = 1$ bo'lsa, u holda $\chi_{+1}^{(1)} = a\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ bo'ladi.

Agarda $_x = -1$ bo'lsa, u holda $\chi_{-1}^{(1)} = a\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ bo'ladi.

Normallashtirish shartidan a ni qiymati aniqlanadi:

$$\chi_1^{(1)*}\chi_1^{(1)} = |a|^2(1\,1)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 2|a|^2 = 1.$$

Demak, $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Shunday qilib,

$$\chi_{+1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \ \chi_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Shunga o'xshash ikkinchi va uchinchi tenglamalardan

$$\sigma_y = \pm 1: \qquad \chi_{+1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \ \chi_{-1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix};$$

$$\sigma_z = \pm 1: \qquad \chi_{+1}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-1}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

*$\chi_{+1}^{(3)}$ va $\chi_{-1}^{(3)}$ funksiyalar mos ravishda spin yo'nalishi **z** o'qi bo'yicha va qarama-qarshi yo'nalgan holga tegishlidir.*

8. Elementlar davriy sistemasi nazariyasi negizida yotgan asosiy tushunchalarni keltiring.

9. Zarrachalarning aynan o'xshashlik prinsipini ifodalab bering.

10. Qaysi o'rin almashtirishlarga nisbatan gamiltonian invariant bo'ladi?

11. Simmetrik va antisimmetrik to'lqin funksiyalari deganda nimani tushunasiz?

12. Zarrachalarning qaysi sinfiga elektron tegishli bo'ladi?

13. Simmetrik bo'lmagan to'lqin funksiyasidan tuzilgan antisimmetrik funksiyaning umumiy ko'rinishi qanday bo'ladi?

14. Atomdagi elektron qaysi kvant sonlari bilan ifodalanadi?

15. Bir xil n,l va m kvant sonlari bilan berilgan holatlardagi atomda nechta elektron joylashishi mumkin?

16. Bosh kvant soni n=2 bo'lgan elektron qobig'idagi elektronlarning maksimal soni nechta bo'ladi?

17. Kislorod atomining elektron konfiguratsiyasini ko'rsating.

yechish kerak bo'ladi. Mana shu hollarda angarmonik ossilatorga ega bo'linadi.

Angarmonik ossilator uchun bir o'lchamli Shredinger tenglamasi ushbu ko'rinishga ega bo'ladi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2\psi + \alpha x^3\psi = E\psi \tag{8.24}$$

Ushbu masala oldingi paragrafda yoritilgan g'alayonlanish nazariyasining ishchi formulalari yordamida yechiladi. (8.24) da gamiltonian

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 x^3}{2} + \alpha x^3 \tag{8.25}$$

ko'rinishga ega, g'alayonlanish energiya qiymatining ko'rinishi esa

$$\hat{W} = \alpha x^3 \tag{8.26}$$

bo'ladi. Ma'lumki, $\alpha = 0$ holat – g'alayonlanmagan sistemaning kvant sathlari bo'lib, garmonik ossilyator sathlarining o'zginasidir. Uning xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalari ma'lum (IV-bobga qarang):

$$E_n^0 = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad \psi^0{}_n(x). \tag{8.27}$$

Tekshirilayotgan masalada aynish holatlari mavjud emas, ya'ni har bir energetik sathga bitta to'lqin funksiyasi mos keladi. G'alayonlangan energiyaning matrik elementi esa (8.6) ga ko'ra,

$$W_{mn} = \int \psi_m^0 \hat{W} \psi_n^0 dx = \alpha \int \psi_m^0 x^3 \psi_n^0 dx = \alpha\left(x^3\right)_{mn} \tag{8.28}$$

ko'rinishga ega bo'ladi, bunda $\left(x^3\right)_{mn}$ orqali x^3 uchun mos kelgan matrik elementlar belgilangan. (8.21) formulaga asosan ikkinchi yaqinlashishdagi g'alayonlangan sistemadagi k-sathning energiyasi

$$E_k = E_k^0 + \alpha\left(x^3\right)_{kk} + \alpha^2 \sum_{n \neq k} \frac{\left(x^3\right)_{nk}\left(x^3\right)_{kn}}{E_k^0 - E_n^0} \tag{8.29}$$

ga teng bo'ladi. Demak, qo'yilgan masalani yechish uchun $\left(x^3\right)_{mn}$ matritsa elementlarini hisoblashning o'zi kifoya. Bizga ma'lum bo'lgan (6.60) dagi x_{mn} matrik elementlari

$$x_{mn} = x_0\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n-1,m} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n+1,m}\right), \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \tag{8.30}$$

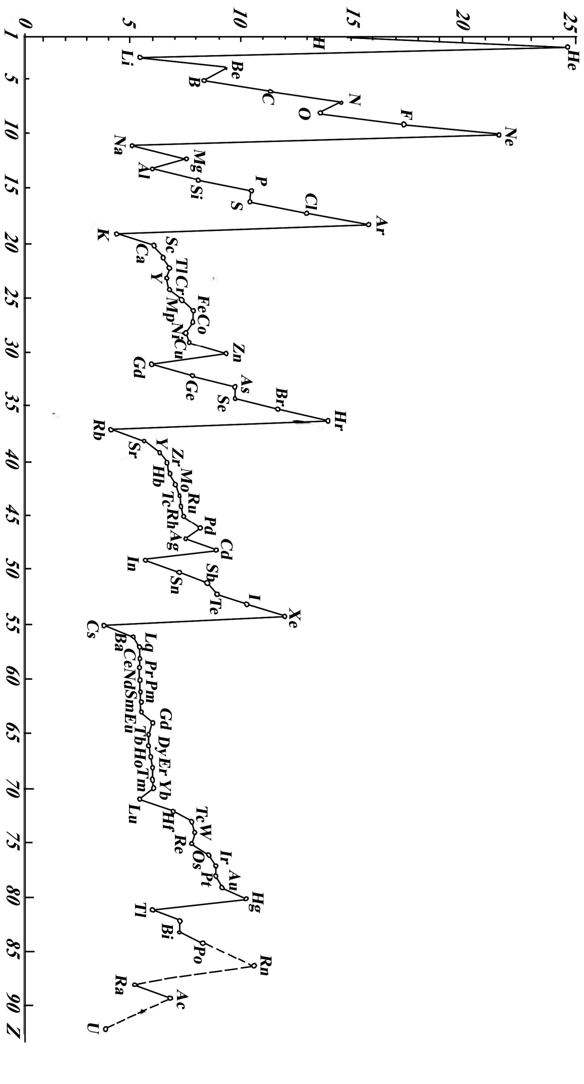
K atomidagi elektronlarning taqsimoti Na atomidagi taqsimotga o'xshash bo'ladi (3-jadvalga qarang).

Kaliy atomidan keyingi element kalsiy *Ca (Z=20)* elementidir. Ushbu elemetning spektroskopik natijalariga ko'ra (20-rasm), *Ca* ning elektronini *N* qobiqqa joylashtirish kerakligi kelib chiqadi. Keyingi elementlar esa *M* qobiqni skandiy - *Sc (Z=21)* dan boshlab ruh - *Zn (Z=30)* gacha to'ldirib boriladi. Keyinchalik *N* qobiq kripton *Kr (Z=36)* gacha to'ldirib kelinadi va shu bilan navbatdagi davr ham inert gaz bilan yakunlanadi. Shunday qilib, *He* atomidan tashqari barcha inert gazlari uchun *8* ta elektrondan iborat konfiguratsiya o'rinlidir, bulardan *2* tasi *s*-holatda, qolgan *6* ta elektron esa *p* holatda joylashgan bo'ladi.

20-rasmda elementlarning ionizatsiya potensiallari uchun olingan spekroskopik ma'lumotlar keltirilgan, ular har bir elementdan keyingisiga o'tganda qo'shiladigan elektronlarning bog'lanish energiyalarini aniqlaydi. Har xil holatlar ketma-ket to'luvchi guruhlarga quyidagicha taqsimlanadi:

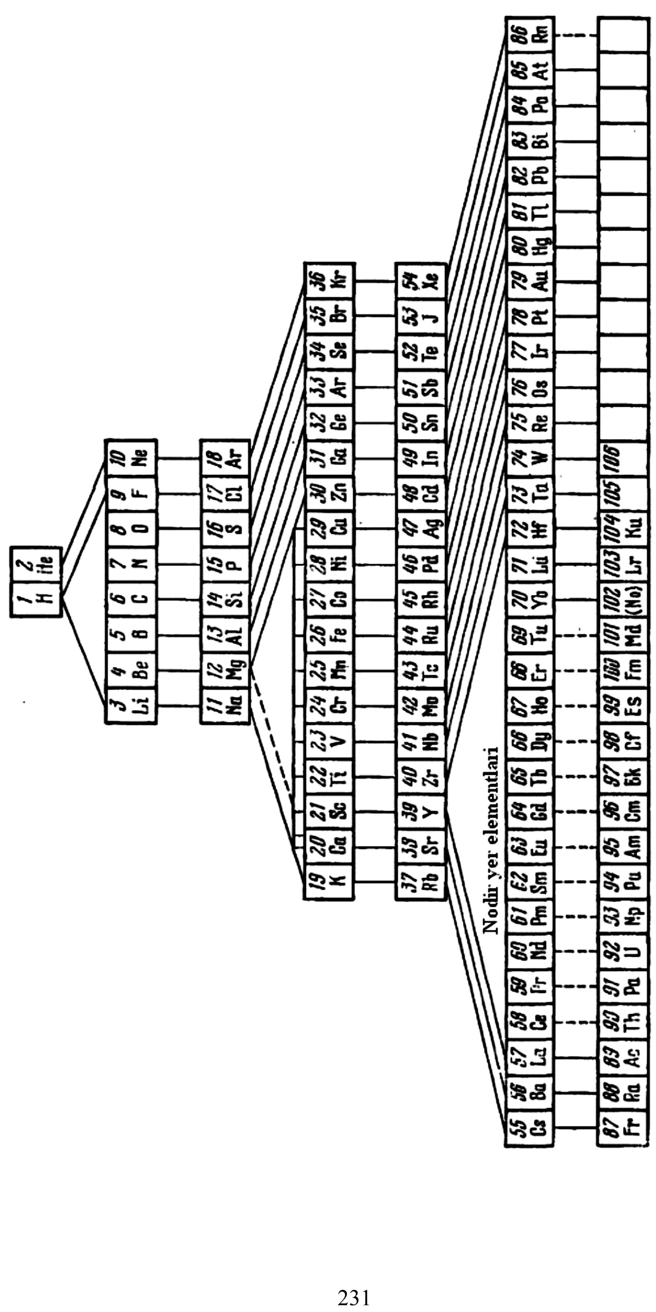
1s …………………………	2ta elektron	
2s, 2p …………………….	8 ta elektron	
3s, 3p ………………………	8 ta elektron	(7.80)
4s, 3d, 4p ………………….	18 ta elektron	
5s, 4d, 5p …………………..	18 ta elektron	
6s, 4f, 5d, 6p ……………….	32 ta elektron	
7s, 6d, 5f …………………		

Haqiqatda esa holatlarning bu tartibda to'ldirilishi bajarilmaydi. Kripton elementidan keyingi element – *Rb (Z=37)* rubidiy bo'lib, *Na* va *K* elementlarga o'xshab ketadi. Demak *Rb* dagi tashqi elektron *N* qobiqda joylashmasdan, balki yangi *O* qobiqqa *(n=5)* joylashtiriladi. Stronsiy *Sr* dagi elekton ham *O* qibiqda joylashgan bo'lib, *Ca* elementiga o'xshab ketadi. *Sr* dan keyingi elementlar *O* va *N* qobiqlardagi bo'sh joylarni to'ldirishadi. *Cs (Z=55)*- Seziy elementidan boshlab *P* – qobiqni *(n=6)* to'ldirish boshlanadi va o'z ichiga *nodir yer elementlari* deb yuritiluvchi, hammasi bo'lib *32* elementdan tashkil topgan, katta davr keladi.



20-rasm. Elementlar ionizatsiya potensiallari haqida ma'lumot.

Nodir yer elementlar guruhi *La* (*Z=57*)- lantandan boshlab *Hf* (*Z=72*) -gafniygacha bo'lgan elementlardan tashkil topgan bo'lib, ular bir-biriga o'xshash kimyoviy xossalarga ega bo'ladi. Chunki, bu davrdagi elementlar O va P qobiqlarda elektronlar taqsimotining o'xshashligi bilan ajralib turadi. Ular bir-biridan N qobiqni to'ldirilish



21-rasm. Elementlarning davriy sistemasi.

VIII bob
G'ALAYONLANISH NAZARIYASI

8.1. Vaqtga bog'liq bo'lmagan g'alayonlanish nazariyasi

Avvalgi boblarda ko'rib chiqilgan Shredinger tenglamasi o'zgaruvchi koeffitsiyentlarga ega bo'lgan xususiy hosilali chiziqli differensial tenglama sifatida namoyon bo'lgan edi. Uning aniq yechimlarini faqat bir necha sodda masalalar uchun olish imkoniyati mavjud bo'ldi va bu masalalarning bir qanchasini oldingi boblarda ko'rib chiqqan edik.

Lekin juda ko'p hollarda, ayniqsa atom va yadroviy sistemalarni batafsil tekshirganda Gamilton operatorlarining xususiy funksiyalarini va xususiy qiymatlarini hisoblash uchun taqribiy usullardan foydalanish maqsadga muvofiq bo'ladi. Keyingi vaqtlarda elektron hisoblash mashinalarining paydo bo'lishi munosabati bilan kvant mexanikasini bir qator masalalarini yechishda raqamli hisoblash usullarining qo'llanilishi muhim ahamiyat kasb eta boshladi. Ushbu bobda real fizikaviy sistema xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalarini aniqlashda analitik hisoblashlarga asoslangan taqribiy usullardan foydalaniladi. Tekshirilayotgan real sistemaning holati aniq yechimga ega bo'lgan ideallashtirilgan holatdan katta farq qilmaydigan qilib tanlab olinadi.

Bu hollarda taqribiy usullar yordamida asosiy yechimga kiritiladigan tuzatmalarni hisoblab chiqish imkoniyati yaratiladi va bu tuzatmalar aniq yechimga qo'shilgan holda berilgan masalaning to'liq yechimlarini beradi. Yuqorida qayd etilgan tuzatmalarni aniqlashning umumiy usuli kvant mexanikasida g'alayonlanish nazariyasi deb yuritiladi.

Ushbu bobda diskret energiya spektriga ega bo'lgan statsionar masalalar uchun g'alayonlanish nazariyasi ko'rib chiqiladi. Faraz qilaylik, kvant sistemaning Gamil'ton operatori ikki qismdan iborat bo'lsin:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \tag{8.1}$$

bunda $\hat{H}_0$– operator aniq yechimga ega bo'lgan ideallashtirilgan sistemaning Gamil'ton operatorini ifodalaydi, $\hat{W}$ operator esa $\hat{H}_0$ ga nisbatan kichik bo'lgan qandaydir qo'shimcha operator bo'lib uni

$$c_m = \lambda \frac{w_{mk}}{E_k^0 - E_n^0} + \lambda^2 \left(\sum \frac{w_{mn} w_{nk}}{\left(E_k^0 - E_n^0\right)\left(E_k^0 - E_m^0\right)} - \frac{w_{kk} w_{mk}}{\left(E_m^0 - E_k^0\right)^2} \right) \cdot \tag{8.22}$$

Olingan formulalar orqali g'alayonlanish nazariyasining qo'llanilish shartlarini olish mumkin. Yuqorida aytib o'tilgan $\hat{W}$ operatorining $\hat{H}$ operatoriga nisbatan kichikligi to'g'risidagi tasdiq quyidagi ko'rinishga keladi:

$$\left| \frac{\lambda w_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} \right| << 1, \quad n \neq m, \tag{8.23}$$

bunda w_{mn} g'alayonlangan operatorning matrik elementlarini beradi.

8.2. Angarmonik ossillyator

Avvalgi paragrafda olingan formulalarni chiziqli angarmonik ossillyatorning energiya sathlarini aniqlash uchun tatbiq etishga harakat qilaylik. Ma'lumki, garmonik ossillyator real mexanik sistemalarning ideallashgan holatini tavsiflaydi. Haqiqatda esa zarrachalarning potensial energiyasi $\frac{m\omega_0^2}{2}x^2$ funksiya bilan emas, balki murakkabroq bo'lgan qandaydir $U(x)$ funksiya orqali ifodalanadi. Faraz qilaylik, $U(x)$ potensial energiyaga ega bo'lgan zarracha potensial o'rada joylashgan bo'lsin. Muvozanat vaziyat koordinata boshiga joylashtiriladi, ya'ni, $x=0$ da $U'(x)=0$ bo'lishi kerak. Potensial energiyani shunday tanlab olamizki, muvozanat vaziyatida u nolga teng bo'lsin, ya'ni $U(0)=0$ shart bajarilsin. Potensial energiyaning darajali qatorga yoyilmasi quyidagi ko'rinishga ega:

$$U(x) = U(0) + \frac{x}{1!}U'(0) + \frac{x^2}{2!}U''(0) + \frac{x^3}{3!}U'''(0) + \ldots..$$

$U(0)=U'(0)=0$ ekanligi hisobga olinsa, hamda $x=0$ turg'un muvozanat nuqtasida ushbu:

$$\frac{1}{2}U''(0) = \frac{m\omega_0^2}{2}, \quad \frac{1}{3!}U'''(0) = \alpha,$$

belgilashlarni kiritilsa, u holda qo'yilgan masalani nolinchi yaqinlashishda emas, balki yuqori tartibli hadlari hisobga olgan holda darajasi bilan farqlanadi. Bu to‘ldirish *Ce (Z=58)*- seriy elementdan boshlanadi va *Lu (Z=71)*- lyutetsiy elementi bilan tugatiladi. Nodir elementlar guruhi *lantanoidlar* ham deyiladi va ularning kimyoviy xossalari asosan tashqi elektronlar bilan aniqlanadi. Oltinchi davr inert gazi *Rn (Z=86)* - radon elementi bilan yakunlanadi.

Davriy sistemaning yettinchi davrni tabiiy holatdagi elementlar bilan to‘ldirish oxirgacha amalga oshirilmagan. Hozirgi vaqtgacha *Np(Z=93)* – neptuniydan *Ku (Z=104)* – kurchatoviygacha sun’iy ravishda elementlar olingan. Hosil bo‘lgan elementlar nodir yer elementlarga o‘xshash alohida guruhni tashkil etadi.Ushbu guruhda lantan rolini *Ac(Z=89)*- aktiniy elementi o‘ynaydi va shuning uchun bu guruh elementlarini *aktinoidlar* deb yuritiladi. Ular o‘zaro kimyoviy xossalariga ta’sir ko‘rsatmaydigan *5f* va *6d* elektronlar bilan farq qiladi.

Elementlarning elektron tuzilishi tasvirlangan 3-jadvaldan ko‘rinib to‘ribdiki, *oraliq guruh elementlari* uchun yuqori qobiqning *s*-holatlari ikkinchi qobiqning *d* va f holatlaridan avval to‘ldirila boshlaydi. Oraliq guruhni tashkil etuvchi elementlar maxsus kimyoviy xususiyatlarga ega bo‘ladi. Bu effekt kuzatiladigan birinchi element kaliy atomidir. Kaliy atominig tashqi elektroni *3d* holatda emas, balki *4s* holatda joylashgan. Jadvaldan atomlarda elektron qobiqchalarning to‘ldirishining *1s, 2s, 2p, 3s, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, 7s* tartibda bajarilishi ko‘riladi. Bu tartibda asosan lantanoidlar va aktinoidlarning kimyoviy xossalarini juda o‘xshashligini tushunturish mumkin. Davriy sistemani *3d, 4d* va *5d* qobiqlarning to‘lishi mos ravishda *temir, palladiy* va *platina* kabi elementlarda yuz beradi.

Elektron qobig‘i to‘la, ya’ni qobiqchalari ham, to‘ldirilgan elementlar alohida turg’unlik xususiyatga ega. Bu element atomlarida kuchsiz bog‘langan tashqi elektron bo‘lmaydi. Quyida keltirilgan jadvalda alohida o‘rin egallaydigan bu elementlarning elektron konfiguratsiyasi ayniqsa barqaror bo‘lgani tufayli , ular kimyoviy jihatdan inertdir:

$$\begin{array}{cccccc} He & Ne & Ar & Kr & Xe & Rn \\ 1s^2 & 2p^6 & 3p^6 & 4p^6 & 5p^6 & 6p^6 \end{array}$$

21-rasmda N. Bor tomonidan taklif etilgan sxematik ko‘rinishdagi elementlarning davriy sistemasi berilgan.

Elementlarning davriy sistemasini kvant mexanika nuqtai nazardan tushuntirish bu nazariyaning katta yutig’i bo‘libgina qolmay, boshqa sun’iy elementlarni kashf etish imkoniyatini ham yaratdi.

Element		Ichki qobiqchalar konfiguratsiyalari	N		O			P	Asosiy term	Ionizatsiya potensiali, eV
			5,2 *5d*	5,3 *5f*	6,0 *6s*	6,1 *6p*	6,2 *6d*	7,0 *7s*		
Hf	72	1 s dan 5 p gacha bo‘lgan qobiqchalar 68 ta elektronga ega	2	–	2	–	–	–	$^3F_2$	5,5
Ta	73		3	–	2	–	–	–	$^4F_{3/2}$	7,7
W	74		4	–	2	–	–	–	$^5D_0$	7,98
Re	75		5	–	2	–	–	–	$^6S_{5/7}$	7,87
Os	76		6	–	2	–	–	–	$^5D_4$	8,7
Ir	77		7	–	2	–	–	–	$^4F_{1/2}$	9,2
Pt	78		8	–	1	–	–	–	$^3D_3$	8,96
Au	79	1 s dan 5 d gacha bo‘lgan qobiqchalar 78 ta elektronga ega	–	–	1	–	–	–	$^2F_{1/2}$	9,223
Hg	80		–	–	2	–	–	–	$^1S_0$	10,434
Tl	81		–	–	2	1	–	–	$^2P_{1/2}$	6,106
Pb	82		–	–	2	2	–	–	$^3P_0$	7,415
Bi	83		–	–	2	3	–	–	$^4S_{3/2}$	7,287
Po	84		–	–	2	4	–	–	$^3P_2$	8,2
At	85		–	–	2	5	–	–	$^2P_{1/2}$	9,2
Rn	86		–	–	2	6	–	–	$^1S_0$	10,745
Fr	87	1 s dan 5 d gacha bo‘lgan qobiqchalar 78 ta elektronga ega	–	–	2	6	–	1	$^2S_{1/2}$	3,98
Ra	88		–	–	2	6	–	2	$^1S_0$	5,277
Ac	89		–	–	2	6	1	2	$^2D_{1/2}$	6,89
Th	90		–	–	2	6	2	2	^3F	6,95
Pa	91		–	2	2	6	1	2	^4K	–
U	92		–	3	2	6	1	2	^5L	6,08
Np	93		–	4	2	6	1	2	^6M	–
Pu	94		–	6	2	6	–	2	^7F	5,1
Am	95		–	7	2	6	–	2	^8S	–
Cm	96		–	7	2	6	1	2	^9D	
Bk	97		–	8	2	6	1	2		
Cf	98		–	10	2	6	–	2		
Es	99		–	11	2	6	–	2		
Fm	100		–	12	2	6	–	2		
Md	101		–	13	2	6	–	2		
(No)	102		–	14	2	6	–	2		
Lr	103		–	14	2	6	1	2		
Ku	104		–	14	2	6	2			

g‘alayonlanish operatori deyiladi. Ideallashtirilgan sistemada hisobga olinmagan Gamilton operatorining bu qismi tashqi maydonning potensial energiyasi sifatida ham ifodalanishi mumkin.

G‘alayonlanish nazariyasining asosiy maqsadi $\hat{H}_0$ gamiltonian bilan ifodalangan g‘alayon ta’sir qilmagan sistema uchun ma’lum bo‘lgan ψ_n^0 to‘lqin funksiyasi va E_n^0 energiya qiymatlari orqali g‘alayonlangan sistemani statsionar holatlarining xususiy funksiya va energiyalarini aniqlab berish hisoblanadi. Boshqacha aytganda g‘alayonlanish nazariyasi usullaridan foydalanish uchun ikkita shartni qabul qilish kerak:

1) G‘alayonlangan sistema uchun Shredinger tenglamasining

$$\hat{H}_0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0 \tag{8.2}$$

yechimlari ma’lum bo‘lsin va aynish holatlari mavjud bo‘lmasin.

2) $\hat{w}$ operatorni quyidagi ko‘rinishda

$$\hat{W} = \lambda\hat{w} \tag{8.3}$$

ifodalash mumkin bo‘lsin, bunda λ kichik o‘lchamsiz parametr.

Demak, (8.1) operatorning xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalarini aniqlash masalasi

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda\hat{w}\right)\psi = E\psi \tag{8.4}$$

tenglamaning yechimini topish masalasiga keltiriladi. (8.4) dagi izlanayotgan $\psi(x)$ funksiyani ma’lum bo‘lgan $\psi_n^0(x)$ funksiyalar bo‘yicha qatorga yoyiladi:

$$\psi(x) = \sum_n c_n\psi_n^0(x). \tag{8.5}$$

Bu holda barcha c_n larning to‘plami energetik, ya’ni E - tasavvuridagi ψ funksiyani beradi. (8.5) qator (8.4) tenglamaga qo‘yiladi va hosil bo‘lgan ifodaning ikkala tomonini $\psi_n^{0*}(x)$ ga ko‘paytirib chiqiladi, so‘ngra x bo‘yicha integrallanadi. U holda (8.4) tenglamaning chap tomoni

$$\sum c_n\int\psi_m^{0*}(x)(\hat{H}_0 + \lambda\hat{w})\psi_n^0(x)dx = \sum c_n\int\psi_m^{0*}(x)E_n^0\psi_n^0(x)dx +$$
$$+\lambda\sum_n c_n\int\psi_m^{0*}(x)\hat{w}\psi_n^0(x)dx = \sum c_nE_n^0\int\psi_m^{0*}(x)\psi_n^0(x)dx + \lambda\sum_n c_nw_{mn} =$$
$$= \sum_n c_nE_n^0\delta_{mn} + \lambda\sum_n c_nw_{mn} = c_mE_m^0 + \lambda\sum_n w_{mn}c_n$$

$$E_k = E_k^0 + w_{kk} \tag{8.16}$$

$$\psi_k(x) = \psi_k^0(x) + \sum_{m\neq k}\frac{w_{mk}}{E_k^0 - E_m^0}\psi_m^0(x). \tag{8.17}$$

Olingan (8.16) va (8.17) lar kvant mexanikasidagi g‘alayonlanish nazariyasining muhim formulalaridir.

3.Ikkinchi tartibli tuzatmalarni hisoblash tenglamalarini keltirib chiqaraylik. Buning uchun yana bir marta (8.10) da keltirilgan tenglamalarning ikkala tomonidagi λ^2 qatnashgan hadlar oldidagi koeffitsiyentlarini tenglashtirilsa,

$$(E^{(0)} - E_m^0)c_m^{(2)} + E^{(1)}c_m^{(1)} + E^{(2)}c_m^{(0)} = \sum w_{mn}c_n^{(1)}$$

hosil bo‘ladi. (8.14) va (8.15) – birinchi yaqinlashishni hisoblash formulalarini olingan tenglamaga qo‘yib, *k* sath uchun quyidagi ikkinchi yaqinlashishda hosil bo‘lgan tuzatmalarni hisoblash formulalri olinadi:

$$(E_m^0 - E_k^0)c_m^{(2)} + (w_{mm} - w_{kk})\frac{w_{mk}}{E_k^0 - E_m^0} - E^{(2)}\delta_{mk} +$$
$$+\sum_{n\neq k} w_{mn}\frac{w_{nk}}{E_k^0 - E_n^0} = 0. \tag{8.18}$$

Ushbu (8.18) tenglamadan *m=k* bo‘lgan holdan ikkinchi yaqinlashishda E_k^0 energetik sathga tuzatmani topish mumkin, ya’ni:

$$E^{(2)} = \sum_{n\neq k}\frac{w_{kn}w_{nk}}{E_k^0 - E_n^0} \tag{8.19}$$

$m\neq k$ bo‘lgan hollar uchun esa $c_m^{(2)}$ - tuzatmalarni aniqlash mumkin:

$$c_m^{(2)} = \sum\frac{w_{mn}w_{nk}}{\left(E_k^0 - E_n^0\right)\left(E_k^0 - E_m^0\right)} - \frac{w_{kk}w_{mk}}{\left(E_m^0 - E_k^0\right)^2}, \quad m\neq k, n\neq k. \tag{8.20}$$

Yuqoridagi hisoblashlarni davom ettirib uchinchi, to‘rtinchi va boshqa yuqoriroq tartibli yaqinlashishlarni hisoblovchi formulalarni keltirib chiqarish mumkin. Bu darslikda ikkinchi yaqinlashish bilangina chega-ralanamiz. Shunday qilib, tekshirilayotgan sistemaning ikkinchi yaqin-lashishni hisobga olgan holda *k*-sathdagi energiya va xususiy funksiya-larining qiymatlarini hisoblash formulalari quyidagi ko‘rinishga keladi:

$$E_k = E_k^0 + \lambda w_{kk} + \lambda^2\sum_{n\neq k}\frac{w_{kn}w_{nk}}{E_k^0 - E_n^0}. \tag{8.21}$$

3-jadval

Element		K	L		M			N		Asosiy term	Ioni-zatsiya potensiali
		1,0 1 s	2,0 2 s	2,1 2p	3,0 3s	3,1 3p	3,2 3d	4,0 4s	4,1 4p		
H	1	1	–	–	–	–	–	–	–	$^2S_{1/2}$	13,595
He	2	2	–	–	–	–	–	–	–	$^1S_0$	24,58
Li	3	2	1	–	–	–	–	–	–	$^2S_{1/2}$	5,39
Be	4	2	2	–	–	–	–	–	–	$^1S_0$	9,32
B	5	2	2	1	–	–	–	–	–	$^2P_{1/2}$	8,296
C	6	2	2	2	–	–	–	–	–	$^3P_0$	11,264
N	7	2	2	3	–	–	–	–	–	$^4S_{3/2}$	14,54
O	8	2	2	4	–	–	–	–	–	$^3P_2$	13,614
F	9	2	2	5	–	–	–	–	–	$^2P_{3/2}$	17,418
Ne	10	2	2	6	–	–	–	–	–	$^1S_0$	21,559
Na	11	Neon konfigu-ratsiyasi			1	–	–	–	–	$^2S_{1/2}$	5,138
Mg	12				2	–	–	–	–	$^1S_0$	7,644
Al	13				2	1	–	–	–	$^2P_{1/2}$	5,984
Si	14				2	2	–	–	–	$^3P_0$	8,149
P	15				2	3	–	–	–	$^4S_{3/2}$	10,55
S	16				2	4	–	–	–	$^3P_2$	10,357
Cl	17				2	5	–	–	–	$^2P_{3/2}$	13,01
Ar	18				2	6	–	–	–	$^1S_0$	15,755
K	19	Neon konfiguratsiyasi					–	1	–	$^2S_{1/2}$	4,339
Ca	20						–	2	–	$^1S_0$	6,111
Sc	21						1	2	–	$^2D_{3/2}$	6,56
Ti	22						2	2	–	$^3F_2$	6,83
V	23						3	2	–	$^4F_{3/2}$	6,74
Cr	24						4	1	–	$^7F_3$	6,764
Mn	25						5	2	–	$^6S_{3/2}$	7,432
Fe	26						6	2	–	$^5D_3$	7,90
Co	27						7	2	–	$^4F_{1/2}$	7,86
Ni	28						8	2	–	$^3F_1$	7,633
Cu	29						10	1	–	$^2S_{1/2}$	7,724
Zn	30						10	2	–	$^1S_0$	9,391
Ga	31						10	2	1	$^2P_{1/2}$	6,00
Ge	32						10	2	2	$^3P_0$	7,38
As	33						10	2	3	$^4S_{3/2}$	9,81
Se	34						10	2	4	$^2P_3$	9,75
Br	35						10	2	5	$^2P_{3/2}$	11,84
Kr	36						10	2	6	$^1S_0$	13,891

Element		Ichki qobiqchalar konfiguratsiyalari	N		O			P	Asosiy term	Ionizatsiya potensiali eV
			4,2 4d	4,3 4f	5,0 5s	5,1 5p	5,2 5d	6,0 6s		
Rb	37	Kripton konfi-gurat-siyasi	–	–	1	–	–	–	$^2S_{1/2}$	4,176
Sr	38		–	–	2	–	–	–	$^1S_0$	5,692
Y	39		1	–	2	–	–	–	$^2D_{3/2}$	6,38
Zr	40		2	–	2	–	–	–	$^3F_2$	6,835
Nb	41		4	–	1	–	–	–	$^6D_{1/2}$	6,88
Mo	42		5	–	1	–	–	–	$^7S_3$	7,131
Tc	43		6	–	1	–	–	–	$^6S_{3/2}$	7,23
Ru	44		7	–	1	–	–	–	$^5F_5$	7,36
Rh	45		8	–	1	–	–	–	$^4F_{1/2}$	7,46
Pd	46		10	–	–	–	–	–	$^1S_0$	8,33
Ag	47	Palladiy konfigu-ratsiyasi		–	1	–	–	–	$^2S_{1/2}$	7,574
Cd	48			–	2	–	–	–	$^1S_0$	8,991
In	49			–	2	1	–	–	$^2P_{1/3}$	5,785
Sn	50			–	2	2	–	–	$^3P_0$	7,332
Sb	51			–	2	3	–	–	$^4P_{3/2}$	8,61
Te	52			–	2	4	–	–	$^3P_2$	9,01
L	53			–	2	5	–	–	$^2P_{3/2}$	10,44
Xe	54			–	2	6	–	–	$^1S_0$	12,127
Cs	55	1 s dan 4 d gacha bo‘lgan qobiqchalar 6 ta elektronga ega		–	5 s va 5p qobiqchalar 8 ta elektronga ega		–	1	$^2S_{1/3}$	3,808
Ba	56			–			–	2	$^1S_0$	5,810
La	57			–			1	2	$^2D_{3/2}$	5,61
Ce	58			2			–	2	^2H	6,91
Pr	59			3			–	2	$4I$	5,76
Nd	60			4			–	2	^5I	6,31
Pm	61			5			–	2	^6H	–
Sm	62			6			–	2	^7F	5,6
Eu	63			7			–	2	^8S	5,67
Gd	64			7			1	2	^9D	6,16
Tb	65			9			–	2	^6H	6,74
Dy	66			10			–	2	$^5I_0$	6,82
Ho	67			11			–	2	^4I	–
Er	68			12			–	2	^3H	6,08
Tm	69			13			–	2	^2F	5,81
Yb	70			14			–	2	^1S	6,2
Lu	71			14			1	2	$^3D_{3/2}$	6,15

ko‘rinishda bo‘ladi, bunda

$$w_{mn} = \int \psi_m^{0*} \hat{w} \psi_n^0 dx \qquad (8.6)$$

bo‘lib, energetik tasavvurdagi g‘alayonlanish energiyasining matrik elementini ifodalaydi. Endi (8.4) ning o‘ng tomoni hisoblab chiqiladi:

$$\sum_n E\psi_m^{0*}(x)c_n\psi_n^0(x) = E\sum_n c_n \int \psi_m^{0*}(x)\psi_n^0(x)dx = E\sum_n c_n\delta_{mn} = Ec_m.$$

Yuqoridagilarni hisobga olib, (8.4) tenglamani quyidagicha o‘zgartirish mumkin:

$$\left(E - E_m^0\right)c_m = \lambda\sum_n w_{mn}c_n. \qquad (8.7)$$

Hosil bo‘lgan (8.7) tenglamadan to‘lqin funksiyasiga va energiya qiymatiga tuzatmalarni aniqlash maqsadida c_m xususiy funksiyalarni va E xususiy qiymatlarini λ parametr darajalari bo‘yicha qatorga yoyilmasini olish kerak:

$$c_m = c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} + ... \qquad (8.8)$$

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + ... \qquad (8.9)$$

Ushbu paragrafda aynish mavjud bo‘lmagan holatni tekshirib chiqiladi, ya’ni (8.2) tenglama bilan ifodalangan va ga’layonlanmagan holatga tegishli bo‘lgan E_n^0 energiyaning xususiy qiymati bitta ψ_n^0 xususiy funksiyaga mos kelishi ko‘rib chiqiladi. (8.8) va (8.9) larni (8.7) tenglamaga qo‘yilsa, quyidagi tenglamalar sistemasi hosil bo‘ladi:

$$\left(E^{(0)} - E_m^0 + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + ...\right)\left(c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} + ...\right) =$$

$$= \lambda\sum_n w_{mn}\left(c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} + ...\right) \qquad (8.10)$$

Ushbu tenglikdan foydalanib, hamda bir xil darajalari bo‘lgan hadlarni yig‘ib chiqib, quyidagi tenglamalarni olish mumkin:

1.(8.10) tenglamaning ikkala tomonidagi λ^0 oldidagi koeffitsiyentlar tenglashtirilsa, biz nolinchi yaqinlashish uchun quyidagi tenglikni hosil qilish mumkin:

$$(E^{(0)} - E_m^{(0)})c_m^{(0)} = 0, \qquad m = 1,2,3,\dots,k,\dots \qquad (8.11)$$

Ushbu ifoda $\hat{H}_0$ - g‘alayonlanmagan sistemaning tenglamasi bo‘ladi. Bizni $\hat{W}$ g‘alayon ta’siri natijasida E_k^0 energetik sath bilan bir qatorda ψ_k^0 to‘lqin funksiyasining o‘zgarishi ham qiziqtiradi. Demak, (8.11)

dagi yechimlar ichidan biz k –tartib raqamiga mos keluvchi yechimlar ajratib olinadi:

$$E^{(0)} = E_k^{(0)}, \quad c_m^{(0)} = \delta_{mk} \qquad (8.12)$$

bu yerda faqat bitta koeffitsiyent, ya’ni $c_k^{(0)} = 1$ bo‘ladi, qolgan hamma koeffitsiyentlar - $c_m^{(0)}$ lar esa nolga teng bo‘ladi: $c_m^{(0)} = 0$. Olingan (8.12) yechim nolinchi yaqinlashishdagi yechim bo‘ladi va shu yechimdan foydalangan holda keyingi, ya’ni birinchi yaqinlashishdagi yechimni olish mumkin.

