

**Өзбекстан Республикасы Жоқары ҳәм орта арнаўлы  
билим министригиги**

**Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик  
университети**

**Физика-математика факультети**

**Улыўма физика кафедрасы**

**Б.А.Абдикамалов**

# **КВАНТЛЫҚ МЕХАНИКА**

**Физика факультетинин студентлери ушын лекциялар конспекті**

**Нөкис 2012**

## Мазмұны

- I бөлім. Квантлық механика ҳәм оның илимдеги тутқан орны.
- I бап. Квантлық механиканың тийкарғы орны.
- 1-1. Қысқаша кирисиүй.
- 1-2. Ҳал.
- 1-3. Суперпозиция принципи.
- 1-4. Пси-функцияның физикалық мәниси.
- 1-5. Шредингер теңлемеси.
- 1-6. Итималлық ағысының тығызлығы.
- II бап. Квантлық механиканың математикалық аппараты.
- 1-7. Тийкарғы постулаттар.
- 1-8. Сызықты операторлар.
- 1-9. Операторларды матрицалық формада көрсетиүй.
- 1-10. Операторлар алгебрасы.
- 1-11. Анықсызлық қатнаслары.
- 1-12. Үзликсиз спектр.
- III бап. Физикалық шамалардың меншикли мәнислері ҳәм меншикли функциялары.
- 1-13. Физикалық шамалардың операторлары.
- 1-14. Физикалық шамалардың операторларының коммутациясының қағыйдалары.
- 1-15. Координата ҳәм импульс операторларының меншикли функциялары.
- II бөлім. Квантлық физиканың тийкарлары.
- 2-1-1. Жыллылық нурланыўы нызамлары.
- 2-1-2. Нурланыўдың квантлық теориясы.
- 2-1-3. Фотон газы ҳәм оның қәсийетлери.
- 2-1-4. Квантлық оптика.
- 2-1-5. Жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализми.
- 2-2-1. Де Бройль гипотезасы.
- 2-2-2. Де Бройль гипотезасын экспериментте тастыйықлаў.
- 2-2-3. Анықсызлық қатнаслары.
- 2-2-4. Микробөлекшелерди затлардың структурасын изертлеў ушын қолланыў.
- 2-3-1. Толқын функциясы.
- 2-3-2. Шредингер теңлемеси.
- 2-3-3. Итималлықтар ағысының тығызлығы векторы.
- 2-3-4. Физикалық шамаларды операторлардың жәрдеминде беріү.
- 2-3-5. Операторлардың меншикли функциялары ҳәм меншикли мәнислері.
- 2-3-6. Квантлық механикадағы өлшеўлер проблемасы.
- 2-3-7. Ҳәр қыллы физикалық шамаларды бир ўақытта өлшеў.
- 2-3-8. Квантлық механиканың матрицалық формасы.
- 2-4-1. Стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси.
- 2-4-2. Откермейтуғын дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше.
- 2-4-3. Потенциал табалдырық ҳәм дийўал областындағы бөлекшениң қозғалысы.
- 2-4-4. Шекли тереңликке ийе потенциал шуқырдағы бөлекше.
- 2-4-5. Квантлық гармоникалық осциллятор.
- 2-5-1. Атомлардың квантлық қәсийетлери.
- 2-5-2. Водород атомының Бор теориясы.
- 2-5-3. Водород тәризли атомлардың квантлық механикандағы

тәрийипленийи.

2-5-4. Квантлық санлар ҳәм олардың физикалық мәниси.

2-5-5. Штерн ҳәм Герлах тәжирийбеси. Электронның спини ҳаққындағы гипотеза.

2-6-1. Шредингер теңлемесин жуўық түрде шешиў усыллары.

III бөлім. Паули теориясы.

3-1. Электронның қозғалыс муғдарының моменти (импульс моменти).

3-2. Сфералық координаталардағы қозғалыс муғдарының толық муғдарының операторлары.

3-3. Спинге ийе шар функциялары.

3-4. Спинге ийе шар функцияларының базы бир қәсийетлери.

3-5. Паулидиң толқын теңлемеси.

IV бөлім. Квантлық механиканың көп электронлық мәселеси ҳәм атомның құрылышы.

4-1. Толқын функциясының симметриялық қәсийетлери.

4-2. Энергия операторы ҳәм оның симметриясы.

4-3. Келисилген майдан усылы.

V бөлім. Дирак теориясы.

5-1. Квантлық механика ҳәм салыстырмалық теориясы.

5-2. Классикалық қозғалыс теңлемеси.

5-3. Толқын теңлемесин келтирип шығарыў.

5-4. Дирак матрицалары.

5-5. Еркин электрон ушын Дирак теңлемеси.

5-6. Лоренц түрлендіриўлери.

5-7. S матрицасының көшерлерди кеңисликлик бурыўға ҳәм Лоренц түрлендіриўлери ушын түри.

5-8. Тоқ векторы.

5-9. Майдан бар жағдайдағы Дирак теңлемеси. Қозғалыс теңлемелери.

5-10. Дирак теориясындағы қозғалыс муғдары моменти ҳәм спин векторы.

5-11. Электронның кинетикалық энергиясы.

VI бөлім. Релятивисттик квантлық механика.

6-1. Скаляр релятивисттик Клейн-Гордон теңлемеси.

6-2. Дирак теңлемеси.

6-3. Дирак электронының орайлық күшлер майданындағы қозғалысы.

6-4. Дирак теңлемесиниң толық шешими.

Мәселелер ҳәм олардың шешимлери.

## I бөлім

# Квантлық механика ҳәм оның илимдеги тутқан орны

## I бап. Квантлық механиканың тийкарғы орны

### 1-1. Қысқаша кирисиү

Микродұньяда табылған нызамлар макроскопиялық объектлер бағынатуғын нызамлардан, яғни классикалық физиканың нызамларынан түпкиликли түрде айрылады. Биз сеziў органларымыз жәрдемінде тек макроскопиялық объектлерди бақтай аламыз. Соныңтан биз усындаң денелердин көргизбели образын өзимиздин санамызда сәүлелендіре аламыз. Бул образларды микрообъектлерге алып келиў (мысалы электронды микроскопиялық шарик түринде көз алдымызға келтириў) пүткіллей дұрыс емес ҳәтте зиянлы. Соныңтан микродұньяның механикасын (квантлық механиканы) үйренийге кирискенде үйренилетуғын объектлер менен процесслердин көргизбели образларын дөретиўге тырысыўлардан дәрхәл бас тартыў керек болады.

«Түсній» сөзи күнделікти турмыста өзинде объекттиң ямаса процесстиң көргизбели образын дөретиў дегенди аңлатады. Бирақ квантлық механика тап сондай етип «түснійге» болмайды. Усы жағдайға байланыслы квантлық теорияның дөретиўшилердин бири Дирак былай деп жазды: «... физика илимдерин баз мәселеси бизді көргизбели картиналар менен тәмийинлеў емес, ал құбылысларды басқаратуғын нызамларды ашыў ҳәм бул нызамларды жаңа нызамларды ашыў ушын қолланыў болып табылады... Атомлық құбылыслар жағдайында әдеттеги мәнисте көргизбели картина бар деп күтийге болмайды. Бул жерде «көргизбели» деп айтқанда тийкарынан классикалық принциплерде ҳәрекет ететуғын модель түсніледи. Бирақ «картина» сөзинде мәнисин кеңейтиўге болады. Буның ушын бул сөзге өз-ара келисіүшилик айқын көринип туратуғындағы етип тийкарғы нызамларды қараудың қалеген усылын киргизиў керек. Бундай кең мәнисте атомлық құбылыслардың картинасы квантлық теорияның нызамларын үйренийдиң барысында кем-кемнен ашыла береди<sup>1</sup>».

Квантлық механикаға ҳәр қыйлы математикалық формаларды бериў мүмкін. Тууылыўдан бул илим бир бириңен ғәрэзсиз Шредингердин толқын механикасы ҳәм Гейзенбергтиң матрицалық механикасы түрінде пайда болды. Кейинирек Дирак квантлық механиканың «векторлық» формасын ислеп шықты. Квантлық механиканың барлық формалары бир бириңе эквивалент, олар бирдей физикалық нәтийжелерге алып келеди ҳәм бир бириңе түрлендирилийи мүмкін.

Квантлық механиканың математикалық аппараты өзине тән ҳәм улыўма айтқанда әпиўайы емес. Бул жағдайлар, атап айтқанда көргизбели түрде көз алдыға келтириўдин мүмкіншилигиниң жоқлығы ҳәм математикалық аппаратының қурамалы екенлеги квантлық механиканы қыйын илимдердин қатарына қосады.