2.(8.10) tenglamalarning ikkala tomonidagi λ^1 qatnashgan hadlarning oldidagi koeffitsiyentlari tenglashtirilsa, quyidagi tenglamani hosil qilish mumkin:

$$\left(E^{(0)} - E_m^{(0)}\right)c_m^{(1)} + E^{(1)}c_m^{(0)} = \sum_n w_{mn}c_n^{(0)}.$$

Olingan tenglamani k-sathni tekshirishga qo‘llaniladi. (8.12) lardan foydalanib hamda $\sum_n w_{mn}c_n^{(0)}$ tenglikdandan $m=n$ bo‘lgan hadni ajratib olib, quyidagi ifodaga kelinadi:

$$\left(w_{mm} - E^{(1)}\right)\delta_{mk} + \left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}\right)c_m^{(1)} + \sum_{m\neq n} w_{mn}\delta_{nk} = 0 \qquad (8.13)$$

Avvalo, ushbu (8.13) tenglamadan $m=k$ tenglama ajratib olinadi va

$$w_{kk} - E^{(1)} = 0$$

tenglama hosil bo‘ladi. Demak, birinchi yaqinlashishdagi E_k^0 energetik sathga tuzatmani topgan bo‘lamiz:

$$E^{(1)} = w_{kk}. \qquad (8.14)$$

Keyingi bosqichda (8.13) dagi $m\neq k$ bo‘lgan boshqa hadlarni ajratib olib, quyidagi tenglik hosil bo‘ladi:

$$\left(E_m^{(0)} - E_k^{(0)}\right)c_m^{(1)} + w_{mk} = 0.$$

Bu tenglamadan birinchi yaqinlashishdagi $c_m^{(1)}$ tuzatmani aniqlash mumkin:

$$c_m^{(1)} = \frac{w_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}, \qquad m \neq k. \qquad (8.15)$$

Demak, ”x-tasavvurda” birinchi tartibli yaqinlashishda, tuzatmalarni hisobga olgan holda, k sathning energetik qiymati va xususiy funksiyalari quyidagi formulalar orqali aniqlanadi:

dan foydalangan holda, $\left(x^3\right)_{mn}$ matritsa elementlarini matritsalarni ko'paytirish qoidasiga binoan bevosita topish mumkin:

$$\left(x^3\right)_{kn}=\sum_l x_{kl}\left(x^2\right)_{ln}=\sum_l x_{kl}\sum_m x_{lm}x_{mn}=\sum_l\sum_m x_{kl}x_{lm}x_{mn}. \tag{8.31}$$

Ushbu (8.31) formulaga (8.30) dan x_{kl}, x_{lm} va x_{mn} ifodalari qo'yilsa, quyidagi natijaga kelinadi:

$$\left(x^3\right)_{kn}=\left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sum_l\sum_m\left(\sqrt{\frac{k}{2}}\delta_{k-1,l}+\sqrt{\frac{k+1}{2}}\delta_{k+1,l}\right)\times$$
$$\times\left(\sqrt{\frac{l}{2}}\delta_{l-1,m}+\sqrt{\frac{l+1}{2}}\delta_{l+1,m}\right)\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{m-1,n}+\sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{m+1,n}\right) \tag{8.32}$$

(8.32) da Kroneker belgisi qatnashmaganligi sababli l va m lar bo'yicha qatorlarning yig'indisini hisoblash yetarli bo'ladi va natijada, $\left(x^3\right)_{mn}$ ning noldan farqli faqatgina to'rtta elementi uchun quyidagi ifodalarni olish munkin:

$$\begin{aligned}
\left(x^3\right)_{k-3,n}&=x_0^3\sqrt{\frac{k(k-1)(k-2)}{8}}\delta_{k-3,n},\\
\left(x^3\right)_{k-1,n}&=x_0^3\sqrt{\frac{9}{8}k^3}\delta_{k-1,n},\\
\left(x^3\right)_{k+1,n}&=x_0^3\sqrt{\frac{9}{8}(k+1)^3}\delta_{k+1,n},\\
\left(x^3\right)_{k+3,n}&=x_0^3\sqrt{\frac{k(k+1)(k+2)(k+3)}{8}}\delta_{k+3,n}.
\end{aligned} \tag{8.33}$$

Bu matritsalarda dioganal elementlar yo'q. Shu sababli (8.21) tenglikning o'ng tarafidagi ifodaning ikkinchi hadi aynan nolga aylanadi, ya'ni g'alayonlanish gamiltonianidagi αx^3 had birinchi yaqinlashishda hech qanday tuzatma bermaydi:

$$\left(x^3\right)_{kk}=0 \tag{8.34}$$

Ikkinchi yaqinlashishda beradigan tuzatmasini hisoblashda, (8.21) tenglikning o'ng tarafidagi ifodaning uchinchi hadini hisoblashda, n bo'yicha yig'indida faqat to'rtta had qoladi, ya'ni $n=k\pm3$ va $n=k\pm1$. Bundan tashqari $\left(x^3\right)_{kn}=\left(x^3\right)_{nk}$ bajarilishini hisobga olsak, quyidagi formulani olinadi:

Yuqoridagi keltirilgan integrallarni hisoblab bo'lingach, (8.57) dagi tenglamalar sistemasini oshkor ravishda yozish mumkin:

$$\begin{aligned}
\left(E_2^0-E\right)c_1+W_{12}c_2&=0,\\
\left(E_2^0-E\right)c_2+W_{21}c_1&=0,\\
\left(E_2^0-E\right)c_3&=0,\\
\left(E_2^0-E\right)c_4&=0.
\end{aligned} \tag{8.62}$$

(8.45) determinantning ko'rinishi bu holda quyidagicha bo'ladi:

$$\Delta_2(E)=\begin{vmatrix}E_2^0-E & W_{12} & 0 & 0\\ W_{21} & E_2^0-E & 0 & 0\\ 0 & 0 & E_2^0-E & 0\\ 0 & 0 & 0 & E_2^0-E\end{vmatrix}$$

Ushbu determinant hisoblansa,

$$\left[\left(E_2^0-E\right)^2-W_{12}^2\right]\left(E_2^0-E\right)\left(E_2^0-E\right)=0 \tag{8.63}$$

ifodaga ega bo'linadi va (8.63) tenglamaning to'rtta ildizi quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

$$E_1=E_2^0+W_{12},\ E_2=E_2^0-W_{12},\ E_3=E_2^0,\ E_4=E_2^0. \tag{8.64}$$

(8.64) ifoda g'alayonlangan sathlarning energiya qiymatlarini ifodalaydi. Natijada $E_2^0\to E_1^0$ tegishli bo'lgan bitta spektral chiziq o'rniga

$$E_4\to E_1^0,\ E_3\to E_1^0,\ E_2\to E_1^0,\ E_1\to E_1^0 \tag{8.65}$$

uchta o'tishlarga mos bo'lgan uchta spektral chiziqqa ega bo'linadi. Shu bilan elektr maydonida spektral chiziqlarning ajralish hodisasining mavjudligi ko'rsatildi. (8.64) tenglamadan ayonki, $E_3=E_4$ teng, ya'ni bu holda aynish holi to'la olib tashlanmagan, E_2^0 energetik sathi mumkin to'rtta sath o'rniga faqat uchta sathga ajraladi. Endi E_1, E_2, E_3 va E_4 sathlarga tegishli bo'lgan nolinchi yaqinlashishdagi φ to'lqin funksiyalarning ko'rinishlarini aniqlab chiqaylik. Shu maqsadda (8.62) tenglamalar sistemasida c_α amplitudalarni topish zarur. (8.62) tenglamaga $E=E_3=E_2^0$ va $E=E_4=E_2^0$ lar qo'yilsa, $c_1=c_2=0$ va

$c_3\neq0,\ c_4\neq0$ ekanligi kelib chiqadi. Demak, ajralmaydigan sathlarning umumiy holatini ifodalovchi funksiyaning ko'rinishi quyidagicha bo'ladi:

$$\varphi=c_3\psi_3^0+c_4\psi_4^0,\ E=E_2^0. \tag{8.66}$$

Agarda (8.62) tenglamaga $E=E_1=E_2^0+W_{12}$ qiymati qo'yilsa, $c_1=c_2$ va $c_3=c_4=0$ natijani olish mumkin. Demak, E_1 energetik sathga

$$\varphi_1=\frac{1}{\sqrt2}\left(\psi_1^0+\psi_2^0\right),\ E_1=E_2^0+W_{12} \tag{8.67}$$

to'lqin funksiyalar mos keladi. Shunga o'xshash $E=E_2=E_2^0-W_{12}$ sath uchun to'lqin funksiyasining ko'rinishini osongina topish mumkin:

$$\varphi_2=\frac{1}{\sqrt2}\left(\psi_1^0-\psi_2^0\right),\ E_2=E_2^0-W_{12} \tag{8.68}$$

bu yerda $c_3=c_4=0$ va $c_1=-c_2$ teng bo'ladi. Shunday qilib, E - elektr maydon mavjudligini hisobga olgan holda statsionar holatlarning to'lqin funksiyalari quyidagicha bo'ladi: $\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3=\varphi_3^0,\ \ \varphi_4=\varphi_4^0$. Demak, ushbu yangi tasavvurda W g'alayonlangan matritsaning ko'rinishi

$$W'_{\alpha\beta}=eE\int\varphi_\alpha^* z\varphi_\beta dv \tag{8.69}$$

bo'lib, uni quyidagi dioganal matritsalar orqali tasvirlash mumkin:

$$W'=\begin{pmatrix}3eaE & 0 & 0 & 0\\ 0 & -3eaE & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix} \tag{8.70}$$

Vodorod atomida hosil bo'ladigan Shtark effektidan olingan natijalarni quyidagicha tavsiflash mumkin. Elektr maydon ta'sirida paydo bo'ladigan uyg'ongan holatlar markaziy simmetriyaga ega bo'la olmaydi va vodorod atomida nolga teng bo'lmagan elektr dipol momenti vujudga keladi. E_1 va E_2 sathlarning siljishi φ_1 va φ_2 holatlarda dipol momentining mos ravishda $3eaE$ va $-3eaE$ ga teng ekanligi bilan aniqlanadi, birinchi holda dipol yo'nalishi tashqi maydon yo'nalishiga qarama-qarshi yo'nalgan, ikkinchi holda esa u maydon yo'nalishi bo'yicha yo'nalgan bo'ladi. E_3 va E_4 sathlar esa umuman ajralmaydi, chunki bu φ_3 va φ_4 holatlarda elektr dipoli nolga teng bo'ladi.

$$c_{km}=c_{km}^{(1)}=-\frac{i}{\hbar}\int W_{mk}e^{i\omega_{mk}t}dt \qquad (k\neq m)$$
$$c_{kk}=1+c_{kk}^{(1)}=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}W_{kk}dt \tag{8.91}$$

(8.91) dagi integral chegaralari shunday tanlab olinganki, bunda $t\to-\infty$ da hamma $c_{km}^{(1)}$ koeffitsiyentlar nolga aylanadi.

8.6. Vaqtga bog'liq bo'lgan g'alayonlanishning ta'siri natijasidagi o'tishlarning ehtimolliklari

Ushbu paragrafda $W(x,t)$ vaqtga bog'liq bo'lgan g'alayonlanishning ta'siri natijasida tekshirilayotgan sistemaning E_n kvant holatidan E_m kvant holatiga o'tishi ehtimolligi hisoblab chiqiladi. G'alayonlanish $t<0$ da va $t>T$ vaqt momentlarida nolga teng bo'lsin. U holda $t=T$ vaqt momentida birinchi yaqinlashishdagi $c_m^{(1)}(t)$ amplituda uchun (8.88) formuladan quyidagi formulaga ega bo'linadi:

$$c_m^{(1)}=\frac{1}{i\hbar}\int_0^T W_{mn}(\tau)e^{i\omega_{mn}\tau}d\tau=\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}W_{mn}(\tau)e^{i\omega_{mn}\tau}d\tau,\ \ m\neq n. \tag{8.92}$$

Olingan (8.92) dagi $c_m^{(1)}$ ifodasining ma'nosini aniqlab chiqaylik. Berilgan $W(x,t)$ g'alayonlanishni Fur'ye integraliga yoyish natijasida

$$W(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}W(x,\omega)e^{-\omega t}d\omega \tag{8.93}$$

ifodaga ega bo'linadi. Fur'ye teoremasiga asosan quyidagi tenglik o'rinli bo'ladi:

$$W(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}W(x,\omega)e^{i\omega t}d\omega. \tag{8.94}$$

U holda (8.91) dagi g'alayonlanishning matrik elementi, (8.92) ni hisobga olgan holda, quyidagicha yozish mumkin:

$$\sum_{n\neq k}\frac{\left(x^3\right)_{kn}\left(x^3\right)_{nk}}{E^0_{\ k}-E^0_{\ n}}=\left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^3\times$$

$$\times\left[\frac{1}{3}\frac{k(k-1)(k-2)}{8}+\frac{9}{8}k^3-\frac{9}{8}(k+1)^3-\frac{1}{3}\frac{(k+1)(k+2)(k+3)}{8}\right]\frac{1}{\hbar\omega} \qquad (8.35)$$

chunki,

$$E^0_{k-3}-E^0_n=3\hbar\omega,\ \ E^0_{\ k+3}-E^0_{\ n}=-3\hbar\omega.$$

Shunday qilib, ikkinchi yaqinlashishdagi *k*-energetik sathga beradigan tuzatma

$$E^{(2)}=-\frac{15}{4}\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\left(k^2+k+\frac{11}{30}\right) \qquad (8.36)$$

bo‘ladi. Demak, (8.29) formulaga (8.27), (8,34) va (8.36) ifodalar qo‘yilsa, angarmonik ossillyatorning $\hat{W}=\alpha x^3$ g‘alayonlanish hadini hisobga olgan holda, kvant sathlarining enrgiyasini hisoblash uchun quyidagi formula hosil qilinadi:

$$E_k=\hbar\omega_0\left(k+\frac{1}{2}\right)-\frac{15}{4}\frac{\alpha^2}{\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\left(k^2+k+\frac{11}{30}\right). \qquad (8.37)$$

8.3. Aynish mavjud bo‘lgan holda g‘alayonlanish nazariyasi

Endi $\hat{H}_0$ g‘alayonlanmagan operatorning xususiy qiymatlari aynigan holini ko‘rib chiqaylik, ya’ni bitta energiyaning xususiy qiymatiga bir nechta xususiy funksiyalar mos kelsin. Boshqacha aytganda, $E=E^0_n$ g‘alayonlanmagan sistemadagi xususiy qiymat orqali berilgan holat, $\psi^0_{n_1},\psi^0_{n_2},.....\psi^0_{n_s}$ o‘zaro ortogonal bo‘lgan funksiyalar, yoki ularning ixtiyoriy chiziqli kombinatsiyasi orqali ifodalansin. G‘alayolanishni hisobga olgan holda $\hat{H}_0$ operatorning xususiy qiymatlari aynimaydi, yoki ularning aynish darajasi kamayadi. Aynish mavjud bo‘lganida g‘alayonlanish yo‘qoladi, ya’ni aynishning ta’siri natijasida energiya sathi bir nechta bir-biriga yaqin joylashgan sathlarga ajraladi. Ushbu hosil bo‘lgan sathlarning har biriga o‘zining yagona to‘lqin funksiyasi mos keladi.

Endi masalani hal qilish uchun (8.7) tenglamaga murojaat qilinadi, lekin uni bir oz o‘zimizning hol uchun moslashtirishimiz kerak bo‘ladi.

$$(E^0_2+W_{\beta\beta}-E)c_\beta+\sum_{\alpha\neq\beta}^{4}W_{\beta\alpha}c_\alpha=0,\qquad \alpha,\beta=1,2,3,4 \qquad (8.57)$$

$$W_{\beta\alpha}=\int\psi^{0*}_\beta eE z\psi^0_\alpha dv. \qquad (8.58)$$

Avvalo (8.57) tenglamada qatnashayotgan matrik elementlar hisoblab chiqiladi. (8.55) dagi funksiyalar sferik koordinatalar sistemasida ifodalanganligi sababli (8.58) dagi matrik elementlarni integrallashni sferik koordinatalar sistemasida amalga oshirish maqsadga muvoffiqdir. (8.58) dagi ikkita W_{12} va W_{21} noldan farqli integrallardan tashqari barcha integrallar nolga teng bo‘ladi. Misol tariqasida W_{11} matrik elementlari hisoblab chiqiladi. $z=r\cos\theta$ ekanligi hisobga olinsa,

$$W_{11}=eE\int\psi_1^{0*}r\cos\theta\psi_1^0r^2\sin\theta drd\theta d\varphi=$$

$$=eE\frac{1}{\sqrt{2a^3}}\frac{1}{\sqrt{2a^3}}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{2a}}r^2(1-\frac{r}{2a})^2dr\int_0^\pi\cos\theta\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi=0 \qquad (8.59)$$

bo‘ladi, chunki

$$\int_0^\pi\cos\theta\sin\theta d\theta=0.$$

Endi nolga teng bo‘lmagan W_{12} va W_{21} matrik elementi hisoblab chiqiladi:

$$W_{12}=W_{21}=eE\int f(r)F(r)z^2dv=$$

$$=\frac{eE\sqrt{3}}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{12}}\frac{1}{a^3}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}e^{-\frac{r}{2a}}(1-\frac{r}{2a})e^{-\frac{r}{2a}}\frac{1}{r}\frac{r}{2a}z^2r^2\sin\theta drd\theta d\varphi. \qquad (8.60)$$

Bu integralni hisoblashda quyidagilardan foydalaniladi:

$$\int_0^{2\pi}d\varphi=2\pi,$$

$$\int_0^\pi z^2\sin\theta d\theta=r^2\int_0^\pi\cos^2\theta\sin\theta d\theta=\frac{2}{3}r^2,$$

hamda $\gamma=\frac{r}{a}$ - yangi o‘zgaruvchi kiritib, (8.60) integralning natijasi olinadi:

$$W_{12}=W_{21}=\frac{eEa}{12}\int_0^\infty e^{-\gamma}(1-\frac{\gamma}{2})\gamma^4d\gamma=-3eEa \qquad (8.61)$$

Shunday qilib, vodorod atomidagi chiziqli Shtark effektini paydo bo‘lishi unga tegishli bo‘lgan uyg‘ongan holatlarda elektr dipol momentining vujudga kelishi bilan chambarchas bog‘liqdir.

8.5. Vaqtga bog‘liq bo‘lgan g‘alayonlanish nazariyasi

Kvant sistemalariga tashqaridan ta’sir qilish natijasida statsionar bo‘lmagan jarayonlarning paydo bo‘lishi amaliy jihatdan katta ahamiyatga egadir. Masalan, tashqi o‘zgaruvchan elektromagnit maydon ta’sirida atomlarda yorug‘likning yutilishi yoki nurlanishini bunday jarayonlarning misoli sifatida keltirish mumkin. Ushbu jarayonlarning matematik nazariyasi vaqtga oshkor ravishda bog‘liq bo‘lgan g‘alayonlanish nazariyasi asosida yaratilgan.

Mazkur bobning avvalgi paragraflarida vaqtga oshkor ravishda bog‘liq bo‘lmagan g‘alayonlanish nazariyasi ko‘rib chiqilgan edi va bu holda g‘alayonlanish statsionar holatlarni o‘zgarishiga sabab deb qaraldi. Vaqtga oshkor ravishda bog‘liq bo‘lmagan g‘alayonlanish nazariyasida sistema holatlari energiyasini ifodalovchi xususiy qiymatlarga tuzatmalarni kiritish haqida gap yuritilgan edi, ya’ni energiyaning xususiy qiymatlariga tuzatmalarni hisoblash imkoniyati yaratildi.

Statsionar bo‘lmagan g‘alayonlanish nazariyasida g‘alayonlanishni paydo bo‘lish jarayonini tekshirib chiqish mumkin. Bu holda sistemadagi g‘alayonlanishni o‘z ichiga qamrab olgan to‘la gamiltonian vaqtga bog‘liq bo‘ladi, natijada energiya saqlanmaydi va stasionar holatlar mavjud bo‘lmaydi. Umuman o‘lganda bu holda sistemaning energetik sathlari o‘zgarmaydi, sistema vaqtga bog‘liq bo‘lgan g‘alayonlanish ta’sirida muayyan stasionar holatlarda qolmasdan, biror bir stasionar holatdan boshqasiga o‘tish jarayonini sodir etadi. Demak, bu holda energiyaning xususiy qiymatlariga tuzatmalarni topish masalasi paydo bo‘lmaydi, bu holda masala quyidagicha ifodalanadi: tekshirilayotgan sistemaning to‘lqin funksiyalarini g‘alayonlanmagan sistemaning statsionar holatlari to‘lqin funksiyalari bo‘yicha taqriban hisoblashdan iboratdir.

Statsionar bo‘lmagan jarayonlar uchun sistemaning gamilton operatorini

$c_k^{(0)}=1,\ c_n^{(0)}=0$ agarda $n\neq m$ bo‘lsa, chunki ma’lumki $t=0$ vaqt momentida sistema E_k energiyaga teng bo‘lgan holatda joylashgan edi (8.83 ga qarang). Shunday qilib, nolinchi yaqinlashishida sistemaning holati o‘zgarmaydi.

Birinchi yaqinlashishdagi tenglamalar sistemasi (8.87) formuladagi ikkinchi qator orqali ifodalangan bo‘lib, uni

$$i\hbar\frac{dc_m^{(1)}}{dt}=W_{mk}e^{i\omega_{mk}t} \qquad (8.88)$$

ko‘rinishda yozish mumkin. Ajraluvchi o‘zgaruvchilardan tashkil topgan bu tenglamalarni integrallash natijasida ushbu

$$c_m^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int W_{mk}e^{i\omega_{mk}t}dt+Const \qquad (8.89)$$

yechimga ega bo‘linadi. Yuqoridagi hisoblashlarga o‘xshash hisoblashlarni davom ettirilsa, keyingi yaqinlashishlardagi koeffitsiyentlarlarni ham aniqlash mumkin.

Hisoblashlar natijasida (8.89) formula orqali olingan $\left|c_m^{(1)}(t)\right|^2$ kattalik birinchi yaqinlashishda $t>0$ vaqt momentida sistemani m holatda topish ehtimolligini aniqlab beradi, agarda boshlanish $t=0$ vaqt momentida sistema k holatda joylashgan bo‘lsa.

Masalan, hisoblashlar natijasida ikkinchi tartibdagi yaqinlashishda izlanayotgan $c_m^{(2)}$ koeffitsiyenti uchun yechim quyidagi ko‘rinishda bo‘ladi:

$$c_m^{(2)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\sum_k\int W_{mk}e^{i\omega_{mk}t}c_k^{(1)}(t)dt \qquad (8.90)$$

(8.89) va (8.90) integrallarda chegaralarni tanlanishi, qo‘yilgan konkret masala shartlariga bog‘liqdir. Masalan, g‘alayonlanish muayyan chekli vaqt oralig‘idagina ta’sir qilishi mumkin. G‘alayonlanish ta’sir qilishdan oldin sistema diskret spektrning k holatda joylashgan bo‘lsin. Keyingi vaqt momentida sistemaning holati

$$\psi_m(x,t)=\sum_k c_{km}(t)\psi_k(t)$$

funksiya orqali ifodalanib, birinchi yaqinlashishdagi koeffitsiyentlarning ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

Aynish mavjud bo‘lgan holda operatorning xususiy funksyalari ikkita, ya’ni n va α, indekslarga bog‘liq bo‘ladi. Demak, bitta n indeks o‘rniga, ikkita n va α indekslarni ishlatish kerak. U holda

$$\psi(x)=\sum_{n,\alpha}c_{n\alpha}\psi^{0}_{n\alpha}(x) \tag{8.38}$$

bo‘ladi va (8.7) tenglama

$$\left(E-E^{0}_{m}\right)c_{m\beta}=\sum_{n}W_{m\beta,n\alpha}c_{n\alpha} \tag{8.39}$$

ko‘rinishga keladi. Bunda

$$W_{m\beta,n\alpha}=\int\psi^{0*}_{m\beta}\hat{W}\psi^{0}_{n\alpha}dx \tag{8.40}$$

g‘alayonlangan energiyaning matrik elementi bo‘lib, aynigan holatlarni ham o‘z ichiga qamrab olgan.

Bizni qiziqtirayotgan hol bu E^{0}_{k} sathga yaqin joylashgan g‘alayonlangan sistemaning E_k kvant sathini va unga tegishli bo‘lgan $\psi_{k\alpha}(x)$ xususiy funksyalarni aniqlashdan iborat. Aynish mavjud bo‘lgan holda nolinchi yaqinlashishda (8.39) tenglamadan

$$\left(E^{0}_{k}-E\right)c_{k\beta}=0 \tag{8.41}$$

ifoda kelib chiqadi va bundan $E=E^{0}_{k}$ da $c_{k\beta}\neq 0$ degan hulosaga kelinadi. Shuning uchun bu holda

$$\left.\begin{aligned}c_{k\alpha}&=c^{(0)}_{k\alpha}(\neq 0),\quad \alpha=1,2,......,f_k\\ c^{(0)}_{n\alpha}&=0\ \ (n\neq k)\end{aligned}\right\} \tag{8.42}$$

bo‘ladi. Nolinchi yaqinlashishda (8.39) tenglamalardan $c_{k\alpha}$ nolga teng bo‘lmagan hadlar tanlab olinadi, ya’ni

$$\left(E^{0}_{k}-E\right)c^{(0)}_{k\beta}=\sum_{\alpha,\beta}W_{k\beta,k\alpha}c^{(0)}_{k\alpha} \tag{8.43}$$

tenglik ajratib olinadi. $\alpha=\beta$ hadlarni alohida ajratib, tenglamaning chap tomoniga o‘tkazilsa va k indeks vaqtincha yozilmasa, u holda quyidagi tenglamaga kelinadi:

$$(E^{0}_{k}+W_{\beta\beta}-E)c^{(0)}_{\beta}+\sum_{\alpha\neq\beta}^{f_k}W_{\beta\alpha}c^{(0)}_{\alpha}=0. \tag{8.44}$$

Biz k indeksni faqat E^{0}_{k} hadda saqlab qoldik, chunki E^{0}_{k} sathga tegishli bo‘lgan guruh f_k holatlardan tashkil topgan. Olingan (8.44) tenglama

$$\psi_{200}=R_{20}(r)Y_{00}$$
$$\psi_{210}=R_{21}(r)Y_{10}$$
$$\psi_{211}=R_{21}(r)Y_{11} \tag{8.52}$$
$$\psi_{21,-1}=R_{21}(r)Y_{1,-1}$$

Demak (2.81) ga binoan

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,Y_{1,\pm1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{\pm i\varphi} \tag{8.53}$$

bo‘ladi. Ikkinchidan, radial funksiyalarni (5.46) formula yordamida osongina hisoblash mumkin:

$$R_{20}=\frac{1}{\sqrt{2a^3}}e^{-\frac{r}{2a}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)$$
$$R_{21}=\frac{1}{\sqrt{6a^3}}e^{-\frac{r}{2a}}\frac{r}{2a} \tag{8.54}$$

bunda a – Bor orbitasining radiusi, $\frac{1}{\sqrt{2a^3}}$ va $\frac{1}{\sqrt{6a^3}}$ esa normallashtiruvchi koeffitsiyentlar. Sferik koordinatalar sistemasi hisobga olinsa, (8.52) dagi funksiyalarni quyidagicha yozish mumkin:

$$\psi_{200}=\psi^{0}_{1}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{20}=f(r),$$
$$\psi_{210}=\psi^{0}_{2}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}\frac{z}{r}=F(r)z,$$
$$\psi_{211}=\psi^{0}_{3}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}\frac{x+iy}{r}=F(r)\frac{x+iy}{r}, \tag{8.55}$$
$$\psi_{21,-1}=\psi^{0}_{4}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}\frac{x-iy}{r}=F(r)\frac{x-iy}{\sqrt{2}}.$$

E^{0}_{2} sathga tegishli umumiy holat esa (8.47) ga binoan

$$\varphi=\sum_{\alpha=1}^{4}C_{\alpha}\psi^{(0)}_{\alpha} \tag{8.56}$$

bo‘ladi. Endi, aynish mavjud bo‘lgan holda g‘alayonlanish nazariyasiga asosan kvant holatlarini va to‘lqin funksiyalarini aniqlash uchun (8.44) dagi tenglamani yechish kerak bo‘ladi. Bu holda tenglamalar quyidagi ko‘rinishga ega bo‘ladi:

$$\hat{H}=\hat{H}_0(x)+\hat{W}(x,t) \tag{8.71}$$

ko‘rinishda yozish mumkin. Bu yerda $\hat{H}_0(x)$ g‘alayonlanish bo‘lmaganida sistemaning to‘la energiya operatori, $\hat{W}(x,t)$ esa tashqaridan ta’sir etuvchi g‘alayonlanish operatorini ifodalaydi, bu operator qandaydir o‘zgaruvchan maydonning potensial energiya operatorini tavsiflaydi. Shunday qilib, g‘alayonlangan operator uchun Shredinger tenglamasining ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left[\hat{H}_0(x)+\hat{W}(x,t)\right]\psi(x,t). \tag{8.72}$$

Hosil bo‘lgan chiziqli differensial tenglamaning yechimi ko‘p hollarda mavjud emas. Vaqtga bog‘liq bo‘lgan g‘alayonlanish nazariyasida bu tenglamaning olinadigan taqribiy yechimlarini $\hat{H}_0(x)$ gamiltonian uchun mavjud bo‘lgan tenglamalarning yechimlari bo‘lganidagina hosil qilish mumkin. Ular g‘alayonlanmagan sistemaning stasionar holatlarini ifodalovchi $\psi^{(0)}_{n}(x,t)$ to‘lqin funksiyalari bo‘lib,

$$i\hbar\frac{\partial\psi^{(0)}_{n}(x,t)}{\partial t}=\hat{H}_0\psi^{(0)}_{n}(x,t) \tag{8.73}$$

tenglamani qanoatlantiradi. (8.73) dagi to‘lqin funksiyani quyidagicha yozish mumkin:

$$\psi^{(0)}_{n}(x,t)=\psi^{(0)}_{n}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E^{0}_{n}t}. \tag{8.74}$$

Endi g‘alayonlangan (8.72) tenglamaning yechimini quyidagi

$$\psi(x,t)=\sum_{n}c_n(t)\psi^{(0)}_{n}(x)e^{-i\frac{E^{0}_{n}}{\hbar}t} \tag{8.75}$$

yig‘indi ko‘rinishida izlanadi, bunda yoyilma koffitsiyentlari vaqtga bog‘liq funksiyalardir va bu juda muhim ahamiyatga ega. Shunday qilib, (8.72) dagi to‘la Shredinger tenglamasini yechish, $\hat{W}(x,t)$ ta’siri natijasida sistemaning topilish ehtimolligini aniqlash mumkin. Demak, sistemaning vaqt o‘tishi bilan rivojlanishini ifodalash uchun $c_n(t)$ koeffitsiyentlarni aniqlash zarur. Bu masalani hal qilish uchun (8.75) yoyilma (8.72) tenglamaga qo‘yiladi va quyidagi munosabat olinadi:

$$\hat{H}=\hat{H}_0(x)+\lambda\hat{W}(x,t) \tag{8.85}$$

orqali yozish mumkin va $c_n(t)$ koeffitsiyentlarni quyidagi yoyilmalar orqali tavsiflash imkoniyati paydo bo‘ladi:

$$c_n=c_n^{(0)}+\lambda c_n^{(1)}+\lambda^2 c_n^{(2)}+\cdots \tag{8.86}$$

Hosil bo‘lgan (8.86) dagi yoyilmalarni (8.81) dagi tenglamalarga qo‘yib, quyidagicha ko‘rinishdagi ifoda olinadi:

$$i\hbar\left[\frac{dc_m^{(0)}}{dt}+\lambda\frac{dc_m^{(1)}}{dt}+\lambda^2\frac{dc_m^{(2)}}{dt}+\cdots\right]=$$
$$=\sum_{n}\left[c_n^{(0)}+\lambda c_n^{(1)}+\lambda^2 c_n^{(2)}+\cdots\right]\lambda W_{mn}e^{i\omega_{mn}t}.$$

Olingan tenglamalarning chap va o‘ng tomondagi λ ning bir xil darajalarga ega bo‘lgan hadlarni tenglashtirilsa, quyidagi tenglamalarni olishga muvaffaq bo‘linadi:

$$\begin{aligned}&\frac{dc_m^{(0)}}{dt}=0\\ &i\hbar\frac{dc_m^{(1)}}{dt}=\sum_{n}c_n^{(1)}W_{mn}e^{i\omega_{mn}t}\\ &i\hbar\frac{dc_m^{(2)}}{dt}=\sum_{n}c_n^{(1)}W_{mn}e^{i\omega_{mn}t}\\ &\vdots\qquad\quad\vdots\qquad\quad\vdots\\ &i\hbar\frac{dc_m^{(s)}}{dt}=\sum_{n}c_n^{(s-1)}W_{mn}e^{i\omega_{mn}t}\end{aligned} \tag{8.87}$$

Hosil bo‘lgan tenglamalar sistemasini navbatma-navbat yechish natijasida izlayotgan $c_m(t)$ koeffitsiyentlarni aniqlash mumkin.

Nolinchi yaqinlashishdagi tenglamalar sistemasining yechimini (8.87) dagi tengliklarning birinchi qatori orqali aniqlash mumkin. Demak, uning yechimlari

$$c_m^{(0)}=\delta_{mn}$$

bilan berilib, $c_m^{(0)}(t)$ kattalik izlayotgan $c_m(t)$ koeffitsiyentlarning boshlang‘ich vaqtdagi qiymatlari bilan mos kelishi kerak. Shuning uchun bu koeffitsiyentlarni quyidagi ko‘rinishda tanlab olinadi:

noldan farqli bo‘lgan yechimlarga ega bo‘lishi uchun (8.44) tenglamaning diskriminanti nolga teng bo‘lishi kerak:

$$\Delta(E)=\begin{vmatrix} E_k^0+W_{11}-E, W_{12}, \dots\dots\dots\dots W_{1f_k} \\ W_{21}, E_k^0+W_{22}-E, \dots\dots\dots\dots W_{2f_k} \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ W_{f_k1}, \dots\dots\dots\dots, E_k^0+W_{f_kf_k}-E \end{vmatrix}=0. \quad (8.45)$$

Hosil bo‘lgan E ga nisbatan tuzilgan f_k darajali algebraik tenglamaning ildlzlari quyidagicha bo‘ladi:

$$E=E_{k1}, E_{k2}, \dots E_{kf} \quad (8.46)$$

$W_{\beta\alpha}$ matrik elementlar kichik bo‘lganligi sababli, bu olingan ildizlar bir-biriga yaqin joylashgan bo‘ladi. Demak, g‘alayonlanish natijasida E_k^0 aynigan holat bir qator bir-biriga yaqin joylashgan sathlardan iborat bo‘ladi va bunda aynish holatlar yo‘qoladi. Agarda (8.46) dagi bir necha ildizlar bir-biriga teng bo‘lsa, u holda aynish qisman yo‘qolgan bo‘ladi.

Nolinchi yaqinlashishdagi aniq to‘lqin funksiyani hosil qilish uchun cheksiz ko‘p chiziqli kombinatsiyalar ichida (8.44) tenglamaga tegishli bo‘lgan $c_{k\alpha}^{(0)}$ koeffitsiyentlar uchun funksiyalar to‘plamini tanlab olish kerak:

$$\psi_{k\beta}^{(0)}(x)=\sum_{\alpha=1}^{f} C_{k\alpha}^{(0)}\psi_{k\alpha}^{(0)}(x). \quad (8.47)$$

Endi (8.45) tenglamani yechib, har bir (8.46) dagi ildizni qiymatini (8.44) dagi tenglamaga qo‘yish kerak. Bu orqali $c_{k\alpha}^{(0)}$ koeffitsiyentlar aniqlangan bo‘ladi va olingan natajani (8.47) qo‘yib, nolinchi yaqinlashishda izlanayotgan to‘lqin funksiyalari aniqlanadi.

8.4. Elektr maydonida vodorod atomining energetek sathlarini ajralishi

Elektr maydon ta’sirida atom spektr chiziqlarining ajralishi Shtark effekti deyiladi. 1913-yilda I. Shtark elektr maydon ta’sirida vodorod atomida Balmer seriyasi chiziqlarining ajralishini kuzatdi. Agar elektr maydon yetarlicha zaif bo‘lsa va bu maydon ta’sirida yuzaga keladigan

qo‘shimcha energiya atomning g‘alayonlanmagan energiya sathlari orasidagi masofalarga nisbatan kichik bo‘lsa, u holda sathlar ajralishini g‘alayonlanish nazariyasi asosida hisoblash mumkin.

Odatda, atomning ichki elektr maydoni tashqi maydonga nisbatan juda katta bo‘ladi. Masalan, vodorod atomida birinchi Bor orbitasi uchun Kulon maydonining kuchlanganligi

$$E_0=\frac{e}{a^2}=5,13\cdot10^{11}\frac{V}{m}$$

bo‘ladi. Shuning uchun atomning tashqi elektr maydoni ta’sirida olgan qo‘shimcha potensial energiyasini

$$W=eEz=-D_zE \quad (8.48)$$

tuzatma yoki g‘alayonlanish sifatida qarash mumkin. Bu yerda E tashqi elektr maydon kuchlanganligini bildiradi va tashqi elektr maydoni z o‘qiga mos yo‘nalishda olingan $D_z=-ez$ komponenta z o‘qiga nisbatan dipol momentini bildiradi. Demak, elektronning to‘la potensial energiyasi

$$U'(r)=U(r)+eEz$$

bo‘ladi va statsionar holatlar uchun Shredinger tenglamasi quyidagicha ko‘rinish oladi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+[U(r)+eEz]\psi=E\psi. \quad (8.49)$$

Ushbu masalada g‘alayonlanish bo‘lmaganida atomining elektroni uchun Shredinger tenglamasining xususiy funksiyalari va xususiy qiymatlari nolinchi yaqinlashishi sifatida tanlab olish mumkin. Elektr maydonining ta’sirini hisobga olmagan holda atom kvant sathlarining energiyasini:

$$E=E_{nl}^0 \quad (8.50)$$

va tegishli to‘lqin funksiyalarini:

$$\psi_{nlm}^0=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad (8.51)$$

orqali belgilash mumkin.