---

<sup>1</sup> П.А.М.Дирак. Принципы квантовой механики. Физматгиз. 1960. стр. 26.

## 1-2. Ҳал

Ҳал түснеги квантлық механикандағы ең тийкарғы ҳәм басланғыш түсніктердің бири болып табылады. Сонықтан «ҳал» түснегине қатаң түрдеги дәл анықлама бериў қыйын. Дирак «ҳал» түснегин белгілеуден ямаса денелерден туратуғын базы бир атомлық системаны қараймыз (масса, инерция моменти ҳәм тағы басқалар). Бул бөлекшелер арасындағы тәсир етисиў күшлері де белгилі болсын. Бул күшлердин тәсир етиў нызамларына сәйкес ҳәр қыйлы қозғалыслардың жүзеге келийи мүмкін. Бундай қозғалыслардың ҳәр бири системаның ҳалы деп аталады».

Ҳал ушын Дирак берген анықламаны басланғыш анықлама сыпатында қабыл етемиз. «Ҳал» термининиң мазмұны квантлық механиканың мазмұнын баянлаудың барысында толығы менен ашылады.

Микросистеманың ҳалы ҳаққындағы информацияларды өлшеўлер өткериўдің нәтийжесинде алады. Бундай жағдайда микросистемаға макроскопиялық система болған әсбап пенен тәсир етеди. Сонықтан микросистемалар үстинде исленген өлшеў нәтийжелер мәжбүрий түрде макроскопиялық денелер ушын ислеп шығылған терминлерде аңлатылады (координата, импульс, импульс моменти, энергия ҳәм тағы басқалар). Бул характеристикалар динамикалық өзгериўшилер деп аталады.

Микробөлекшелердин қәсийетлери макроскопиялық денелердин қәсийетлеринен түп-тамырынан айрылады. Сонықтан микробөлекшелер ушын макроденелер ушын жазыллатуғын динамикалық өзгериўшилерди жазыўға болмайды. Бирақ әсбап пенен (ямаса тәбийи дене менен) тәсир етисиўдің барысында микробөлекше жоқарыда айтылып өтилген динамикалық өзгериўшилердин айырымлары менен харakterленетуғында қәсийет көрсетеди. Микробөлекшелердин қәсийетлериниң өзлерине тән екенлигин сол жағдай көрсетеди, өлшеўлердин барысында барлық өзгериўшилердин ҳәммеси ушын анық мәнислер алынбайды. Мысал электронның сондай ҳаллары болады, бундай ҳалларда турған электрон макроденелер менен тәсирлесиўдің барысында (өлшеўлердин барысында)  $p_x$  импульсине иие екенлигин көрсетеди. Соның менен бирге экспериментлер неше рет қайталанса да усындағы ҳалда турған электрон ушын бирдей  $p_x$  шамалары алынады. Бирақ егер биз сол ҳалда турған электронның координаталарын анықлағымыз келсе, онда өлшенип атырған координата ушын бирдей итималлық пенен  $-\infty$  тен  $+\infty$  ке шекемги мәнислер алынады. Электронның бундай ҳалы ҳаққында айтқанда электронның анық  $p_x$  динамикалық өзгериўшиге иие болатуғын ҳалы ҳаққында гәп етиледи.

Өлшеўлердин барысында (яғни макроденелер менен тәсирлескенде) электрон  $x$  координатасының анық мәниске иие болатуғын ҳаллардың бар болыўының мүмкін екенлиги табылады. Бундай ҳалларда  $p_x$  импульсiniң мәниси пүткіллей анық емес болып шығады. Бул жағдайда электрон ушын координатаның анық  $x$  мәниси болатуғын ҳал бар деп айтады.

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда координата  $x$  та, импульс  $p_x$  та бир ўақытта анық мәнислерге иие болмайтуғын ҳаллар да бар екенлигин атап өтемиз. Бундай жағдайда электронның үстинен жургизилген көп санлы өлшеўлердин барысында  $x$  ушын базы бир  $\Delta x$  интервалының ишиндеги, ал импульс  $p_x$  ушын да базы бир  $\Delta p_x$  интервалының ишиндеги мәнислер алынады. Усы  $\Delta x$  ҳәм  $\Delta p_x$  шамалары бир бири менен Гейзенберг анықсылық қатнаслары арқалы байланысқан:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2. \quad (1.2.1)$$

Анықсызлық қатнаслары классикалық механиканың түсніклерин микробөлекшелер ушын қандай дәрежеде пайдаланыўға болатуғынлығын, мысал ретинде микробөлекшелердин траекториялары ҳаққында қандай дәрежедеги дәлликте айтыўға болатуғынлығын көрсетеди. Траектория бойынша қозғалыс хәр бир ўақыт моментинде координаталар менен тезликтің анық мәнислері менен характерленеди. (1.2.1)-аңлатпаны

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \hbar/2m$$

туринде көширип жазсақ бөлекшениң массасы қанша көп болса, оның координаталары менен тезликлериндеги анықсызлықтың соншама киши болатуғынлығын, бөлекшениң траекториясы түснігінин жоқары дәлликте қолланыўға болатуғынлығын көрсетеди. Ҳәтте егер өлшеми 1 мкм болған микробөлекшени алсақ, онда оның массасы атомның массасынан шама менен  $10^{12}$  есе үлкен болады. Бундай бөлекше ушын  $x$  пенен  $v_x$  шамаларындағы анықсызлықтың мәниси бул шамаларды өлшеудің дәллиги шеклеринде болады. Сонлықтан оның қозғалысын траектория бойынша қозғалыстан айырыўға болмайды.

Солай етип бөлекшениң массасы қаншама үлкен болса, онда оның қозғалысы ушын классикалық механиканың нызамлары менен түсніклерин соншама үлкен дәлликте қолланыўға болады екен. Бул тастыйықлау сәйкеслик принципи деп аталатуғын улыўмалық тастыйықлаудың дара жағдайы болып табылады. Бул принцип бойынша  $\hbar \rightarrow 0$  шеклеринде квантлық механиканың нызамлары қатнаслары классикалық механиканың сәйкес нызамлары менен қатнасларына өтеди. Бул жағдай бойынша Планк турақтысына пропорционал болған эффектлердин тутқан орны қаншама киши болса, қарап атырылған системаның қәсийетлериниң классикалық қәсийетлерге соншама жақын болатуғынлығын көрсетеди.

Квантлық ҳәм классикалық нызамлар арасындағы көпирдин орнын ийелеў менен бир қатарда сәйкеслик принципи классикалық шамалардың квантлық механикалық аналогларын табыўға мүмкіншилик береди.

Биз қарап атырған микросистема жайласқан ҳалдың характеристикасы ушын бул ҳалда анық мәнислерге ийе болатуғын динамикалық өзгериўшилерди сайлап алый тәбийий. Берилген ҳалда анық мәнислерге ийе болатуғын динамикалық өзгериўшилердин жыйнағы толық жыйнақ (орыс тилинде «полный набор» деп айтылады) деп аталады. Ҳәр қыйлы ҳаллар ушын толық жыйнақтар ҳәр қыйлы болады. Дара жағдайда толық жыйнақ тек бир динамикалық өзгериўшиден тұра алады. Бундай ҳалда толық жыйнақты пайда етиўши динамикалық өзгериўшилердин биреүинен басқасының барлығы да анық емес болып шығады.

Динамикалық өзгериўшилер ҳаққында улыўма айтқанда (яғнай конкрет түрде емес ҳәм  $x, p_x, E$  ҳәм басқалардың айқын түрде қайсысы екенligи айтылмаған жағдайларда) биз оларды әдетте  $Q$ , айырым жағдайларда  $R, A, B$  ҳәм басқа да ҳәриплердин жәрдеминде белгилеймиз.

Берилген динамикалық өзгериўши қабыл ете алатуғын санлық мәнислердин жыйнағын оның спектри деп атайды. Егер динамикалық өзгериўшинин мәниси үзликсиз избе-излиktи пайда ететуғын болса, онда бул шама мәнислердин үзликсиз (яmasa тутас) спектрине ийе деп айтады. Егер руқсат етилген санлы мәнислер дискрет избе-излиktи пайда ететуғын болса, онда бундай шама мәнислердин дискрет спектрине ийе болады деп есаптаймыз. Улыўма жағдайда динамикалық өзгериўшинин мәнислериниң спектри өз ишине үзликсиз де, дискрет те

участкаларды ала алады.

$Q$  өзгериүшисиниң ҳәр қыйлы мәнислерин биз  $q$  символы арқалы белгилеймиз. Егер берилген мәнис дискрет спектрге тийисли болса, онда биз мәнистиң номерин аңлататуғын төменге индекс қоямыз, яғни  $q_n$  түринде жазамыз. Индекстин жоқлығы  $q$  шамасының берилген мәнисиниң үзликсиз спектрге тийисли екенлигин аңғартады.