Ushbu paragrafga vodorod atomida ikkinchi kvant sathi (n=2 bo‘lgan sath) ning ajralishi ko‘rib chiqiladi, chunki birinchi sathda aynish mavjud emas va shu sababli spektrlarning ajralishi yuz bermaydi. Qayd etilgan kvant holatiga quyidagi to‘lqin funksiyalari bilan ifodalangan to‘rt holat mos keladi va ularni (8.51) dan osongina hosil qilish mumkin:

$$i\hbar\sum_n\left(c_n(t)\frac{\partial\psi_n^{(0)}(x,t)}{dt}+\frac{dc_n(t)}{dt}\psi_n^{(0)}(x,t)\right)=$$
$$=\sum_n c_n(t)\left[\hat{H}_0(x)+\hat{W}(x,t)\right]\psi_n^{(0)}(x,t) \quad (8.76)$$

$\psi_n^{(0)}(x,t)$ to‘lqin funksiyalari (8.73) tenglamani qanoatlantirishi hisobga olinsa, (8.76) tenglamaning chap va o‘ng tomondagi birinchi hadlari aynan bir-biriga teng bo‘ladi va ularni qisqartirib yuborish mumkin, u holda quyidagi tenglamaga kelinadi:

$$i\hbar\sum_n\frac{dc_n(t)}{\partial t}\psi_n^{(0)}(x,t)=\sum_n c_n(t)\hat{W}(x,t)\psi_n^{(0)}(x,t). \quad (8.77)$$

Hosil bo‘lgan (8.77) tenglamaning ikkala tomonini chap tomonidan $\psi_m^{(0)^*}(x,t)$ funksiyaga ko‘paytirib, so‘ngra butun fazo bo‘yicha integrallanadi va quyidagi natijaga kelinadi:

$$i\hbar\sum_n\frac{dc_n(t)}{\partial t}\int\psi_m^{(0)^*}(x,t)\psi_n^{(0)}(x,t)d\upsilon=$$
$$=\sum_n c_n(t)\int\psi_m^{(0)^*}(x,t)\hat{W}(x,t)\psi_n^{(0)}(x,t)d\upsilon. \quad (8.78)$$

Olingan (8.78) dagi ifodaning o‘ng tomonidagi yig‘indida faqat bitta $n=m$ ga tegishli bo‘lgan had saqlanib qoladi, chunki

$$\int\psi_m^{(0)^*}(x)\psi_n^{(0)}(x)d\upsilon=\begin{cases}0, & n\neq m\\ 1, & n=m\end{cases} \quad (8.79)$$

ifodalar o‘rinlidir.

(8.78) tenglamaning o‘ng tomoni esa quyidagicha yozilishi mumkin:

$$W_{mn}(t)=\int\psi_m^{(0)^*}(x,t)\hat{W}(x,t)\psi_n^{(0)}(x,t)d\upsilon=$$
$$=\int\psi_m^{(0)^*}(x)e^{\frac{i}{\hbar}E_mt}\hat{W}(x,t)\psi_n^{(0)}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}d\upsilon=W_{mn}e^{i\omega_{mn}t}. \quad (8.80)$$

Bu yerda $W_{mn}(t)$ had orqali g‘alayonlanish operatorining matrik elementi belgilanadi va bu had g‘alayonlanishning vaqtga bog‘liq ko‘paytuvchisini ham o‘z ichiga olgan matritsa elementidir. Shunday qilib, (8.78) tenglamani quyidagi ko‘rinishda yozish mumkin:

$$i\hbar\frac{dc_m(t)}{\partial t}=\sum_n W_{mn}c_n(t)e^{i\omega_{mn}t} \quad (8.81)$$

bunda

$$\omega_{mn}=\frac{E_m^0-E_n^0}{\hbar} \quad (8.82)$$

teng bo‘lib, E_m^0 energiyaga ega bo‘lgan statsionar holatdan E_n^0 statsionar holatga o‘tishdagi chastotalarni ifodalaydi.

Olingan (8.81) dagi tenglamalar sistemasi aniq bo‘lib, o‘zaro ta’sir tasavvurdagi Shredinger tenglamasi deyiladi.

Hozirgi vaqtgacha hech qanday yaqinlashishlar to‘g‘risida gap yuritilmagan edi. (8.81) dagi tenglamalar sistemasining yechimini hosil qilish matematik nuqtayi nazardan berilgan Shredinger to‘la tenglamasini yechish bilan ekvivalentdir.

Faraz qilaylik, $t=0$ vaqt momentida g‘alayonlanmagan sistemaning energiyasini o‘lchash natijasida E_k qiymatni olishga erishildi. U holda $t=0$ vaqt momentida quyidagi shart bajarilishi kerak:

$$c_k(0)=1,\quad c_n(0)=0 \text{ agarda } n\neq m \text{ bo‘lsa.} \quad (8.83)$$

Vaqt o‘tishi bilan $c_n(t)$ koeffitsiyentlar ham o‘zgaradi va vaqtning keyingi momentlaridagi sistemaning energiyasi E_k qiymatlarni qabul qiladi. Bunday hodisaning sodir bo‘lish ehtimolligi $|c_k(t)|^2$ ga teng bo‘ladi. Demak, sistema boshlang‘ich vaqt momentida k holatda joylashgan bo‘lsa, u holda $t>0$ vaqt momentida sistemani m holatda topish ehtimolligi $|c_k(t)|^2$ kattalikka teng bo‘ladi.

Shunday qilib, t vaqt momentida $E=E_m$ holatda joylashgan sistemani topilish ehtimolligi $|c_m(t)|^2$ kattalikka teng bo‘ladi. Shuning uchun, t vaqt momentiga kelganida E_n holatdan E_m holatga o‘tish ehtimolligi

$$P_{mn}(t)=|c_m(t)|^2 \quad (8.84)$$

bo‘ladi.

Ushbu bobning 8.1-paragrafida ishlatilgan λ parametrni kiritish maqsadga muvofiqdir. Bu parametr yordamida g‘alayonlanishni kiritish yoki o‘chirish mumkin. U holda, (8.71) dagi to‘la gamiltonianni

Umuman olganda, nurlanish hodisasiga nisbatan kvant sistemani garmonik tebranuvchi dipollar to‘plami bilan ifodalab, bu ossillatorlar to‘plamining barchasini elektr momentining matrisasi orqali tassavur qilish mumkin, ya’ni

$$D(t)=\begin{pmatrix} D_{11} & D_{12}e^{i\omega_{12}t}\dots & D_{1n}e^{i\omega_{1n}t}\dots \\ D_{21}e^{i\omega_{21}t} & D_{22}\cdots & D_{2n}e^{i\omega_{2n}t}\dots \\ D_{m1}e^{i\omega_{m1}t} & D_{m2}e^{i\omega_{m2}t}\dots & D_{mn}e^{i\omega_{mn}t}\dots \end{pmatrix} \tag{8.118}$$

bo‘lib, uning chastotalari esa

$$\omega_{mn}=\frac{E_m-E_n}{\hbar} \tag{8.118′}$$

kabi aniqlanadi. Ular ham quyidagi matritsani tashkil etadi:

$$\omega=\begin{vmatrix} 0 & \omega_{12}\cdots & \omega_{1n}\cdots \\ \omega_{21} & 0 \quad \cdots & \omega_{2n}\cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \omega_{m1}\omega_{m2} & \cdots\omega_{mn} & \cdots \end{vmatrix} \tag{8.118″}$$

$\mathbf{D}(t)$ matristaning $D_{mn}(t)$ diagonal elementlari vaqtga bog‘liq emas, chunki $\omega_{nn}=0$ bo‘lib, ular n – kvant holatda joylashgan atomning o‘rtacha elektr momentini ifodalaydi. Diagonal bo‘lmagan elementlar esa atomning nurlanishini ifodalab, Bor chastotalariga teng bo‘lgan chastotalar bilan tebranadi.

Shunday qilib, (8.114) formulani (8.98) formulaga qo‘yish natijasida E_n holatdan E_m holatga o‘tish ehtimolligini hisoblash mumkin, ya’ni:

$$P_{mn}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}\left|\varepsilon(\omega_{mn})\right|^2\cdot|1\mathbf{D}_{mn}|^2 \tag{8.119}$$

ga teng bo‘ladi. Kvant mexanikasiga doir darsliklarda $\left|\varepsilon(\omega_{nn})\right|^2$ kattalikning qiymati hisoblab berilgan, ya’ni elektr maydoni Fur’ye komponentasining kvadratini T vaqt mobaynida oqib o‘tgan energiya miqdori orqali ifodalash mumkin. $d\omega$ chastota intervalida 1 sm² yuzadan o‘tgan energiya miqdorini $E(\omega_{mn})$ bilan belgilansa,

$$E(\omega_{mn})=c\left|\varepsilon(\omega)\right|^2$$

natijaga ega bo‘linadi. U holda,

$$P_{mn}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}|1\mathbf{D}_{mn}|^2\frac{E(\omega_{mn})}{c} \tag{8.119′}$$

ifoda hosil qilinadi. Oqib o‘tgan energiya miqdori $E(\omega_{mn})$ esa o‘z navbatida chastotaning birlik intervaliga to‘g‘ri kelgan $\rho(\omega_{mn})$ nurlanayotgan energiyaning zichligini c - yorug‘lik tezligiga, hamda T – energiyaning o‘tish vaqtiga ko‘paytmasiga teng bo‘ladi, ya’ni:

$$E(\omega_{mn})=\rho(\omega)cT. \tag{8.120}$$

Yuqoridagi (8.119') va (8.120) ikkala formulaga asoslanib birlik vaqt ichida E_n holatdan E_m holatga $p_{mn}(\omega_{mn})$ o‘tish ehtimolligi hisoblash mumkin, buning uchun (8.119') formulada $P_{mn}(\omega_{mn})$ ni yorug‘likning ta’sir qiluvchi T vaqtga bo‘lish kifoya qiladi, u holda

$$p_{mn}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}|1\mathbf{D}_{mn}|^2\rho(\omega_{mn}) \tag{8.121}$$

natija olinadi. Agarda D_{mn} elektr moment vektori va **1** yorug‘lik maydonining polarizatsiya yo‘nalishi orasidagi burchakni Θ_{mn} orqali belgilansa, $p_{mn}(\omega_{mn})$ kattalik uchun quyidagi natijaga kelinadi:

$$p_{mn}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}\left|\mathbf{D}_{mn}\right|^2\cos^2\Theta_{mn}\rho(\omega_{mn}). \tag{8.122}$$

Ushbu formula yordamida o‘tish ehtimolliklarini hisoblash mumkin bo‘lib, qaralayotgan atom sistemaning xossalari bilan aniqlanadigan $\mathbf{D}_{mn}$ elektr moment matritsasini bilishning o‘zi kifoya.

8.8. Dipol nurlanishi uchun tanlash qoidalari

Avvalgi paragrafda ko‘rsatildiki, tashqi elektromagnit maydon ta’sirida o‘tish hodisalarining ro‘y berilish ehtimolligi kiritilgan $\mathbf{D}_{mn}$ elektr momentlarining qiymatlarini nolga teng bo‘lmasligiga bog‘liqligi aniqlangan edi. Aslida qaraganimizda, ushbu matrik element holatlarning ko‘p kombinatsiyasi uchun nolga teng bo‘ladi va bu hollarda berilgan holatlar uchun o‘tish ta’qiqlangan bo‘lib, uning ehtimolligi nolga teng bo‘ladi. Masalan, ikkala E_n va E_m holatlarning mavjudligiga qaramasdan, yorug‘lik ta’sirida E_n holatdan E_m holatga

$$W_{mn}(t)=\int\psi_m^*(x)W(x,t)\psi_n(x)dx=$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega t}d\omega\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(x)W(x,\omega)\psi_n(x)dx= \tag{8.95}$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega t}W_{mn}(\omega)d\omega$$

(8.95) integraldagi $W_{mn}(\omega)$ kattalik ω chastotaga ega bo‘lgan Fur’ye komponentasining matrik elementi bo‘lib, unga Fur’ye teoremasi qo‘llanilsa,

$$W_{mn}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}W_{mn}(t)e^{i\omega t}dt \tag{8.96}$$

integralga kelinadi. Olingan tenglikni (8.91) dagi integral bilan solishtirilsa,

$$c_m^{(1)}=\frac{2\pi}{i\hbar}W_{mn}(\omega_{mn}) \tag{8.97}$$

natijaga kelinadi. Demak, (8.84) va (8.97) formularga asosan, E_n statsionar holatdan E_m statsionar holatga o‘tish ehtimolligini quyidagi formula orqali ifodalash mumkin:

$$P_{mn}=\frac{4\pi^2}{\hbar^2}\left|W_{mn}(\omega_{mn})\right|^2 \tag{8.98}$$

Juda muhim natijaga ega bo‘lindi. $P_{mn}\neq0$ bo‘lishi uchun $W_{mn}(\omega_{mn})\neq0$ bo‘lishi shart, ya’ni E_n sathdan E_m sathga o‘tish mavjud bo‘lishi uchun ta’sir etuvchi g‘alayonlanish spektrining ichida $\omega_{mn}=\frac{1}{\hbar}(E_m-E_n)$ chastotaga teng bo‘lgan chastota albatta mavjud bo‘lishi kerak. Boshqacha aytganda, o‘tish jarayoni rezonans xarakterga ega bo‘lib, kvant sistemasi esa ω_{mn} Bor chastotalariga teng bo‘lgan xususiy chastotali ossillatorlarning to‘plami shaklida qarash mumkin. O‘zgaruvchan tashqi g‘alayonlanish ta’sirida sistemadagi faqat shunday ossillatorlar uyg‘onish holatiga keladiki, ularning chastotalari g‘alayonlanishda ishtirok etuvchi chastotalar bilan mos kelishi kerak.

Shunday qilib, sistema g‘alayonlanish ta’sirida dastlabki statsionar holatdan istalgan boshqasiga o‘tadi. Olingan (8.98) formula diskret

uchinchi had esa ushbu ikki elektronning Kulon o‘zaro ta’sir energiyasini aniqlab beradi.

O‘zaro ta’sir magnit operatori esa elektronlarning tezligiga, joylashgan holatiga va spinlariga bog‘liq bo‘lib, quyidagi ko‘rinishda yozilishi mumkin:

$$\hat W=\hat W(\mathbf S_1,\mathbf S_2,\mathbf r_1,\mathbf r_2,-i\hbar\nabla_1,-i\hbar\nabla_2) \tag{9.2}$$

Endi ikkala elektonlar kinetik energiyasi hisobga olinsa, geliy atomining to‘liq gamiltonianini quyidagi ko‘rinishda ifodalash mumkin:

$$\hat H(\mathbf r_1,\mathbf r_2,S_1,S_2)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}+\hat W. \tag{9.3}$$

Hosil qilingan (9.3) ifodada oxirgi had atomdagi spektrlarning multiplet strukturasi bilan bog‘langan bo‘lib, Kulon o‘zaro ta’siriga nisbatan juda kichik son orqali berilgan bo‘ladi. Shuning uchun, keyingi hisoblashlarda bu had hisobga olinmaydi va (9.3) ning ko‘rinishini

$$\hat H(\mathbf r_1,\mathbf r_2)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}} \tag{9.4}$$

ifoda orqali aniqlash mumkin. Shunday qilib, geliy atomining yadrosi cheksiz katta massaga ega bo‘lib, qo‘zg‘almas deb hisoblanadi va ikkita elektronli sistema uchun Shredinger tenglamasi quyidagicha bo‘ladi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}\right)\Psi=E\Psi. \tag{9.5}$$

Olingan (9.5) Shredinger tenglamasidagi Gamilton operatorida spin operatorlari hisobga olinmasligi tufayli, to‘la to‘lqin funksiyasini ikkita to‘lqin funksiyalarining ko‘paytmasi sifatida qarsh mumkin. Ulardan biri elektronlarning og‘irlik markazi harakatini ifodalovchi funksiya bo‘lsa, ikkinchisi ularning spinlariga tegishli o‘zgaruvchilarni ifoda qilivchi funksiya bo‘ladi. Agarda spin o‘zgaruvchilar sifatida oz yo‘nalishdagi spin proyeksiyalar tanlab olinsa, u holda geliy atomidagi ikkita elektron uchun to‘liq to‘lqin funksiyani quyidagicha yozish mumkin:

$$\Psi(\mathbf r_1,\mathbf r_2,S_1,S_2)=\Phi(\mathbf r_1,\mathbf r_2)\cdot S(S_1,S_2). \tag{9.6}$$

spektr sodir bo‘ladigan o‘tishlar uchun keltirib chiqarilgan. Ammo, uzluksiz spektr holatlari orasida g‘alayonlanish ta’sirida beradigan o‘tish ehtimolliklarini hisoblash uchun keltirib chiqariladigan formulaga olingan (8.98) ifodaga nisbatan bir qator o‘zgartirishlar kiritish lozim. Uzluksiz spektr holatlarini aniqlovchi va shuning uchun ham uzluksiz qiymatlar qatorini qabul qiluvchi kattaliklar to‘plami α harf bilan belgilanadi, $d\alpha$ belgisi ostida esa, shu kattaliklar bo‘yicha differentsialni tushunish darkor. Masalan, erkin zarrachalar impulslarining P_x, P_y, P_z komponentlarini α kattaliklar sifatida olish mumkin. Mazkur holda bu zarrachalarning to‘lqin funksiyalari $\psi_\alpha(x)$ bo‘lib, energiyasi ham shu parametrning funksiyasi bo‘la oladi, ya’ni $E = E(\alpha)$ bo‘ladi. U holda, (8.75) formulada diskret spektrning holatlari bo‘yicha olingan summada uzluksiz spektr holatlarini ifodalovchi integral ham paydo bo‘ladi, ya’ni

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(x)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} + \int c_\alpha(t)\psi_\alpha(x)e^{-i\frac{E(\alpha)}{\hbar}t}d\alpha. \quad (8.99)$$

Zarrachalarning to‘lqin funksiyalari δ- funksiyaga impuls bo‘yicha normalashtirilishi kerakligi hisobga olinsa va barcha hisoblashlarni (8.72) dan boshlab (8.89) gacha hisoblab chiqilsa, quyidagi natijaga kelish mumkin:

$$c_\alpha^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t W_{\alpha n}(\tau)e^{i\frac{E(\alpha)-E_n}{\hbar}\tau}d\tau \quad (8.100)$$

bunda

$$W_{\alpha n}(t) = \int \psi_\alpha^*(x)W(x,t)\psi_n(x)dx \quad (8.101)$$

bo‘ladi. Sistema boshlang‘ich vaqtda E_n energiyali holatda joylashganligini hisobga olish kerak.

Faraz qilaylik, $W(x,t)$ g‘alayonlanish vaqtga nisbatan monoxromatik ravishda o‘zgarsin. U holda,

$$W(x,t) = W(x)e^{i\omega t} + W^*(x)e^{-i\omega t} \quad (8.102)$$

yozish mumkin va

$$W_{\alpha n}(t) = W_{\alpha n}e^{i\omega t} + W^*_{\alpha n}e^{-i\omega t} \quad (8.103)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\hat{H} + W(\mathbf{r},t)\right]\psi \quad (8.113)$$

ko‘rinishda bo‘ladi va $W(\mathbf{r},t)$ kattalikni g‘alayonlanishni ifodalovchi kattalik deb qarash mumkin.

Qaralayotgan masala tushayotgan yorug‘lik ta’sirida atom $E_n(\psi = \psi_n)$ kvant holatidan $E_m(\psi = \psi_m)$ kvant holatiga o‘tish extimolligini hisoblashdan iboratdir. Bu masalada yoruglik $t = 0$ vaqt momentdan boshlab $t = T$ vaqt momentigacha atomga ta’sir etadi. Agarda T vaqt yorug‘lik to‘lqinlarining tebranish davridan ancha katta bo‘lmasa edi, u holda vaqtni bunday cheklash tushayotgan yorug‘likning spektral tarkibiga bog‘liq bo‘lmasdi.

G‘alayonlanish nazariyasiga asosan E_n stasionar holatdan E_m stasionar holatga o‘tish ehtimolligi (8.96) formula orqali beriladi va bu formulani qo‘llash uchun avvalo $W_{mn}(t)$ ni hisoblash zarur. (8.111) dagi kattalik hisobga olinsa, (8.94) formulaga binoan,

$$\begin{aligned} W_{mn}(t) &= \int \psi_m^* W(\mathbf{r},t)\psi_n d\upsilon = \\ &= -\varepsilon(t)\int \psi_m^*(\mathbf{1D})\psi_n d\upsilon = -\varepsilon(t)(\mathbf{1D}_{mn}) \end{aligned} \quad (8.114)$$

teng bo‘ladi. Bu formulada $\mathbf{D}_{mn}$ elektr moment vektorining matrik elementi bo‘lib, uning komponentalarini quyidagi ko‘rinishda yozish mumkin:

$$\left.\begin{aligned} D_{mn}^x &= -e\int \psi_m^* x\psi_n d\upsilon, \\ D_{mn}^y &= -e\int \psi_m^* y\psi_n d\upsilon, \\ D_{mn}^z &= -e\int \psi_m^* z\psi_n d\upsilon. \end{aligned}\right\} \quad (8.115)$$

Shunday qilib, tekshirilayotgan kattalik uchun quyidagi

$$W_{mn}(\omega_{mn}) = -\varepsilon(\omega_{mn})\ (\mathbf{1D}_{mn}) \quad (8.116)$$

tenglik o‘rinli bo‘lib, $\varepsilon(\omega_{mn})$ kattalik orqali ω_{mn} chastotaga tegishli bo‘lgan $\varepsilon(t)$ ning Fur’ye komponentasi belgilangan va uning qiymati

$$\varepsilon(\omega_{mn}) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\varepsilon(t)e^{-i\omega_{mn}t}dt = \frac{1}{2\pi}\int_0^T\varepsilon(t)e^{-i\omega_{mn}t}dt \quad (8.117)$$

ga teng.

o‘tish amalga oshmasligi ham mumkin, tegishli bo‘lgan ω_{mn} chastotali yorug‘lik na yutiladi va na nurlanadi. Faqat muayyan hollardagina matrik element noldan farqli bo‘lishi mumkin va bunda holatlar orasida o‘tish ehtimolligi sodir bo‘ladi. Bu o‘tishlar taqiqlanmagan o‘tishlar deb nomlanadi va $\mathbf{D_{mn}}$ kattalik o‘tishning dipol momenti deyiladi. Elektromagnit nurlanish vujudga kelishi uchun atom holatining nurlanishgacha va nurlanishdan keyingi kvant xarakteristikalari, tanlash qoidalari deb ataluvchi qoidalarga bo‘ysinishi kerak. Boshqacha aytganda, qandaydir qoidaga binoan $E_n \to E_m$ barcha mumkin bo‘lgan o‘tishlardan, amalda faqat bir nechtasigina sodir bo‘ladi. Bunday tanlash qoidalari kvant mexanikasi paydo bo‘lishidan avval, spektroskopiya sohasida izlanishlar olib boruvchi tadqiqotchilarga ma’lum edi. Faqat kvant mexanikasi asosida keltirib chiqarilgan o‘tish ehtimolliklari uchun formulalar negizida yuqorida qayd etilgan tanlash qoidalarining kelib chiqish sababi aniqlandi. Ma’lum bo‘ldiki, tanlash qoidalari xususiy funksiyalarining ortogonalligiga bog‘liqdir. Kvant mexanikasida tanlash qoidalari tabiiy ravishda vujudga kelib, kvant o‘tishlarining taqiqlanish yoki taqiqlanmasligini ifodalaydi. Endi muhim hollar uchun $\mathbf{D}_{mn}$ matrisalarning xususiyatlarini tekshirib, hamda yorug‘likning yutilishi va nurlanishi uchun tanlash qoidalarini keltirib chiqamiz.

A. Ossillyator uchun tanlash qoidalari

Zaryadi e ga, massasi m ga va xususiy chastotasi ω_0 ga teng bo‘lgan garmonik ossillyator berilgan bo‘lsin. Ma’lumki, bunday ossillyatorning E_n kvant sathlari

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0,1,2,3,\cdots$$

formula orqali aniqlanadi. Elektr momentning matrik elementlari esa quyidagiga teng bo‘lishi kerak:

$$D_{mn} = ex_{mn}e^{i\omega_{mn}t} = ex_{mn}e^{i\omega(m-n)t} \quad (8.123)$$

bunda x_{mn} kattalik koordinata matritsasining elementlaridir. 6.4-paragrafda ushbu koordinata matrisasini hisoblab chiqib, uning elementlari $m = n \pm 1$ lar uchungina noldan farqli bo‘lishi ko‘rsatilgan edi. Shu mulohaza asoslanib, garmonik ossillyator uchun tanlash

IX bob
KO‘P ELEKTRONLI ATOMLAR
9.1. Geliy atomi

Elementlarning davriy sistemasidagi ikkinchi element - geliy atomi bo‘lib, ko‘p elektronli atomlar ichida eng soddasi hisoblanadi. Chunki uning tashqi elektron qobig‘i ikkita elektrondan tashkil topgan. Geliy atomining nisbatan sodda ko‘rinishiga qaramasdan klassik fizika doirasida ham, Bor nazariyasi asosida ham uning nazariyasini yaratib bo‘lmadi. Faqat kvant mexanikasi asosida ko‘p elektronli sistemalar nazariyasini yaratish imkoni paydo bo‘ldi. Birinchidan, sof kvant effekti bo‘lgan almashuv bilan bog‘liq energiya effekti Bor nazariyasida hisobga olinmaydi. Chunki bu energiya ko‘p elektronli atomlarda, jumladan geliy atomida ham, muhim ahamiyatga egadir. Ikkinchidan, Bor nazariyasida elektronlarning spini ham mutlaqo hisobga olinmaydi. Tajribalardan ma’lumki, ko‘p elektronli sistemalar uchun spin bilan bog‘liq bo‘lgan effektlar yaratilayotgan nazariyada juda katta ahamiyatga ega va bu effektlarni hisobga olgan taqdirdagina ko‘p elektronli sistemalarning barcha xususiyatlarini tushuntirish imkoniyati yaratiladi.

Avvalo geliy atomining elektronlari uchun $\hat{H}$ – Gamilton operatorining ko‘rinishini aniqlab olaylik. Geliy atomidagi sodir bo‘layotgan o‘zaro ta’sirlarni ikki guruhga ajratish mumkin: geliy atomidagi ikkita elektronning yadro zaryadi bilan kuchli Kulon o‘zaro ta’siri va elektronlarni kuchsiz magnit o‘zaro ta’siri. Birinchi guruhga yadro va elektronlar orasidagi o‘zaro ta’sir kuchlari kiradi, ikkinchisiga esa elektronlarning spinlari orasida sodir bo‘layotgan hamda spin va orbital harakat bilan bog‘langan o‘zaro ta’sir kuchlari kiradi. Elektronlarning o‘zaro ta’sir energiyasi

$$U = -\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (9.1)$$

ko‘rinishda bo‘ladi. Bunda r_1 va r_2 – mos holda birinchi va ikkinchi elektronlarning koordinatalari, r_{12} - ikkita elektron orasidagi masofa. (9.1) ifodani birinchi hamda ikkinchi qismlari birinchi va ikkinchi elektronning atom yadrosi bilan o‘zaro ta’sir energiyasini ifodalaydi, beradi. Bu hodisada energiyaning saqlanish qonuni o‘rinli bo‘lishi uchun $\varepsilon = E_m - E_n$ energiyali yorug‘lik kvanti nurlanadi. Bunday o‘tishlarning ehtimolliklarini hisoblash ham mumkin bo‘ladi.

Shunday qilib, kvant mexanikasi asosida, yorug‘likning yutilish yoki nurlanish ehitmolligini hisoblash mumkin. Bu masalani hal etish uchun avvalgi paragrafga binoan tushayotgan yorug‘lik ta’sirida biror kvant sathdan ikkinchi kvant sathga o‘tish ehtimolligini hisoblash kerak. Demak, atomdagi optik elektron bilan yorug‘lik orasidagi o‘zaro ta’sirni aniqlash kerak. Atomga tushayotgan yorug‘likning elektr maydon kuchlanganligi vektori

$$\varepsilon(x,t) = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \cos(\omega_0 t) \qquad (8.109)$$

ko‘rinishda bo‘lsin, ya’ni atom ichidagi fazoning barcha nuqtalarida bu kattalik bir xil qiymatni qabul qiladi. Atomning o‘lchmlari tushayotgan yorug‘likning to‘lqin uzunligidan ancha kichik bo‘lish sharti keng oraliqda o‘rinlidir. Xususan, ultrabinafsha va ko‘rinadigan yorug‘liklar uchun $\lambda >> 10^{-8}$ sm $(a \approx 10^{-8}\,\text{sm})$ bo‘ladi. Atom ichida yorug‘likning vaqtga bog‘liq bo‘lgan elektr maydoni ta’sir etadi va bu ta’sir atomning butun o‘lchamlari ichida bir xil qiymatga egadir. Bunday vaqtga bog‘liq bo‘lgan elektr maydonni quyidagicha belgilab olinadi:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(t). \qquad (8.110)$$

Yuqorida qilgan mulohazalarga asosan, (8.110) dan foydalanib, yorug‘likning elektr maydoni bilan elektron orasidagi o‘zaro ta’sir ifodasini kiritish mumkin. Agarda maydonning skalyar potensiali

$$\varphi(\mathbf{r},t) = -\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{r}$$

bo‘lsa, u holda $\mathbf{r}$ nuqtada joylashgan elektronga ta’sir etuvchi kuch funksiyasi

$$W(\mathbf{r},t) = -e\varphi = +e(\boldsymbol{\varepsilon},\mathbf{r}) = -\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{D} \qquad (8.111)$$

bo‘ladi. Bunda $\mathbf{D} = -e\mathbf{r}$ elektronning elektr momentini ifodalovchi kattalikdir. Endi birlik $\mathbf{1}$ vektori kiritilsa va $\boldsymbol{\varepsilon}(t) = \mathbf{1}\varepsilon(t)$ bo‘lsa, u holda (8.111) ni quyidagicha yozish mumkin:

$$W(\mathbf{r},t) = -\varepsilon(t)\cdot(\mathbf{1D}). \qquad (8.112)$$

Shunday qilib, $\psi(\mathbf{r},t)$ to‘lqin funksiyasi uchun Shredinger tenglamasi:

qoidasini keltirib chiqarish mumkin: agarda $m=n+1$ bo‘lganidagina $D_{mn} \neq 0$ bo‘ladi, ya’ni

$$D_{mn} \neq 0 \quad , \quad m=n+1. \qquad (8.124)$$

Tegishli chastotalar esa

$$\omega_{mn} = \omega_0(m-n) = \pm\omega_0 \qquad (8.125)$$

teng bo‘lib, garmonik ossillyatorning xususiy chastotasiga teng bo‘ladi. Agarda $D_0 = ex_0 = e\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ kabi belgilash kiritilsa va (4.89) formuladan foydalanilsa, Geyzenberg tassavurida $D(t)$ matritsani quyidagicha yozish mumkin:

$$D(t) = \begin{pmatrix} 0 & D_0 e^{i\omega_0 t}\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & 0 \\ D_0 e^{i\omega_0 t}\sqrt{\frac{1}{2}} & 0 & D_0 e^{i\omega_0 t}\sqrt{\frac{2}{2}} & 0 \\ 0 & D_0 e^{i\omega_0 t}\sqrt{\frac{2}{2}} & 0 & D_0 e^{i\omega_0 t}\sqrt{\frac{3}{2}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \qquad (8.126)$$

Shunday qilib, muhim natijaga kelinadi: garmonik ossillator faqat o‘zining ω_0 xususiy chastotasiga teng bo‘lgan chastotali yorug‘likni yutishi yoki nurlantirishi mumkin.

Atomdagi elektron uchun tanlash qoidalari

Ushbu qismda markaziy kuchlar maydonida harakatlanuvchi elektronning elektr momenti matritsasini tekshirib chiqiladi. Bu holda kelib chiqadigan ikkita tanlash qoidasini hisoblash mumkin, ulardan biri l orbital kvant soniga ikkinchisi esa m magnit kvant soniga bog‘liq bo‘ladi. Statsionar holatlarning to‘lqin funksiyalari ma’lum bo‘lgan

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. (8.122) formuladan ko‘rinib turibdiki, ushbu berilgan to‘lqin funksiyalarga nisbatan elektr momenti matritsasini hisoblash yetarlidir. Agarda bu matrik elementlar nolga teng bo‘lsa, u holda o‘tish ehtimolliklari ham nolga teng bo‘ladi va natijada shu o‘tishga tegishli bo‘lgan spektral chiziq tajribalarda kuzatilmaydi.

$$\Delta l = \pm 1. \qquad (8.133)$$

Endi n bosh kvant soni uchun tanlash qoidalari ko‘rib chiqiladi. (8.127) dagi

$$\int_0^\infty R_{nl}R_{n'l'}r^3 dr \qquad (8.134)$$

integrallarni hisoblashdan shu narsa ayon bo‘ldiki, $\Delta l = \pm 1$ tanlash qoidalari o‘rinli bo‘lganida, $\Delta n = n' - n$ bosh kvant sonining o‘zgarishi ixtiyoriy ko‘rinishda bo‘lar ekan. (8.134) integral noldan farqli bo‘ladi. Shunday qilib, n bosh kvant soni uchun tanlash qoidasi mavjud bo‘lmaydi, u faqat ixtiyoriy karrali sonlarga o‘zgarishi mumkin.

8.9.VIII bob ga oid savol va masalalar

1. *G‘alayonlanish nazariyasining mohiyati nimadan iborat?*
2. *Qaysi holatlarda g‘alayonlanish nazariyasidan foydalanish maqsadga muvofiq bo‘ladi?*
3. *Aynish bo‘lmagan hol uchun g‘alayonlanish nazariyasi metodining sxemasi keltirilsin.*
4. *Birinchi yaqinlashishda energiya va to‘lqin funksiyasiga tuzatmalarning ko‘rinishi qanday bo‘ladi?*
5. *Ikkinchi yaqinlashishda energiyaga tuzatmaning ko‘rinishi qanday bo‘ladi?*
6. *G‘alayonlanish nazariyasidan foydalanish uchun qanday shart (tengsizlik ko‘rinishida) bajarilishi kerak?*
7. *Aynish mavjud bo‘lgan holda g‘alayonlanish nazariyasining metodi qanday ifodalanadi?*
8. *Kvant o‘tish hodisasini izohlab bering.*
9. *Kvant o‘tish ehtimolligi qanday aniqlanadi?*
10. *Optik o‘tish deganda nimani tushunasiz?*
11. *Dipol o‘tish deb nimaga aytiladi?*
12. *Optik o‘tishdagi tanlash qoidalarini asoslab bering.*
13. *Atom termlarini ifodalovchi l va m kvant sonlarini taqiqlovchi qoidalarini sanab o‘ting.*
14. *Yorug‘likning yutilish spektrlaridagi va majburiy nurlanishdagi intensivlik nimaga bog‘liq?*

bo‘lib, $W_{\alpha n}$ va $W_{\alpha n}^*$ kattaliklar $W(x,t)$ ning Fur’ye komponentlari matrik elementlari deyiladi. (8.103) formulani (8.100) ga qo‘yilsa va vaqt bo‘yicha integrallansa, quyidagi natijani hosil qilish mumkin:

$$c_\alpha^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[W_{\alpha n}\frac{e^{i(\omega_{\alpha n}+\omega)t}-1}{\omega_{\alpha n}+\omega} + W_{\alpha n}^*\frac{e^{i(\omega_{\alpha n}-\omega)t}-1}{\omega_{\alpha n}-\omega}\right]. \qquad (8.104)$$

Integralning quyi chegarasi esa boshlang‘ich shartga mos holda,ya’ni $t=0$ da $c_\alpha^{(1)}(t)=0$ bo‘ladigan qilib tanlab olingan. Agarda $E(\alpha) > E_n$ bo‘lsa, u holda atom maydon energiyasini yutadi, ya’ni yutilish hodisasi ro‘y beradi, Agarda $E(\alpha) < E_n$ bo‘lsa, u holda atom o‘z energiyasini maydonga berib, majburiy nurlanish sodir bo‘ladi. Birinchi holda $\omega_{\alpha n} = \frac{1}{\hbar}(E_\alpha - E_n)$ musbat kattalik bo‘lsa, ikkinchi holda esa ushbu kattalik manfiy qiymatlarni qabul qiladi. Yuqorida qayd etilgan har ikkala jarayonni hisoblashda (8.104) formulaning o‘ng tomonidagi ikkita haddan birortasi hisobga olinmasa ham bo‘ladi. Keyinchalik yutilish hodisasi ko‘rib chiqiladi, shuning uchun olingan formulada $\omega > 0, E(\alpha) > 0$ va $E_n < 0$ bo‘lganligi sababli, birinchi hadning qiymati juda kichik bo‘ladi va faqat ikkinchi had bilan chegaralaniladi. U holda, (8.104) formulaga binoan

$$c_\alpha^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}W_{\alpha n}^*\frac{e^{i(\omega_{\alpha n}-\omega)t}-1}{\omega_{\alpha n}-\omega} \qquad (8.105)$$

natijada ega bo‘linadi. $c_\alpha^{(1)}(t)$ kattalik modulining kvadratini

$$\left|c_\alpha^{(1)}(t)\right|^2 \equiv c_\alpha^{(1)*}\cdot c_\alpha^{(1)} = \frac{1}{\hbar^2}\left|W_{\alpha n}\right|^2\frac{2\left[1-\cos(\omega_{\alpha n}-\omega)t\right]}{(\omega_{\alpha n}-\omega)^2} =$$
$$= \frac{1}{\hbar^2}\left|W_{\alpha n}\right|^2\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{\alpha n}-\omega)t}{\frac{1}{4}(\omega_{\alpha n}-\omega)^2} = \frac{\pi}{\hbar^2}\left|W_{\alpha n}\right|^2 tf(\beta,t) \qquad (8.106)$$

hisoblash orqali o‘tish ehtimolligini ifoda qoluvchi kattalikka ega bo‘linadi, bunda

$$\beta=\frac{1}{2}(\omega_{\alpha n}-\omega),\ f(\beta,t)=\frac{\sin^2\beta t}{\pi\beta^2 t}$$

belgilashlar kiritilgan.

Ko‘p hollarda, t vaqt katta bo‘lganidagina $\left|c_{\alpha}^{(1)}(t)\right|^2$ kattalikning qiymati amaliy jihatdan muhim ahamiyatga egadir. Buni aniq ko‘rsatish uchun $t\to\infty$ da $f(\beta,t)$ funksiyaning o‘zgarishini ko‘rib chiqaylik. $\beta\neq 0$ bo‘lganida va $t\to\infty$ da $f(\beta,t)\to 0$ bo‘ladi. Agarda $\beta=0$ bo‘lsa, $f(0,t)=\frac{t}{\pi}$ bo‘ladi va t ortishi bilan $f(\beta,t)$ funksiya cheksiz orta boradi. Shunday qilib, barcha β lar bo‘yicha $f(\beta,t)$ integrallansa,

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Sin^2\beta t}{\beta^2 t}d\beta=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Sin^2 x}{x^2}dx=1$$

ni hosil qilinadi. $f(\beta,t)$ funksiyaning xossalarini δ - funksiya xossalari bilan taqqoslansa, ularni aynan bir-biriga o‘xshashliklari payqaladi. Demak, $\lim\limits_{t\to\infty} f(\beta,t)$ bo‘lganida δ - funksiyaning konkret shakllaridagi bitta mumkin bo‘lgan ko‘rinishini ifodalaydi va shuning uchun quyidagini yozish mumkin:

$$\lim_{t\to\infty}\frac{Sin^2\beta t}{\pi\beta^2 t}=\delta(\beta)=\delta\left(\frac{\omega_{\alpha n}-\omega}{2}\right)$$

Hosil bo‘lgan ifodani (8.106) formulaga qo‘yilsa va δ - funksiyaning xossalaridan foydalanilsa, quyidagi natijaga ega bo‘linadi:

$$\left|c_{\alpha}^{(1)}(t)\right|^2=\frac{4\pi}{\hbar^2}\left|W_{\alpha n}\right|^2 t\delta\left(\frac{\omega_{\alpha n}-\omega}{2}\right)= =\frac{2\pi}{\hbar}\left|W_{\alpha n}\right|^2\delta\left(E_{\alpha}-E_n^{(0)}-\hbar\omega\right)t. \qquad (8.107)$$

8.7. Yorug‘likning yutilishi va nurlanishi

Zarrachalarning elektromagnit nurlanish maydoni bilan o‘zaro ta’sirining to‘la-to‘kis nazariyasini kvant mexanikasi doirasida mukammal hal etish mumkin emas. Lekin elektromagnit maydon

nurlanishi bilan kvant sistemalari orasidagi o‘zaro ta’sir orqali kelib chiqadigan energiya va impuls saqlanish qonunlari asosida yaratilgan Eynshteynning nurlanish nazariyasiga tayangan holda, bu sohadagi bir qator masalalarni hal etish mumkin. Demak, kvant o‘tishlar nazariyasidan foydalangan holda, uyg‘ongan holatga yoki uyg‘ongan holatdan quyi holatiga o‘tishining ehtimolligini hisoblash mumkin. Birinchi holda atomning energiyasi E_m-E_n kattalikka ortadi, agarda E_n dastlabki holat energiyasi, E_m esa uyg‘ongan holatning energiyasini ifodalasa, ikkinchi holda esa xuddi shu kattalikka atomning energiyasi kamayadi. Birinchi holda E_m-E_n qo‘shimcha energiya elektromagnit nurlanish maydonidan olingan bo‘lib, yorug‘likning yutilish hodisasini tavsiflaydi, ya’ni yorug‘lik ta’sirida atom E_n holatdan E_m holatga o‘tadi. Kvant mexanikasining qonunlari o‘rinli bo‘lishi uchun E_m-E_n energiyalar ayirmasining qiymati tushayotgan yorug‘lik kvantining $\hbar\omega$ energiyasiga teng bo‘lishi shart, ya’ni Borning chastotalar shartlari bajarilishi kerak:

$$\hbar\omega = E_m-E_n \qquad (8.108)$$

Kvant o‘tishlar nazariyasidan ma’lumki, bu tenglik o‘rinli bo‘lishi, ya’ni $E_n\to E_m$ o‘tishlari mavjud bo‘lishi uchun tashqi ta’sir etuvchi spektr ichida $\omega=\frac{E_m-E_n}{\hbar}=\omega_{mn}$ chastotaga teng bo‘lgan chastota qatnashayotgan bo‘lishi lozim. Biz qarayotgan holda bu quyidagicha ifodalanadi: atomga tushayotgan yorug‘likninng spektri ichida $\varepsilon=\hbar\omega$ energiyaga teng bo‘lgan yorug‘lik kvanti albatta bo‘lishi kerak, ya’ni:

$$\varepsilon=\hbar\omega=E_m-E_n$$

bo‘lishi shart.

Ikkinchidan, vaqtga garmonik ravishda bog‘liq bo‘lgan ω_{mn} chastota qatnashayotgan g‘alayonlanishning qismi orqali $E_n\to E_m$ o‘tish amalga oshadi. Shunday qilib, agarda tushayotgan yorug‘likni monoxromatik to‘lqinlar yoyilmasi sifatida qaralsa, u holda $E_n\to E_m$ o‘tish to‘la amalga oshishi uchun bu yorig‘likda albatta ω_{mn} chastotali to‘lqin va unga tegishli bo‘lgan $\varepsilon=\hbar\omega_{mn}$ energiyali kvantlar mavjud bo‘lishi kerak. Agarda atom yorug‘likning ta’sirida uyg‘ongan E_m holatdan E_n holatga o‘tadigan bo‘lsa, u holda nurlanish hodisasi ro‘y

Qaralayotgan masala markaziy simmetrik maydonda sodir bo‘layotganligi sababli, masalaning shartlariga binoan dekart koordinata sistemasidan sferik koordinata sistemasiga o‘tish maqsadga muvofiqdir. Bu holda

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

teng bo‘lib, tegishli ikkala statsionar holatlarni ifodalovchi kvant sonlarini mos ravishda l,m va l',m' orqali belgilanadi. Endi (8.115) da berilgan matrik elementlarini sferik koordinata sistemasida qaytadan yozib chiqiladi hamda $\cos\varphi,\sin\varphi$ funksiyalar o‘rniga ularning

$$\cos\varphi=\frac{e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}}{2},\ \sin\varphi=\frac{e^{i\varphi}-e^{-i\varphi}}{2i}$$

kabi eksponensial ko‘rinishdagi ifodalari bilan almashtiriladi. (8.115) formulaga ψ_m^* va ψ_n funksiyalarining oshkor ko‘rinishda berilgan qiymatlari qo‘yilsa, quyidagi ifodaga kelinadi:

$$D_{mn}^x=-\frac{e}{2}\int_0^{\infty}R_{nl}R_{n'l'}r^3dr\int_0^{\pi}P_l^mP_{l'}^{m'}\sin^2\theta d\theta\int_0^{2\pi}\left[e^{i(m'-m+1)\varphi}+e^{i(m'-m-1)\varphi}\right]d\varphi$$

$$D_{mn}^y=-\frac{e}{2i}\int_0^{\infty}R_{nl}R_{n'l'}r^3dr\int_0^{\pi}P_l^mP_{l'}^{m'}\sin^2\theta d\theta\int_0^{2\pi}\left[e^{i(m'-m+1)\varphi}+e^{i(m'-m-1)\varphi}\right]d\varphi \qquad (8.127)$$

$$D_{mn}^z=-\frac{e}{2}\int_0^{\infty}R_{nl}R_{n'l'}r^3dr\int_0^{\pi}P_l^mP_{l'}^{m'}\sin\theta\cos\theta d\theta\int_0^{2\pi}e^{i(m'-m)\varphi}d\varphi.$$

Yuqorida olingan formulalarga asoslanib, kvant sonlari uchun tanlash qoidalarini keltirib chiqarish mumkin. Magnit kvant soni uchun shartlarni aniqlash qiyin emas. Shu maqsadda D_{mn}^z ni hisoblanadi. Ushbu kattalikdagi oxirgi

$$\int_0^{2\pi}e^{i(m'-m)\varphi}d\varphi$$

integral noldan farqli bo‘lishi uchun, $m'=m$ bo‘lishi kerak. Shunday qilib, birinchi tanlash qoidasi hosil qilinadi:

$$\Delta m=m'-m=0. \qquad (8.128)$$

Shu yo‘sindagi mulohazalarni (8.127) ifodadagi D_{mn}^x va D_{mn}^y kattaliklar uchun qo‘llanilsa, ularning oxirgi integral ostidagi eksponentalar ko‘rsatkichi noldan farqli butun sonlarga karrali bo‘lsa,

integral natijasi nolga teng bo‘ladi. Ushbu matrik elementlar noldan farqli bo‘lishi uchun va nurlanish yuz berishi uchun eksponentalar ko‘rsatkichi

$$m'-m+1=0 \quad \text{yoki} \quad m'-m-1=0$$

shartlardan birini qanoatlantirishi kerak. Bu tenglamalarni quyidagicha umumlashtirish mumkin:

$$\Delta m=m'-m=\pm 1. \qquad (8.129)$$

Yuqorida olingan (8.129) ifoda m magnit kvant soni uchun ikkinchi tanlash qoidasini beradi. Demak,umumiy holda m magnit kvant soni uchun tanlash qoidasi

$$\Delta m=0,\pm 1. \qquad (8.130)$$

shartdan iborat bo‘ladi.

Ikkinchi, ya’ni l orbital kvant soni uchun tanlash qoidasini keltirib chiqarish uchun (8.127) formuladagi D_{mn}^z kattalikni hisoblash kifoyadir, (8.128) ga binoan $m'=m$ bo‘lishi shart. U holda θ bo‘yicha integralni quyidagi ko‘rinishda yozish mumkin:

$$\int_0^{\pi}\cos\theta P_l^m(\cos\theta)P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\sin\theta d\theta. \qquad (8.131)$$

Ushbu integralda yangi $x=\cos\theta$ o‘zgaruvchi kiritilsa, u holda bu integral $\int_{-1}^{+1}xP_l^m(x)P_{l'}^{m'}(x)dx$

ko‘rinishga keladi. Shar funksiyalar nazariyasidan ma’lumki, P_l^m, P_{l-1}^m va P_{l+1}^m ketma-ket funksiyalari uchun quyidagi rekurrent formula o‘rinli bo‘ladi:

$$xP_l^m(x)=\frac{l+m}{2l+1}P_{l-1}^m(x)+\frac{l-m+1}{2l+1}P_{l+1}^m(x) \qquad (8.132)$$

P_l^m - Lejandr funksiyalarining ortogonalligi hisobga olinsa, ko‘rinib turibdiki, (8.131) integralga (8.130) ifodani qo‘yib, integrallash bajarilsa, u noldan farqli bo‘lishi uchun

$$l'-l=\pm 1$$

shartni qanoatlantirishi kerakligi kelib chiqadi.

Shunday qilib, l orbital kvant soni uchun tanlash qoidasi quyidagi ko‘rinishda bo‘ladi:

Bu formulada spinga bog'liq bo'lgan to'lqin funksiyasining qismi $S(s_{z_1}, s_{z_2})$ orqali berilgan.

Tajribadan ma'lumki, elektronlar Pauli prinsipiga bo'ysunadi. Demak, (9.6) dagi to'lqin funksiyasi elektronlarning o'rin almashtirilishiga nisbatan antisimmetrik funksiya bo'lishi kerak, ya'ni

$$\hat{P}_{12}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, s_{z_1}, s_{z_2}) = -\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, s_{z_1}, s_{z_2}) \quad (9.7)$$

(9.7) da kiritilgan $\hat{P}_{12}$ o'rin almashtrish operatori $\hat{P}'_{12}$ va $\hat{P}''_{12}$ ikkita operator ko'paytmasi shaklida berilishi mumkin. Bunda birinchi $\hat{P}'_{12}$ - o'rin almashtirish operatori $\mathbf{r}_1$ va $\mathbf{r}_2$ elektronlarning og'irlik markazi koordinatalari o'rnini almashtirsa, ikkinchi $\hat{P}''_{12}$ - operator S_{z_1} va S_{z_2} elektronlarning o'rnini almashtiradi. Demak, (9.7) ifoda o'rniga

$$\hat{P}'_{12}\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot \hat{P}''_{12}S(s_{z_1}, s_{z_2}) = -\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot S(s_{z_1}, s_{z_2}) \quad (9.8)$$

formulani olish mumkin.

Hosil qilingan ifodadan ikkita imkoniyat kelib chiqadi: birinchidan

$$\hat{P}'_{12}\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = +\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (9.9)$$

bo'lsa, u holda

$$P''_{12}S(s_{z_1}, s_{z_2}) = -S(s_{z_1}, s_{z_2}) \quad (9.10)$$

o'rinli bo'ladi, ikkinchidan

$$\hat{P}'_{12}\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (9.11)$$

bo'lsa, u holda

$$P''_{12}S(s_{z_1}, s_{z_2}) = +S(s_{z_1}, s_{z_2}) \quad (9.12)$$

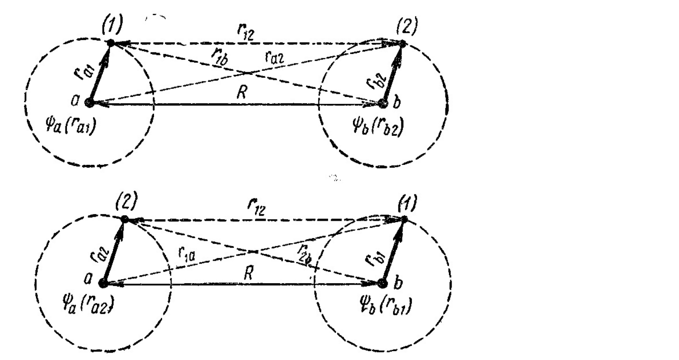
kelib chiqadi. Birinchi imkoniyatda koordinataga bog'liq bo'lgan funksiya simmetrik funksiya, spinga tegishli funksiya esa antisimmetrik funksiya orqali ifodalanishini bildiradi. Ikkinchi imkoniyat holida esa aksincha, ya'ni koordinata funksiyasi antisimmetrik, spin esa simmetrik funksiya orqali ifodalanadi. Demak, geliy atomini ifodalovchi to'lqin funksiyasi uchun ikki tipdagi to'lqin funksiyalar hosil bo'ladi:

$$\Psi_1 = \Phi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot S_s(s_{z_1}, s_{z_2}), \quad (9.13)$$

$$\Psi_2 = \Phi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \cdot S_a(s_{z_1}, s_{z_2}). \quad (9.14)$$

Ionli bog'lanish kuchlari qarama-qarshi elektr zaryadlar orasidagi bir-biriga tortishuv kuchlaridan farq qilmaydi. Masalan, ***NaCl*** molekulasida atomlarning bog'lanishi Na^+ ioni bilan Cl^- ioni o'rtasida elektrostatik tortishish kuchi asosida vujudga keladi. Kulon qonuniga asosan, qarama-qarshi zaryadli ionlar o'zaro tortishadi va Kulon kuchi ta'sirida ionlar bir-biriga yaqinlashishadi. Ammo, kichik masofalarda ularning yaqinlashuviga to'sqinlik qiladigan itarishuv kuchlari paydo bo'ladi. Natijada masofaning biror qiymatida bu ikki kuchlar tenglashadi, ya'ni metal ***(Na)*** va galloid ***(Cl)*** atomlardan tashkil topgan turg'un sistema, molekula, vujudga keladi.

Bayon etilgan ionli bog'lanish yordamida barcha molekulalarning tuzilishini tushuntirish mumkin emas. Masalan, bu bog'lanish ikkita neytral ***H*** vodorod atomidan ***H_2*** vodorod molekulasining qanday tashkil etilganini tushuntirib bera olmadi. Bunday molekulalarning tuzilishini va ularning barqarorligini ikkinchi tur bog'lanish – kovalent bog'lanish kuchlari orqali tushuntirish mumkin. Kovalent bog'lanishlarni klassik fizika nuqtayi nazardan tushuntirib bo'lmaydi, bu bog'lanishni faqat o'zaro ta'sirning kvant mexanik xususiyatlari orqali ifodalash mumkin. Uning mohiyatini vodorod molekulasi misolida muhokama qilaylik. Avvalo bir-biridan uzoqda joylashgan o'zaro ta'sirlashmaydigan ikkita vodorod atomi berilgan bo'lsin. Yadro maydonida joylashgan elektron muayyan energiyaga ega bo'lib aniq bir kvant holatida joylashgan bo'lsin. Ikkala atomni bir-biri bilan yaqinlashtirsak, ularning elektron bulutlari tutasha boshlaydi va natijada o'zaro ta'sir kuchlari paydo bo'ladi. Atomlar bir-biriga yaqinlashganda 23-rasmdagi birinchi atomning elektronini ikkinchi atom yadrosi atrofida qayd qilish ehtimolligi noldan farqli bo'ladi, shuningdek ikkinchi atomni elektronini birinchi atom yadrosi atrofida ham qayd qilish mumkin. Ikkala atomning yadrolari orasida itarishuv kuchlari paydo bo'ladi, shuning uchun ular orasidagi masofa kamayishi bilan yadrolar o'rtasidagi o'zaro ta'sir energiya orta boshlaydi. Atomlar orasidagi masofa yanada kamayishi bilan ularning elektron bulutlari shunchalik tutashib ketaveradi, bu holda qaysi elektron birinchi atomga tegishli, qaysi biri ikkinchisiga tegishli degan so'zlar o'z ma'nosini yo'qotadi. Bunda kvant mexanikasidagi zarrachalarni aynan o'xshashlik prinsipi, ya'ni zarrachalarning bir-biridan farq qilib bo'lmaslik prinsipini hisobga olish lozim.



23-rasm. Vodorod molekulasidagi o'zaro ta'sir sxemasi.

23-rasmdagi tutash chiziq o'zaro ta'sir ψ_1 va ψ_2 yechimlarga bo'ysunuvchi zarrachalar orasidagi bog'lanishni ifodalaydi, punktir chiziq esa nolinchi yaqinlashishdagi o'zaro ta'sirni ifodalaydi.

Sodir bo'lgan vaziyatda ikkita atomdan iborat sistemadagi har bir elektron bir vaqtning o'zida ikkala atomga ham tegishli bo'ladi. Bu esa o'z navbatida Pauli prinsipiga zid emas, chunki bir holatda spinlari qarama-qarshi yo'nalgan ikkita elektron mavjud bo'lishi mumkin. Masofa kamayishi bilan elektron bulutlarining zichligi orta borishi natijasida yadrolar bir-biriga maksimal yaqinlashishga harakat qiladi, ya'ni tortishuv kuchlarining natijasida molekulada kovalent bog'lanish kuchlari paydo bo'ladi. Atomlar orasidagi barqaror molekula vujudga keladi, uning turg'unligi atomlar orasidagi elektronlarning o'zaro almashuviga bog'liqdir. Demak, ikkala elektronning umumlashuvi tufayli molekuladagi kovalent bog'lanish kuchlari paydo bo'ladi.

9.4. Vodorod molekulasi

Misol tariqasida kvant mexanikasi asosida H_2 vodorod molekulasining tuzilishini ko'rib chiqaylik. Vodorod molekulasi ikkita proton va ikkita elektronlardan tashkil topgan bo'lib, uning tuzilishini kovalent bog'lanish kuchlari orqali, ya'ni faqat almashuv energiyasi asosida, tushuntirish mumkin. Vodorod molekulasi nazariyasini yaratish uchun undagi ikkita atom o'zaro ta'sir potensialini aniqlash zarur. Bu

$$(\varepsilon - K)c_1 + (\varepsilon S^2 - A)c_2 = 0, \quad (9.67)$$

$$(\varepsilon S^2 - A)c_1 + (\varepsilon - K)c_2 = 0. \quad (9.68)$$

Bu ikkala tenglamadan ε uchun quyidagi tenglamani hosil qilish mumkin:

$$(\varepsilon - K)^2 - (\varepsilon S^2 - A)^2 = 0. \quad (9.69)$$

Yuqoridagi tenglamaning ikkita ildizi quyidagi ko'rinishga ega:

$$\varepsilon_1 = \frac{K - A}{1 - S^2} \quad (9.70)$$

va

$$\varepsilon_2 = \frac{K + A}{1 + S^2}. \quad (9.71)$$

Bu topilgan ikkala ildizni navbatma-navbat (9.67) tenglamaga qo'yilsa. $\varepsilon = \varepsilon_1$ da

$$c_1 = -c_2 \quad (9.72)$$

va $\varepsilon = \varepsilon_2$ bo'lganida

$$c_1 = c_2 \quad (9.73)$$

natijaga kelinadi. Demak, izlayotgan yechimlarni quyidagi ko'rinishda yozish mumkin: birinchi yechim antisimmetrik yechim bo'lib,

$$E_a = 2E_0 + \frac{K - A}{1 - S^2}, \Phi_a = \psi_1 - \psi_2 \quad (9.74)$$

ko'rinishida bo'ladi, ikkinchisi esa simmetrik yechim bo'lib,

$$E_S = 2E_0 + \frac{K + A}{1 + S^2}, \Phi_S = \psi_1 + \psi_2 \quad (9.75)$$

bo'ladi. Olingan yechimlar yordamida (9.42) da ifodalangan vodorod molekulasining o'zaro ta'sir potensialini ikki holat uchun, ya'ni simmetrik va antisimmetrik holatlar uchun, yozish mumkin:

$$U_a = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + \frac{K - A}{1 - S^2}, \quad (9.76)$$

$$U_S = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + \frac{K + A}{1 + S^2}. \quad (9.77)$$

Bunda s va a indekslar orqali simmetrik va antisimmetrik to‘lqin funksiyalari belgilangan. Tajribalardan ma’lum bo‘ldiki, geliy atomining normal holatida uning to‘lqin funksiyasi koordinatalar bo‘yicha simmetrik funksiya va spinlar bo‘yicha antisimmetrik bo‘ladi. Geliy atomining bunday holati parageliy deyiladi, to‘liq spin nolga teng bo‘ladi va (9.14) to‘lqin funksiyasi bilan ifodalanadi. Agarda to‘liq spin birga teng bo‘lsa, ya’ni to‘lqin funksiyasi koordinatalar bo‘yicha antisimmetrik funksiya va spinlar bo‘yicha simmetrik funksiya bo‘lsa, u holda geliy atomi ortogeliy holatida bo‘ladi.

9.2 Geliy atomining yaqinlashgan miqdoriy nazariyasi

Geliy atomining kvant sathlarini hisoblash uchun (9.5) tenglamaga murojaat qilinadi. Bu tenglamaning aniq yechimini olish mumkin emas, shu tufayli mazkur masalani hal qilish uchun bir qator taqribiy usullar ishlab chiqilgan. Bular ichida ma’lum bo‘lgan g‘alayonlanish nazariyasi usulidan foydalanilsa, geliy atomi asosiy holat energiyasi va to‘lqin funksiyalarini hisoblash mumkin. Yuqorida spinga bog‘liq bo‘lgan o‘zaro ta’sir kuchlarni hisobga olinmasa haqida gaplashgan edik. U holda, (9.6) dagi ifodadan foydalanilsa, (9.5) dagi tenglamada $S(s_{z_1}, s_{z_2})$ ni qisqartirib quyidagi tenglamaga kelinadi:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar}{2m}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}\right)\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=E\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2). \qquad (9.15)$$

Bu tenglamadagi $\hat{H}$ operatorni quyidagicha yozish mumkin:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=\hat{H}_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)+\hat{W}(\mathbf{r}_{12})=\hat{H}_0(\mathbf{r}_1)+\hat{H}_0(\mathbf{r}_2)+\hat{W}(\mathbf{r}_{12}) \qquad (9.16)$$

ya’ni

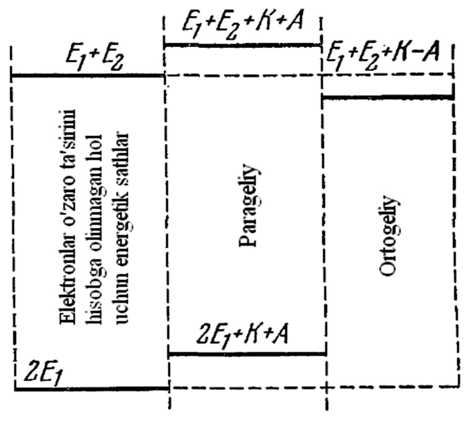
$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2} \qquad (9.17)$$

va

$$\hat{W}(r_{12})=\frac{e^2}{r_{12}} \qquad (9.18)$$

$\hat{H}_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ – operator ikkala elektronning o‘zaro ta’sirini hisobga olmagan holdagi yadro maydonidagi elektronlarning to‘la energiyasini

sathlari parageliy va ortogeliy sathlarning turli energetik qiymatlarga tegishli bo‘lgan sathlariga ajraladi: parageliy sathlarga $E_n + E_m + K + A$ sath o‘rinli; ortogeliyga esa $E_n + E_m + K - A$ sath tegishlidir (22-rasm).



22-rasm. Geliy atomining almashuv ajralish sxemasi.

9.3. Molekulalarning tuzilishi

Barcha kimyoviy xususiyatlarni o‘zida mujassamlashtirgan bir jinsli moddaning eng kichik zarrachasi molekula deb ataladi. Molekulalar bir xil yoki turli xil elementlarning atomlaridan tashkil topgan bo‘ladi. Masalan, vodorod (H_2), kislorod (O_2) molekulalari bir xil atomlardan tuzilgan molekulalar tarkibiga kirsa, osh tuzi molekulasi ($NaCl$) esa har xil atomlardan tashkil topgan molekulaga misol bo‘ladi. Shuni ta’kidlash lozimki, molekula barqaror, turg‘un tuzilishga ega bo‘lgan sistema hisoblanadi. Bu esa o‘z navbatida molekulani tashkil etuvchi atomlararo ta’sirlashuvchi kuchlar bilan bevosita bog‘langanligidan dalolat beradi. Keling bu bog‘lanishning mohiyati bilan tanishib chiqaylik.

Tajribadan ma’lum bo‘ldiki, molekulalarning barqarorligi, atomlar o‘rtasida vujudga keladigan kimyoviy bog‘lanish kuchlar ta’siri ostida amalga oshiriladi. Tabiatda ikki xil kimyoviy kuchlar mavjudligi aniqlandi: ionli bog‘lanish kuchlari va kovalent bog‘lanish kuchlari.

energiya ikkala yadro orasidagi $\frac{e^2}{R}$ Kulon potensial energiyasi, hamda atomlarning elektronlar orasidagi $E(R)$ potensial energiyasidan iborat deb qarash mumkin. Shunday qilib, izlanayotgan $U(R)$ energiya ikki qismdan iborat bo‘lib, u

$$U(R)=\frac{e^2}{R}+E(R) \qquad (9.41)$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. Bunda R –atomlar yadrolari orasidagi masofani ifodalaydi.

Demak, ko‘rilayotgan masalada $E(R)$ ni aniqlash kerak. Ravshanki, atomlarning yadrolari orasidagi masofa juda katta bo‘lganida bir atomning ikkinchi atomdagi elektronning harakatiga bo‘lgan ta’sirini hisobga olmasak ham bo‘ladi, shuning uchun $R\to\infty$ da elektronlarning energiyasi har bir vodorod atomining elektronlar energiyasining yig‘indisiga teng bo‘ladi. Bizni keyinchalik quyi energetik holatda joylashgan vodorod molekulasi qiziqtiradi. Agarda normal holatdagi vodorod atomining energiyasi $E_o = 13{,}55eV$ dan iborat ekanligi eslansa, u holda katta R masofalar uchun vodorod molekulasining energiyasi $2E_0$ ga teng bo‘ladi. Umumiy holda

$$E(R)=2E_0+\varepsilon(R) \qquad (9.42)$$

ifodani yozish mumkin. Olingan (9.42) formulada $\varepsilon(R)$ kattalik atomlarning bir-biriga yaqinlashgandagi elektronlar energiyasining o‘zgarishini ko‘rsatadi, boshqacha aytganda, har bir elektron ikkala atomga tegishli ekanligini bildiradi va atomlar orasida elektronlar almashuvi sodir bo‘ladi. Shu tufayli o‘zaro almashuv kuchlari vujudga kelib, kovalent bog‘lanishni ifodalab beradi. Shunday qilib, ushbu paragrafning asosiy maqsadi o‘zaro ta’sir energiyani hisoblashdan iborat.

Elektronlar sistemasining E - to‘la energiyasi shu sistema uchun yozilgan Shredinger tenglamasidan aniqlanadi, ya’ni

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\Phi=E\Phi \qquad (9.43)$$

bo‘ladi. Bunda $\hat{H}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ sistemaning gamiltoniani bo‘lib, quyidagicha ko‘rinishda bo‘ladi:

mos kelgan bir jinsli bo‘lgan tenglamaga ega bo‘linadi. Matematika kursidan ma’lumki, bir jinsli bo‘lmagan tenglamaning yechimini olish uchun uning o‘ng tomonidagi had bir jinsli bo‘lgan tenglamaning yechimiga ortogonal bo‘lishi kerak. Boshqacha aytganda, quyidagi tenglama o‘rinli bo‘lishi lozim:

$$\int\left\{[\varepsilon-W(1,2)]c_1\psi_1-[\varepsilon-W(2,1)]c_2\psi_2\right\}\psi_1 d\upsilon_1 d\upsilon_2=0 \qquad (9.62)$$

bunda $d\upsilon_1 = dx_1dy_1dz_1, d\upsilon_2 = dx_2dy_2dz_2$ ga teng bo‘lib, c_1 va c_2 koeffitsiyentlarni aniqlovchi birinchi tenglama hosil qilindi. Lekin qo‘yilgan masalani to‘la- to‘kis hal qilish uchun ushbu tenglamaga o‘xshash ikkinchi tenglamani ham hosil qilishga majbur bo‘linadi. Demak, (9.59) dagi ifodada $\hat{H}\varphi$ hadni quyidagi ko‘rinishda olish lozim:

$$\hat{H}\varphi=\left[\hat{H}_a(2)+\hat{H}_b(1)\right]\varphi+W(2,1)\varphi.$$

Yuqoridagi tenglik hosil qilinganda yana kichik kattalik $W\varphi$ hisobga olinmaydi. Shunday qilib, (9.61) tenglama o‘rniga quyidagi ifodani yozish mumkin:

$$[H_a(2)+H_b(1)]\varphi-2E_0\varphi=[\varepsilon-W(1,2)]c_1\psi_1+[\varepsilon-W(2,1)]c_2\psi_2. \qquad (9.61')$$

Olingan tenglamaning chap tomoni ψ_2 yechimga ega bo‘lgan (9.56) tenglama bilan mos keladi, φ uchun bir jinsli bo‘lmagan tenglamaninig o‘ng tomoni esa ψ_2 yechimga ega bo‘lgan bir jinsli tenglamaga ortogonal bo‘lishi kerak, ya’ni:

$$\int\left\{[\varepsilon-W(1,2)]c_1\psi_1+[\varepsilon-W(2,1)]c_2\psi_2\right\}\psi_2 d\upsilon_1 d\upsilon_2=0. \qquad (9.63)$$

tenglama o‘rinli bo‘lishi kerak.

Keyingi hisoblashlarni soddalashtirish maqsadida quyidagi belgilashlarni kiritiladi:

$$K=\int W(1,2)\psi_1\psi_1 d\upsilon_1 d\upsilon_2=\int W(2,1)\psi_2\psi_2 d\upsilon_1 d\upsilon_2 \qquad (9.64)$$

$$A=\int W(1,2)\psi_2\psi_1 d\upsilon_1 d\upsilon_2=\int W(2,1)\psi_1\psi_2 d\upsilon_1 d\upsilon_2. \qquad (9.65)$$

va

$$S^2=\int\psi_1\psi_2 d\upsilon_1 d\upsilon_2. \qquad (9.66)$$

U holda, (9.62) va (9.63) tenglamalarni quyidagi ixcham ko‘rinishda yozish mumkin:

beradi, $\hat{W}(\mathbf{r}_{12})$ - operator esa elektronlarning o‘zaro ta’sir energiyasini ifodalaydi. (9.15) tenglama g‘alayon operatori sifatida qaralishi mumkin. Boshqacha aytganda, (9.18) o‘zaro ta’sir energiyasini kichik tuzatma deb qarash mumkin va nolinchi yaqinlashishda yadro maydonida elektronlar harakatini bir-biri bilan o‘zaro ta’sir qilmaydi deb qarash mumkin.

Qaralayotgan harakat Kulon maydonidagi harakat bo‘lganligi sababli uning to‘lqin funksiyalari va kvant sathlari ma’lum. Birinchi elektron E_n energiyaga ega bo‘lib, $\psi_n(\mathbf{r}_1)$ holatida joylashgan bo‘lsin, ikkinchisi esa - E_m energiya va $\psi_m(\mathbf{r}_2)$ holatda bo‘ladi. U holda E_n+E_m energiyaga tegishli bo‘lgan nolinchi yaqinlashishdagi to‘lqin funksiyani

$$\psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = -\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2) \qquad (9.19)$$

shaklida tanlab olish mumkin. Demak,

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \hat{H}_0(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2) + \hat{H}_0(\mathbf{r}_2)\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2) = \\ = E_n\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2) + E_m\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2)$$

ya’ni

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = (E_n + E_m)\psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \qquad (9.20)$$

bo‘ladi. Shu bilan birga, E_n+E_m energiya ikkinchi holatga ham tegishli bo‘ladi, ya’ni bu holda birinchi elektron E_m holatda, ikkinchisi esa E_n holatda bo‘lishi mumkin.

Bu holatning to‘lqin funksiyasi

$$\psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = -\psi_m(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2) \qquad (9.21)$$

ko‘rinishda bo‘ladi va (9.20) dagi ifodaga o‘xshash quyidagi

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = (E_n + E_m)\psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \qquad (9.22)$$

ifodani yozish mumkin.

Shunday qilib, g‘alayonlanmagan E_n+E_m sistemaga birinchi va ikkinchi elektronlar holatlarining almashuvi bilan farq qiladigan ψ_1 va ψ_2 ikkita holat tegishli bo‘ladi. Bu holda aynish holatiga duch kelinadi. Geliy atomining nazariyasida uchraydigan bunday aynish almashuv aynishi deyiladi. Demak, g‘alayonlanish nazariyasining umumiy qoidasiga binoan nolinchi yaqinlashishdagi to‘lqin funksiyasi

nazariyasini qo‘llash natijasida geliy atomining holatlari uchun simmetrik va antisimmetrik to‘lqin funksiyalari mavjud bo‘ladi, ularga mos kelgan energiya sathlari ham aniqlanadi:

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2), E_S = E_n + E_m + K + A, \qquad (9.37)$$

$$\Phi_a(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - \psi_2), E_a = E_n + E_m + K - A. \qquad (9.38)$$

Yuqoridagi ifodalarda $\frac{1}{\sqrt{2}}$ ko‘paytuvchi normallashtirish shartini bajarish uchun kiritilgan.

Shunday qilib, *K* kattalik elektronlarning Kulon o‘zaro ta’siri bilan bog‘liq energiyasini aniqlab bersa, *A* kattalik esa elektronlarning almashuv energiyasini ifodalaydi. Demak, elektronlarning almashuvi tufayli geliy atomida ikkita holat mavjud bo‘ladi: Φ_S - simmetrik va Φ_a - antisimmetrik holatlar, bunda Φ_S to‘lqin funksiya elektronlarning spinlari qarama-qarshi yo‘nalishda bo‘lgan holatni ifodalaydi va parageliy holatini tavsiflaydi; Φ_a to‘lqin funksiyasi esa elektronlarning spinlarining yo‘nalishi parallel bo‘lgan holatni ifodalaydi va ortogeliy holatini tavsiflaydi. Shunday qilib, almashuv energiyasi tufayli ikki xil holat mavjudligi kelib chiqdi: Φ_S simmetrik va Φ_a antisimmetrik holatlar.