Микродунъяның нызамларының макроскопиялық денелерди изертлегенде бақланатуғын нызамлықлардан түп-тамырынан айрылатуғынлығы жоқарыда атап өтилди. Бул айырма мынадай жағдайда анық көринеди: квантлық механикада ҳаллар ҳәм динамикалық өзгериүшилерди тәрийиплеў ушын классикалық физикада пайдаланылатуғын математикалық шамалардан басқа тәбиятқа ийе математикалық шамалар қолланылады. Ҳәр бир динамикалық өзгериүши ушын базы бир сзықты оператор жазылады. Системаның ҳалы улыўма айтқанда базы бир  $\psi$  комплексли өзгериүши менен тәрийипленеди. Бул комплексли өзгериүшини толқын функциясы ямаса пси-функция ямаса итималлықтар амплитудасы деп атайды. Биз көбинесе пси-функция термининен пайдаланамыз. Ҳалдың характеристикасы ушын Дирак айрықша түрдеги комплексли векторды усынды. Оны ҳал векторы деп атайды.

Хеш бир пси-функцияны сәйкеслендириүге болмайтуғын ҳаллардың да болатуғынлығын аңғарамыз. Бундай ҳалларды аралас ҳаллар, ал пси-функциялар менен тәрийипленетуғын ҳалларды таза ҳаллар деп атайды. Биз тек таза ҳалларды қараймыз. Соныңтан «таза» сөзин биз айтпаймыз ҳәм ҳалдың ҳаллары ҳаққында гәп етемиз.

### 1-3. Суперпозиция принципи

Суперпозиция принципи квантлық механиканың тийкарғы принципи болып табылады. Бул принциптиң мәниси төмендегилерден ibарат: Мейли базы бир система базы бир  $Q$  шамасы  $q_1$  мәнисине ийе болатуғын  $\psi_1$  ҳалында ямаса сол  $Q$  шамасы  $q_2$  мәниске ийе болатуғын  $\psi_2$  ҳалында да тура алатуғын болсын. Бундай жағдайда  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$  ( $c_1$  менен  $c_2$  арқалы ықтыярлы комплексли санлар белгиленген) ҳалы да бар болып, бул ҳалда  $Q$  шамасын өлшенгенде  $q_1$  ямаса  $q_2$  мәниси алынады.

Суперпозиция принципинен  $Q$  шамасы анық мәнислерге ийе болатуғын  $\psi_1$  ҳәм  $\psi_2$  ҳалларын қосқанда сол  $Q$  шамасы пүткіллей анық емес болып қалатуғын жаңа  $\psi$  ҳалының пайда болатуғынлығы келип шығады.

Тап усындей нәтийже еки ҳалдан көп ҳалларды қосқанда да орын алады. Егер  $Q$  шамасы анық мәнислерге ийе болатуғын  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$  ҳаллары бар болатуғын болса, онда

$$\psi = \sum_{m=1}^n c_m \psi_m \quad (1.3.1)$$

толқын функциясы (пси-функция,  $c_n$  арқалы ықтыярлы комплексли сан белгиленген) менен тәрийипленетуғын да ҳал болып, бул ҳалда  $Q$  шамасы  $q_1, q_2, \dots, q_n$  мәнислериниң бирине тең болады.

Мынадай кери тастыйықлаў да дұрыс: Квантлық системаны қәлелеген  $\psi$  ҳалы жоқарыда айтылған  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$  ҳалларының қосындысы (суперпозициясы) деп көрсетилийи мүмкін. Бул тастыйықлаў да суперпозиция принципиниң формулировкасы болып хызмет ете алады.

(1.3.1)-теңлеме менен тәрийипленетуғын системаның қәсийетлері векторлардың қәсийетлерине уқсас. Ҳақыйқатында да бирдей тәбиятқа ийе  $a_1, a_2, \dots,$

а<sub>n</sub> векторларын ҳақыйқый  $c_1, c_2, \dots, c_n$  санларына көбейтсек ҳәм буннан кейин оларды қоссақ сондай тәбиятқа ийе  $a = \sum c_m a_m$  жаңа векторын аламыз. Бундай аналогия тийкарында Дирак системаның ҳаллары ушын жазылатуғын шамаларды бир бири менен салыстырыў ушын айрықша кеңисликтери векторлар түринде қарауды усынды.

Базы бир  $\psi_m$  ҳалын өзиниң үстине өзин қойсақ, яғни  $\psi_1 = \psi_m$  деполжасақ, онда (1.3.1)-аңлатпаға сәйкес

$$\psi = c_1 \psi_m + c_2 \psi_m = (c_1 + c_2) \psi_m = c \psi_m$$

функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалды аламыз. Бул ҳал да дәслепки  $\psi_m$  ҳалындай ҳал болады. Бундай ҳалда  $Q$  шамасын өлшегенимизде  $q_m$  нәтийжесин аламыз. Алынған ҳалдың дәслепки ҳалдан айырмасы жоқ деполжаў тәбийий. Тек ғана  $c = c_1 + c_2 = 0$  болған жағдай бул анықламаға кирмейди. Бул жағдайда  $q_m$  шамасын  $c$  ға көбейткен менен ҳеш қандай ҳал алынбайды ( $\psi = 0$  ҳеш қандай ҳалдың жоқ екенлигин билдиреди).

Жоқарыда айтылғанларға сәйкес  $\psi$  ҳәм  $c\psi$  (с арқалы ықтыярлы нолге тең емес комплексли сан белгиленген) функциялары менен тәрийипленетуғын ҳалларды бир бири менен бирдей деп қабыл етемиз. Егер ҳалларды векторлардың жәрдеминде тәрийиплейтуғын болсақ, онда соңғы тастыбықлаудан ҳалдың вектордың бағыты менен ғана тәрийипленетуғынлығын, ал вектордың узынлығының ҳеш қандай әхмийетиниң жоқ екенлигин көремиз.

Суперпозиция принципиниң классикалық физикада да бар екенлигин атап етемиз. Тардың ықтыярлы тербелисин жийилиги тийкары жийиликтен пүтин сан есе өзгешеликке ийе гармоникалық тербелислердин қосындысы (суперпозициясы) деп қараўға болады. Бул аналогия дәслепки үақытлары квантлық механикаға толқын механикасы, ал квантмеханикалық системаның ҳалы ушын жазылатуғын  $\psi$  функциясына толқын функциясы деп атама бериў ушын себеп болды. Бирақ жоқарыда атап өтилген аналогияның алысқа бармайтуғынлығы атап өтиў керек. Квантлық механикадағы суперпозиция менен классикалық суперпозиция арасында оғада терең айырма бар. Мысалы тербелиўши тардың ҳалларының суперпозициясы тербелестиң басқа амплитудаға ийе ҳалына алып келеди. Демек нәтийжеде жүзеге келген тербелис дәслепки тербелистен айырмаға ийе болады. Квантлық механикада болса ҳаллардың суперпозициясы жаңа ҳалдың пайда болыўына алып келмейди. Квантлық ҳалда классикалық тербелислердин амплитудасына сәйкес келетуғын характеристика пүткиллей жоқ.

## § 4. Пси-функцияның физикалық мәниси

Координаталық көрсетиў деп аталатуғын көрсетиўде пси-функция бөлекшелер системасын пайда етиўши бөлекшелердин координаталарының ҳәм үақыттың функциясы болып табылады. Бир бөлекшеден туратуғын системаны қараймыз. Бул жағдайда  $\psi = \psi(x, y, z, t)$ . Пси-функцияның модулиниң квадраты  $|\psi|^2 = \psi^* \psi$  ( $\psi^*$  арқалы  $\psi$  ге комплексли түйинлес функция аңлатылған) кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында бөлекшени табыўдың итималлығына тең. Егер  $|\psi(x, y, z, t)|^2$  шамасын  $x, y, z$  ноқатында алынған көлем элементи  $dV = dx dy dz$  шамасына көбейтсек, онда бөлекшениң  $t$  үақыт моментинде  $dV$  көлеминде табыўдың итималлығы  $dP$  шамасын аламыз:

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^* \psi dV. \quad (1.4.1)$$

Тап сол сыйқлы еки бөлекшеден туратуғын система ушын жазылған

$$dP = |\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t)|^2 dV_1 dV_2$$

шамасы система үстинде  $t$  ўақыт моментинде жүргизилген өлшеўлерде 1-бөлекшениң  $dV_1$  көлеминде, 2-бөлекшениң  $dV_2$  көлеминде табылышының итималлығына тең болады. Бул формулада  $x_1, y_1, z_1$  арқалы биринши бөлекшениң координаталар, ал  $x_2, y_2, z_2$  арқалы 2-бөлекшениң координаталары белгиленген.