Geliy atomining termlarini va optikaviy spektrlari tuzilishini ko‘rib chiqishdan ma’lumki, geliy atomining asosiy $^1S_0$ holatida atomining ikkala elektroni ham ^1S holatida joylashgan va Pauli prinsipiga binoan ularning spinlari o‘zaro qarama-qarshi yo‘nalgan bo‘ladi. Demak, geliy atomining asosiy holati simmetrik funksiya (parageliy) orqali ifodalanishi kerak. Bu holda $\psi_1=\psi_2$ va $\Phi_a=0$ bo‘lishi lozim. Shunday qilib, geliy atomining quyi holati uchun yagona yechimining ko‘rinishi va energetik sathning qiymati quyidagicha ifodalangan bo‘ladi:

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1)\psi_{100}(\mathbf{r}_2) \qquad (9.39)$$

$$E = 2E_1 + K + A. \qquad (9.40)$$

Parageliy va ortogeliy holatlar energiyalarning farqi (9.37) va (9.38) formulalarga binoan *2A* ga teng bo‘ladi. Demak, geliy atomining

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{a_1}} - \frac{e^2}{r_{b_2}} - \frac{e^2}{r_{b_1}} - \frac{e^2}{r_{a_2}}. \qquad (9.44)$$

Ushbu formulaga ikkala elektronning kinetik energiya operatorlaridan tashqari vodorod molekulasining to‘la potensial energiyasi ham kiradi. Bu potensial energiya elektronlarning potensial energiyasi va protonlarning o‘zaro Kulon itarishish potensial energiyasidan iborat, ya’ni

a) $\left(-\frac{e}{r_{a_1}}\right)$ had birinchi elektronni va birinchi yadroning potensial energiyasini,

b) $\left(-\frac{e}{r_{b_2}}\right)$ had ikkinchi yadroni va ikkinchi elektronning potensial energiyasini,

c) $\left(-\frac{e}{r_{b_2}}\right)$ had ikkinchi yadroni va birinchi elektronning potensial energiyasini,

d) $\left(-\frac{e^2}{r_{b_2}}\right)$ had birinchi yadroni va ikkinchi elektronning potensial energiyasini va nihoyat,

e) $\left(-\frac{e^2}{r_{12}}\right)$ had ikkala elektronning o‘zaro ta’sir energiyalarini ifodalaydi (23-rasmga qarang)

Hosil bo‘lgan (9.43) tenglama faqat taqribiy usullar yordamida yechiladi. (9.43) tenglamani analitik yechib bo‘lmaydi, ammo qo‘pol yaqinlashish bo‘lsa ham geliy atomi uchun (9.15) tenglamani yechishda foydalanilgan g‘alayonlanish usulidan foydalanib yechishga harakat qilinadi. Nolinchi yaqinlashishda molekulaning to‘lqin funksiyasini hosil qilishda ikkita o‘zaro ta’sirlashmaydigan vodorod atomining to‘lqin funksiyalarini tanlab olish mumkin. Bu yaqinlashishga energiyaning tegishli bo‘lgan qiymati *2E₀* ga teng bo‘ladi.

Yuqoridagi usulni qo‘llash uchun qaralayotgan sistemaning (9.44) dagi gamiltonianini batafsil va har tomonlama ko‘rib chiqish lozim.

$$\psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \psi_a(r_{a_2})\psi_b(r_{b_1}). \qquad (9.57)$$

Shunday qilib, yadrolar orasidagi *R* masofa katta bo‘lganida (9.43) tenglama $2E_0$ energiyaga tegishli bo‘lgan ikkita (9.52) va (9.57) formulalar orqali ifodalangan yechimlarga ega bo‘ladi. Agarda endi atomlar orasidagi *W(1,2)* o‘zaro ta’sirlari hisobga olinsa yechimni ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$\Phi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \varphi \qquad (9.58)$$

bunda c_1 va c_2 lar keyinchalik aniqlash lozim bo‘ladigan koeffitsiyentlar, φ esa nolinchi yaqinlashishga tegishli tuzatmadir.

Shu tuzatmani hisobga olishimizda va ikkinchi tartibli tuzatmalarni hisobga olmaganimizda (9.58) ni (9.43) tenglamaga qo‘yilsa va (9.42) ni nazarda tutilsa, quyidagi ifodaga kelinadi:

$$c_1\hat{H}\psi_1 + c_2\hat{H}\psi_2 + \hat{H}\varphi = 2E_0(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) + \varepsilon(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) + \\ +(2E_0 + \varepsilon)\varphi \qquad (9.59)$$

Endi (9.59) ning chap tomonida (9.47) va (9.53) hisobga olinsa, quyidagi hosil bo‘ladi:

$$c_1[\hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2) + \hat{W}(1,2)]\psi_1 + c_2[\hat{H}_a(2) + \hat{H}_b(1) + \hat{W}(1,2)]\psi_2 + \\ +[\hat{H}_1(1) + \hat{H}_b(2)]\varphi + \hat{W}(1,2)\varphi = 2E_0(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) + \\ +\varepsilon(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) + (2E_0 + \varepsilon)\varphi. \qquad (9.60)$$

Hosil bo‘lgan yuqoridagi tenglamada $E=2E_0$ ga tegishli (9.49) va (9.56) yechimlar hisobga olinsa va kichik miqdor bo‘lgan $W\varphi$, $\varepsilon\varphi$ ko‘paytmalar qatnashgan hadlarni inobatga olinmasa,

$$[H_a(1) + H_b(2)]\varphi - 2E_0\varphi = [\varepsilon - W(1,2)]c_1\psi_1 + [\varepsilon - W(2,1)]c_2\psi_2 \qquad (9.61)$$

tenglama olinadi.

Shunday qilib, ε xususiy qiymatga va $\psi(\mathbf{r})$ to‘lqin funksiyasiga tuzatmalar topish uchun bir jinsli bo‘lmagan tenglamani hosil qilindi. Bu tenglamani o‘zida yana c_1 va c_2 koeffitsiyentlarni ham aniqlash lozim. Avvalo aytib o‘tish kerakki, (9.61) tenglamaning o‘ng tomonida nol bo‘lganida, u holda $\psi_1(\mathbf{r})$ yechimli φ funksiya uchun (9.49) bilan aynigan holatlarning superpozitsiyasidan tashkil topgan bo‘lish kerak, ya’ni

$$\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = c_1\psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) + c_2\psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2). \tag{9.23}$$

G‘alayonlanish nazariyasining asosiy tenglamalaridan foydalanib, g‘alayonlashgan sistemaning c_1 va c_2 amplitudalarini hamda E energiyaga tegishli bo‘lgan kvant sathlari aniqlanadi. Bizning holda ikki karrali almashuv aynishi mavjud bo‘lganligi sababli quyidagi tenglamalar o‘rinlidir:

$$\left.\begin{aligned}(E^0_{nm} + W_{11} - E)c_1 + W_{12}\, c_2 = 0\\ W_{12}c_1 + (E^0_{nm} + W_{22} - E)c_2 = 0\end{aligned}\right\} \tag{9.24}$$

Bunda

$$E^0_{nm} = E_n + E_m \tag{9.25}$$

bo‘lib, g‘alayonlanmagan harakatning energiyasini beradi, W_{11}, W_{12}, W_{21} va W_{22} kattaliklar W g‘alayonlanish energiyasining matrik elementlarini ifodalaydi va (9.18) formula bilan aniqlangan edi. Bunda

$$W_{11} = \int \psi_1^* \hat{W} \psi_1 dv_1 dv_2, \tag{9.26}$$

$$W_{12} = \int \psi_1^* \hat{W} \psi_2 dv_1 dv_2. \tag{9.27}$$

bo‘ladi va $dv_1 = dx_1dy_1dz_1$, $dv_2 = dx_2dy_2dz_2$ bo‘ladi.

G‘alayonlangan sistemaning E energiya sathlarini topish uchun (9.24) tenglamalardan determinant tuziladi:

$$\begin{vmatrix} W_{11} - \varepsilon & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \tag{9.28}$$

bunda

$$\varepsilon = E - E^0_{nm} = E - (E_n + E_m) \tag{9.29}$$

energiyaga vujudga keladigan tuzatmani ifoda qiladi. Endi (9.26) va (9.27) dagi matrik elementlarning ko‘rinishi aniqlab olinadi. Bu masalani hal qilish uchun (9.26) va (9.27) formulalarga ψ_1 va ψ_2 funksiyalarning (9.19) qiymatlarini va (9.18) W ning qiymatini o‘rniga qo‘yiladi va quyidagicha natijaga kelinadi:

$$W_{11} = e^2 \int \frac{|\psi_n(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_m(\mathbf{r}_2)|^2}{r_{12}} dv_1 dv_2 = W_{22}. \tag{9.30}$$

$$W_{12} = e^2 \int \frac{\psi_n^*(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2)\psi_m^*(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} dv_1 dv_2. \tag{9.31}$$

Hisoblashlarni davom ettirib,

$$W_{12} = W_{21} = W_{12}^* = W_{21}^* \tag{9.32}$$

ni ko‘rsatish mumkin. Shu bilan birga

$$W_{11} = W_{22} = K, \qquad W_{12} = W_{21} = A \tag{9.33}$$

belgilash kiritilsa (9.28) dagi determinantni

$$\begin{vmatrix} K - \varepsilon & A \\ A & K - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \tag{9.34}$$

shaklida yozish mumkin va bu ifodadan

$$(K - \varepsilon)^2 = A^2.$$

Yoki

$$\varepsilon = K \pm A \tag{9.35}$$

natija kelib chiqadi.

Yuqorida kiritilgan yangi belgilashlarda (9.24) tenglamalar sistemasi

$$\left.\begin{aligned}(K - \varepsilon)c_1 + Ac_2 = 0\\ (K - \varepsilon)c_2 + Ac_1 = 0\end{aligned}\right\} \tag{9.36}$$

ko‘rinishda ifodalanadi. Olingan (9.36) tenglamalarga (9.35) dagi $\varepsilon = K + A$ ildiz qo‘yilsa, $c_1 = c_2$ natija olinadi. Agar tenglamalarga (9.35) dagi ikkinchi $\varepsilon = K - A$ ildiz qo‘yilsa, u holda $c_1 = -c_2$ natijaga kelinadi. Demak, (9.23) yechim quyidagi ko‘rinishda bo‘ladi: g‘alayonlanish

(9.44) gamiltoniandagi birinchi elektronni (a) yadro atrofidagi gamiltonianini $H_a(1)$ orqali belgilanadi (23-rasm). Uning ko‘rinishi

$$\hat{H}_a(1) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{a_1}} \tag{9.45}$$

kabi bo‘ladi. Shunga o‘xshash ikkinchi elektronning (b) yadro atrofidagi harakati $H_b(2)$ bilan belgilanadi. Uning ko‘rinishi esa

$$\hat{H}_b(2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{b_2}} \tag{9.46}$$

bo‘ladi. U holda, to‘la gamiltonian uchta qismdan iborat bo‘ladi, ya’ni

$$\hat{H} = \hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2) + \hat{W}(1,2) \tag{9.47}$$

bunda

$$\hat{W}(1,2) = -\frac{e^2}{r_{a_2}} - \frac{e^2}{r_{b_1}} + \frac{e^2}{r_{12}}. \tag{9.48}$$

Shunday qilib, (9.47) tenglikdan ko‘rinib turibdiki, ikkita vodorod atomi bir-biriga yaqinlashtirilganda ham, har bir atomdagi elektron bilan o‘zining protoni orasidagi o‘zaro ta’sirlashuv kuchlari elektronlar orasidagi o‘zaro ta’sirga nisbatan ancha kattadir, ya’ni $\hat{W}(1,2)$ hadni $\hat{H}_a(1)$ va $\hat{H}_b(2)$ hadlarga nisbatan hisobga ancha kichik deb qabul qilish mumkin. Shuning uchun elektronlararo o‘zaro ta’sir potensialni qolgan potensial energiyalarga nisbatan tuzatma sifatida qarash mumkin. Ya’ni, (9.48) dagi $\hat{W}(1,2)$ hadni bu ikki asosiy potensial energiya operatoriga tuzatma sifatida olinadi. Demak, nolinchi yaqinlashishda (9.43) tenglamada $\hat{W}(1,2)$ kattalik hisobga olinmasa ham bo‘ladi va

$$\left[\hat{H}_a(1) + \hat{H}_b(2)\right]\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = E\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \tag{9.49}$$

tenglama hosil qilinadi. Bu tenglama birinchi elektron (a) atomda ikkinchisi esa (b) atomda joylashgandagi ikkita o‘zaro ta’sirlashmaydigan vodorod atomining harakatini ifodalaydi. Uning yechimlarini quyidagicha yozish mumkin

$$\hat{H}_a(1)\psi_a(\mathbf{r}_{a_1}) = E_0\psi_a(\mathbf{r}_{a_1}), \tag{9.50}$$

$$\hat{H}_b(2)\psi_b(\mathbf{r}_{b_2}) = E_0\psi_b(\mathbf{r}_{b_2}), \tag{9.51}$$

Mana endi (9.49) tenglamaning yechimida (9.50) va (9.51) dagi to‘lqin funksiyalardan foydalanish mumkin va ikkita erkin vodorod atomidan iborat sistemaning to‘lqin funksiyasi

$$\psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \psi_a(r_{a_1})\psi_b(r_{b_2}) \tag{9.52}$$

ko‘paytmasiga teng va bu yechimga tegishli energiya qiymati $2E_0$ ga teng bo‘ladi.

Agarda aynish mavjud bo‘lmasa, (9.52) dagi yechim bilan chegaralansa ham bo‘ladi va uni nolinchi yaqinlashishdagi yechim sifatida qarash mumkin. Lekin qaralayotgan masalada elektronlarning o‘rnini almashtirishi mavjud bo‘lganligi sababli, mazkur almashuv tufayli aynish holati paydo bo‘ladi. Demak, (9.52) dagi ifodalangan yechim bilan bir qatorda ikkinchi yechim ham mavjud bo‘lishi kerak, ya’ni bu holda birinchi *(a)* atomda *(2)* elektron va *(b)* ikkinchi atomda *(1)* elektron joylashgan bo‘ladi. Ushbu gamiltonianni quyidagicha yozish mumkin:

$$\hat{H} = \hat{H}_a(2) + \hat{H}_b(1) + \hat{W}(2,1) \tag{9.53}$$

bunda

$$\hat{H}_a(2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{a_2}} \tag{9.54'}$$

$$\hat{H}_b(1) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{b_1}} \tag{9.54''}$$

va

$$\hat{W}(2,1) = -\frac{e^2}{r_{a_1}} - \frac{e^2}{r_{b_2}} + \frac{e^2}{r_{12}} \tag{9.55}$$

ifodalar hosil qilinadi. Gamiltonianni (9.53) formula orqali ifodalaganda (9.43) dagi tenglama

$$\left[\hat{H}_a(2) + \hat{H}_b(1)\right]\Phi = E\Phi \tag{9.56}$$

shaklda yoziladi. Bu esa (9.49) dagi tenglamaga o‘xshash tenglama hosil bo‘lganligini bildiradi va uning yechimini quyidagicha ko‘rinishda yozish mumkin:

X bob
SOCHILISH NAZARIYASI

10.1 Sochilishning amplitudasi va kesimi

Klassik mexanikada ikkita zarrachaning o‘zaro ta’siri natijasida biror zarrachaning harakat yo‘nalishi o‘z yo‘nalishini o‘zgartirsa, bunday hodisa sochilish hodisasi deb yuritiladi va bu holda ikkala zarrachaning tezliklari va nishon masofasi orqali ularning to‘qnashuvi to‘la-to‘kis aniqlanadi. Kvant mexanikasida esa sochilish hodisasini kengroq ma’noda tushuniladi, chunki zarrachalarni o‘zaro ta’siri natijasida ularning ichki holatlarining o‘zgarishi ham yuz berishi mumkin. Ma’lumki, sochilishni tadqiq qilishning eng yaxshi usullaridan biri – qo‘zgalmas joylashgan atomni yoki zarrachani katta tezlikka ega bo‘lgan elektronlar yoki radioaktiv moddalarning α zarrachalari bilan bombardimon qilish. O‘zaro ta’sir natijasida birlamchi dastadagi zarrachalarning bir qismi o‘zining harakatini o‘zgartiradi yoki boshqa zarrachalarga aylanadi. Shu tufayli kvant mexanikasida ikki xil sochilish to‘g‘risida gap yuritiladi: elastik va noelastik to‘qnashuvlar. Birichi holda, ya’ni elastik sochilishda, zarrachalarning soni, energiyasi, ichki tuzilishlari o‘zgarmasdan qoladi, faqat ularning harakat yo‘nalishi o‘zgaradi. Ikkinchi holda esa, ya’ni noelastik to‘qnashuvlar natijasida, zarrachalarning energiyasi o‘zgaradi, yangi zarrachalar paydo bo‘ladi va hokazo. Haqiqatan ham, atom yadrosining mavjudligi Rezerford tomonidan aniqlangan α zarrachalarning sochilishi natijasida isbotlandi.

Moddaning mikroskopik tartibini aniqlashda o‘zaro to‘qnashuv hodisalarining har tomonlama tahlili markaziy o‘rin tutadi. Umuman olganda, zarrachalarning o‘zaro ta’siri to‘g‘risidagi barcha ma’lumotlar ularning sochilishi haqidagi tajribalarda aniqlangan edi. Yadrodagi neytronlarning sochilishini tahlil qilish natijasida mashhur fizik Nils Bor tomonidan yadro tuzulishining hozirgi zamon tassavurlarini ifodalab berish imkoniyati yaratildi. Umuman olganda, zarrachalarning o‘zaro ta’siri to‘g‘risidagi barcha ma’lumotlar sochilish qonunlarining o‘rganilishi natijasida kelib chiqishi ayon bo‘ldi.

Zarrachalar dastasining sochilishini xarakterlovchi kattalik sochilishning differensial effektiv kesimi orqali ifoda qilinadi. Ushbu

kattalik $d\Omega$ fazoviy burchak ichida birlik vaqtda sochilgan $dN_{soch.}$ zarrachalar sonining j_{tush} tushayotgan zarrachalar oqimi zichligining nisbati orqali aniqlanadi, ya’ni differensial effektiv kesim

$$d\sigma(\theta,\varphi)=\frac{dN_{soch}(\theta,\varphi)}{j_{tush}} \tag{10.1}$$

munosabat orqali aniqlanadi. Bunda θ va φ burchaklar – sochilayotgan zarrachalarning harakat yo‘nalishlarini aniqlab beradi. Soddalashtirish maqsadida dN_{soch} kattalikni

$$dN_{soch}(\theta,\varphi)=j_{soch}(\theta,\varphi)ds$$

orqali ifodalash ancha qulayliklarga olib keladi, ya’ni $dN_{soch}(\theta,\varphi)$ kattalikni sochilgan zarrachalar oqimi zichligini ushbu oqimga perpendikulyar joylashgan ds yuzaga ko‘paytmasi sifatida qarash mumkin. Bunda $ds=r^2d\Omega$ bo‘lib, differensial effektiv kesimni quyidagi formula orqali aniqlash mumkin:

$$d\sigma=\frac{j_{soch}}{j_{tush}}ds. \tag{10.2}$$

Kvant mexanikasida j_{soch} va j_{tush} oqimlarning zichligi deganda ushbu kattaliklarning tegishli ehtimollik oqimlarning zichliklari tushuniladi.

Ushbu bobda faqat elastik sochilishlar, ya’ni zarrachalar soni o‘zgarmaydi yoki ularning ichki holatining o‘zgarishi yuz bermaydigan sochilish bilan ish ko‘riladi. Sochilish jarayonida ikkita zarrachaning o‘zaro ta’siri o‘rinli bo‘lishi nazarda tutiladi, ya’ni sochuvchi va sochilayotgan zarrachalar bilan ish yuritiladi. Bu holda zarrachalarning o‘zaro ta’sir energiyasi ularning orasidagi masofaga bog‘liq bo‘ladi va shuning uchun elastik sochilish to‘g‘risidagi masalani har qanday ikki jism masalasi kabi keltirilgan massali, bitta zarrachaning qo‘zg‘almas kuch markazi maydonidagi sochilish masalasiga keltirish mumkin. Bu masalani hal qilish uchun zarrachalarning energiya markazi qo‘zg‘almas bo‘lgan koordinatalar sistemasiga o‘tiladi, ya’ni masalani inersiya markazi qo‘zg‘almas bo‘lgan sistemada ko‘rib chiqiladi. Ammo, tajribalarni o‘tkazganimizda laboratoriya koordinata sistemasida sochilish masalasini tekshirib chiqish zaruriyati paydo bo‘ladi, shuning uchun, agarda tashqi kuchlar maydonida bitta zarracha harakatining masalasi hal qilingan bo‘lsa, u holda natijaviy ma’lumotlarni

zarrachaning sochilishini hisoblab chiqaylik. Faraz qilaylik, Ze-zaryadli atomning yadrosi koordinata boshida joylashgan va atomda $\mathbf{r}''$ nuqtada joylashgan elektronlar to‘plami hisobiga vujudga keladigan elektr zaryadi esa fazoda $-e\rho(r'')$ zichlik bilan taqsimlangan bo‘lsin. U holda, $\mathbf{r}$ nuqtadagi elektr potensial

$$\varphi(r)=\frac{Ze}{r}-e\int\frac{\rho(r'')d\upsilon''}{|\mathbf{r}''-\mathbf{r}|} \tag{10.26}$$

formula orqali beriladi. Hosil bo‘lgan maydondagi zarrachalarning potensial energiyasi esa

$$U(r)=e_1\varphi(r)=\frac{Zee_1}{r}-ee_1\int\frac{\rho(r'')d\upsilon''}{|\mathbf{r}''-\mathbf{r}|} \tag{10.27}$$

teng bo‘ladi. $U(r)$ ning qiymatini (10.24) formulaga qo‘yilsa, sochilish amplitudasi uchun quyidagi formula olinadi:

$$f(\theta)=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{Zee_1}{4\pi}\int\frac{e^{i\mathbf{qr}'}}{\mathbf{r}'}d\upsilon'+\frac{2m}{\hbar^2}\frac{Zee_1}{4\pi}\int e^{i\mathbf{qr}'}d\upsilon'\int\frac{\rho(r'')d\upsilon''}{|\mathbf{r}''-\mathbf{r}'|}. \tag{10.28}$$

Yuqorida olingan integrallar alohida ko‘rib chiqiladi. Avvalo, shuni ta’kidlash kerakki,

$$\varphi(\mathbf{r}'')=\int\frac{e^{i\mathbf{qr}'}}{|\mathbf{r}''-\mathbf{r}'|}d\upsilon' \tag{10.29}$$

integralni fazoda $\rho(\mathbf{r}')=e^{i\mathbf{qr}'}$ zichlik bilan taqsimlangan elektr zaryadlarning $\mathbf{r}''$ nuqtadagi potensiali sifatida qarash mumkin va bu potensial esa o‘z navbatida quyidagi Puasson tenglamasini qanoatlantiradi:

$$\nabla^2\varphi(\mathbf{r}')=-4\pi\rho(\mathbf{r}')=-4\pi e^{i\mathbf{qr}'} \tag{10.30}$$

va bu tenglama orqali $\varphi(\mathbf{r}')$ potensialni aniqlash imkoniyati paydo bo‘ladi:

$$\varphi(\mathbf{r}')=\frac{4\pi}{|\mathbf{q}|^2}e^{i\mathbf{qr}'} \tag{10.31}$$

(10.28) dagi birinchi integralni (10.29) bilan solishtirilsa,

$$J_1=\int\frac{e^{i\mathbf{qr}'}}{\mathbf{r}'}d\upsilon'=\int\frac{e^{i\mathbf{qr}'}}{|\mathbf{r}'|}d\upsilon'=\frac{4\pi}{|\mathbf{q}|^2},\quad |\mathbf{q}|^2=q_x^2+q_y^2+q_z^2 \tag{10.32}$$

Bunda (9.64) va (9.65) integrallarni yaqqol ko‘rinshda yozish maqsadida (9.48) va (9.55) dagi ifodalardan foydalaniladi va quyidagi natijalarga kelinadi:

$$K=\int\left\{-\frac{e^2}{r_{a_2}}-\frac{e^2}{r_{b_1}}+\frac{e^2}{r_{12}}\right\}\psi_a^2(r_{a_1})\psi_b^2(r_{b_2})d\upsilon_1d\upsilon_2 \tag{9.78}$$

$$A=\int\left\{-\frac{e^2}{r_{a_2}}-\frac{e^2}{r_{b_1}}+\frac{e^2}{r_{12}}\right\}\psi_a(r_{a_1})\psi_b(r_{b_2})\psi_a(r_{a_2})\psi_b(r_{b_1})d\upsilon_1d\upsilon_2 \tag{9.79}$$

bo‘ladi. Almashuv energiyasiga tuzatma esa

$$S=\int\psi_a(r_{a_1})\psi_b(r_{b_1})d\upsilon_1=\int\psi_a(r_{a_2})\psi_b(r_{b_2})d\upsilon_2 \tag{9.80}$$

ko‘rinishda bo‘ladi. Demak, (9.78) ifodalangan K kattalik vodorod molekulasini tashkil qilgan zaryadlarning Kulon o‘zaro ta’sir o‘rtacha energiyasini ifodalaydi. A kattalik esa holatlar orasidagi elektronlarni almashuvi natijasida kelib chiqadi va o‘zaro ta’sir almashuv energiyasini ifodalaydi. Aynan shu kattalik tufayli o‘zaro tortishuv kuchlari vujudga keladi va turg‘un molekula paydo bo‘ladi.

Endi (9.74) va (9.75) dagi E_a hamda E_S formulalardan kelib chiqadigan natijalar ko‘rib chiqiladi. Bu formulalardagi g‘alayonlanish energiyasini quyidagi ko‘rinishda yozish mumkin:

$$E_a=\frac{K-A}{1-S^2} \tag{9.81}$$

va

$$E_S=\frac{K+A}{1+S^2} \tag{9.82}$$

bo‘ladi.

Kutulganidek, simmetrik (9.81) va antisimmertik (9.82) koordinata funksiyalariga mos o‘zaro ta’sir energiyalarning qiymatlari turlicha bo‘lishi ayon bo‘ldi. Geliy atomining nazariyasida, Pauli prinsipiga asosan, elektronning spinini hisobga olinganda elektronning to‘lqin funksiyasi har doim antisimmetrik to‘lqin funksiyasi bo‘lishi kelib chiqdi. Demak, olingan formulaga binoan (9.82) dagi kattalik antisimmetrik spin funksiyasiga tegishli bo‘lishi kerak va $E_S(R)$ ifoda spinlarning o‘zaro antiparallel yo‘nalganligini bildiradi. Shunga o‘xshash, (9.81) dagi ifoda esa vodorod molekulasini tashkil etuvchi elektronlarning spinlari bir-biriga nisbatan parallel yo‘nalganligini bildiradi.

Atomlar orasidagi masofa katta bo‘lganida to‘lqin funksiyalar o‘zaro tutashmaydi, R va r_{12} kattaliklar katta qiymatlarni , K hamda A kattaliklar esa juda ham kichkina qiymatlarni qabul qiladi. Shu tufayli $R \to \infty$ da $E_S \approx E_a$ bo‘ladi. Yadrolar orasidagi o‘rtacha masofalarda, ya’ni elekronning Bor radiusi tartibidagi masofalarda, atom to‘lqin funksiyalarning o‘zaro qoplagan sohasi katta bo‘lib, elektron bulutining almashuv zichligi ham katta bo‘ladi. Bundan tashqari, elektron buluti almashuv sohasining ba’zi qismlari yadrolarga juda yaqin kelgani munosabati bilan ularning yadrolar bilan o‘zaro tortishuvi A almashuv integraliga katta manfiy hissa qo‘shadi.Yadrolar orasidagi o‘rtacha masofa nisbatan katta bo‘lganligi sababli, turli qismlardagi elektron bulutlarining almashuv zichligi bir-biridan shu masofada bo‘ladi. Demak, energiyaga qo‘shiladigan musbat hissa ham deyarli kam bo‘ladi. Natijada, yadrolar orasidagi o‘rtacha masofalarda A integral manfiy qiymatlarni qabul qiladi va bu o‘z navbatida E_S kattalikning manfiyligini va E_a ning musbatligini bildiradi. Demak, o‘rtacha masofalarda E_S kattalik atomlar orasidagi tortishuvni, E_a kattalik esa itarishuvni ifodalaydi.

Shunday qilib, elektronlarning holati to‘la antisimmetrik bo‘lgan to‘lqin funksiyasi bilan ifodalanadi. Elektronlarning o‘rin almashtirishlari bilan bog‘liq to‘lqin funksiya va unga mos xususiy qiymat simmetrik bo‘lgani uchun barqaror vodorod molekuladagi to‘la to‘lqin funksiya antisimmetrik bo‘lishi uchun spin to‘lqin funksiyasi antisimmetrik bolishi shart, ya’ni elektronlarning spinlari antiparallel yo‘nalgan bo‘lishi lozim. Faqat shu holdagina ikkita vodorod atomlari orasidagi tortishish kuchi paydo bo‘ladi va bu singlet holat bo‘lib uni, $^1\Sigma$ orqali belgilanadi, ya’ni Φ_S holat $U_s(R)$ energiyaga ega bo‘lgan singlet holatni tashkil etadi (bu holatda spinlar antiparallel yo‘nalgan bo‘ladi). Elektronlar o‘rinlarini almashtirishda holat antisimmetrik to‘lqin funksiyasi bilan ifodalansa, spin to‘lqin funksiya simmetrik bo‘lishi shart. Bu holat triplet holat bo‘lib, u $^3\Sigma$ bilan belgilanadi, ya’ni Φ_a holatda $U_a(R)$ energiyaga ega bo‘lib, triplet holatni tashkil etadi (spinlar bu holatda parallel yo‘nalgan). 24- rasmga murojaat qilinsa,

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\int e^{ik(\mathbf{n}_0-\mathbf{n})\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')d\upsilon' \qquad (10.21)$$

ko‘rinishda yozish mumkin.

Agarda

$$\mathbf{q} = k(\mathbf{n}_0 - \mathbf{n}) \qquad (10.22)$$

vektor kiritilsa, uning absolyut qiymati

$$\mathbf{q} = 2k\sin\frac{\theta}{2} \qquad (10.23)$$

ekanligini hisobga olish kerak. Bu yerda θ burchak $\mathbf{n}_0$ va $\mathbf{n}$ vektorlar orasidagi burchak bo‘ladi, ya’ni sochilish burchagidir.

U holda, $V(r) = \frac{2m}{\hbar^2}U(r)$ ni hisobga olinsa,

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'}U(\mathbf{r}')d\upsilon' \qquad (10.24)$$

bo‘ladi, ya’ni zarrachaning impulsi $\hbar q$ ga o‘zgaradigan bo‘lsa, sochilish amplitudasi $U(\mathbf{r})$ potensial maydonning mos Furye komponentasi orqali aniqlanishi ko‘riladi. Hosil qilingan (10.24) formulani (10.6) qo‘yilsa $d\Omega$ fazoviy burchak elementiga mos differensial effektiv sochilish kesimi olinadi:

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'}U(\mathbf{r}')dv'\right|^2. \qquad (10.25)$$

Bu formula birinchi marta Maks Born tomonidan olingan bo‘lib, sochilish nazariyasida Born yaqinlashishi deyiladi.

10.3. Rezerford formulasi

Yuqorida hosil qilingan $f(\theta)$ differensial effektiv kesim formulasi katta tezliklarda harakatlanayotgan zaryadlangan zarrachalarning elastik sochilishini hisoblash uchun qo‘llanilishi mumkin. Birinchidan, faraz qilaylik, atom to‘qnashuvdan avval ham, to‘qnashuvdan keyin ham tinch holatda bo‘lsin. Ikkinchidan, to‘qnashuvdan so‘ng atom tinch holatda qolishi uchun, atomning M massasi to‘qnashayotgan zarrachaning massasidan ancha katta bo‘lishi kerak. Yuqorida keltirilgan shartlarni bajarilgan deb olib, e_1 zaryadli va m massali

laboratoriya sistemasida olish maqsadga mufoviq bo‘ladi. Ma’lumki, laboratoriya sanoq sistemasida to‘qnashuvgacha zarrachalardan biri tinch holda olingan deb hisoblanadi va quyidagi formula orqali bu ko‘rilayotgan sanoq sistemalari bilan bog‘langan bo‘ladi:

$$tg\theta_1 = \frac{m_1 sin\theta}{m_1 + m_2 cos\theta}, \theta_2 = \frac{\pi - \theta}{2} \qquad (10.3)$$

bunda θ – inersiya markazi sistemasidagi ikkala zarrachaning sochilish burchagi, θ_1 va θ_2 – laboratoriya sanoq sistemasidagi birinchi va ikkinchi zarrachalarni og‘ish burchaklari, m_1 va m_2 lar zarrachalarning massalari. Bu bobda har doim inersiya markazi sistemasi bilan bog‘langan koordinatalar sistemasidan foydalaniladi va m orqali to‘qnashuvchi zarrachalarning keltirilgan massasi belgilanadi.

Koordinata sistemasidagi z-o‘qining musbat yo‘nalishida harakatlanayotgan erkin zarracha $\psi = e^{ikz}$ ko‘rinishdagi yassi to‘lqin orqali berilgan bo‘lsin. Koordinata boshida qo‘zg‘almas sochuvchi markaz joylashtiriladi. Sochuvchi markazdan uzoq masofalardan tushayotgan zarrachalarning dastasi erkin harakatlanayotgan bo‘lsin. U holda, sochuvchi markazning atrofida zarracha sochilish ta’siriga uchraydi va uni ifoda qiluvchi to‘lqin funksiyasining ko‘rinishi o‘zgaradi. Keyinchalik, sochilgan zarracha markazdan uzoqlashgandan so‘ng, u yana erkin zarracha sifatida harakatlanishi kerak. Lekin uzoq masofalarda sochilgan zarrachalarning dastasi har doim markazdan yo‘naltirilgan bo‘lganligi sababli, sochilgan zarrachalarning dastasini $f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$ tarqaluvchi to‘lqin orqali ifodalash mumkin.

Shunday qilib, sochuvchi markazdan u‘zoq masofalarda tushayotgan hamda sochilgan zarrachalarning harakatini ifodalovchi to‘liq to‘lqin funksiyasi qu‘yidagi ko‘rinishda bo‘ladi:

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}. \qquad (10.4)$$

Hosil qilingan formuladagi birinchi had tushayotgan zarrachalarning harakatini ifoda qilsa, ikkinchi had esa sochilayotgan zarrachalarni ifodalaydi (25-rasm).

foydalanilsa, burchaklar bo‘yicha integrallash natijasida quyidagi ifodaga kelinadi:

$$K = \frac{32Z^6e^2}{a^6}\int_0^\infty r_1^2 dr_1 \exp\left(-\frac{2Zr_1}{a}\right)\int_{r_1}^\infty r_2 \exp\left(-\frac{2Zr_2}{a}\right)dr_2.$$

Keyinchalik r_1 va r_2 lar bo‘icha integrallansa, quyidagi oxirgi natijani olish mumkin:

$$K = \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a}.$$

Shunday qilib, birinchi yaqinlashishdagi geliy atomining asosiy holatidagi energiyasi

$$E = E_0 + K = -\frac{Z^2e^2}{a} + \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a}$$

bo‘ladi.

Shunday qilib, nolinchi yaqinlashishda qo'yilgan masala yechildi. Birinchi yaqinlashishda qo'yilgan masalani yechish uchun geliy atomidagi e^2/r_{12} elektronlarning o'zaro ta'sir potentsial energiyasini g'alayon sifatida qarash zarur. Ma'lumki, birihchi yaqinlashishdagi energiyaga tegishli bo'lgan tuzatma g'alayonlanish hadini o'rtacha qiymatiga teng bo'ladi, ya'ni:

$$K=\int \psi_1^2(\mathbf{r}_1)\int \psi_1^2(\mathbf{r}_2)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}d\tau_1 d\tau_2.$$

Bu yerda $|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|=\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta},$,

$$\cos\theta=\cos\theta_1\cos\theta_2+\sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)$$

θ burchak $\mathbf{r}_1$ va $\mathbf{r}_2$ vektorlar orasidagi burchakni, θ_1,φ_1 va $\theta_2\ \varphi_2$ burchaklar esa $\mathbf{r}_1$ va $\mathbf{r}_2$ vektorlarning mos ravishda qutb burchaklarini ifodalaydi,

$$d\tau_1=r_1^2\sin\theta_1 dr_1 d\theta_1 d\varphi_1 \ \ va\ \ d\tau_2=r_2^2\sin\theta_2 dr_2 d\theta_2 d\varphi_2.$$

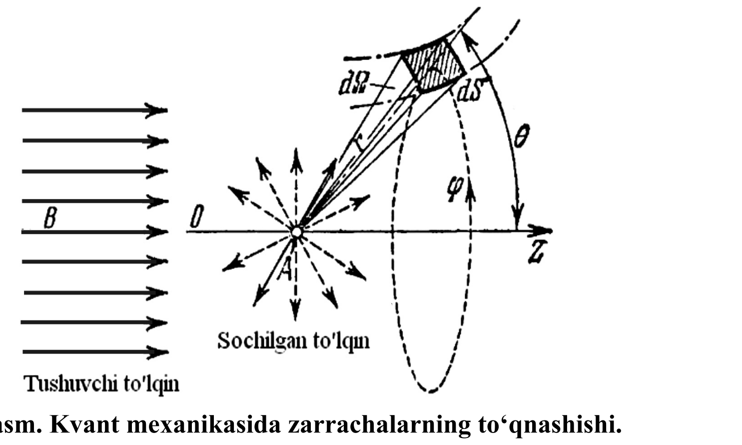
Yuqoridagi integralni hisoblashda uni ikkita o'zaro kesishgan sferik-simmetrik hajmdagi zaryadlarning o'zaro elekrtostatik energiyasi sifatida qaralsa ancha qulay bo'ladi. Bu holda elektrostatikada ma'lum bo'lgan usullardan foydalanish maqsadga muvofiq bo'ladi. Avvalo $\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}$ kasrni sferik funksiyalar bo'yicha qator ko'rinishdagi yoyilmasidan foidalaniladi:

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}=\frac{1}{r_1}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta),\ agarda\ \ r_1\rangle r_2,$$

yoki

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}=\frac{1}{r_2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\theta),\ agarda\ \ r_1\langle r_2.$$

U holda qayd etilgan integralni hisoblashda z o'qini r_1 vektori bo'yicha yo'naltiriladi, ψ_{1s} to'lqin funksiyalari o'rniga ularning qiymatlari qo'yilsa hamda sferik funksiyalarning ortogonalligidan



25-rasm. Kvant mexanikasida zarrachalarning to'qnashishi.

Bu yerda tarqalayotgan to'lqinlarning $f(\theta,\varphi)$ amplitudasi – sochilish amplitudasi deyiladi va u θ va φ burchaklarga bog'liq bo'ladi. Sochilgan zarrachalarning vaqt birligidagi $ds=r^2d\Omega$ sirt elementidan o'tish ehtimolligi hisoblab chiqiladi. Quyidagi formulalar ma'lum:

$$j_{tush}=(j_z)_{tush}=\frac{p}{m},$$

$$j_{soch}=(j_z)_{soch}=\frac{p}{mr^2}d\Omega. \tag{10.5}$$

Bunda m–keltirilgan massa. (10.5)dagi ifodalar (10.2) qo'yilsa,

$$d\sigma=|f(\theta,\varphi)|^2 d\Omega \tag{10.6}$$

formula hosil bo'ladi. Shunday qilib, (10.6) formuladan ayonki sochilish amplitudasi modulining kvadrati sochilishning differensial kesimini aniqlab beradi, ya'ni θ va φ yo'nalishida sochilayotgan zarrachalarning ehtimollik zichligi sifatida namoyon bo'ladi. Demak, effektiv kesim sochilish amplitudasining kattaligi orqali to'la-to'kis aniqlanadi. Hozircha noma'lum bo'lgan $f(\theta,\varphi)$ funksiyani, ya'ni sochilish amplitudasini, Shredingerning tenglamasini yechish orqali keltirib chiqarish mumkin.

$$\varphi_0=u,\frac{\omega}{c}=k,\rho_0=-\frac{1}{4\pi}V\psi^0 \tag{10.15}$$

deb olinsa. Bu holda (10.14) tenglamaning yechimini quyidagicha yozish mumkin:

$$\varphi_0(\mathbf{r})=\int\frac{1}{R}\rho_0(\mathbf{r}')e^{ikR}\frac{dv'}{R}. \tag{10.16}$$

Demak, (10.14) va (10.10) tenglamalarning yaqqol o'xshashligidan foydalanilsa. (10.10) tenglamaning yechimini

$$u(\mathbf{r})=-\frac{1}{4\pi}\int\frac{1}{R}V(\mathbf{r}')\psi^0(\mathbf{r}')e^{ikR}dv' \tag{10.17}$$

ko'rinishda ifodalash mumkin.

Keyingi masalada bu funksiyaning sochuvchi markazdan uzoq r masofalardagi ko'rinishi aniqlanishi kerak. Buning uchun OZ yo'nalishida, ya'ni tushayotgan dasta yo'nalishida, birlik vektor kiritiladi va uni $\mathbf{n}_0$ orqali belgilanadi. Shu bilan birga $\mathbf{r}$ yo'nalishidagi birlik vektorni $\mathbf{n}$ orqali belgilaymiz. U holda, $\mathbf{R}=|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|$ masofani

$$|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^2=r^2+r'^2-2\mathbf{n}\mathbf{r}'r$$

ko'rinishda yozib, $\mathbf{r}\gg\mathbf{r}'$ da

$$|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|=r-\mathbf{n}\mathbf{r}' \tag{10.18}$$

bo'lganligi sababli, (10.17) dagi integral ostidagi $\frac{1}{R}$ ko'paytuvchi ifodada $R\approx r$ olinsa va bu natijani (10.18) ga qo'yilsa, sochuvchi markazdan uzoq masofalarda u funksiya uchun yozilgan (10.17) ifodani quyidagi aniq ko'rinishini olish mumkin:

$$u(\mathbf{r})=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{+ikr}}{r}\int e^{-ik\mathbf{n}\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')\psi_0(\mathbf{r}')dv'. \tag{10.19}$$

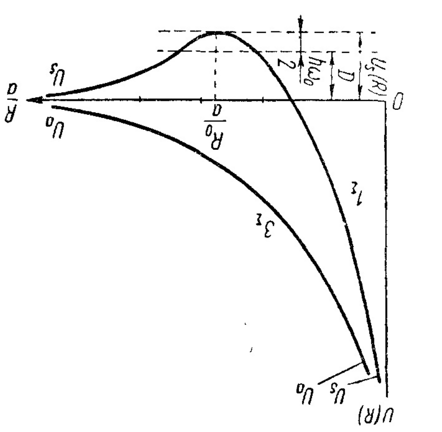
Hosil qilingan formulaga $\psi^0(\mathbf{r}')$ ning qiymati qo'yilsa va $z'=\mathbf{r}'\mathbf{n}_0$ ekanligi eslansa, (10.19) formulaning ko'rinishi quyidagicha bo'ladi:

$$u(\mathbf{r})=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{+ikr}}{r}\int e^{ik(\mathbf{n}_0-\mathbf{n})\mathbf{r}'}V(\mathbf{r}')dv' \tag{10.20}$$

Olingan (10.20) formulani (10.4) formulaning o'ng tomondagi ikkinchi hadi bilan taqqoslansa, (10.20) formuladagi $\frac{e^{+ikr}}{r}$ ning oldidagi koeffitsiyent izlanayotgan sochilish amplitudasini beradi va uni

quyidagi xulosaga kelish mumkin. Ushbu rasmda $U_a(R)$ va $U_s(R)$ atomlarning o'zaro energiyasi R atomlararo masofaga bog'liq funksiya sifatida keltirilgan. R masofa Bor radiuslarining birliklarida keltirilgan va absissa o'qida $\frac{R}{a}$ belgilangan. Rasmdan ayonki, Φ_a antisimmetrik holatni ifodalovchi $U_a(R)$ energiya vodorodni tashkil qiluvchi ikkita atomning itarishishiga mos keladi va natijada H_2 molekula vujudga kela olmaydi.

Aksincha, Φ_a simmetrik holat uchun $U_s(R)$energiya $R_0=1,4$, $a=0,74\cdot10^{-8}$sm da minimumga ega bo'lib, bu holda vodorod atomlarining orasidagi masofa R_0ga teng bo'ladi va bu simmetrik holatda barqaror H_2 vodorod molekulasi hosil bo'ladi.



24-rasm. Triplet va singulet holatlar uchun ikkita vodorod atomlari orasidagi o'zaro ta'sir energiyasi.

Vodorod molekulasini har tomonlama o'rganish natijasida kovalent bog'lanish kuchlariga xos bo'lgan yana bir xususiyat to'g'risida to'xtalib o'tish joiz. Kovalent bog'lanish kuchlari to'yinish xususiyatiga ega bo'ladi. Buni isbotlash uchun vodorod molekulasiga uchunchi H vodorod atomi yaqinlashishi ko'rib chiqiladi. Ma'lumki, vodorod molekulasida spinlari antiparallel yo'nalishga ega bo'lgan ikkita elektron atomi o'zaro antiparallel spinlarga ega bo'lgan elektronlar bilan almashuvi imkoniyati bo‘lmaydi, chunki bunday almashuv natijasida spinlari bir-biriga parallel bo‘lgan ikkita elektron vujudga kelishi ta’qiqlangan. Shuning uchun vodorod molekulasi va vodorod atomi orasida faqat parallel spinlarga ega bo‘lgan elektronlar o‘zaro almashuvi mumkin.

Lekin yuqoridagi vodorod molekulasini nazariyasidan ko‘rinib turibdiki, bunday almashuv itarishish kuchlarning paydo bo‘lishiga olib keladi. Demak, vodorod molekulasi bilan vodorod atomi o‘rtasida ular o‘zaro yaqinlashganda itarish kuchi vujudga keladi va shuning uchun o‘sha vodorod atomidan tashkil topgan vodorod molekulasi vujudga kelishi mumkin emas. Yuqorida keltirilgan sababga binoan kovalent bog‘lanish kuchlarning to‘yinish xususiyati belgilanadi.

9.5. IX bobga oid savol va masalalar

1. *Parageliy va ortogeliy holatlari orasidagi farqlarni izohlab bering.*
2. *O’zaro ta’sir almashuv energiyasining fizik ma’nosini aytib bering.*
3. *Ionli va kovalent bog‘lanishlarning asosiy farqlarini ko‘rsatib bering.*
4. *Vodorod molekulasining tuzilishini izohlab bering.*
5. ***Masala.** Geliy atomi va geliysimon ionlarda elektronlarning o‘zaro ta’sir energiyasini g‘alayon sifatida qarab, ularning asosiy holat energiyasini aniqlang.*

***Yechish.** G‘alayonlanish nazariyasidan foydalangan holda geliy atomining asosiy holatdagi masalasini yechish mumkin.(9.1) dan geliy atomidagi elektronlarning o‘zaro ta’sir potentsial energiyasi ma’lum:*

$$U=-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}.$$

Ushbu potentsial energiyaga mos energiya operatorining ko‘rinishi:

$$\widehat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2+\nabla_2^2\right)-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}$$

teng bo‘lib,shu operatorga tegishli Shedinger tenglamasi esa quyidagicha bo‘ladi:

$$\left(\nabla_1^2+\nabla_2^2\right)\psi+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r_1}+\frac{Ze^2}{r_2}-\frac{e^2}{r_{12}}\right)\psi=0,$$

$$\psi=\psi\left(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2\right).$$

Agar ushbu tenglamada e^2/r_{12} elektronlarning o‘zaro ta’sir energiyasiga tegishli had hisobga olinmasa,u holda bu ko‘rinishdagi Shedinger tenglamasi ikkita tenglamaga ajraladi va har birining ko‘rinishi quyidagicha ifoda qilinadi:

$$\nabla^2\psi_k+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E_k+\frac{Ze^2}{r_k}\right)\psi_k=0, \quad k=1,2.$$

Olingan tenglamalar vodorod atomi uchun Shredinger tenglamasining o‘zginasidir, uning xususiy qiymatlari va xususiy funksiyalari ma’lum. Hususan, n=1 asosiy holat uchun (5.41) formuladan quyidagi ifoda kelib chiqadi:

$$E_1=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}.$$

Asosiy holat bu 1s holat bo‘lib, uning xususiy funksiyasi (5.50)formuladan:

$$\psi_{1s}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{Zr}{a}}$$

ifoda orqali beriladi. Bunda $a=\frac{\hbar^2}{me^2}$ Bor orbitasining radiusi ((5.51) ga qarang). Qaralayotgan sistemaning energiyasi uni tashkil etgan qismlarni energiyasining yig‘indisiga teng bo‘ladi:

$$E_0=2E_1=-\frac{mZ^2e^4}{\hbar^2}$$

xususiy funksiyasi esa $r=r_1$ va $r=r_2$ bo‘lganida ψ_{1s} funksiyalarning ko‘paytmasiga teng, ya’ni:

$$\psi=\frac{Z^3}{\pi a^3}e^{-\frac{Z}{a}r_1}e^{-\frac{Z}{a}r_2}.$$

10.2. Born formulasi

Sochilish amplitudasini aniq ko‘rinishda topish masalasi kvant mexanikasida murakkab masalalar turiga kiradi. Shredinger tenglamasining aniq yechimini hosil qilish va $f(\theta,\varphi)$ni aniqlash masalasi ko‘pgina amaliy jihatdan qiziqarli fizik masalalarda katta matematik qiyinchiliklar bilan bog‘langandir. Shu tufayli, sochilish nazariyasida taqribiy usullar keng qo‘llaniladi va bu usullar ichida muhim o‘rinni Born yaqinlashishi egallaydi. Ushbu usul asosida quyidagi taxmin yotadi: sochuvchi maydon sochiluvchi zarracha harakatiga ta’siri nisbatan kuchsiz g‘alayonlanish sifatida qarash mumkin. Boshqacha aytganda, agar o‘zaro ta’sir potensial energiyani kichik g‘alayon sifatida qaralsa, u holda zarrachaning boshlang‘ich harakati kam o‘zgaradi. Sochuvchi markaz maydonidagi tushayotgan zarrachalarning potensial energiyasi $U(r)$ orqali belgilanadi, bunda r markazdan zarrachagacha bo‘lgan masofani ifodalaydi. Zarrachaning energiyasi esa E bilan belgilanadi. Markazga tushayotgan zarrachalarning to‘lqin funksiyasini $\psi(r)$ orqali ifoda qilinsa, u holda bu funksiya uchun Shredinger tenglamasi quyidagi ko‘rinishda bo‘ladi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+U(r)\psi=E\psi. \tag{10.7}$$

Zarracha bilan markaz orasidagi masofa ortgan sari $U(r)$ potensial energiyani tez so‘nuvchi deb qabul qilinadi. Zarracha $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ impulsga ega bo‘ladi va ushbu

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}=\frac{p^2}{\hbar^2}$$

to‘lqin sonini kiritib, quyidagicha

$$V(r)=\frac{2m}{\hbar^2}U(r)$$

belgilansa, (10.7) tenglamani

$$\nabla^2\psi+k^2\psi=V(r)\psi \tag{10.8}$$

ko‘rinishda yozish mumkin. Hosil bo‘lgan tenglamaning shunday yechimlarini tanlab olish kerakki, bu yechimlar qo‘yilgan fizik masalaga mos kelishi kerak, ya’ni sochuvchi markazdan uzoq

masofalarda izlanayotgan $\psi(r)$ yechimlar tushayotgan zarrachalarni ifodalovchi yassi to‘lqinlar va sochiluvchi zarrachalarni ifodalovchi tarqaluvchi to‘lqinlarning yig‘indisidan iborat bo‘lsin. Shuning uchun, (10.8) tenglamaning yechimini

$$\psi=\psi^0+u \tag{10.9}$$

superpozitsiya ko‘rinishida izlanadi va bu yechimda $\psi^0=e^{ikz}$ tushayotgan zarrachalarning dastasini ifodalasa, u funksiya esa sochiluvchi zarrachalarni dastasini ifodalaydi. Endi (10.9) ni (10.8) tenglamaga qo‘yilsa va $(\sim Vu)$hadni hisobga olinmasa,

$$\nabla^2u+k^2u=V(r)\psi^0 \tag{10.10}$$

ko‘rinishdagi tenglama olinadi.

Navbatdagi asosiy vazifamiz (10.10) tenglamaning yechimini aniqlashdan iborat bo‘ladi va bu izlayotgan yechim $r\to\infty$ da $u(r,\theta)=f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$ ko‘rinishida bo‘lishi kerak. Yuqoridagi (10.10) tenglamani yechish elektrodinamika kursidan ma’lum

$$\nabla^2\varphi-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}=-4\pi\rho \tag{10.11}$$

kechikuvchi potensiallar tenglamasiga o‘xshash holda bevosita yozilishi mumkin. Bu yerda ρ -koordinata va vaqtning biror funksiyasi bo‘lib, (10.11) ning yechimi

$$\varphi(\mathbf{r},t)=\int\frac{1}{R}\rho\left(\mathbf{r}',t-\frac{R}{c}\right)dv' \tag{10.12}$$

funksiya orqali ifodalanadi va bunda $\mathbf{R}=\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ bo‘lib, $\mathbf{r}$ kuzatish nuqtasidan $\rho dv'$ zaryad joylashgan $\mathbf{r}'$ nuqtasigacha bo‘lgan masofani bildiradi. Agar ρ funksiyaning vaqtga bog‘liqligini $e^{-i\omega t}$ ko‘paytuvchi orqali berilsa, u holda

$$\rho=\rho_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t},\ \varphi=\varphi_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \tag{10.13}$$

deb yozib, φ_0 uchun quyidagi tenglamani hosil qilish mumkin:

$$\nabla^2\varphi_0+k^2\varphi_0=-4\pi\rho_0. \tag{10.14}$$

Hosil bo‘lgan (10.14) tenglamani (10.10) tenglama bilan solishtirilsa, ayonki (10.10) va (10.14) tenglamalar bir birlari bilan mos keladi, agarda

Yechish. Ma'lumki,

$$f(\theta)=-\frac{2m}{q\hbar^2}\int U(\mathbf{r})r\sin qrdr$$

bunda $q=2k\sin\frac{\theta}{2}$. $U(\mathbf{r})=U_0$ bo'lganida,

$$f(\theta)=\frac{2m|U_0|}{q\hbar^2}\int_0^R r\sin qrdr=\frac{2m|U_0|R}{q^2\hbar^2}\left(\frac{\sin qR}{qR}-\cos qR\right)$$

va

$$d\sigma=|f(\theta)|^2d\Omega=\frac{(2m|U_0|)^2}{\hbar^4}\left(\frac{\sin qR-qR\cos qR}{q^3}\right)^2d\Omega.$$

4. Masala. Oldingi masaladagi sochilishning differensial kesimi natijasidan foydalanib potensial o'ra orqali sodir bo'ladigan sochilishning to'liq differensial kesimi aniqlansin. Quyidagi ikkita chekli hollar ko'rilsin:

a) kR>>1, ya'ni tezligi katta bo'lgan zarrachalarning sochilishini;

b) kR<<1, ya'ni tezligi kichik bo'lgan zarrachalarning sochilishini.

Yechilish. Ma'lumki $d\sigma=\frac{(2m|U_0|)^2}{\hbar^4}\left(\frac{\sin qR-qR\cos qR}{q^3}\right)^2d\Omega.$

Bunda $q=2k\sin\frac{\theta}{2}$ va $d\Omega=2\pi\sin\theta d\theta$.

Demak,

$$\sigma=8\pi R^2\left(\frac{m|U_0|R^2}{\hbar^2}\right)^2\int_0^{\pi}\left(\frac{\sin qR-qR\cos qR}{q^3R^3}\right)^2\sin\theta d\theta.$$

Berilgan integralni bo'laklab integrallash natijasida va integralning chegaralarini hisobga olganda quyidagi natija olinadi:

$$\sigma=\frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{m|U_0|R^2}{\hbar^2}\right)^2\left[1-\frac{1}{(2kR)^2}+\frac{\sin 4kR}{(2kR)^3}-\frac{\sin^2 2kR}{(2kR)^4}\right].$$

Endi xususiy hollarni ko'rilsa.

a) kR>>1 bo'lganda

$$\sigma=\frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{m|U_0|R^2}{\hbar^2}\right)^2;$$

b) kR<<1 bo'lganda esa

$$\sigma=\frac{16\pi}{9}R^2\left(\frac{m|U_0|R^2}{\hbar^2}\right)^2.$$

5. Masala. Born yaqinlashishida Yukava potensiali $U(\mathbf{r})=\frac{\alpha}{r}e^{-\frac{r}{a}}$ maydonidagi sochilishning amplitudasi va sochilishning to'liq differensial kesimi aniqlansin.

Yechish. Ma'lumki,

$$f(\theta)=-\frac{2m}{q\hbar^2}\int U(\mathbf{r})r\sin qrdr.$$

Bu formulaga Yukava potensialining ifodasi qo'yilsa

$$f(\theta)=-\frac{2m\alpha}{q\hbar^2}\int_0^{\infty}e^{-\frac{r}{a}}\sin qrdr$$

bo'ladi. Endi $\sin qr=\frac{e^{iqr}-e^{-iqr}}{2i}$ formuladan va o'zgaruvchilarni almashtirish metodidan foydalanib integrallash natijasida

$$f(\theta)=-2\alpha\left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2}\right)\frac{1}{1+a^2q^2}$$

ni olinadi. U holda

$$d\sigma=|f(\theta)|^2d\Omega=4\alpha^2\left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2}\right)^2\frac{d\Omega}{\left(1+a^2q^2\right)^2}$$

va sochilishning to'liq differensial kesimi quyidagiga teng bo'ladi:

$$\sigma=4\pi\left(\frac{2\alpha ma^2}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{1+4a^2k^2}.$$

bo'yicha, qatorga yoyganimizdagi p^4 ga proporsional bo'lgan hadni g'alayonlanish hadi deb qarash kerak:

$$E=\left(\mathbf{p}^2c^2+m^2c^4\right)^{1/2}\approx mc^2+\frac{\mathbf{p}^2}{2m}-\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}+\cdots$$

G'alayonlanish nazariyasi bo'yicha energetik sathlarning shu hadga mos keluvchi birinchi tartibli siljishi uchun quyidagini yozish mumkin:

$$\delta E_m^{(1)}=\left\langle\psi_n\left|-\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}\right|\psi_n\right\rangle \qquad (11.25)$$

bunda $\psi_n=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ - Kulon to'lqin funksiyalaridir. Mana shu tuzatishni hisoblasak, (11.24) formuladagi oxirgi had olinadi.

Relyativistik tuzatishni hisobga olganimizda l kvant soni bo'yicha aynish yo'qoladi, natijada berilgan n uchun energetik sathlar n ta bir-biriga yaqin bo'lgan (α^2 ning kichik bo'lgani uchun) sathlarga ajralanadi. Vodorod atomi uchun (11.24) bo'yicha energiya'ning to'liq ajralish kattaligi quyidagiga teng bo'lishi kerak:

$$\delta E_m^{(1)}=\frac{\alpha^4mc^2(n-1)}{n^3(n-1/2)}=Ry\alpha^2\frac{n-1}{n^3(2n-1)}. \qquad (11.26)$$

Vodorod atomida kuzatiladigan parchalanish, haqiqatda (11.24) formula beradigan kattalikdan ikki marta kichikdir. Bu shuni ko'rsatadiki, Kleyn–Gordon tenglamasini elektronning harakatini ifodalashga qo'llab bo'lmas ekan. Haqiqatan ham, avvalgi boblardan malumki, elektron spin va xususiy magnit momentiga egadir, bular esa Kleyn–Gordon tenglamasida hisobga olinmagan. Demak, Kleyn–Gordon tenglamasi spinga ega bo'lmagan zarrachalargagina (masalan, π-mezonlarga) qo'llanishi mumkin ekan. Biz topgan (11.23) va (11.24) formulalar π-mezoatomlarning– yadro va uning atrofida aylanayotgan π−-mezondan iborat bo'lgan ekzotik atom sistemasining energetik sathlarini beradi. Shuni ham hisobga olish kerakki, π-mezonning massasi katta (elektron massasidan taxminan 270 marta) bo'lgani uchun uning orbitasining Bor radiusi kichikdir va shunga yarasha π-mezonni yadroga yaqin sohada topish ehtimolligi kattadir. Shuning uchun, energetik sathlarni hisoblaganda yadroning nuqtaviy bo'lmaganligi sababli uning elektr maydonining kichik masofalarda Kulon

natija kelib chiqadi. (10.28) dagi ikkinchi integral esa quyidagicha hisoblanadi:

$$J_2=\int e^{i\mathbf{qr}'}d\upsilon'\int\frac{\rho(r'')d\upsilon''}{|\mathbf{r}''-\mathbf{r}|}=\int d\upsilon''\rho(r'')\int\frac{e^{i\mathbf{qr}'}d\upsilon'}{|\mathbf{r}''-\mathbf{r}'|}=$$
$$=\int d\upsilon''\rho(r'')\frac{4\pi}{|\mathbf{q}|^2}e^{i\mathbf{qr}''}=\frac{4\pi}{|\mathbf{q}|^2}\int d\upsilon\rho(r)e^{i\mathbf{qr}}. \qquad (10.33)$$

Olingan (10.33) formulada integrallashni bajarish uchun qutb koordinatalar sistemasiga o'tiladi, bunda Z-o'qini $\mathbf{q}$ vektor bo'yicha yo'naltiriladi. U holda,

$$d\upsilon=r^2dr\sin\theta d\theta d\varphi, \qquad \mathbf{qr}=qr\cos\theta$$

bo'ladi va

$$\int d\upsilon\rho(r)e^{i\mathbf{qr}}=\int_0^{\infty}\rho(r)r^2dr\int_0^{\pi}e^{iqr\cos\theta}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$$

ni hosil qilish mumkin. φ o'zgaruvchi bo'yicha integrallash natijasida 2π ko'paytma hosil bo'ladi, $x=\cos\theta$ almashtirish bajarilishi natijasida esa

$$\int_0^{\pi}e^{iqr\cos\theta}\sin\theta d\theta=\int_{-1}^{1}e^{iqrx}dx=\frac{2\sin qr}{qr}$$

kelib chiqadi. Demak,

$$\int d\upsilon\rho(r)e^{i\mathbf{qr}}=4\pi\int_0^{\infty}\frac{\sin(qr)}{qr}\rho(r)\cdot r^2\cdot dr \qquad (10.34)$$

bo'ladi. Hosil bo'lgan ifodani (10.33) formulaga qo'yilsa, J_2 integralning natijasi kelib chiqadi. Endi (10.32) va (10.33) formulalarni (10.28) qo'yilsa, $f(\theta)$ uchun quyidagi natijani olish mumkin:

$$f(\theta)=-\frac{2mee_1}{4\pi\hbar^2}\frac{4\pi}{q^2}\left\{Z-4\pi\int_0^{\infty}\frac{\sin(qr)}{qr}\rho(r)r^2dr\right\}. \qquad (10.35)$$

Agarda

$$q^2=4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}=\frac{4m^2\upsilon^2}{\hbar^2}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

ekanligi eslansa va

$$F(\theta)=4\pi\int_0^{\infty}\frac{sin(qr)}{qr}\rho(r)r^2dr \qquad (10.36)$$

belgilash kiritilsa, quyidagi oxirgi natijani olish mumkin:

$$f(\theta)=-\frac{ee_1}{2m\upsilon^2}\{Z-F(\theta)\}\cos ec^2\frac{\theta}{2}. \qquad (10.37)$$

Kiritilgan $F(\theta)$ kattalik *atom formfaktori* deyiladi, uning qiymati esa elektron zaryadi zichligining taqsimoti bilan aniqlanadi va elektronlarning burchaklar bo‘yicha sochilishini aniqlab beradi. Olingan (10.37) formula yordamida θ burchakka E energiyali elektronlarning differensial effektiv kesimini topishimiz mumkin, ya’ni

$$d\sigma=\left(\frac{ee_1}{2m\upsilon^2}\right)^2\{Z-F(\theta)\}^2\cos ec^4\frac{\theta}{2}d\Omega \qquad (10.38)$$

Olingan formulani yaqqol namoyon qilish uchun, $e\rho$ - elektron dastasi zaryadining zichligi to‘g‘risida sodda taxmin yuritamiz. Avvalo,

$$\rho=\rho_0e^{-\frac{r}{a}}$$

deb qabul qilinadi, bu yerda a – atomning radiusi. Umuman olganda, atom neytral bo‘lganligi sababli

$$\int\rho d\upsilon=Z$$

bo‘ladi, demak

$$\rho_0=\frac{Z}{8\pi a^3}$$

bo‘ladi. Shunday qilib,

$$\rho=\frac{Z}{8\pi a^3}e^{-\frac{r}{a}} \qquad (10.39)$$

ifoda kelib chiqadi. Endi $F(\theta)$ atom form faktorini hisoblashga o‘tilishi mumkin:

$$F(\theta)=4\pi\int_0^{\infty}\rho(r)\frac{sin(qr)}{qr}r^2dr=\frac{Z}{2a^3q^3}\int_0^{\infty}e^{-\frac{\xi}{qa}}Sin\xi\cdot\xi\cdot d\xi.$$

Bunda $qr=\xi$ belgilash kiritildi. Hosil bo‘lgan oxirgi integralni hisoblash qiyinchilik tug‘dirmaydi:

olishga imkoniyat bermas ekan. Kinetik energiyaning musbatligi bo‘lib qoladi va to‘lqin funksiya bu holda nol nuqtada singulyarlikka ega bo‘ladi. Demak, funksiyamizning cheklanganlik talabi $l=0$ bo‘lganda $l'_{\pm}$ larning ichida to‘g‘risini tanlab olishga imkoniyat bermas ekan. Kinetik energiyaning musbatligi talabi esa l'_{+} ni tanlab olishga olib keladi. Shunday yo‘l bilan orbital kvant soni l ning har bir qiymati uchun radial tenglama (11.19) ning faqat bitta yechimi qoldiriladi, u ham bo‘lsa kichik ρ uchun asimptotikasi $\sim\rho^{l'+1}$ bo‘lgan yechimdir.

Kulon maydonidagi relyativistik zarrachaning energiya sathlari uchun (11.18) va (11.21) formulalardan quyidagi aniq ifoda olinadi:

$$E=mc^2\left[1+\frac{\alpha^2Z^2}{\left(n_r+l'_{+}+1\right)^2}\right]^{-\frac{1}{2}}. \qquad (11.23)$$

Olingan bu ifodani α bo‘yicha α^4 aniqlikkacha qatorga yoyilsa quyidagi olinadi:

$$E\approx mc^2\left[1-\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}-\frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+1/2}-\frac{3}{4}\right)\right]= \qquad (11.24)$$
$$=mc^2-Z^2\frac{Ry}{n^2}-\frac{Z^4\alpha^2}{n^3}Ry\left(\frac{1}{l+1/2}-\frac{3}{4}\right),$$

bunda $n=n_r+l+1$ faqat musbat qiymat qabul qiluvchi bosh kvant soni, $Ry=\frac{me^4}{2\hbar^2}$ - vodorod atomining ionizatsiya energiyasi (Ridberg doimiysi). Topilgan ifodaning birinchi hadi zarrachaning tinchlik energiyasiga mos keladi, keyingi had vodorod atomidagi elektronning norelyativistik energiya sathlarini ifodalaydi: $E_n=-Ry/n^2$ (Balmer formulasi). Formuladagi oxirgi had esa berilgan n uchun energetik sathlarning l bo‘yicha aynishini yo‘q qiluvchi haddir, bu had atom spektrining nozik strukturasiga to‘g‘ri keladi. Aytib o‘tish kerakki, spektrning nozik strukturasini norelyativistik kvant mexanikasida ham olish mumkin, buning uchun relyativistik energiyaning impuls

XI bob

RELYATIVISTIK KVANT MEXANIKASI

11.1 Shredingerning relyativistik tenglamasi

Shredinger tenglamasi tezliklari yorug‘lik tezligidan juda kichik bo‘lgan zarrachalargagina qo‘llanishi mumkin. Bu tenglamaning tezliklari yorug‘lik tezligiga yaqin bo‘lgan zarrachalarga qo‘llanishi mumkin bo‘lgan umumlashtirilgan formasi bir necha tadqiqotchilar, jumladan Shredingerning o‘zi tomonidan norelyativistik kvant mexanikasining yaratilishi bilan deyarli bir vaqtda taklif qilingan edi. Ushbu masalani ko‘rib chiqishdan oldin Shredinger tenglamasini olishning formal yo‘li eslatib o‘tiladi.

Berilgan $U(\mathbf{r})$ potensialda harakat qilayotgan zarrachaning energiyasi quyidagiga tengdir:

$$E=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+U(\mathbf{r}). \qquad (11.1)$$

Shu ifodada

$$E\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t},\mathbf{p}\Rightarrow -i\hbar\nabla \qquad (11.2)$$

almashtirish bajarilsa va hosil bo‘lgan operator bilan $\psi(\mathbf{r},t)$ to‘lqin funksiyasiga ta’sir qilinsa, Shredinger tenglamasi kelib chiqadi:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t)+U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t). \qquad (11.3)$$

Agar energiya uchun quyidagi relyativistik ifodadan

$$E^2=\mathbf{p}^2c^2+m^2c^4 \qquad (11.4)$$

foydalanilsa hamda (11.2) almashtirish bajarilsa, quyidagi relyativistik tenglama olinadi:

$$\left(\nabla^2-\frac{\partial^2}{c^2\partial t^2}-\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi(\mathbf{r},t)=0 \qquad (11.5)$$

Mazkur tenglama 1926-yilda mustaqil ravishda bir necha tadqiqotchilar – O.Kleyn, V. Gordon, B.Fok va E. Shredingerlar tomonidan olingan va fizikada Kleyn - Gordon tenglamasi nomini olgan. Bu tenglamani olishda faqatgina (11.4) relyativistik

$$\psi_{nlm}=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{m=+l}c_{lm}R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi). \qquad (10.52)$$

Bu yechimni uning OZ o‘qiga proyeksiyasi (m soni) va impuls momentning qiymatlari (l soni) bilan farqlanuvchi holatlarning superpozitsiyasi ko‘rinishida izlayotganligimizni bildiradi.

Sochilish nazariyasiga murojaat qilinsa, shunday xususiy yechim aniqlanishi kerakki, uning asimptotikasi quyidagi ko‘rinishda bo‘lsin:

$$\psi_{r\to\infty}=e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}. \qquad (10.53)$$

Bu yechim sferik simmetriyaga ega bo‘lib, φ o‘zgaruvchiga bog‘liq emas. Demak, (10.52) ifodadan φ ga bog‘liq bo‘lmagan yechimni olish uchun, bu ifodada yig‘indining $m\neq0$ barcha hadlarini hisobga olmaslik kerak. U holda,

$$\psi(r,\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}c_lR_l(r)P_l(\cos\theta)$$

yechimga ega bo‘linadi, chunki $Y_{l,0}(\theta,\varphi)$ faqat ko‘paytuvchi bilan $P_l(cos\theta)$ dan farq qiladi.

Endi asosiy vazifamiz c_l amplitudalarni aniqlashdan iborat bo‘lib, ushbu masala kvant mexanikasiga bag‘ishlangan bir qator darsliklarda yetarlicha to‘liq bayon etilganligi tufayli, o‘quvchiga oxirgi natijani berish bilan chegaralanamiz. Shunday qilib, sochilayotgan to‘lqining amplitudasi

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{2i\eta_l}-1\right)P_l(Cos\theta)$$

ko‘rinishda bo‘ladi, bunda η_l sochilgan to‘lqinlarning fazasi.

10.6. X bobga oid savol va masalalar

1. Elastik va noelastik sochilishlarning asosiy farqi nimada?
2. Sochilishning differensial effektiv kesimini izohlab bering.
3. **Masala.** Born yaqinlashishida $U=-|U_0|$ agarda $r\le R$ yoki $U=0$ agar $r>R$ bo‘lganida sferik potensial o‘radagi sochilishning amplitudasi va differensial kesimi hisoblansin.

$$\int_0^{\infty} e^{-\frac{\xi}{qa}} Sin\xi \cdot \xi \cdot d\xi = \frac{1}{2i}\int_0^{\infty} e^{-\frac{\xi}{qa}}\left(e^{i\xi}-e^{-i\xi}\right)\xi d\xi = \frac{2a^3q^3}{\left(1+q^2a^2\right)^2}.$$

Bundan

$$F(\theta)=\frac{Z}{\left(1+q^2a^2\right)^3}=\frac{Z}{\left(1+4k^2a^2 sin\dfrac{\theta}{2}\right)^2} \qquad (10.40)$$

kelib chiqadi. Demak,

$$d\sigma(\theta)=\left(\frac{e_1eZ}{2m\upsilon^2}\right)^2\left[1-\frac{1}{\left(1+4k^2a^2Sin^2\dfrac{\theta}{2}\right)^2}\right]^2 \cos ec^4\frac{\theta}{2}d\Omega \qquad (10.41)$$

ifoda hosil bo‘ladi.

Tezliklari katta zarrachalar uchun $ka>1$ bo‘ladi va (10.41) dagi formulada ikkinchi hadni hisobga olmasak ham bo‘ladi. U holda,

$$d\sigma(\theta)=\left(\frac{e_1eZ}{2m\upsilon^2}\right)^2 \cos ec^4\frac{\theta}{2}d\Omega \qquad (10.42)$$

natija olinadi.

Klassik mexanikada olingan Rezerford formulasi hosil bo‘ldi. Bu holda Rezerford formulasi Born yaqinlashish usuli orqali olingan. Qiziqarli juhati shundan iboratki, agarda mazkur masalani aniq yozganimizda, xuddi shu natijani olgan bo‘lar edik. Darvoqe, sochilishning effektiv kesimini aniq hisoblagan vaqtimizda olingan yechimda $\hbar$ Plank doimiysi qatnashmaydi. Demak, klassik fizika hamda kvant mexanikasi tomonidan hisoblab chiqilgan natijalar bir-biriga mos kelishi lozim.

10.4. Bir xil zarrachalar to‘qnashuvi

Ikkita bir xil zarrachaning to‘qnashgan holini ko‘rib chiqish masalasi alohida ahamiyatga egadir. Ma’lumki, kvant mexanikasida zarrachalarning aynan o‘xshashligi ular o‘rtasida o‘ziga xos almashinuvchi o‘zaro ta’sirning paydo bo‘lishiga olib keladi. Sochilish jarayonlarida yuqorida qayd etilgan o‘zaro ta’sirni hisobga olish

$$d\sigma=\left(\frac{e^2}{m_e\upsilon^2}\right)^2\left[\frac{1}{sin^4\dfrac{\theta}{2}}+\frac{1}{cos^4\dfrac{\theta}{2}}+\frac{1}{sin^2\dfrac{\theta}{2}cos^2\dfrac{\theta}{2}}\right] \qquad (10.47)$$

ifoda olinadi.

10.5 Sochilishning aniq nazariyasi

Yuqorida ko‘rib chiqilgan sochilishning yaqinlashishlar asosida keltirib chiqilgan nazariyasi bilan bir qatorda sochilishning aniq nazariyasi ham mavjudligini ko‘rsatish mumkin. Bu masalani hal qilish uchun (10.8) ifodaga murojat etiladi va

$$\nabla^2\psi+k^2\psi=V(r)\psi \qquad (10.49)$$

tenglamani aniq yechimini olishga harakat qilinadi. Bu tenglama markaziy kuchlar maydonidagi harakatning umumiy nazariyasida uchraydigan tenglamadan $-2m/\hbar^2$ ko‘paytuvchi va hadlarning ketma-ket joylashgani bilan ajralib turadi. Shu sababdan, (10.49) tenglamaning $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ energiya, $M^2=\hbar^2l(l+1)$ impuls momentining kvadrati va $M_z=\hbar m$ impuls momentining proyeksiyasiga tegishli bo‘lgan xususiy yechimi quyidagicha bo‘ladi:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi). \qquad (10.50)$$

Shunday qilib, markaziy simmetriyali maydonda Shredinger tenglamasining umumiy yechimi aniqlandi. Agarda $R_{nl}(r)=\frac{u_l}{r}$ deb qabul qilinsa, (10.49) ifoda u_l funksiya uchun quyidagi tenglamani hosil qilish mumkin:

$$\frac{d^2u_l}{dr^2}+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u_l=V(r)u_l. \qquad (10.51)$$

(10.49) tenglamaning umumiy yechimini $\psi_{lm}(r,\theta,\varphi)$ - ortogonal funksiyalarning yoyilmasi shaklida yozish mumkin:

munosabatdan foydalanganimiz uchun tenglama relyativistik invariantdir, ya’ni, nisbiylik nazariyasining almashtirishlariga (Lorens almashtirishlariga) nisbatan invariantdir. Shredinger tenglamasidan farqli ravishda Kleyn - Gordon tenglamasi fazoviy va vaqt koordinatlariga nisbatan simmetrikdir.