Бөлекшениң қандай да бир орында жайласқаны анық, яғни сондай орында жайласқанлығының итималлығы 1 ге тең болғанлықтан (1.4.1) итималлықтарының барлық кеңислик бойынша қосындысы 1 ге тең болыуы керек. Солай етип бизлер пси-функциясының нормировка шәртине келемиз

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \quad (1.4.2)$$

Алдыңғы параграфта биз пси-функцияны нолге тең емес ықтыярлы комплексли санға көбейтиүдиң мүмкін екенligин айтқан едик. Демек интеграл шекли мәниске ийе болса (1.4.2) шәртиниң орынланыуы керек. Бул шәртті қанаатландыратуғын пси-функцияны нормировкаланған пси-функция деп атайды. Демек нормировкаланған пси-функция фазалық көбейтиүши деп аталатуғын  $e^{i\alpha}$  көбейтиүшиси дәллигине шекем дәллікті анықланған екен ( $\alpha$  арқалы ықтыярлы ҳақыйқый сан белгиленген).

Базы бир жағдайларда (1.4.2)-интеграл тарқалыушы интеграл (яғни шексизликке айланады) болады ҳәм сонлықтан (1.4.2)-шәртке сәйкес пси-функцияны нормировкалаудың мүмкіншилиги болмайды. Бундай жағдайда  $|\psi|^2$  шамасын итималлықтың тығызлығы деп айта алмаймыз. Бирақ бул жағдайда да  $|\psi|^2$  шамаларының мәнислериниң кеңисликтің ҳәр қылышы ноқатларындағы қатнаслары координаталардың сәйкес мәнислериниң салыстырмалы итималлығын анықтайады.

Бөлекшениң ҳәр қылышы орынларда турыуының итималлықтарын билиў арқалы оның координаталарының орташа мәнислерин есаплауға болады. Мысалы, бөлекшениң радиус-векторы болған  $\langle r \rangle$  шамасының орташа мәниси

$$\langle r \rangle = \int r dP = \int r |\psi|^2 dV = \int \psi^* r \psi dV$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады<sup>2</sup> (формулаға симметриялық түр бериў ушын биз  $r$  шамасын  $\psi^* \psi$  көбеймесиниң ишине алғып жаздық). Бул векторлық көбейме үш скаляр көбеймеге эквивалентли:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dV, \langle y \rangle = \int \psi^* y \psi dV, \langle z \rangle = \int \psi^* z \psi dV. \quad (1.4.3)$$

Тап сондай жоллар менен координаталардың қәлеген функциясының орташа мәнисин табыў мүмкін. Мысалы бөлекшениң потенциал энергиясының орташа мәниси

<sup>2</sup> Орташа мәниси белгилеў ушын шаманың символының үстине «-» белгиси қойылады (мысалы  $\bar{r}$ ) ямаса  $\langle r \rangle$  түриндеги сынық қаұсырмаға алады. Соңғы усыл қөбірек пайдаланылып атыр.

$$\langle U \rangle = \int \psi^* U(x, y, z) \psi dV. \quad (1.4.4)$$

Соңғы ақлатпаның мәниси мынадай: Мейли бөлекшениң потенциал энергиясының шамасын өлшеў көп рет қайталаңатуғын ҳәм усы өлшеўлердин барлығында да бөлекше бир  $\psi$  ұалында турған болсын. Бундай жағдайда өлшеўлердин санының артыўының барысында алынған нәтийжелердин орташа мәниси (1.4.4) шамасына умтылады.

Солай етип бөлекшениң пси-функциясын биле отырып өлшеўлердин барысында координаталардың қәлеген функциясының ҳәр қыйлы мәнислериниң алыныў итималлығын ҳәм бул өлшеўлерде алынатуғын орташа мәнисти есаплауды үйрендиқ. Бирақ бөлекшелердин координаталарының функциялары болмаған физикалық шамалардың (мысалы импульсти, импульс моментин, энергияны) қалай анықлаудың кереклиги ҳәзирше белгисиз болып қалмақта. Ҳәр қыйлы күш майданда жайласқан бөлекшениң пси-функциясы ҳаққындағы мәселе де еле анықланған жоқ. Усындей мәселелерди қараў менен шуғылланыўды енди баслаймыз.

## 1-5. Шредингер теңлемеси

$U = U(x, y, z, t)$  потенциалы менен тәрийипленетуғын күш майданында жайласқан бөлекшениң пси-функциясын Шредингер тәрепинен ашылған дара тууындылы дифференциал теңлемени шешиў менен табыўға болады

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Бул теңлемени жыйнақлы түрде былайынша жазамыз

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (1.5.1)$$

Бул теңлемеде  $\nabla^2 = \Delta$  арқалы Лаплас операторы,  $m$  арқалы бөлекшениң массасы, ал  $\hbar$  арқалы  $2\pi$  шамасына бөлинген Планк туралысы белгиленген.

Бул теңлемениң ашылышына қандай көз-қараслардың алып келгенлиги ҳаққындағы мәселеге итибар бермей, (1.5.1)-теңлемени ең тийкарғы басланғыш ақлатпа, теңлемени шешиўдин барысында алынған нәтийжелердин экспериментлердин нәтийжелери менен сәйкес келийиниң себебинен теңлемениң дұрыслығына гүмәнның ҳеш қандай жоқ екенлигин атап өтемиз<sup>3</sup>.

Потенциал  $U$  өз ишине ўақыт  $t$  ны анық алмайтуғын жағдай айрықша қызықтырады. Бундай жағдайда  $U$  потенциал майдан мәнисине иие. Бундай шәрт орын алғанда (1.5.1)-теңлемениң шешими әпиүайыласады. Себеби бул жағдайда пси-функция еки көбейтишігеге ажыралады<sup>4</sup>. Олардың бири тек бөлекшелердин координаталарынан ғәрезли, ал екиншиси тек ўақыттан ғәрезли болады. Бул тастыйықлауды тексерип көриў ушын пси-функцияны

<sup>3</sup> Бундай көз-қараслар ҳаққында улыўма физика бойынша көп қолланбаларда оқыўға болады. Мысалы И.В.Савельев. Курс общей физики. Т. III. § 65. «Наука». 1973.

<sup>4</sup> Гәп дара шешимлер ҳаққында болып атыр.  $\sum c_n \varphi_n(x, y, z) \cdot f_n(t)$  улыўма шешиминиң биреюи тек координаталардан, екиншиси тек ўақыттан ғәрезли болған еки көбейтиші түринде берилиўи мүмкін емес.

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) \cdot f(t)$$

түринде жазамыз ҳәм бул аңлатпаны (1.5.1)-теңлемеге қоямыз.  $\nabla^2$  операторының тек  $\varphi$  көбейтишисине тәсир ететуғынлығын, ал  $\partial f / \partial t = df / dt$  екенлигин есапқа алып

$$-\frac{\hbar^2}{2m} f \nabla^2 \varphi + U \varphi f = i\hbar \varphi \frac{df}{dt}$$

аңлатпасын аламыз. Бул теңлемениң еки тәрепин де  $\varphi f$  ке бөлсек

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + U \varphi}{\varphi} = \frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt}$$

аңлатпасына келемиз. Бул теңлемениң шеп тәрепи тек бөлекшениң координаталарына, ал оң тәрепи тек үақытқа ийе. Ҳәр қыйлы болған ғәрэзсиз өзгериүшилердин еки функциясы усы функциялар тек турақлы мәниске ийе болған жағдайда ғана өз-ара тең болады. Бул турақлы шаманы Е арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда биз еки дифференциал теңлемеге келемиз

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + U \varphi = E \varphi, \quad (1.5.3)$$

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} = E. \quad (1.5.4)$$

Екинши теңлемени былайынша жаза аламыз:

$$\frac{df}{dt} + \frac{i}{\hbar} Ef = 0.$$

Биз турақлы коэффициентлерге ийе сыйықлы бир текли теңлемеге келдик. Бул теңлемени  $f = e^{\lambda t}$  аңлатпасын қойыў жолы менен шешсек

$$f = e^{-(\frac{i}{\hbar})Et} \quad (1.5.5)$$

түриндеги функцияны аламыз (улыўмалық шешимде биз С көбейтишисин жазбадық, себеби пси-функция усындағы көбейтиші дәллигинде анықланған).

Енди (1.5.3)-теңлемеге итибар беремиз. Бул теңлемеден Е арқалы белгиленген турақлы шаманың мәнисин анықлау мүмкін. (1.5.3)-теңлемениң барлық ағзаларының бирдей бирлікке ийе болыўы талабынан Е шамасының да U шамасының бирлигіндегі бирлікке, яғни энергияның бирлигине ийе болатуғынлығы келип шығады. Потенциал күш майданындағы қозғалыста системаның тек толық энергиясы ғана турақлы болып қалады. Сонықтан Е шамасын бөлекшениң толық энергиясына теңлестиремиз.