Kleyn - Gordon tenglamasidan xuddi Shredinger tenglamasidan olganimizdek uzluksizlik tenglamasini olish mumkin:

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t}+div\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=0. \qquad (11.6)$$

Buning uchun extimollik zichligi $\rho(\mathbf{r},t)$ va oqim zichligi $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ uchun quyidagi ifodalarni olish kerak:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right), \qquad (11.7)$$

$$\rho(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar}{2imc^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right). \qquad (11.8)$$

$\rho(\mathbf{r},t)$ uchun ifodani xuddi norelyativistik kvant mexanikasida qilganimizdek, zarrachaning t vaqt momentida $\mathbf{r}$ nuqtada topish ehtimolligining zichligi sifatida qarash kerak. Ammo, manfiy bo‘lmagan norelyativistik ehtimollik zichligi

$$\rho(\mathbf{r},t)=\psi(\mathbf{r},t)^*\psi(\mathbf{r},t)=|\psi(\mathbf{r},t)|^2\geq 0 \qquad (11.9)$$

dan farqli ravishda kiritgan (11.8) zichlik hamma vaqt manfiy bo‘lmaslik xossasiga ega emas. Hattoki, agar $\psi(\mathbf{r},t)$ - funksiya haqiqiy bo‘lsa (Kleyn–Gordon tenglamasining bunday yechimlari mavjud), (11.8) zichlik butun fazoda aynan nolga tengdir. $\rho(\mathbf{r},t)$ ishorasi noaniqligi uni zarrachani t vaqt momentida $\mathbf{r}$ nuqtada topish ehtimolligining zichligi sifatida qarab bo‘lmasligini anglatadi. Kleyn – Gordon tenglamasining yechimi bo‘lgan $\psi(\mathbf{r},t)$ funksiya’ni ham ehtimollik amplitudasi sifatida qarab bo‘lmasligi ravshandir. ψ-funksiyani ehtimoliy talqin qilishdagi bunday qiyinchilikka Kleyn-Gordon tenglamasining birinchi tadqiqodchilari e’tibor berishgan edi. Ehtimoliy talqinning mumkinmasligi o‘z vaqtida, hatto Kleyn-Gordon tenglamasidan voz kechishga ham olib kelgan, unga formal relyativistik lekin, tabiatga daxli yo‘q bir tenglama deb ham qaralgan. Bu esa o‘z navbatida ma’lum ijobiy rol ham o‘ynagan "haqiqiy" relyativistik

Agar $e\varphi(r)=-Ze^2/r$ deb olinsa, relyativistik zarrachaning Kulon maydonidagi harakatini ko‘rib chiqish mumkin bo‘ladi. Quyidagi o‘lchamsiz uzunlik va energiyalarni kiritaylik:

$$\rho=r/\gamma, \gamma=\frac{\hbar^2c^2}{e^2E}, \varepsilon=\frac{E^2-m^2c^4}{\alpha^2E^2}. \qquad (11.18)$$

Kiritilgan yangi o‘zgaruvchilarda (11.17) tenglamaning ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

$$\frac{d^2R(\rho)}{d^2\rho}-\frac{2Z}{\rho}R(\rho)+\frac{l(l+1)-Z^2\alpha^2}{\rho^2}R(r)+\varepsilon R(r)=0 \qquad (11.19)$$

bunda $\alpha=e^2/\hbar c\approx 1/137$ - nozik struktura doimiysi deyiladigan doimiydir. Agar (11.19) da

$$l(l+1)-Z^2\alpha^2=l'(l'+1) \qquad (11.20)$$

kabi belgilash kiritilsa, olingan tenglama elektronning vodorod atomidagi to‘lqin funksiyasining radial qismi uchun tenglama bilan bir xil bo‘ladi. Bu tenglama esa parametr ε ning faqatgina ba’zi qiymatlaridagina yechimga ega:

$$\varepsilon=-\frac{Z^2}{\left(n_r+l'+1\right)^2} \qquad (11.21)$$

bunda n_r ixtiyoriy musbat butun son yoki nol. (11.20) kvadrat tenglamadan l ning berilgan qiymatlarida l' uchun quyidagi ikkita qiymat olinadi:

$$l'_{\pm}=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\left[(2l+1)^2-4Z^2\alpha^2\right]^{1/2} \qquad (11.22)$$

$l>0$ bo‘lganda bularning biri musbat, ikkinchisi esa manfiy bo‘ladi. Bu ildizlarning qaysi birini (11.21) ga qo‘yish kerak? $R(\rho)$ funksiya’ning kichik ρ lar uchun asimptotikasi xuddi norelyativistik holdagidek quyidagi ko‘rinishga ega bo‘ladi:

$$R_1(\rho)\sim\rho^{l'+1}, R_2(\rho)\sim\rho^{-l'}.$$

Agar to‘lqin funksiyasini nolda chekli bo‘lsin desak, unda $R_1(\rho)$ va musbat l' ni, ya’ni, l'_+ ni tanlab olinishi kerak. Lekin l'_+ ildiz faqatgina $l>0$ bo‘lgandagina noldan kattadir, $l=0$ holda $l'_{\pm}$ ning ikkalasi ham manfiy bo‘lib, qoladi va to‘lqin funksiya bu holda nol nuqtada singulyarlikka ega bo‘ladi. Demak, funksiyamizning cheklanganlik talabi $l=0$ bo‘lganda $l'_{\pm}$ larning ichida to‘g‘risini tanlab zarurligi ham kelib chiqadi. Spinlari $\frac{1}{2}$ ga teng bo‘lgan ikkita bir xil zarracha, masalan, elektronlarning to‘qnashuvi ko‘rib chiqiladi. U holda, sistemaning to‘la to‘lqin funksiyasini ko‘paytma ko‘rinishda yozish mumkin, uning birinchi funksiyasi koordinata yoki orbital, ikkinchisi esa spin funksiyasi deb ataladi. Shredinger tenglamasi faqat koordinata funksiyasinigina aniqlaydi, shu tufayli ikkita bir xil zarrachalardan tashkil topgan sistema uchun zarrachalarning o‘rnini almashtirishga nisbatan orbital to‘lqin funksiyasi simmetrik yoki antisimmetrik bo‘lishi kerak. Agarda sistemaning to‘la spini S=0 bo‘lsa, u holda orbital to‘lqin funksiya simmetrik bo‘ladi, agarda S=1 bo‘lsa u holda – antisimmetrik bo‘lishi kerak. Og‘irlik markazi bilan bog‘langan sanoq sistemasida zarrachalarning o‘rnini almashtirish radius-vektor yo‘nalishini teskarisiga o‘zgartirishga olib keladi, ya’ni $\mathbf{r}_1=-\mathbf{r}_2$. Lekin, inersiya markazi tinch turgan koordinatalar sistemasida r o‘zgarmasdan qoladi, θ burchak esa $\pi-\theta$ ga almashinadi. Shuning uchun, cheksizlikdagi chegaraviy shartni qanoatlantiruvchi birinchi zarracha uchun to‘lqin funksiyasi

$$\psi_1 = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}$$

ko‘rinishda bo‘ladi.

Ikkinchi zarracha uchun

$$\psi_2 = e^{-ikz} + \frac{f(\pi-\theta)}{r}e^{ikr}$$

bo‘ladi. Sistemaning to‘lqin funksiyasini esa, $r\to\infty$ da, uning simmetriyasini hisobga olgan vaqtimizda, quyidagicha yozish lozim:

$$\psi = e^{ikz} \pm e^{-ikz} + \frac{e^{ikr}}{r}\left[f(\theta) \pm f(\pi-\theta)\right]. \qquad (10.43)$$

Zarrachalarning aynan o‘xshashligi sababli, ularning qaysi biri sochiluvchi, qaysi biri sochuvchi ekanini ko‘rsatib bo‘lmaydi.

Inersiya markazi sistemasida, ikkita bir xil, bir-biriga qarama-qarshi tarqalayotgan tushuvchi yassi to‘lqinlarga ega bo‘linadi. (10.43 formulada bu e^{ikz} va e^{-ikz}). Ushbu (10.43) formuladagi tarqaluvchi sferik to‘lqin esa har ikki zarrachaning sochilishini hisobga oladi va uning yordamida fazoviy burchakning berilgan $d\Omega$ elementida zarrachalardan birortasining sochilish ehtimolligini aniqlab beradi. Shunday qilib, agar

to‘qnashayotgan zarracharning yig‘indi spini S=0 bo‘lsa, u holda sochilishning differensial effektiv kesimi

$$d\sigma_0 = \left|f(\theta) + f(\pi-\theta)\right|^2 d\Omega \qquad (10.44)$$

ko‘rinishga ega bo‘ladi. Agar S=1 bo‘lsa, u holda

$$d\sigma_1 = \left|f(\theta) - f(\pi-\theta)\right|^2 d\Omega \qquad (10.45)$$

bo‘ladi.

Hosil qilingan (10.44) va (10.45) formulalarda to‘qnashuvchi zarrachalarning yig‘indi spini aniq qiymatga ega, deb faraz qilingan edi. Agar sistema ma’lum spin holatda bo‘lmasa, u holda sochilish kesimini aniqlash uchun barcha mumkin bo‘lgan holatlar bo‘yicha o‘rtachalashtirish lozim, chunki ularning hammasini teng ehtimolli deb qaraladi. $\frac{1}{2}$ spinga ega bo‘lgan ikkita zarrachadan tashkil topgan sistemasining $2\cdot 2=4$ ta turli spin holatlaridan biri $S=0$ to‘la spinga (zarrachalarning spin proyeksiyalari $+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$ bo‘lgan holatga) mos keladi va uchtasi $S=1$ spinga (zarrachalarning spin proyeksiyalari $\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}$ bo‘lgan holatga) mos keladi. Shuning uchun, sistemaning S=0 yoki S=1 spinga ega bo‘lish ehtimolligi mos ravishda $\frac{1}{4}$ yoki $\frac{3}{4}$ ga teng va shunga ko‘ra

$$d\sigma = \frac{1}{4}d\sigma_0 + \frac{3}{4}d\sigma_1 =$$

$$= \left\{\left|f(\theta)\right|^2 + \left|f(\pi-\theta)\right|^2 - \frac{1}{2}\left[f(\theta)f^*(\pi-\theta) + f^*(\theta)f(\pi-\theta)\right]\right\}d\Omega \qquad (10.46)$$

bo‘ladi.

Misol ta’riqasida $U=\frac{e^2}{r}$ Kulon qonuni bo‘yicha o‘zaro ta’sirlashuvchi ikkita tez harakatlanuvchi elektronlarning to‘qnashuvi ko‘rib chiqiladi. Agarda $-e^2/\hbar\upsilon \ll 1$ bo‘lganida (υ-zarrachalarning nisbiy harakat tezligi) amplituda uchun uning Born yaqinlashishidagi ifodasidan foydalanish mumkin. Bunda formuladagi m ikkala zarrachaning keltirilgan massasi ekanini yoodda tutish lozim ($m=m_e/2$, bunda m_e –elektronning massasi), u holda

tenglama sohasidagi izlanishlar Dirakni 1928-yilda o‘zining mashhur tenglamasini vujudga keltirishga olib kelgan. Kleyn – Gordon tenglamasining to‘g‘ri talqinini 1934- yilda Pauli va Vayskopflar ikkilamchi kvantlash metodi asosida berishgan. Ular $(\mathbf{r},t)$ va $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ kattaliklarga (elementar zaryadga ko‘paytirgandan keyin) zarrachalarning mos ravishda zaryadi va toki zichliklari sifatida qarashni taklif etganlar.

Kleyn–Gordon tenglamasini talqin qilishda yana bir qiyinchilik bor u ham bo‘lsa, kvant mexanikasida qabul qilingan sababiyat prinsipining buzilishidir. Bu prinsip bo‘yicha to‘lqin funksiyasining boshlang‘ich momentdagi qiymati sistemaning keyingi ixtiyoriy vaqtdagi holatini aniqlaydi. Kleyn–Gordon tenglamasi vaqt bo‘yicha ikkinchi tartibli tenglama bo‘lgani uchun boshlang‘ich momentda faqatgina $\psi(\mathbf{r},t)$ ning o‘zigina emas, balki $\partial\psi(\mathbf{r},t)/\partial t$ ni ham berish kerak. Demak, faqatgina $\psi(\mathbf{r},t)$ ning boshlang‘ich momentdagi qiymati sistemaning holatini aniqlab bera olmaydi.

Kleyn–Gordon tenglamasining yechimiga o‘taylik. Kleyn–Gordon tenglamasi quyidagi tekis to‘lqin ko‘rinishidagi yechimga ega ekanligini ko‘rish, qiyin emas:

$$\psi(\mathbf{r},t) = N\exp[i(\mathbf{pr} - Et)/\hbar] \qquad (11.10)$$

bunda

$$E = \pm\left(\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4\right)^{1/2}. \qquad (11.11)$$

(11.11) formuladagi ishoraning noaniqligi (11.4) klassik formuladagi ishoraning noaniqligiga mos keladi. Bu bilan bog‘liq bo‘lgan, qiyinchiliklarni quyida Dirak tenglamasi ko‘rib chiqqanda batafsil muhokama qilinadi.

Ko‘rinib turibdiki, (11.10) to‘lqin funksiyalik holatda musbat va manfiy energiyalik zarrachalar uchun zaryad zichligining ishorasi har xil ekan. Pauli va Vayskopf talqini bo‘yicha manfiy energiyalik holatni manfiy zaryadli zarrachalarning holati va musbat energiyalik holatni esa musbat zaryadlangan zarrachalarning holati deb qarash kerak.

11.2. Elektromagnit maydondagi zarracha

Vektor potensiali $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ va skalar potensiali $\varphi(\mathbf{r},t)$ bo‘lgan elektromagnit maydonda harakat qilayotgan zaryadli relyativistik

zarrachani ko‘raylik. Shu holga to‘g‘ri keladigan to‘lqin tenglamasini keltirib chiqarish uchun (11.2) munosabatda energiya E va impuls $\boldsymbol{p}$ larni quyidagicha almashtirish kerak:

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi(\mathbf{r},t), \mathbf{p} \to i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t) \qquad (11.13)$$

va hosil bo‘lgan operator munosabat bilan to‘lqin funksiyasiga ta’sir qilish kerak. (11.13) almashtirishning kelib chiqishini Dirak tenglamasiga elektromagnit maydonni kiritganda muhokama qilinadi. Aytilgan ishlar bajarilgandan keyin elektromagnit maydondagi zarracha uchun Kleyn–Gordon tenglamasi olinadi:

$$\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi(\mathbf{r},t)\right)^2 - c^2\left(i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 - m^2c^4\right]\psi(\mathbf{r},t) = 0. \quad (11.14)$$

Potensiallar vaqtga bog‘liq bo‘lmagan holda bu tenglamada $\mathbf{r}$ va t o‘zgaruvchilar ajraladi. Bu holda

$$\psi(\mathbf{r},t) = u(\mathbf{r})\exp(-iEt/\hbar)$$

deb olinsa, to‘lqin funksiyasining fazoviy qismi uchun quyidagi statsionar tenglama olinadi:

$$\left[(E - e\varphi)^2 - c^2\left(i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - m^2c^4\right]u(\mathbf{r}) = 0. \qquad (11.15)$$

Vektor potensial nolga teng va skalar potensial $\varphi(\mathbf{r})$ -sferik simmetrik bo‘lgan holni olib ko‘raylik. (11.15) tenglama bu holda quyidagi ko‘rinishga keltiriladi:

$$\left(-\hbar^2c^2\nabla^2 + m^2c^4\right)u(\mathbf{r}) = (E - e\varphi)^2 u(\mathbf{r}). \qquad (11.16)$$

Oxirgi tenglamada sferik koordinatalar sistemasida o‘zgaruvchilarni ajratishimiz mumkin. Buning uchun $u(\mathbf{r})$ funksiya’ni quyidagi ko‘rinishda izlanadi:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{R(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

bunda $Y_{lm}(\theta,\varphi)$- sferik funksiyalardir. Noma’lum $R(r)$ funksiya uchun quyidagi tenglama olinadi:

$$\frac{d^2R(r)}{d^2r} - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) + \frac{(E - e\varphi)^2 - m^2c^4}{\hbar^2c^2}R(r) = 0. \qquad (11.17)$$

$$p^2 = p_\mu p^\mu = p_0^2 - p_1^2 - p_2^2 - p_3^2.$$

Quyidagi belgilashlar kiritilsa:

$$\partial^i = -\partial_i = -(\nabla)_i \quad \text{va} \quad \partial^0 = \partial_0 = \frac{\partial}{c\partial t}$$

impuls uchun formulalarni qulay ko‘rinihga keltirib olinadi:

$$p^\mu = (i\partial^0, i\partial) = i\partial^\mu \quad \text{va} \quad p_\mu = (i\partial^0, -i\partial) = i\partial_\mu. \qquad (11.43)$$

Takrorlanuvchi (bir gal kovariant bir gal kontravariant holda) grek indekslari bo‘yicha 0 dan 3 gacha yig‘indi ko‘zda tutiladi. Lotin indekslari esa 1,2,3 qiymatlarni qabul qiladi.

Avvalgi paragrafdagidek, Kleyn–Gordon operatorini ikki operatorning ko‘paytmasi ko‘rinishiga keltirib olaylik:

$$p^2 - m^2 = (\hat{p} + m)(\hat{p} - m) \qquad (11.44)$$

bunda $p^2 = p^\mu p_\mu$ va biz Feynman belgilash kiritildi: $\hat{p} = p^\mu \gamma_\mu$. (11.44) formulaning chap tomoni Lorens – skalar bo‘lgani va uning o‘ng tomoni impuls p^μ bo‘yicha chiziqli bo‘lishi kerakligi uchun yangi sonlar γ_μ larni kiritishga majbur bo‘ldik. Bu yangi γ_μ sonlar oddiy sonlar bo‘la olmaydi, chunki oddiy sonlar uchun (11.44) o‘rinli bo‘lmaydi. (11.44) formulada qavslar ochib chiqilsa,

$$\hat{p}^2 = \hat{p}\hat{p} = p^\mu \gamma_\mu p^\nu \gamma_\nu = \frac{1}{2} p^\mu p^\nu (\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu) = p^2 \qquad (11.45)$$

tenglik o‘rinli bo‘lishi uchun

$$(\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu) = 2g_{\mu\nu} \qquad (11.46)$$

bo‘lishi kerakligi ko‘riladi. Ma’lumki, bunday xossaga matritsalar egadir. Shuni hisobga olib, (11.46) tenglikni haqiqatda quyidagi ko‘rinishda tushunish kerak:

$$(\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu) = 2g_{\mu\nu} I. \qquad (11.47)$$

bunda I-o‘lchamligi xuddi γ_μ - ning o‘lchamligi N ga teng bo‘lgan birlik matritsadir. Odatda, (11.47) ning o‘rniga (11.46) qo‘llaniladi, bunda faqat birlik matritsa bo‘lishini esda tutish kerak. Kiritilgan matritsalarning o‘lchami N aniqlanadi. $\mu \neq \nu$ bo‘lgan holda

$$\gamma_\mu \gamma_\nu = -\gamma_\nu \gamma_\mu = -I\gamma_\mu \gamma_\nu$$

bo‘lgani uchun

$$\det(\gamma_\mu \gamma_\nu) = (-I)^N \det(\gamma_\nu \gamma_\mu) = (-I)^N \det(\gamma_\mu \gamma_\nu) \qquad (11.48)$$

tenglik olinadi. Demak, $(-1)^N = 1$, ya’ni, N - juft son ekan. 11.3-paragrafda ko‘rsatilganidek $N = 4$.

Endi (11.44) dan foydalanib, quyidagi vaqt bo‘yicha chiziqli bo‘lgan tenglamani yozib olish mumkin:

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)\psi = 0. \qquad (11.49)$$

Agar (11.42) dan foydalanilsa, bu tenglamani koordinat fazosida yozib olish mumkin:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0. \qquad (11.50)$$

Bu-Dirak tenglamasining kovariant ko‘rinishidir. Dirak matritsalarining o‘lchamidan kelib chiqadiki, (11.50) tenglamadagi $\psi(\mathbf{r}, t)$ funksiya to‘rt komponentalik to‘lqin funksiyadir.

γ-matritsalarning asosiy xossalarini o‘rganishga o‘taylik, buning uchun (11.46) munosabatdan boshqa hech narsa kerak bo‘lmaydi.

Agar (11.46) da $\mu = \nu = 0$ desak,

$$(\gamma^0)^2 = I \qquad (11.51)$$

munosabat olinadi. $\mu = \nu = i$ holda esa

$$(\gamma^i)^2 = -I \qquad (11.52)$$

ekanligi ko‘rish mumkin. Bunda i bo‘yicha yig‘indi yo‘q. Bu formula ixtiyoriy i uchun o‘rinlidir, ya’ni, $(\gamma^1)^2 = -I$ $(\gamma^2)^2 = -I$ $(\gamma^3)^2 = -I$. Agar $\gamma^i = -\gamma_i, \gamma^0 = -\gamma_i$ xossalar eslansa, (11.51) va (11.52) formulalarni quyidagi bitta ifodaga birlashtirish mumkin:

$$\gamma^\mu \gamma_\mu = I \qquad (11.53)$$

(μ bo‘yicha yig‘indi yo‘q).

Amalda ko‘pincha γ-matritsalar va ularning ko‘paytmalarining izi – shpurini hisoblashga to‘gri keladi (matritsaning izi – uning diagonal elementlarining yigindisidir). Bitta matritsaning izini hisoblashdan boshlaylik:

maydonidan farqli bo‘lishini ham hisobga olish kerak. π-mezonlar uchun kuchli o‘zaro ta’sirning ham ahamiyati kattadir, buning ham π-mezoatomlarning energetik sathlariga ta’sirini hisobga olish kerak. Bu ikki effekt (11.23) va (11.24) formulalarni keltirib chiqarishda hisobga olinmagan.

11.3. Dirak tenglamasi

1928-yilda Dirak ehtimoliy talqin qilishdagi qiyinchiliklardan holi bo‘lgan relyativistik tenglamani olgan. Pauli va Vayskopf 1934-yilda Kleyn–Gordon tenglamasiga yangicha yondoshmagunlaricha Dirak tenglamasi to‘g‘ri bo‘lgan yagona relyativistik tenglamadir deb qaralgan. Hozirgi tasavvurlar bo‘yicha ikkala tenglama ham to‘g‘ri tenglamadir, faqat ularning qo‘llanish sohasi har xildir: Dirak tenglamasi spini 1/2 (Plank doimiysi $\hbar$ birliklarida) bo‘lgan zarrachalarga va Kleyn-Gordon tenglamasi esa spinsiz zarrachalarga qo‘llanishi kerak.

Avvalgi paragraflarda ko‘rdikki, Kleyn–Gordon tenglamasining ehtimoliy talqinidagi qiyinchiliklar uning vaqt bo‘yicha ikkinchi tartibli tenglamaligi bilan bog‘liqdir. Demak, bu qiyinchilikdan xoli bo‘lish uchun tenglamaning vaqt bo‘yicha hosilasi birinchi tartibli bo‘lishi kerak. Formal nuqtayi nazardan bunday tenglamani ozod zarrachaning energiyasi uchun klassik relyativistik ifodadan $E^2 = \mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4$ olish mumkin. Lekin bu ifodada zarrachaning impulsini tegishli operatorga almashtirilsa $E = \left(-c^2\hbar^2\nabla^2 + m^2c^4\right)^{1/2}$ ko‘rinishdagi operator olinadi. Bu operatorning to‘lqin funksiyasiga ta’siri esa integral munosabatga tengdir. Integro-differensial tenglamaga olib keladigan bu yo‘l albatta to‘g‘ri kelmaydi.

Nisbiylik nazariyasida hamma koordinatlar va vaqt teng huquqli bo‘lgani uchun izlanayotgan tenglama hamma o‘zgaruvchilar (koordinatlar va vaqt) bo‘yicha birinchi tartibli differensial tenglama bo‘lishi kerak. Agar kvadratik forma bo‘lgan klassik $E^2 - \mathbf{p}^2c^2 - m^2c^4$ munosabatni ikkita chiziqli formalarning ko‘paytmasi sifatida ifodalash mumkin bo‘lganida edi, bunday tenglamani darrov olgan bo‘lar edik. Lekin oddiy arifmetika nuqtayi nazaridan bunday faktorizatsiya’ni

Elektronning klassik radiusi	$r_0 = e^2/(4\pi\varepsilon_0 mc^2)$	$2{,}81794 \cdot 10^{-15}\, m$
Vodorod atomi uchun Bor radiusi	$a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(me^2)$	$5{,}29177 \cdot 10^{-11}\, m$
Yadroning cheksiz massasi uchun Ridberg doimiysi	$R_\infty = \alpha/(4\pi \cdot a_0)$	$1{,}09737 \cdot 10^{7}\, m^{-1}$
Vodorod atomi uchun Ridberg doimiysi	R_H	$1{,}09768 \cdot 10^{7}\, m^{-1}$
Bor magnetoni	$\mu_B = e\hbar/(2m)$	$9{,}27408 \cdot 10^{-24}\, Dj/Tl$
Elektronning magnit momenti	μ_e	$9{,}28483 \cdot 10^{-24}\, Dj/Tl$
Protonning magnit momenti	μ_p	$1{,}411062 \cdot 10^{-26}\, Dj/Tl$
Neytronning magnit momenti	μ_n	$-0{,}96630 \cdot 10^{-26}\, Dj/Tl$
Yadro magnetoni	$\mu_N = e\hbar/(2m_p)$	$5{,}05082 \cdot 10^{-27}\, Dj/Tl$

B ilova
Delta- funksiya va uning xossalari

Bitta x o‘zgaruvchiga bog‘liq bo‘lgan delta funksiya, odatda, $\delta(x)$ orqali belgilanadi. $\delta(x)$ funksiya Dirak tomonidan kiritilgan bo‘lib, nazariy fizikaning turli masalalarini yechishda keng qo‘llaniladi. Ushbu funksiya x o‘zgaruvchiga nisbatan singular funksiya bo‘lib, $x = 0$ nuqtadan tashqari barcha qolgan nuqtalarda nolga teng bo‘ladi, ya’ni

$$\delta(x) = 0, \ \text{agar} \ x \neq 0,$$
$$\delta(x) = \infty, \ \text{agar} \ x = 0.$$

Boshqacha aytganda

$$\int_a^b \delta(x)dx = 1, \ \text{bu yerda} \ a < 0 < b \qquad (B.1)$$

δ – funksiyaning eng muhim xossasi quyidagi tenglik orqali ifodalanadi:

bajara olmaymiz. Shunga qaramasdan, Dirak bu kvadratik formani quyidagi ko'rinishda yozib olish mumkin deb faraz qildi:

$$E^2 - \mathbf{p}^2c^2 - m^2c^4 = \left(E - c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} - \beta mc^2\right)\left(E + c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta mc^2\right). \qquad (11.27)$$

Hosil bo'lgan chiziqli formalardan birini (masalan, birinchisini) olib, unda E va $\mathbf{p}$ larni (11.2) qoida bo'yicha operatorlarga almashtirilsa va shu operator munosabat bilan to'lqin funksiyasiga ta'sir qilinsa, izlanayotgan vaqt bo'yicha birinchi tartibli bo'lgan differensial tenglama olinadi:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}\psi + \beta mc^2\psi. \qquad (11.28)$$

Ushbu olingan (11.28) tenglama Dirak tenglamasidir. Hozircha noma'lum bo'lgan $\boldsymbol{\alpha}$ va β kattaliklar koordinatlarga bog'liq bo'lmasligi kerak, aks holda ozod zarrachaning harakatini ifoda qilishi kerak bo'lgan (11.28) tenglamada koordinatlarga bog'liqlik paydo bo'ladi, bu esa zarrachaga qandaydir kuchlar ta'sir qilayotganini bildirar edi. Ozod zarracha uchun fazoning hamma nuqtalari va vaqtning ixtiyoriy momenti ekvivalentdir (fazo-vaqtning bir jinsliligi), shuning uchun koordinata boshining siljishi yoki vaqtning o'lchash boshining o'zgarishi tenglamani o'zgartirmasligi kerak. Agar $\boldsymbol{\alpha}$ va β kattaliklar koordinatlarning funksiyalari bo'lganda bunday bo'lmas edi.

Kiritilgan $\boldsymbol{\alpha}$ va β kattaliklar xossalarini (11.27) ning o'ng tomoni uning chap tomoniga teng bo'lishi kerakligi shartidan topish mumkin. (11.27) dagi chiziqli formalarni ko'paytirganimizda noma'lum $\boldsymbol{\alpha}$ va β kattaliklarning ko'paytmadagi tartibiga ahamiyat berish kerak, chunki $\boldsymbol{\alpha}$ va β lar yuqorida aytganimizdek oddiy sonlar bo'la olmaydi. Ko'paytmada paydo bo'ladigan impulsga nisbatan chiziqli bo'lgan $mc^3p_i(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i)$ ifodani yo'qotish uchun

$$(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i) = 0, \qquad i = 1,2,3 \qquad (11.29)$$

deb olish kerak. Demak, $\boldsymbol{\alpha}$ va β kattaliklar o'zaro antikommutativ bo'lishi kerak ekan. Undan tashqari, $\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}$ hadlarni o'zaro ko'paytirganda ham ortiqcha hadlar paydo bo'ladi:

$$(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p})(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}) = \alpha_i p_i \alpha_j p_j = \frac{1}{2}p_i p_j\left(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i\right).$$

Bunda biz ba'zi bir takrorlanishlardan xalos bo'la olmaymiz. O'quvchi relyativistik 4-vektorlar bilan tanish deb faraz qilamiz.

Umumiy va nazariy fizika kurslaridan ma'lumki, fizik kattaliklarning birliklari aniq bir kelishuv asosida tanlab olinadi, masalan, SI sistemasi, SGS sistemasi va h.k. Relyativistik kvant mexanikasida ham o'ziga xos birlik sistemasi ko'p ishlatiladi. U ham bo'lsa - *tabiiy birliklar sistemasi* deb nom olgan sistemadir, bu sistemada yorug'lik tezligi va Plank doimiysi birga tenglashtirib olinadi:

$$c = 1, \quad \hbar = 1.$$

Buning natijasida energiya va impuls massa birligiga ega bo'lishini (11.4) formuladan darhol ko'rish mumkin. (11.2) formulaga nazar tashlasak, impuls va energiya l^{-1} birlikka ega bo'lishi kerakligi ko'riladi, bunda l – uzunlik birligi (masalan, sm). Vaqt ham mana shu *sm* larda o'lchanadi, massaning birligi esa sm^{-1} bo'ladi. Tezliklar o'lchamsiz kattalik bo'lib, jism tezligining yorug'lik tezligiga nisbatiga teng bo'ladi. Harakat miqdori momenti va spin o'lchamsiz kattaliklar bo'ladi (haqiqatan ham, ularning o'lchamligi Plank doimiysi bilan bir xil edi). Demak, tezlik va aylanma momentlar o'zining tabiiy birliklarida ifodalanadi, o'lchamli kattaliklarning hammasi esa *sm* ning har xil darajasidagi birliklarga ega bo'ladi. Bu, albatta, katta qulayliklarga olib keladi. Shuning uchun ham shu sistemadan foydalanib turiladi.

Dirak tenglamasini kovariant ko'rinishga keltirish uchun energiya-impuls 4-vektorining ta'rifini va mos keluvchi operatorlarga o'tish ta'riflarini eslab ((11.2) formulalarga qarang) quyidagi moslik formulalarini yozish mumkin (Plank doimiysini $\hbar = 1$. deb olinganida):

$$p^\mu = \{E/c, \mathbf{p}\} \to \left\{i\frac{\partial}{c\partial t}, -i\nabla\right\} \qquad (11.41)$$

va

$$p_\mu = g_{\mu\nu}p^\mu = \{E/c, -\mathbf{p}\} \to \left\{i\frac{\partial}{c\partial t}, i\nabla\right\} \qquad (11.42)$$

bunda $g_{\mu\nu}$ metrik tenzorni bildiradi. Uning signaturasi quyidagi ko'rinishda olinadi $\{+,-,-,-\}$, ya'ni, ixtiyoriy to'rt vektorning kvadrati quyidagicha aniqlanadi:

$$Sp\gamma_\mu = Sp\gamma_\nu\gamma_\nu\gamma_\mu = Sp\gamma^\nu\left(2\delta^\nu_\mu - \gamma_\mu\gamma^\nu\right) =$$
$$= -Sp\gamma_\nu\gamma_\mu\gamma^\nu = Sp\gamma^\nu\gamma_\nu\gamma_\mu = -Sp\gamma_\mu = 0. \qquad (11.54)$$

Bu munosabatni hisoblashda birinchi tenglik belgisidan keyin Sp belgisining ostiga birlik matritsani kiritdik ((11.53) ga qarang) va $\mu \neq \nu$ bo'lsin deb oldik, bunda $\delta^\nu_\mu = 0$ bo'ladi. To'rtinchi tenglik belgisidan keyin esa shpurning siklik xossasidan foydalandik.

Dirak matritsalarining o'lchami 4 ga tengligi aytilgan edi. Lekin mustaqil 4×4 matritsalarning soni 16 ga teng bo'lishi kerak. Odatda, shu 16 ta matritsalar sifatida quyidagi matritsalar olinadi:

I - birlik matritsa – bitta;

$\gamma^\mu, \mu = 0,1,2,3$ – to'rtta matritsa

$\sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{2i}\left[\gamma^\mu, \gamma^\nu\right] = \frac{1}{2i}\left(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu\right)$ –oltita matritsa

$\gamma^5 = -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ – bitta;

$\gamma^\mu\gamma^5, \mu = 0,1,2,3$ – to'rtta matritsa.

Bu ro'yxatda paydo bo'lgan γ^5-matritsa kvantlangan maydonlar nazariyasida alohida rol o'ynaydi (uning ba'zi bir xossalari bilan keyin tanishib chiqiladi).

Ikkita gamma-matritsalar ko'paytmasining shpuri hisoblaniladi:

$$Sp\gamma^\mu\gamma^\nu = \frac{1}{2}Sp\left(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu\right) = g_{\mu\nu}SpI = 4g^{\mu\nu}. \qquad (11.55)$$

Yanada qiyinroq bo'lgan, quyidagi masalaga o'tib, to'rtta gamma-matritsalarning ko'paytmasining shpurini topaylik:

$$Sp\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma = \frac{1}{2}Sp\gamma^\mu\gamma^\nu\left(-\gamma^\sigma\gamma^\lambda + 2g^{\sigma\lambda}\right) =$$
$$= 8g^{\sigma\lambda}g^{\mu\nu} - Sp\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\sigma\gamma^\lambda =$$
$$= 8g^{\sigma\lambda}g^{\mu\nu} - Sp\gamma^\mu\left(-\gamma^\sigma\gamma^\lambda + 2g^{\nu\sigma}\right)\gamma^\lambda = \qquad (11.56)$$
$$= 8\left(g^{\sigma\lambda}g^{\mu\nu} - g^{\sigma\nu}g^{\mu\lambda} + g^{\mu\sigma}g^{\nu\lambda}\right) - Sp\gamma^\sigma\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda.$$

ILOVALAR

A ilova
Asosiy fizik doimiylarning belgilanishi va qiymatlari

Nomi	Belgilanishi	Qiymati
Plank doimiysi	h $\hbar = h/(2\pi)$	$6{,}6218\cdot10^{-34}\,Dj\cdot s$ $1{,}05459\cdot10^{-34}\,Dj\cdot s$
Vakuumda yorug'likning tezligi	c	$2{,}99792\cdot10^{8}\,m/s$
Elementar elektr zaryad	e	$1{,}60219\cdot10^{-19}\,Kl$
Elektr doimiysi	ε_0	$8{,}85419\cdot10^{-12}\,F/m$
Magnit doimiysi	$\mu_0 = 1/(\varepsilon_0 c^2)$	$1{,}25664\cdot10^{-6}\,Gn/m$
Gravitatsion doimiy	G	$6{,}672\cdot10^{-11}\,H\cdot m^2/kg^2$
Nozik struktura doimiysi	$\alpha = e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c)$	$1/137{,}036 = 7{,}29735\cdot10^{-3}$
Avogadro soni	N_A	$6{,}02205\cdot10^{23}\,mol^{-1}$
Faradey soni	$F = N_A\cdot e$	$9{,}64846\cdot10^{4}\,Kl/mol$
Bolsman doimiysi	k	$1{,}38066\cdot10^{-23}\,Dj/K$
Universal gaz doimiysi	$R = N_A\cdot k$	$8{,}31441\,Dj/(mol\cdot K)$
Atom massa birligi	m_u	$1{,}66057\cdot10^{-27}\,kg$
Elektronning tinchlikdagi massasi	m_e yoki m	$9{,}10953\cdot10^{-31}\,kg$
Protonning tinchlikdagi massasi	m_p	$1{,}67265\cdot10^{-27}\,kg$
Neytronning tinchlikdagi massasi	m_n	$1{,}67492\cdot10^{-27}\,kg$
Elektronning Kompton to'lqin uzunligi	$\lambda_c = h/(mc)$	$2{,}42631\cdot10^{-12}\,m$

Ko‘rinib turibdiki, $i \neq j$ bo‘lganda impulsning har xil komponentalarining ko‘paytmasi paydo bo‘lishi mumkin. Buning oldini olish uchun

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0, i \neq j \tag{11.30}$$

deb qabul qilish kerak. Qolgan hadlar to‘g‘ri ko‘rinishga ega bo‘lishi uchun

$$\beta^2 = \alpha_i^2 = 1 \tag{11.31}$$

deb olish kerak. Topilgan (11.29)-(11.31) xossalarga qaralsa, kiritilgan **α** va β kattaliklar matritsalar bo‘lishi kerak, (11.28) tenglama esa matritsa ko‘rinishida yozilgan chiziqli differensial tenglamalar sistemasini tashkil qilar ekan. Bu tenglamaga kirgan to‘lqin funksiya esa ko‘p komponentalik funksiyadir, uni matritsa-ustun sifatida tasavvur qilish qulaydir:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r},t), \\ \psi_2(\mathbf{r},t), \\ \vdots \\ \psi_n(\mathbf{r},t). \end{pmatrix}$$

Matritsa-ustun elementlarining soni α_i va β matritsalarning o‘lchamlariga tengdir. To‘lqin funksiyasi komponentalarining mavjudligi zarracha qo‘shimcha erkinlik darajalarining mavjudligini bildiradi. Bu qo‘shimcha erkinlik darajalari elektronning spini bilan bog‘liq bo‘lishi keyinchalik ko‘rinadi.