Солай етип бөлекше потенциаллық күш майданында қозғалғанда пси-функция мына түрге ийе болады екен

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) \cdot e^{-(\frac{i}{\hbar})Et}. \quad (1.5.6)$$

Бул аңлатпада Е арқалы бөлекшениң толық энергиясы белгиленген. Буннан кеңисликтің ҳәр қыйлы ноқаттарында бөлекшени табыудың итималлығының тығыздығы  $|\psi|^2 = |\varphi|^2$  шамасына тең ҳәм үақыттан ғәрзесиз екен. Соныңқтан (1.5.6) түрдеги пси-функциялар менен тәрийипленетуғын ҳаллар стационар ҳаллар деп аталады. Стационар ҳаллар ушын пси-функцияларды табыў мәселеси  $\varphi(x,y,z)$  функциялары табыў мәселесине алып келинеди. Усы жағдайға байланыслы болған функцияны стационар ҳалдың пси-функциясы деп атайды ҳәм  $\psi$  ҳәрипиниң жәрдеминде белгилейди. (1.5.3)-теңлемедеги  $\varphi$  ҳәрипин  $\psi$  ҳәрипи менен алмастырып стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси деп аталатуғын теңлемеге келемиз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi. \quad (1.5.7)$$

Бул теңлемени

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0 \quad (1.5.8)$$

туринде жийи жазады. (1.5.8)-теңлемеде  $U = 0$  деп есапладап еркин бөлекше ушын Шредингер теңлемесин аламыз:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (1.5.9)$$

Бул теңлемени

$$\psi = e^{\pm ikr} \quad (1.5.10)$$

функциясының қанаатландыратуғынлығын аңсат тексерип көриүге болады. Бул аңлатпада

$$\mathbf{k}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \quad (1.5.11)$$

ҳәм  $\mathbf{p}$  арқалы бөлекшениң классикалық импульси белгиленген.

(1.5.10)-аңлатпадағы  $\mathbf{k}$  ны  $p/\hbar$  пенен алмастырып ҳәм алынған аңлатпаны (1.5.6) ға қойсақ еркин бөлекшениң пси-функциясын аламыз

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)(Et \pm \mathbf{pr})}. \quad (1.5.12)$$

Тап усындай функция (дұрысырағы оның ҳақыйқый бөлими) жийилиги  $\omega = E/\hbar$  ҳәм толқын векторы  $\mathbf{k} = p/\hbar$  болған тегис толқынды тәрийиплейди. Бул сәйкеслик микробөлекшелердин корпускулалық-толқынлық тәбиятының сәйлеси болып табылады. Бундай корпускулалық-толқынлық тәбияттың дифракция бойынша экспериментлерде көринетуғынлығы белгили. Мысалы кристал арқалы өткен электронлар дәстеси фотопластинка менен тәсирлескенде рентген нурлары кристаллар арқалы өткенде пайда болатуғын дифракциялық сүйреттей дифракциялық сүйрет пайда болады.

(1.5.10)-аңлатпадағы жоқарғы плюс ҳәм (1.5.12)-аңлатпадағы минус к бағытындағы, ал төменги белги [(1.5.10) дағы плюс ҳәм (1.5.12 деги минус)] оған

қарама-қарсы бағытта тарқалатуғын жуўырыўшы толқынға сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз. Соныңтан стационар ҳалларды қарағанымызда  $e^{ikx}$  түриндеги пси-функцияны х көшери бағытында оң тәрепке қарай жуўыратуғын толқын, ал  $e^{-ikx}$  түриндеги толқын функциясын х көшери бағытында шеп тәрепке қарай жуўыратуғын толқын түринде трактовкалаймыз.

Анық мәниске иие болған импульске иие еркин бөлекше ушын Шредингер теңлемесиниң улыўма шешими (1.5.10) түриндеги еки толқынның суперпозициясы түринде жазылады

$$\psi = C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr}. \quad (1.5.13)$$

$C_1 = C_2$  ямаса  $C_1 = -C_2$  теңликтери орынланатуғын жағдайларда (1.5.13)-функция сәйкес

$$\psi = A \cos kr \text{ ямаса } \psi = B \sin kr \quad (1.5.14)$$

түринде жазылады. Бул функциялардың турғын толқынды тәрийиплейтуғыны өз-өзинен түснікли.

Дх интервалының ишинде жайласқан (локализацияланған) еркин бөлекшениң қозғалысын қараймыз (әпиүйайлық ушын биз бир өлшемли мәселени қараймыз). Анықсызлық принципи бойынша бөлекшениң импульси  $\hbar/\Delta x$  шамасындағы анықсызлыққа иие болады.

Суперпозиция принципине сәйкес бөлекшениң пси-функциясы импульсиниң мәнислері  $p_0 - \Delta p$  шамасынан  $p_0 + \Delta p$  шамасына шекемги (1.5.12)-түрдеги ҳаллардың қосындысы сыпатында көрсетилий мүмкін:

$$\psi(x, t) = \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} b(p) e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)(Et - px)} dp.$$

$E$  шамасын (энергиясын)  $\omega = E/\hbar$  шамасы менен, ал  $p$  импульсин  $k = p/\hbar$  толқынлық сан менен алмастырып

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} c(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (1.5.15)$$

аңлатпасына иие боламыз. Биз толқын пакетин ямаса толқынлар групласын тәрийиплейтуғын аңлатпаға келдик.

$\omega$  жийилиги толқынлық сан  $k$  ның базы бир функциясы болып табылады:  $\omega = \omega(k)$ . Бул функцияны  $k_0$  ноқатының әтирапында қатарға жаямыз. Қатардың биринши еки ағзасы менен шекленсек

$$\omega(k) = \omega_0 + (d\omega/dk)_0 (k - k_0) \quad (1.5.16)$$

аңлатпасын аламыз.

(1.5.15)-аңлатпадағы  $c(k)$  коэффициенти әстелик пенен өзгеретуғын функция деп есапладап оны интегралдың алдына шағарамыз ( $\Delta k$  шамасы киши деп есапланады). Усының менен бирге экспонентаның көрсеткишиндеги  $\omega$  шамасын оның (1.5.16)-мәниси менен алмастырамыз ҳәм жаңа  $\xi = k - k_0$  өзгериүшисин киргиземиз. Нәтийжеде

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

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпа аңсат интегралланады ҳәм соның нәтийжесинде биз

$$\psi(x, t) = 2c(k_0) \frac{\sin\left\{x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right\}}{x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} = A(x, t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (1.5.17)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Дк шамасының киши екенлигине байланыслы (1.5.17)-функциясын ўақытқа ҳәм кеңисликке байланыслы әсте-ақырынлық пенен өзгеретуғын, амплитудасы  $A(x, t)$  шамасына тең дерлик монохромат толқынды тәрийиплейди деп есаплауға болады. (1.5.17)-аңлатпаның бөлими нолге тең болған ноқатта амплитуданың максимумы жайласады. Солай етип толқын пакетиниң орайы (яғни амплитуда максималлық мәниске ийе ноқат)

$$x_{\text{pak}} = (d\omega/dk)_0 t \quad (1.5.18)$$

ноқатында жайласқан болады.

(1.5.18)-аңлатпадан толқын пакетиниң орайының

$$v_{\text{gr}} = (d\omega/dk)_0 \quad (1.5.19)$$

тезлиги менен қозғалатуғынлығын көриўге болады. Бул аңлатпада  $v_{\text{gr}}$  арқалы группалық тезлик белгиленген.

Еркин бөлекшениң энергиясы ушын релятивистлик емес аңлатпа  $E = p^2/2m$  түрине ийе болады.  $E$  ни  $\hbar\omega$  менен, ал  $p$  ны  $\hbar k$  менен алмастырып  $\omega$  ҳәм  $k$  арасындағы байланысты табамыз:

$$\omega = \frac{k^2 \hbar}{2m} \quad (1.5.20)$$

(1.5.20)-аңлатпаны  $k$  бойынша дифференциаллап еркин бөлекшениң қозғалысын тәрийиплейтуғын толқын пакетиниң тезлиги ушын  $k\hbar/m = p/m = v$  аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада  $v$  арқалы бөлекшениң тезлиги белгиленген. Солай етип толқын пакети де бөлекшениң тезлигидей тезлик пенен қозғалады екен.

Толқын пакетиниң кеңлиги ҳақында айтқанда амплитуда нолге айланатуғын пакеттиң орайына ең жақын жайласқан ноқаттар арасындағы қашықлықты түсінемиз. Бул ноқаттарға (1.5.17)-аңлатпадағы синустың аргументи  $\pm\pi$  шамасына тең болған жағдайдағы  $x$  тың мәнислері сәйкес келеди (аргументтиң ноллик мәниси пакеттиң орайына сәйкес келеди). Демек пакеттиң шегараларының координаталары  $\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right] \Delta k = \pm\pi$  шәртин қанаатландырады. Буннан

$$x = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t \pm \frac{\pi}{\Delta k} \quad (1.5.21)$$

(1.5.21)-аңлатпадан толқын пакетиниң кеңлиги ушын турақтылық шамасы  $\frac{2\pi}{\Delta k}$  алынады. Егер (1.5.20)-аңлатпадағы қатарға жайылдың кейинги ағзаларын да есапқа алатуғын болсақ, онда толқын пакетиниң кеңлиги ушын үақытқа байланыслы өзгеретуғын шама алынады. Толқын пакетиниң кеңлиги үлкейетуғын болып шығады. Бул кеңисликтеги бөлекшениң локализациясының дәллигинин қозғалыстың барысында кемейетуғындығын аңғартады.

## § 6. Итималлық ағысының тығызлығы

Кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында бөлекшени табылудың итималлығының тығызлығы түснігі менен бир қатарда итималлық ағысының тығызлығы түснігін де киргизиү мүмкін. Бул түснікке келиү ушын шексиз үлкен көлем бойынша емес, ал базы бир шекли  $V$  көлемі бойынша алынған  $\int |\psi|^2 dV$  интегралын қараймыз. Бул интеграл бөлекшени берилген көлемде табылудың итималлығын береди. Бул итималлықтан үақыт бойынша тууынды аlamыз:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \psi^* \psi dV = \int_V \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) dV. \quad (1.6.1)$$

(1.5.1)-теңлемеге сәйкес

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi + \frac{1}{i\hbar} U \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi^* - \frac{1}{i\hbar} U \psi^*.$$

Екинши теңлеме бириңиши теңлемениң комплексли түйинлеси болып табылады. Ол бириңиши теңлемеден  $\psi$  функциясын  $\psi^*$  функциясы менен,  $i$  ди  $-i$  менен алмастырыў арқалы алынады. Бул қатнаслардың жәрдемінде (1.6.1)-формуланың оң тәрепин

$$-\int_V \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) dV + \frac{1}{i\hbar} \int_V (\psi^* U \psi - \psi U \psi^*) dV$$

түринде жаза аламыз. Бул интеграллардың екиншисиниң нолге тең екенлеги анық. Бириңиши интегралды болса былайынша жазыў мүмкін:

$$-\int_V \frac{\hbar}{2mi} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) dV. \quad (1.6.2)$$

Бул

$$\begin{aligned} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) &= \nabla \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla^2 \psi^* - \nabla \psi \nabla \psi^* - \psi \nabla^2 \psi^* = \\ &= \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \end{aligned}$$

түриндеги элементар есаплаўлардан келип шығады.

Солай етип (1.6.1)-формуланың оң тәрепин (1.6.2)-аңлатпа менен алмастырыўға болады екен. Нәтийжеде

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \int_V \nabla \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right\} dV \quad (1.6.3)$$

формуласына ийе боламыз.

Остроградский-Гаусс теоремасының жәрдеминде бул қатнастың оң тәрепин  $V$  көлемин шегаралап турған бет  $S$  бойынша интеграл менен алмастырыў мүмкин. Бул

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \int_S \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right\} dS \quad (1.6.4)$$

формуласына алып келеди (биз "-" белгисин формуланың шеп тәрепине өткиздик).

(1.6.4)-аңлатпадан мынадай жуўмақ шығарыўға болады: оң тәрепте турған бет бойынша алынған интеграл бөлекшениң  $V$  көлеминде жайласыў итималлығының киширейиў тезлигин береди. Демек ол интеграл  $S$  бети арқалы өтетуғын итималлықтың ағысын береди деген сөз. Усы жағдайға байланыслы

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (1.6.5)$$

шамасын итималлықтың ағысының тығызлығы деп деп қабыл етемиз.

(1.6.5) белгилеўин пайдаланып (1.6.3)-формуланы былайынша көширип жазамыз:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 \right\} dV = - \int_V \nabla j dV.$$

$V$  көлемин сайлап алыўдың ықтыярлы екенлигине байланыслы кеңисликтиң ҳәр бир ноқатында

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \nabla j = 0 \quad (1.6.6)$$

шәртинин орынланыўы керек. Биз белгили болған үзлиksизлик теңлемесин алдық. Электродинамикағы тап сол сыйқылы теңлеме  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \Delta j = 0$  түринде жазылады. Бул аңлатпада  $\rho$  арқалы зарядтың тығызлығы,  $j$  арқалы тоқтың тығызлығы белгиленген [1-томдағы (51.1)-формулаға қараңыз].

(1.6.6)-аңлатпаға  $j$  ушын жазылған (1.6.5)-аңлатпаны қойсақ пси-функцияның қанаатландырыўы зәрүр болған шәртти аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{\hbar}{2mi} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0. \quad (1.6.7)$$

$|\psi|^2$  шамасының бөлекшени кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында табыўдың итималлығы екенлигин еске түсиремиз. Буннан пси-функцияның төмендегидей шәртлерди қанаатландырыўының кереклиги келип шығады: 1) бир мәнисли, 2) үзлиksиз, 3) шекли (айырым жағдайларда айрықша ноқатларда бул шәрттиң орынланыўы талап етилмейді). Усылар менен бир қатарда (1.6.7)-шәрттен пси функциясының үзлиksиз ҳәм шекли мәниске ийе (шекли) бириңши тууындыға ийе

болатуғынлығы келип шығады (бул жағдайда да айрықша ноқатларда бул шәрттиң орынланбауы мүмкін).

Пси-функцияға қойылатуғын жоқарыда атап өтилген шәртлердин жыйнағы стандарт шәртлер деп аталады.

## II бап

# КВАНТЛЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ АППАРАТЫ

## § 7. Тийкарғы постулаттар

Квантлық механиканың тийкарында бир неше постулаттар турады. Олардың ишине системаның ҳалына пси-функциясының, сондай-ақ Шредингер теңлемесиниң сәйкес келетуғынлығы да киреди. Бул параграфта биз және үш постулатты қарап шығамыз<sup>5</sup>.

Бириңи постулат ҳәр бир физикалық шама ушын анық бир сыйықлы оператор жазылады деп тастырылады.

Оператор дегенимизде бир  $\varphi$  функциясына екинши бир  $f$  функцияны тенглестириў қағыйдасын түсінемиз. Символлық түрде ол былайынша жазылады:

$$f = \hat{Q}\varphi. \quad (1.7.1)$$

Операторларды жазғанда жоқарысына «қалпақ» («шапка») белгисин қоямыз. ( $\hat{Q}, \hat{A}, \hat{x}, \hat{p}$  ұмтасында базы бир түрлерине мысаллар келтиримиз:  $a, U(x,y,z), d/dx, \sqrt{\cdot}$ ). Операторлардың базы бир түрлерине мысаллар келтиримиз:  $a, U(x,y,z), d/dx, \sqrt{\cdot}$ . Бул аңлатпаларда  $a = \text{const}$ . Демек (1.7.1)-аңлатпаға сәйкес  $a\varphi = \psi$ ,  $U(x,y,z)\psi = \varphi$ ,  $a, U(x,y,z)$  операторлары көбейтиў операторлары болып табылады.  $\sqrt{\cdot}$  операторы  $\psi(x)$  функциясына тәсир етип  $\sqrt{\psi(x)} = \varphi(x)$  функциясын береди.  $d/dx$  операторы  $\psi(x)$  функциясына тәсир етип  $\frac{d\psi(x)}{dx} = \varphi(x)$  функциясын береди.

**Интеграллық оператор:** Мейли  $\int K(x, \xi)\psi(\xi)d\xi = \varphi(x)$  болсын. Бул аңлатпада  $\int K(x, \xi)d\xi$  интеграллық оператор, ал  $K(x, \xi)$  функциясы интеграллық оператордың ядросы деп аталады.

**Матрицалық оператор.** Мейли  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$  шамасы матрица-бағана түрінде

жазылған  $n$  – өлшемли вектор болсын.  $n$  – өлшемли кеңисликтеги  $\varphi_i = \sum_{k=1}^n a_{ik}\psi_k$  сыйықлы түрлендіриүин қараймыз. Оны  $A\psi = \varphi$  түрінде жазыуымыз мүмкін. Бул аңлатпада  $A$  арқалы

$$A = \{a_{ik}\} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

формуласындағы  $a_{ik}$  коэффициентлеринен қуралған матрица болып табылады. Соныңтан  $A$  матрицасын матрицалық оператор деп атайды. Бундай жағдайда

<sup>5</sup>Квантлық механиканың постулаттар системасын сайлап алыў толық бир мәнисли емес. Бәрше тәрепинен қабыл етилген улыўмалық постулаттар системасы жоқ.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n-1} & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn-1} & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1i} \psi_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2i} \psi_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n a_{ni} \psi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{bmatrix}$$

қатнасы орын алады.