Dirak tenglamasidan uzluksizlik tenglamasini keltirib chiqarish mumkin. Dirak tenglamasi matritsaviy tenglama bo‘lgani uchun kompleks qo‘shmaning o‘rniga ermit qo‘shmani ishlatish kerak. Eslatib o‘taylik, (krest bilan belgilanadigan) matritsaning ermit qo‘shmasi kompleks qo‘shma bilan transponirlashdan iboratdir:

$$A^+ = \left(A^*\right)^T.$$

Shuning uchun, $\psi(\mathbf{r},t)$ ning ermit qo‘shmasi bo‘lgan $\psi^+(\mathbf{r},t)$ matritsa quyidagi ko‘rinishga ega bo‘ladi:

$$\psi^+(\mathbf{r},t) = \left(\psi_1^*(\mathbf{r},t), \psi_2^*(\mathbf{r},t), \cdots, \psi_n^*(\mathbf{r},t)\right).$$

Dirak tenglamasida ermit qo‘shmasining ko‘rinishi quyidagicha bo‘ladi:

bunda U ixtiyoriy unitar matritsa. Yangi kiritilgan $\tilde{\alpha}_i$ va $\tilde{\beta}$ matritsalarning xossalari eski α_i va β matritsalarning xossalari bilan aynan bir xil bo‘lishini ko‘rish qiyin emas.

Dirak matritsalarining har xil tasavvurlari mavjuddir, lekin Dirak tenglamasidan kelib chiqadigan fizik xulosalarning hech qaysisi konkret tasavvurga bog‘liq emas. Keyingi paragraflarda bu tasavvurlarning bir nechtasi bilan tanishib chiqiladi va ularning qo‘llanish sohalari muhokama qilinadi. Hozircha bu matritsalarning quyidagi tasavvuridan foydalaniladi:

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}. \tag{11.39}$$

bundagi σ_i matritsalar ikki qatorli Pauli matritsalaridir, ya’ni (11.39) tasavvurdagi matritsalarning har bir elementi o‘z navbatida ikki o‘lchamli matritsadan iboratdir:

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{11.40}$$

11.4. Dirak matritsalarining algebrasi

Avvalgi paragrafda Dirakning relyativistik tenglamasini keltirib chiqardik hamda **α** va β matritsalarning eng sodda xossalari bilan tanishib chiqdik. Dirak matritsalarining relyativistik kvant mexanikasining apparatida o‘ynaydigan muhim rolini hisobga olib, bu paragrafda Dirak tenglamasini kovariant ko‘rinishga keltiriladi va Dirak matritsalarining asosiy xossalari bilan tanishib chiqiladi. Ya’ni, bu va keyingi bir necha paragraflar ko‘proq formal xarakterga ega bo‘ladi.

Shpur belgisining ostida matritsalarni siklik ravishda almashtirish mumkinligini hisobga olsak, quyidagi formulaga kelinadi:

$$Sp\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma = 4\left(g^{\mu\nu}g^{\lambda\sigma} - g^{\mu\lambda}g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma}g^{\nu\lambda}\right). \tag{11.57}$$

Umuman olganimizda, toq sonli γ-matritsalarning ko‘paytmasining shpuri hamma vaqt nolga teng, juft sonli γ - matritsalarning ko‘paytmasini esa oxirgi formulani keltirib chiqarishda ishlatgan yo‘l bilan keltirib chiqarish mumkin.

Olingan formulalardan ixtiyoriy 4-vektorlar p_μ, q_μ va h.k lar uchun quyidagi tengliklar urinli ekanligi kelib chiqadi:

$$Sp(\hat{p}) = 0, Sp(\hat{p}\hat{q}) = 4pq, Sp(\hat{p}\hat{q}\hat{k}) = 0$$
$$Sp(\hat{p}\hat{q}\hat{k}\hat{s}) = 4\left[(pq)(ks) - (pk)(qs) + (ps)(qk)\right]. \tag{11.58}$$

Endi γ^5 - matritsalik ifodaning shpuri hisoblanadi va quyidagi tenglik o‘rinli ekanligini isbot qilaylik:

$$Sp\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^5 = 0. \tag{11.59}$$

Faraz qilaylik,

$$Sp\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^5 = ag^{\mu\nu}$$

bo‘lsin, bunda a – noma’lum koeffitsiyentdir. Bu ifoda mumkin bo‘lgan yagona ifodadir, chunki bizning qo‘limizda mos keluvchi indeksli va oddiy songa proporsional bo‘lgan boshqa kattaliklar yo‘q. Oxirgi tenglikda $\mu = \nu = 0$ deb olinsa,

$$Sp\gamma^0\gamma^0\gamma^5 = Sp\gamma^0\gamma^5\gamma^0 = -Sp\gamma^0\gamma^0\gamma^5 = 0$$

ekanligi ko‘riladi. Demak, a=0 ekan va (11.59) – tenglikka keldik. Amalda keng ishlatiladigan yana bir kattalik bor - $Sp\gamma^5\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma$. Bu kattalikning qiymatini quyidagi umumiy ko‘rinishda ifodalab olaylik:

$$Sp\gamma^5\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma = a\in^{\mu\nu\lambda\sigma} + bg^{\sigma\lambda}g^{\mu\nu} + cg^{\sigma\nu}g^{\mu\lambda} + dg^{\mu\sigma}g^{\nu\lambda} \tag{11.60}$$

Bizning qo‘limizda o‘ng tomonda yozish mumkin bo‘lgan boshqa tenzor strukturalar yo‘q. Bu formulada paydo bulgan $\in^{\mu\nu\lambda\sigma}$ simvol 4-rangli birlik absolut antisimmetrik tenzorni bildiradi. Ya’ni, ta’rif bo‘yicha

- $$\in^{0123} = 1$$
- uning ixtiyoriy ikki indeksining o‘rnini almashtirilganda tenzor ishorasini o‘zgartiradi:

$$\left(\gamma^0\gamma_i\right)^+ = \gamma^i\gamma_0^+, \left(\gamma^0\right)^+ = \left(\gamma^i\right)^+\gamma_0$$

tenglikni hisobga olinsa,

$$\left(\gamma^i\right)^+ = \gamma_o\gamma^i\gamma_0,$$

ekanligi topiladi. Oxirgi formula va (11.67) ning ikkinchi formulasini quyidagi bitta formulaga birlashtirish mumkin:

$$\left(\gamma^\mu\right)^+ = \gamma_o\gamma^\mu\gamma_0. \tag{11.68}$$

Endi Dirak tenglamasining ermit qo‘shma ko‘rinishiga o‘taylik. Dirak tenglamasining chap tomonining ermit qo‘shmasini topaylik:

$$\left\{\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - m\right)\psi\right\}^+ = \psi^+\left(-i\bar{\partial}_\mu\gamma^{\mu+} - m\right).$$

Bunda $(\psi)^+\bar{\partial}_\mu$ ifoda $\partial_\mu(\psi)^+$ ni bildiradi. Agarda $\overline{\psi} = (\psi)^+\gamma_0$ belgilash kiritilsa, unda Dirak qo‘shma spinori deyilgan $\overline{\psi}$ uchun quyidagi tenglama olinadi:

$$\overline{\psi}\left(i\bar{\partial}_\mu + m\right) = 0 \tag{11.69}$$

(11.34) uzluksizlik tenglamasi yangi belgilashlarda quyidagi ko‘rinishni oladi:

$$\partial_\mu\left(\overline{\psi}\gamma^\mu\psi\right) = 0 \tag{11.70}$$

bunda

$$j^\mu = e\overline{\psi}\gamma^\mu\psi$$

kattalik esa 4-tok zichligi rolini o‘ynaydi.

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^+}{\partial t}=-c\frac{\hbar}{i}\nabla\psi^+\boldsymbol{\alpha}+mc^2\psi^+\beta. \qquad (11.32)$$

Bu tenglamada $\boldsymbol{\alpha}$ va β matritsalarni ermit matritsalar deb olinsa:

$$\alpha_i^+=\alpha_i,\beta^+=\beta. \qquad (11.33)$$

Bu tabiiydir, chunki, yuqorida qayd etib o‘tilgan matritsalar tajribada kuzatiladigan fizik kattalikka to‘g‘ri keladi, hamda ermit matritsa bo‘lishi kerak bo‘lgan energiya operatori $\widehat{H}=c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}+\beta mc^2$ ning tarkibiga kiradi. Endi (11.28) Dirak tenglamasini chapdan $\psi^+(\mathbf{r},t)$ ga, (11.32) qo‘shma tenglamani esa o‘ngdan $\psi(\mathbf{r},t)$ ga ko‘paytirib va birini ikkinchisidan ayirilsa, quyidagi tenglama olinadi:

$$i\hbar\frac{\partial\psi^+(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)= \qquad (11.34)$$
$$=c\frac{\hbar}{i}\left(\psi^+(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\alpha}\nabla\psi(\mathbf{r},t)+\nabla\psi(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\alpha}\psi^+(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\right).$$

Agar

$$\rho=\psi^+\psi\geq 0,\mathbf{j}=c\psi^+\boldsymbol{\alpha}\psi$$

belgilashlar kiritilsa, (11.34) munosabat uzluksizlik tenglamasi ekanligini ko‘rish mumkin. Zichlikning tarifidan ko‘rinib turibdiki, to‘lqin funksiyasining ehtimoliy talqini uchun hech qanday muammolar yo‘q.

Kiritilgan matritsalarning ko‘rinishini topishga o‘taylik. Avvalgi boblarda (11.29)–(11.31) xossaga ega bo‘lgan σ_i matritsalar – Pauli matritsalari – uchragan edi ((7.11) ifodaga qarang). Pauli matritsalari o‘zaro antikommutativ bo‘lib, har birining kvadrati birlik matritsaga teng edi. Lekin, Pauli matritsalarining soni uchta, shunday xossaga ega bo‘lgan to‘rtta matritsa kerak. To‘rtinchi matritsa sifatida birlik matritsani ololmaymiz, chunki u hamma σ_i lar bilan kommutativdir. Demak, izlanayotgan matritsalarning o‘lchami N Pauli matritsalarining o‘lchamligi bo‘lgan ikkidan katta bo‘lishi kerak ekan. Bu o‘lcham juft songa teng bo‘lishi kerakligini osongina ko‘rsatish mumkin. Haqiqatan ham, (11.29) dan:

$$\alpha_i\beta=\beta\alpha_i=(-I)\beta\alpha_i \qquad (11.35)$$

kelib chiqadi. Bunda I matritsa - N o‘lchamlik birlik matritsadir. Olingan munosabatning chap va o‘ng tomonlarining determinantlari hisoblanadi:

$$\det(\alpha_i\beta)=\det(\alpha_i)\det(\beta)=(-I)^N\det(\alpha_i)\det(\beta) \qquad (11.36)$$

bundagi $\boldsymbol{\alpha}$ va β matritsalar teskari matritsalarga egadir, ((11.31) shart bo‘yicha, har bir α_i va β matritsalarning teskarisi o‘ziga tengdir), ya’ni, ularning determinantlari noldan farqlidir. Demak,

$$(-1)^N=1$$

ekan, ya’ni N juft sondir. Yuqorida aytilganidek, N = 2 bo‘lganda matritsalarning soni yetarli emas, bundan kelib chiqadiki, α_i va β matritsalarning o‘lchamini to‘rtga teng deb olish kerak.

Matritsa α_i va β larning shpuri (shpur – Sp - matritsaning diagonal elementlarining yig‘indisidir) nolga tengligini ko‘rsataylik. Buning uchun quyidagi formulani:

$$\alpha_i\beta=-\beta\alpha_i$$

chapdan α_i ga ko‘paytiriladi va (11.31) shartdan foydalaniladi. Natijada quyidagi olinadi:

$$\beta=-\alpha_i\beta\alpha_i.$$

Tenglikning ikkala tomonidan shpurni hisoblansa va Sp belgisining ostida matritsalarni siklik ravishda o‘rnini almashtirish mumkinligi hisobga olinsa, quyidagiga kelinadi:

$$Sp\beta=Sp(-\alpha_i\beta\alpha_i)=Sp(-\alpha_i^2\beta)=Sp(-\beta)$$

ya’ni,

$$Sp\beta=0. \qquad (11.37)$$

Xuddi shunday yo‘l bilan $Sp\alpha_i=0$ ekanligini ham isbotlash mumkindir. Bundan ham kuchliroq tasdiqni, ya’ni α_i va β matritsalarining ixtiyoriy toq sonining ko‘paytmasining shpuri nolga tengligini ham ko‘rsatish mumkin.

α_i va β matritsalarning ko‘rib chiqilgan xossalari ularning oshkora ko‘rinishini topishga imkon beradi. Lekin bu matritsalarning ko‘rinishi bir qiymatli ravishda aniqlangan emas. Haqiqatan ham, quyidagicha yangi $\tilde{\alpha}_i$ va $\tilde{\beta}$ matritsalar kiritiladi:

$$\tilde{\alpha}_i=U^{-1}\alpha_iU,\tilde{\beta}=U^{-1}\beta U= \qquad (11.38)$$

$$\in^{\mu\nu\lambda\sigma}=-\in^{\nu\mu\lambda\sigma}-\in^{\mu\lambda\nu\sigma}$$

va h.k.;

• ixtiyoriy ikki indeksi o‘zaro teng bo‘lganda bu tenzor nolga tengdir:

$$\in^{1123}=\in^{0120}=0$$

va h.k.

(11.60) tenglikni galma-galdan $g_{\mu\nu},g_{\mu\lambda},g_{\mu\sigma}$ larga ko‘paytirib va takrorlanayotgan indekslar bo‘yicha yig‘ib chiqilsa, $b=c=d=0$ ekanligi topiladi ((11.59) ni hisobga olib). Agar (11.60) da $\mu=0,\nu=1,\lambda=2,\sigma=3$ deb olinsa, $a=4i$ ekanligi topiladi. Demak,

$$Sp\gamma^5\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\lambda\gamma^\sigma=4i\in^{\mu\nu\lambda\sigma} \qquad (11.61)$$

ekan.

Ba’zi bir masalalarda $\gamma^\mu\gamma^\nu\cdots\gamma^\lambda\gamma^\lambda$ ko‘rinishdagi ifodalar uchraydi, bunda μ indeks bo‘yicha yig‘indi mavjud. Bunday ifodalar osongina soddalashtiriladi. Masalan,

$$\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma_\mu=\gamma^\mu\left(-\gamma_\mu\gamma^\nu+2\delta_\mu^\nu\right)=-2\gamma^\nu.$$

Xuddi shunday yo‘l bilan qo‘yidagilarni ko‘rsatish mumkin:

$$\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\sigma\gamma_\mu=4\gamma^\nu\gamma^\sigma$$

$$\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\sigma\gamma^\lambda\gamma_\mu=-2\gamma^\lambda\gamma^\sigma\gamma^\nu$$

va h.k. Dirak matritsalarining bu xossalarini keltirib chiqarishda faqatgina (11.46) formuladangina foydalandik. Avval aytilganidek (11.38) ga qarang), γ-matritsalar ustida ixtiyoriy unitar matritsa U yordamida quyidagi ko‘rinishdagi

$$Sp\gamma^5\gamma^\mu\to\gamma^{\mu\prime}=U\gamma^\mu U^{-1} \qquad (11.62)$$

almashtirish bajarilsa (11.46), (11.47) formulalarning ko‘rinishi o‘zgarmaydi:

$$\left(\gamma'_\mu\gamma'_\nu+\gamma'_\nu\gamma'_\mu\right)=2g_{\mu\nu}I. \qquad (11.63)$$

Bu degani, $\gamma^{\mu\prime}$ matritsalarning xossalari γ^μ matritsalarning xossalaridan hech ham farq qilmaydi. Demak, γ^μ matritsalarning ko‘rinishi bir qiymatli emas, ular (11.62) o‘xshash almashtirish darajasigacha aniqlanganligi ma’lum bo‘ladi. Bu matritsalarning eng ko‘p ishlatiladigan ko‘rinishlari, quyidagichadir:

• standart ko‘rinishi:

$$\gamma_0=\begin{pmatrix}I&0\\0&-I\end{pmatrix},\gamma_i=\begin{pmatrix}0&\sigma_i\\-\sigma_i&0\end{pmatrix},\gamma_5=\begin{pmatrix}0&I\\-I&0\end{pmatrix} \qquad (11.64)$$

• spinor ko‘rinishi:

$$\gamma_0=\begin{pmatrix}0&I\\I&0\end{pmatrix},\gamma_i=\begin{pmatrix}0&-\sigma_i\\\sigma_i&0\end{pmatrix},\gamma_5=\begin{pmatrix}-I&0\\0&I\end{pmatrix}. \qquad (11.65)$$

Bu formulalarda matritsalarning har bir elementi, ham 2×2 matritsalar ko‘rinishida olingan, σ_i - Pauli matritsalari va I – o‘lchamligi 2×2 bo‘lgan birlik matritsadir.

(11.50) ni quyidagi ko‘rinishda yozib olib:

$$\left(i\gamma^0\partial_0+i\gamma\partial-m\right)\psi=0$$

uni chapdan γ^0 ga ko‘paytiriladi:

$$\left(i\partial_0+i\gamma^0\gamma\partial-m\gamma^0\right)\psi=0.$$

Bu formulani (11.28) bilan taqqoslansa

$$\boldsymbol{\alpha}=\gamma^0\boldsymbol{\gamma},\beta=\gamma^0 \qquad (11.66)$$

ekanligini ko‘rish mumkin.

Endi Dirak matritsalarining ermit qo‘shmalarini topaylik. Gamiltonianning

$$H=\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}+\beta m=\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\mathbf{p}+\gamma^0m$$

ermitligidan kelib chikadiki, $\gamma^0\boldsymbol{\gamma}$ va γ^0 matritsalar ham ermit matritsalari bo‘lishi kerak:

$$\left(\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\right)^+=\gamma^0\boldsymbol{\gamma},\left(\gamma^0\right)^+=\gamma^0. \qquad (11.67)$$

Ikkinchi tomondan,

ifoda olinadi. Bu tenglikga (D14) dagi qatorni qo‘yilsa va ξ ning bir xil darajalari oldidagi koeffitsiyentlarni tenglashtirilsa, b_ν koeffitsiyentlarni aniqlovchi rekurrent formula hosil qilinadi:

$$(\nu+2)(\nu+1)b_{\nu+2} = [\nu(\nu-1)+2(|m|+1)\nu-\lambda+|m|+m^2]b_\nu \qquad \text{(D16)}$$

Agarda $\nu = k$ (D14) dagi qator $\nu = k$ raqamli qandaydir sonda uzilsa, u holda ν kattalik *k*-darajadagi ko‘phad bo‘ldi. Demak, (D13) ifoda (D1) tenglamaning uzluksiz, bir qiymatli va chekli yechimlari, yoki (D1) tenglamaning xususiy funksiyalari bo‘ladi.

(D16) tenglikdan ko‘rinib turibdiki bu qator faqat

$$k(k-1)+2(|m|+1)k-\lambda+|m|+m^2 = 0$$

teng bo‘lganidagina uzilishi mumkin. Demak,

$$\lambda = (k+|m|)(k+|m|+1) \qquad \text{(D17)}$$

bo‘lishi kerak. Agarda

$$k+|m| = l \qquad \text{(D18)}$$

deb qabul qilinsa, λ va m kattaliklar uchun qo‘uidagi qiymatlarni qabul qilinishini ko‘rish mumkin:

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, 3, \ldots \qquad \text{(D19)}$$

$$|m| = 0, 1, 2, \ldots, l \qquad \text{(D20)}$$

Yuqoridagi olingan munosabatlardan shuni aytish joizki (D1) tenglamaning boshqa xususiy funksiyalari mavjud emas.

Kiritilgan l va m xarakteristik sonlarga tegishli bo‘lgan Θ yechimlarni

$$\Theta(\xi) = P_l^{|m|}(\xi), \ \xi = \cos\theta \qquad \text{(D21)}$$

orqali belgilanadi. Agarda (D15) tenglamani ξ bo‘yicha differensiallansa $|m|$ o‘rniga $|m|+1$ qatnashadigan tenglama hosil qilinadi. Shuning uchun, $m = 0$ dagi yechimni $P_l^{|m|}(\xi)$ orqali belgilansa, u holda

$$P_l^{|m|}(\xi) = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi). \qquad \text{(D22)}$$

yechimni olish mumkin. Bunda $P_l(\xi)$ kattalik l darajaning Lejandr ko‘phadi, yoki polinomi, deyiladi. Ushbu polinom oldidagi koeffitsiyentni shunday normallashtiriladiki

$$P_l(1) = 1 \qquad \text{(D23)}$$

bo‘lishi kerak. (D16) tenglamadan $|m| = 0$ bo‘lganida

$$b_{\nu+2} = \frac{\nu(\nu+1) - l(l+1)}{(\nu+2)(\nu+1)} b_\nu \qquad \text{(D24)}$$

ifoda olinadi. Ushbu hosil bo‘lgan ifodadan quyidagi natijalar kelib chiqadi: agarda $b_0 \neq 0$ va $b_1 = 0$ qilib tanlab olinsa, u holda P_l ko‘phad ξ ning faqat musbat darajalaridan tashkil topgan bo‘ladi, agarda $b_0 = 0$ va $b_1 \neq 0$ bo‘lsa, u holda P_l faqat toq darajalaridan tashkil topgan bo‘ladi. l ning musbat qiymatlari berilganida b_0 ni tanlab olihsa, yoki l ning toq qiymatlari berilganida b_1 ni tanlab olinsa, P_l ko‘phadning barcha koeffitsiyentlarni hisoblash imkoniyati paydo bo‘ladi. Ushbu hisoblashlarda faqat (D23) tenglikni bajarilishini esdan chiqarmaslik kerak. Shunday qilib, olinadigan ko‘phad quyidagi formula orqali berilishini tekshirish qiyin yemas:

$$P_l^0(\xi) = P_l(\xi) = \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l \qquad \text{(D25)}$$

(D2), (D4) va (D21) ifodalar hisobga olinsa, (D1) tenglamaning quyidagi ko‘rinishdagi xususiy funksiyasini olinadi:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = N_{lm} P_l^{|m|}(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \qquad \text{(D26)}$$

bunda N_{lm} - normallashtiruvchi koeffitsiyent. Hisoblashlar natijasida bu koeffitsiyentning qiymati

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!\,(2l+1)}{(l+|m|)!\,4\pi}} \qquad \text{(D27)}$$

ga teng bo‘ladi. Hosil bo‘lgan (D26)dagi funksiyalar θ,φ sfera sirtida ortogonal funksiyalarning to‘liq sistemasini tashkil etadi. Shuning uchun, ixtiyoriy kvadratik integrallovchi va bir qiymatli $\psi(\theta,\varphi)$ funksiyani

$$\int_a^b f(x)\delta(x)dx = f(0), \ a < 0 < b \qquad \text{(B.2)}$$

bunda $f(x)$ funksiya x o‘zgaruvchining ixtiyoriy uzluksiz funksiyasidir.

(B.2) dagi integralning δ- funksiya xossalariga asoslangan holda, bu funksiya faqat $x = 0$ nuqta atrofidagina muhim rol o‘ynashi ko‘rinib turibdi. U holda $x = 0$ nuqtadagi $f(x)$ funksiyani integral belgisidan tashqariga chiqarib bo‘ladi va qolgan integral (B.1) formulaga asosan birga teng bo‘ladi. (B.2) dagi integralni quyidagicha ham yozish mumkin:

$$\int_a^b f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0). \qquad \text{(B.3)}$$

(B.3) integralidagi $x = x_0$ nuqta integrallash sohasi ichida bevosita joylashgan bo‘lishi kerak. Barcha uzluksiz funksiyalar uchun (B.3) formula o‘rinlidir, bu funksiyalar skalar, vektor, tenzor ko‘rinishida bo‘lishi mumkin.

Kiritilgan delta- funksiyani matematikada kursida qabul qilingan oddiy funksiya ma’nosida qarash mumkin emas. Hozirgi zamon nazariy fizikada keng qo‘llanadigan boshqa singular, yoki xosmas, funksiyalar qatorida, δ- funksiya ham argumetining barcha qiymatlaridagi kattaliklar orqali ifodalanmasdan, balki uning uzluksiz funksiyalar bilan ko‘paytmalarini integrallash qoidasini berish orqali ifoda qilinadi. Boshqacha aytganda, δ– funksiya barcha formulalarning oxirgi ko‘rinishlarida ishtirok etmaydi. Har doim δ- funksiya yozilganda o‘zi bog‘liq bo‘lgan o‘zgaruvchilar bo‘yicha integrallashni nazarda tutiladi.

Analitik funksiyalar ketma-ketligining limiti sifatida δ- funksiyaning oshkor ko‘rinishidagi tassavurlardan biridan foydalanish o‘rinlidir. Bunday tassavurlardan birini

$$\delta(x) = \lim_{\alpha\to\infty} \frac{\sin(\alpha \cdot x)}{\pi x} \qquad \text{(B.4)}$$

orqali ko‘rsatish mumkin.

Mirzayusuf Mirzamahmudovich Musaxanov
Azamxon Sayfiyevich Rahmatov

KVANT MEXANIKASI

Muharrir *X. Po‘latxo‘jayev*
Sahifalovchi *H. Safaraliyev*
Musahhih *B. Tuyoqov*

Litsenziya AI № 190. 10.05.2011- y
Bosishga ruxsat etildi 17.07.2011. Bichimi 60x84 1/16. Ofset qo‘ozi.
TimesUz garniturasi. Shartli bosma t. 22,0. Nashr t. 22.0.
Adadi 500 nusxa. Buyurtma № 14/05.

“Tafakkur –Bo‘stoni” nashriyoti.
Toshkent, Yunusobod, 9-mavze, 13-uy.

«TAFAKKUR» nashriyoti bosmaxonasida chop etildi.
Toshkent, Chilonzor ko‘chasi, 1-uy.

$\frac{\sin(\alpha \cdot x)}{\pi x}$ funksiya $x=0$ da $\frac{\alpha}{\pi}$ ga teng bo‘ladi, x ning qiymati ortgan sari bu funksiya $\frac{2\pi}{\alpha}$ davr bilan tebranadi. $-\infty < x < +\infty$ oraligida esa α ning qiymati qanday bo‘lishiga bog‘liq bo‘lmagan holda bu funksiyadan olingan integral har doim birga teng bo‘ladi. Shunday qilib, $\alpha \to \infty$ da $\lim \frac{\sin(\alpha \cdot x)}{\pi x}$ ifoda δ - funksiyaning barcha xossalariga ega bo‘ladi. (B.4) formuladan foydalangan holda

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk = \delta(x) \qquad (B.5)$$

tenglikni isbotlash mumkin. Ba’zi qo‘llanishlarda δ - funksiyaning boshqa tassavurlaridan foydalanishi mumkin, masalan:

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \to 0} \frac{1}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + x^2}. \qquad (B.6)$$

Ko‘p hollarda δ - funksiyaning tassavurlarini turli ortonormallashgan funksiyalar sistemasi orqali ifodalash maqsadga muvofiqdir. Diskret spektrga tegishli bo‘lgan $\Psi_n(x)$ funksiyalar uchun

$$\delta(x - x') = \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n^*(x)\Psi_n(x') \qquad (B.7)$$

tenglik o‘rinli bo‘ladi. Uzluksiz spektrga xos bo‘lgan $\Psi_F(x)$ funksiyalar uchun esa

$$\delta(x - x') = \int \Psi_F^*(x)\Psi_F(x')dF \qquad (B.8)$$

bo‘ladi.

Endi δ - funksiyaning asosiy xossarini yozib chiqaylik:

$$\delta(-x) = \delta(x) \qquad (B.9)$$

$$x\delta(x) = 0 \qquad (B.10)$$

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|}\delta(x) \qquad (B11)$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \qquad (B.12)$$

$$\int \delta(a-x)\delta(b-x)dx = \delta(a-b) \qquad (B.13)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{\delta(x-a) + \delta(x+a)}{2|a|} \qquad (B.14)$$

Birinchidan γ ning darajasini aniqlab olish zarur, chunki qator bu darajadan boshlanishi kerak. $z \to 0$ da

$$\theta = a_0 z^{\gamma}$$

bo‘ladi. Olingan yechimni (D9) tenglamaga qo‘yilsa va $z^{\gamma-2}$ darajaga nisbatan cheksiz kichik darajali kattaliklarni hisobga olinmasa, (D9) tenglamadan

$$\left[\gamma(\gamma-1) + \gamma - \frac{m^2}{4}\right] a_0 z^{\gamma-2} = 0$$

ni hosil qilinadi va bu ifodadan

$$\gamma = \pm\frac{m}{2} \qquad (D11)$$

natija kelib chiqadi. γ ning shu qiymatini $\xi = -1$ maxsus nuqta atrofidagi yoyilmasini olganida ham olish mumkin.Olingan yechimlar $\xi = \pm 1$ da chekli bo‘lishlari uchun (D10) yoyilmada

$$\gamma = \frac{|m|}{2} \qquad (D12)$$

bo‘lishi kerak, ya’ni $m > 0$ da $\gamma = \frac{m}{2}$ va $m < 0$ bo‘lganida $\gamma = -\frac{m}{2}$ bo‘lishi kerak. (D11) dagi ikkinchi yechim cheksizlikga teng bo‘ladi. Shunday qilib, Θ funksiyani

$$\Theta = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} v \qquad (D13)$$

ko‘rinishida olish mumkin, bunda v ni z ning darajalari bo‘yicha qator shaklida qarash kerak.Yechimni izlashda davom ettirishda v ni ξ lar bo‘icha qator shaklida qidirish ancha qulaylikga olib keladi, ya’ni:

$$v = \sum_{v=0}^{\infty} b_v \xi^v. \qquad (D14)$$

(D13) ni (D8) tenglikka qo‘yilsa

$$(1-\xi^2)v'' - 2(|m|+1)\xi v' + (\lambda - |m| - m^2)v = 0 \qquad (D15)$$

$$\psi(\theta,\phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm} Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (D28)$$

qator shaklida ifodalash mumkin, bunda

$$c_{lm} = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi(\theta,\phi) Y_{lm}^*(\theta,\phi)\sin\theta \; d\theta \, d\phi \qquad (D29)$$

ga teng.

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2\Phi \tag{D3}$$

qabul qilinsa.Bu tenglamadan

$$\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi} \tag{D4}$$

yechim kelib chiqadi. Φ_m funksiya φ ning bir qiymatli funksiyasi bo‘lishi uchun

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ . \ . \ . \tag{D5}$$

qiymatlarni qabul qilishi kerak. (D4) yechimni (D1) tenglamaga qo‘yilsa va olingan natijani Φ_m ga bo‘linsa, Θ funksiyasiga nisbatan quyidagi tenglama hosil qilinadi:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\,\Theta + \lambda\Theta = 0 \tag{D6}$$

Θ funksiyasiyaning θ o‘zgaruvchisi o‘rniga yangi o‘zgaruvchini kiritsak, ya’ni

$$\xi = \cos\theta, \ -1 \le \xi \le +1, \ d\xi = -\sin\theta\, d\theta \tag{D7}$$

bo‘lsa, u holda Θ funksiyasiy ξ o‘zgaruvchining funksiyasi sifatida qarash mumkin.U holda (D6) tenglamaning o‘rniga quyidagi tenglama olinadi:

$$(1-\xi^2)\Theta'' - 2\xi\Theta' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\Theta = 0. \tag{D8}$$

(D8) tenglamaning Θ yechimlarini $\xi = \pm 1$ maxsus nuqtalar atrofida ko‘rib chiqaylik. Avvalo $\xi = +1$ murojaat qilinadi. $z = \xi - 1$ yangi o‘zgartuvchini kiritaylik. U holda (D8) quyidagi tenglama olinadi:

$$\Theta'' + \frac{2}{z}\frac{z+1}{z+2}\Theta' - \left[\frac{\lambda}{z(z+2)} + \frac{m^2}{z^2(z+2)^2}\right]\Theta = 0. \tag{D9}$$

Θ ni yechimlarini z ning darajalari bo‘yicha qator shaklda izlanadi:

$$\Theta = z^{\gamma}v, \ v = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \ . \ . \ . + a_v z^v + \ . \ . \ . \tag{D10}$$

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики – М., 1983.
2. *Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А.* Курс теоретической физики. Т.2. М., 1971.
3. *Landay L.D., Lifshis Y.M.* Nazariy fizika qisqa kursi. T.2. Kvant mexanikasi. Toshkent, 1979.
4. *Савельев И.В.* Основы теоретической физики. Т.2. Квантовая механика. М., 2005.
5. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т.3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория – М., 1989.
6. *Гречко А.Г., Сучаков В.И., Томашевич О.Ф., Федорченко А.М.* Сборник задач по теоретической физике. – М., Просвещение, 1979.
7. *Серова Ф.Г., Янкина А.А.* Сборник задач по теоретической физике. – М., Просвещение, 1979.
8. *Vakil R.X.* Kvant mexanikasiga kirish. O‘quv qo‘llanma. “Oqituvchi”, 1989 й.
9. *Давыдов А.С.,* Квантовая механика – М., Наука, 1973.
10. *Qodirov O., Boydedayev A.,* Fizika kursi. Kvant fizika. O‘quv qo‘llanma. – T., 2005.
11. *Галицкий В.М., и др.* Задачи по квантовой механике. Учебное пособие – М., Наука, 1973.
12. *Мессиа А.* Квантовая механика – М., Мир, Том 1. 1978, Том 2. 1979.
13. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике – М., Мир, 1974.
14. *Musahanov M.M., Padzerskiy V.A., Fayzullayev B.A.* Relyativistik kvant mexanikasi. O‘quv qo‘llanma. T., 2003.

Delta-funksiyadan olingan hosila

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \tag{B.15}$$

munosabatni qanoatlantiradi.

Furye integrallari bilan ishlashda δ- funksiyadan keng foydalanish mumkin. Masalan $f(x)$ funksiyani Furye integraliga yoyilmasi quyidagicha beriladi:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)\, e^{ikx}dk. \tag{B.16}$$

(B.16)dagi tenglikning ikkala tomonini $e^{-ik'x}$ ga ko‘laytirilsa, keyinchalik x bo‘yicha integrallansa va (B.5)dan foydalanilsa:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ik'x}dx = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)e^{i(k-k')x}dkdx = \int_{-\infty}^{\infty} c(k)edk\int_{-\infty}^{\infty} c(k)e^{i(k-k')x}dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} c(k)2\pi\delta(k-k')dk = 2\pi c(k')$$

natijaga kelinadi. Demak,

$$c(k') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ik'x}dx \tag{B.17}$$

ifodaga kelinadi va (B.5) dagi formulani δ- funksiyani Furye integrallariga yoyilmasi sifatida qarash mumkin ekan.

C ilova
Ba’zi-bir integrallarni hisoblash

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx$$

ko‘rinishdagi integral Puasson integrali deyiladi va bizning vazifamiz ularni hisoblashdan iborat. Bu integral ostidagi funksiya juft funksiya bo‘lganligi sababli uni quyidagicha yozish mumkin:

$$J = 2\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{2}{\sqrt{\alpha}} \int_0^{\infty} e^{-t^2} dt$$

bynda $\alpha x^2 = t$ yangi o‘zgaruvchiga o‘tildi. Yuqoridagi ifodalardan foydalangan holda, quyidagi ayniyatni yozish mumkin:

$$J^2 = \frac{4}{\alpha}\int_0^{\infty} e^{-t^2} dt \int_0^{\infty} e^{-u^2} du = \frac{4}{\alpha}\int_0^{\infty}\int_0^{\infty} e^{-\left(u^2+t^2\right)} dtdu.$$

Ushbu

$$r^2 = u^2 + t^2, \varphi = arctg\frac{u}{t}, dtdu = rdrd\varphi$$

qutb koordinatalariga o‘tilsa

$$J^2 = \frac{4}{\alpha}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^{\infty} e^{-r^2} rdrd\varphi = \frac{\pi}{\alpha}$$

natijaga kelinadi. Demak qidirilayotgan integral

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

(C.2)

bo‘ladi.

Navbatdagi

$$J_{2n} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^{2n} dx$$

ko‘rinishdagi integral hisoblanadi. (C.2) formuladagi integralni α - parametr bo‘yicha differensiallansa, quyidagi natijalarni olish mumkin:

$$J_2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^2 dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}},$$

$$J_4 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^4 dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}},$$

$$J_{2n} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} x^{2n} dx = \frac{(2n-1)(2n-3)\cdots 5\cdot 3\cdot 1}{2^n}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}}.$$

Endi

$$J_{2n+1} = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} x^{2n+1} dx$$

ko‘rinishdagi integralni hisoblash masalasini ko‘rib chiqaylik. *n=0* bo‘lganida

$$J_0 = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} x dx = \frac{1}{2\alpha}$$

teng bo‘ladi. α -parametr bo‘yicha J_1 ni differensiallansa,

$$J_{2n+1} = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} x^{2n+1} dx = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}}$$

natija olinadi.

D ilova
$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ tipidagi sferik funksiyalar

$\mathbf{M}^2$ impuls moment kvadrati operatorining xususiy qiymatlarini topish masalasida sferik funksiyalar uchun yozilgan ushbu tenglamalariga duch kelinadi:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \lambda\psi = 0. \qquad (D1)$$

Ushbu ilovaning asosiy maqsadi yuqoridagi tenglamaning xususiy funksiyalarini aniqlash, ya’ni θ va φ o‘zgaruvchilarning $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \varphi \le 2\pi$ o‘zgarish sohasida uzluksiz, bir qiymatli va chekli yechimlarini topishdir.

Dastavval θ va φ o‘zgaruvchilarni ajratib olaylik:

$$\psi = \Theta(\theta)\cdot\Phi(\varphi) \qquad (D2)$$

(D2)ni (D1)ga qo‘yganimizda o‘zgaruvchilarni ajratishga olib keladi agarda

MUNDARIJA