Егер

$$\begin{aligned} \hat{Q}(\varphi_1 + \varphi_2 + \cdots + \varphi_n) &= \hat{Q}\varphi_1 + \hat{Q}\varphi_2 + \cdots + \hat{Q}\varphi_n \\ \hat{Q}(c\varphi) &= c\hat{Q}\varphi \end{aligned}$$

шәртлери орынланатуғын болса операторларды сзыықлы операторлар деп атайды. Бул аңлатпадағы  $c$  арқалы ықтыярлы константа белгиленген. Бул еки шәртти бириктирип, былайынша компактлы түрде жазыў мүмкін:

$$\hat{Q}\left(\sum_{m=1}^n c_m \varphi_m\right) = \sum_{m=1}^n c_m \hat{Q}\varphi_m. \quad (1.7.2)$$

(1.3.12)- ҳәм (1.7.2)-формулаларды бир бири менен салыстырып көргенде сзыықлы оператордың суперпозиция принципи менен сәйкес келетуғынлығын көриўге болады.

Сзыықлы операторларға мысал ретинде  $x$  қа көбейтиўди ( $\hat{Q} = x$ ) ҳәм  $x$  бойынша дифференциаллауды ( $\hat{Q} = \partial/\partial x$ ) көрсетиўге болады. Ҳақыйқатында да

$$x \sum \varphi_m = \sum x\varphi_m, x(c\varphi) = cx\varphi.$$

Тап сол сыйқылды

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \sum \varphi_m \right) = \sum \frac{\partial \varphi_m}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial x} (c\varphi) = c \frac{\partial \varphi}{\partial x}.$$

Математикада ҳәр бир оператор ушын сәйкес теңлеме жазылады:

$$\hat{Q}\varphi = q\varphi. \quad (1.7.3)$$

Бул теңлемеде  $\varphi$  ( $\Psi$  арқалы да белгилеўимиз мүмкін) арқалы базы бир функция,  $q$  арқалы параметр белгиленген. Буннан кейин (1.7.3)-теңлемени теңликке айландыратуғын, усының менен бир қатарда базы бир қосымша шәртлерди (мысалы стандарт шәртлерди) қанаатландыратуғын барлық функцияларды излеў мәселеси қойылады. Көплеген операторлар ушын жоқарыда қойылған шәртлерди қанаатландыратуғын шешимлер  $q$  параметриниң қәлеген мәнислеринде емес, ал айырым мәнислеринде алынатуғынлығы мәлим. Параметрдин усындаған айрықша

мәнислери  $\hat{Q}$  операторының меншикли мәнислери, ал (1.7.3)-теңлемеден алынатуғын  $\varphi$  функциялары оператордың сол меншикли мәнислерге тийисли болған меншикли функциялары деп аталады. Бир қатар жағдайларда бир меншикли мәниске бир неше меншикли функциялардың сәйкес келиүи де мүмкин. Бундай жағдайда берилген меншикли мәнисти айныған (рус тилиндеги «вырождение» сөзи) деп атайды. Берилген меншикли мәниске сәйкес келиүши ҳәр қыйлы функциялардың жыйнағын айныұдың еселиги (рус тилинде «кратность вырождения» деп атайды) деп атایмыз.

Квантлық механиканың екинши постулаты бойынша  $\hat{Q}$  операторына сәйкес келиүши  $Q$  физикалық шамасын өлшегендеге усы оператордың  $q_m$  меншикли мәнислериниң бирлеуі алынады.

Солай етип (1.7.3) түриндеги теңлеме квантлық механикада оғада әхмийетли орынды ийелейди екен. Екинши постулат бойынша  $q$  параметриниң бирлигиниң  $Q$  шамасының бирлигіндегі екенлеги көринип тур. Тап усындағы бирликке  $\hat{Q}$  операторы да ие болады

$\hat{Q}$  операторының меншикли мәнислериниң жыйнағы оператордың спектри ямаса  $Q$  шамасының спектри деп аталады. Спектр  $q_1, q_2, \dots$  дискрет мәнислеринен турыұы мүмкин. Бундай жағдайда спектрди дискрет спектр деп атайды. Егер меншикли мәнислердин жыйнағы үзлиksiz избе-излиkti пайда ететуғын болса спектрди үзлиksiz ямаса тутас спектр деп атайды. Улыўма жағдайда спектр өз ишине дискрет областты да, үзлиksiz областты да алыўы мүмкин.

Дискрет спектр жағдайында  $\hat{Q}$  операторының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын номерлеу мүмкин:

$$\begin{aligned} & q_1, q_2, \dots, q_m, \dots \\ & \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m, \dots \end{aligned}$$

Квантлық механикада қәлекен физикалық шаманың меншикли функцияларының жыйнағы толық системаны пайда етеди деп есаплады. Бул қәлекен  $\psi$  үзлиksiz функциясын меншикли функциялар бойынша төмендегидегі түрде қатарға жайыўға болатуғынлығын аңғартады

$$\psi = \sum c_m \psi_m. \quad (1.7.4)$$

Бул аңлатпада  $c_m$  арқалы тұрақты, улыўма жағдайда комплексли коэффициентлер белгиленген.

(1.7.4)-аңлатпаны системаның базы бир ҳалының пси функциясы деп көз алдымызыға елеслетейик. Квантлық механиканың үшинши постулаты төмендегилерди тастыйықлады: Система  $\psi$  ҳалында түрған болсын.  $Q$  функциясы бойынша (1.7.4)-қатар жайылған. Бундай жағдайда  $q_m$  шамасының алыныў итималлығы (функцияларды тәртиби бойынша нормировкалағанда)  $c_m$  коэффициентиниң модулиниң квадратына тең болады.

$c_m$  коэффициентлериниң мәнисине сәйкес төмендеги шәрттиң орынланыўы керек:

$$\sum |c_m|^2 = 1. \quad (1.7.5)$$

Төменде биз  $\psi_m$  функцияларын сәйкес түрде нормировкалағанда бул шәрттиң ҳақыйқатында да орынланатуғынлығын көремиз.

Қатардың тек бир коэффициентинен басқа коэффициентлериниң барлығыда нолге тең болса (1.7.4)-формула  $\psi = \psi_m$  қатнасына өтеди (пси-функцияның  $e^{i\alpha}$  фазалық көбейтишисине шекемги дәлликте анықланатуғынлығын еске салып өтемиз). Бул жағдайда барлық өлшеўлерде  $q_m$  нәтийжеси алынады. Демек  $\psi_m$  меншикли функциясы  $Q$  шамасының  $q_m$  шамасына тең болатуғын ҳалдың пси-функциясы болып табылады екен.

(1.7.4)-қатардың ағзаларының екіден кем емес ағзалары нолге тең болмаса, онда  $Q$  шамасы  $\psi$  ҳалында анық мәниске ийе болмайды. Өлшеўлерде оның ушын  $q_1, q_2, \dots$  мәнислері алынады. Анау ямаса мынау мәнистиң алының итималлығы сәйкес  $\psi_m$  функциясының (1.7.4)-қатардағы салмағы, яғни  $c_m$  коэффициентиниң шамасы арқалы анықланады деп есаплау тәбий.  $c_m$  шамасының өзи комплексли болғанлықтан бундай итималлықта тең бола алмайды. Соныңтан  $dV$  көлеминде бөлекшени табыудың итималлығы  $\psi$  функциясы тәрепинен емес, ал оның модулиниң квадратының шамасы менен анықланатуғынлығын еске түсіремиз ҳәм тап сол сияқты итималлық сыпатында  $c_m$  шамасының модулиниң квадратын алың керек деген жуұмақ шығарамыз. Бундай таллауды үшинши постулаттың дәлили сыпатында қарауға болмайды. Усы жағдай тек қандай постулатқа келиўдің кереклигін ғана көрсетеди. Постулаттың өзин квантлық механиканың тийкарына қойылған тийкарғы болжау деп қарау керек.

Келеси параграфта биз дискрет спектрге ийе физикалық шаманың қәлеген оператордың меншикли функцияларының ортонормировкалған система деп аталауғын системаны пайда ететуғынлығын көрсетемиз. Бул жағдай

$$\int \psi_m^* \psi_m dV = \delta_{mn} \quad (1.7.6)$$

аңлатпасының орын алатуғынлығын билдиреди. Интеграллау  $\psi$  функциялары анықланған областтағы өзгериүшилердин өзгериү интерваллары бойынша жүргизиледи.

Математикада  $\varphi$  ҳәм  $\psi$  функцияларының скаляр көбеймеси түсиниги бар. Бундай көбейме  $\langle \varphi | \psi \rangle$  түринде жазылады ҳәм төмендигидей болып анықланады:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^* \psi dV. \quad (1.7.7)$$

$dV = dx dy dz$ . Егер скаляр көбейме нолге тең болса функцияларды ортогоналлық функциялар деп атайды. Тап сол сияқты өз-ара перпендикуляр, яғни ортогоналлық векторлардың скаляр көбеймеси нолге тең. (1.7.7)-анықламадан

$$\langle \varphi | \psi \rangle^* = \langle \varphi | \psi \rangle$$

екенлиги келип шығады. Функцияның скаляр квадраты, яғни функцияның өзин өзине скаляр көбейткенде алынатуғын

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \int \varphi^* \varphi dV = \int |\varphi|^2 dV$$

шамасы ҳақыйқай ҳәм оң мәнислерге ийе болады.

$\langle a\varphi | b\psi \rangle$  түриндеги көбеймени алып қарайық. Бул көбеймеги  $a, b$  шамалары комплексли санлар болсын. (1.7.7)-анықламаны итибарға алып

$$\langle a\varphi | b\psi \rangle = a^* b \langle \varphi | \psi \rangle \quad (1.7.9)$$

аңлатпасын жаза аламыз. Солай етип скаляр көбеймениң белгиси алдына турақлы коэффициентлерди шығарғанда бириңи көбейтиүшиниң орнына оның комплексли түйинлеси келеди, ал екинши көбейтиүши өзгериссиз қалады екен.

(1.7.7)-белгилеўди қолланып меншикли функциялардың ортонормировкаланыў шәрти болған (1.7.6)-аңлатпаны

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn} \quad (1.7.10)$$

түринде жазыўға болады.

Тап сондай шәртти туўры мүйешли координата көшерлериниң ортлары да қанаатландырады:

$$e_m e_n = \delta_{mn}.$$

(1.7.10)-шәрттиң жәрдеминде (1.7.4)-қатарға жайыўдағы  $c_m$  коэффициентлериниң мәнисин табыў мүмкін. Буның ушын (1.7.4)-қатнасты  $\psi_n$  ге скаляр көбейтемиз ҳәм (1.7.10)-аңлатпаны итибарға аламыз

$$\langle \psi_n | \psi \rangle = \sum c_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \sum c_m \delta_{mn} = c_n.$$

Сумманың т бойынша алынатуғынлығын аңғарамыз. Солай етип биз

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle = \int \psi_n^* \psi dV \quad (1.7.11)$$

формуласына келемиз.

$c_n$  коэффициентиниң мәнисин билиў физикалық шама анық мәниске ийе болатуғын ҳалдағы усы физикалық шаманың орташа мәнисин табыўға мүмкиншилик береди.  $Q$  шамасын өлшегендеге  $q_m$  мәнисиниң алыныў итималлығы  $|c_m|^2$  шамасына тең. Демек усы шаманың орташа мәниси

$$\langle q \rangle = \sum |c_m|^2 q_m = \sum c_m^* c_m q_m \quad (1.7.12)$$

формуласының жәрдеминде анықланады екен. Бул формулада да сумма т индекси бойынша алынады. (1.7.11) ге сәйкес  $c_m^* = \langle \psi | \psi_m \rangle$ . Бул аңлатпаны (1.7.12)-формулаға қойсақ

$$\langle q \rangle = \sum \langle \psi | \psi_m \rangle c_m q_m = \sum \langle \psi | q_m \psi_m \rangle c_m.$$

(1.7.3)-аңлатпаға сәйкес  $q_m \psi_m$  шамасын  $\hat{Q} \psi_m$  арқалы алмастырып  $c_m$  шамасын скаляр көбейме белгисинен шығарамыз ҳәм оператордың сзығылдырылғанын пайдаланамыз:

$$\langle q \rangle = \sum_m \langle \psi | \hat{Q} \psi_m \rangle c_m = \sum_m \langle \psi | \hat{Q} c_m \psi_m \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \sum_m c_m \psi_m \rangle.$$

Ең ақырында (1.7.4)-аңлатпаны итибарға алып

$$\langle q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle \quad (1.7.13)$$

яmasa

$$\langle q \rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi \, dV \quad (1.7.14)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Биз квантлық механиканың әхмийетли формулаларының бириң алдың. Бул формула пси-функциясын билген ҳалда қәлеген физикалық шаманы өлшеүдиң нәтийжелериниң орташа мәнисин есаплаўға мүмкиншилик береди. Буның ушын усы шамаға сәйкес келиўши оператордың түрин де билиў керек болады.

### 1-8. Сызықты операторлар

Физикалық шамалар ҳақыйқый шамалар болып табылады. Соңықтан олар меншикли мәнислери ҳақыйқый шамалар болып табылатуғын операторлар менен сәўлеленеди. Квантлық механикада тап усындай операторлардың дыққат орайына алынатуғынлығы тәбийий. Бирақ бир қатар есаплаўларды жүргизгенде комплексли меншикли мәнислери бар жәрдемши операторлардан да пайдаланады. Усы жағдайларға байланыслы биз бундай операторлардың қәсийетлері менен танысыруымыз керек.

Тийкарғы анықламалардан баслаймыз.

$$\langle \varphi | \hat{Q}_1 \varphi \rangle = \langle \psi^* | \hat{Q}_2 \psi^* \rangle \quad (1.8.1)$$

қәсийетине ийе еки  $\hat{Q}_1$  һәм  $\hat{Q}_2$  операторлары бир бири менен транспонирленген деп аталады. Бул аңлатпада  $\varphi$  менен  $\psi$  арқалы ықтыярлы еки функция белгиленген.  $\hat{Q}$  операторына транспонирленген операторды  $\tilde{\hat{Q}}$  арқалы белгилеймиз. Демек (1.8.1)-аңлатпадағы  $\hat{Q}_1$  операторын әпиўайы түрде  $\hat{Q}$  арқалы белгилесек, онда  $\hat{Q}_2$  операторын  $\tilde{\hat{Q}}$  арқалы белгилеў керек болады:

$$\langle \varphi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \psi^* | \tilde{\hat{Q}} \psi^* \rangle. \quad (1.8.2)$$

Солай етип (1.8.2)-шәртти қанаатландыратуғын  $\hat{Q}$  һәм  $\tilde{\hat{Q}}$  операторлары бир бири менен транспонирленген деп аталады. (1.7.7) анықламасын итибарға алып (1.8.2) шәртин былайынша жазыўға болады:

$$\int \psi^* \hat{Q} \psi \, dV = \int \psi \tilde{\hat{Q}} \psi^* \, dV. \quad (1.8.3)$$

Ықтыярлы түрде алынған функциялардың қәлеген  $\varphi$  һәм  $\psi$  жубы ушын

$$\langle \varphi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \hat{Q}^+ \varphi | \psi \rangle \quad (1.8.4)$$

шәртин қанаатландыратуғын  $\hat{Q}$  операторы ушын  $\hat{Q}^+$  операторын жазамыз. Бул жағдайда  $\hat{Q}^+$  операторын  $\hat{Q}$  операторының түйинлес эрмит операторы (яmasa әпиўайы түрде түйинлес) деп атайды.  $\hat{Q}$  операторы өзинен оң тәрепте турған функцияға тәсир ететуғын болса  $\hat{Q}^+$  операторы өзиниң алдында (шеп тәрепинде турған функцияға) тәсир етеди. Солай етип  $\hat{Q}$  операторы символына «+» белгисин қойыў оператордың оң тәрепинде турған функцияға тәсир етиўди оң тәрепинде

турған функцияға тәсир етиүге өзгертеди.  $\widehat{Q}^+$  операторы тәсир ететуғын функцияның оң тәрепинде жазылады деген қағыйданы қабыл етсек, онда түйинлес операторды анықтайтуғын (1.8.4) қатнасы

$$\langle \varphi | \widehat{Q} \psi \rangle = \langle \varphi \widehat{Q}^+ | \psi \rangle \quad (1.8.5)$$

түрине енеди. Демек (1.8.5) түриндеги аңлатпаларда оператордың символына (белгисине) түйинлес белгисин қойыў менен бирге оператордың шеп тәрепинде турған «дийўалды» оң тәрепине өткериў керек болады.

Енди

$$(\widehat{Q} \varphi)^* = \widehat{Q}^* \varphi \quad (1.8.6)$$

шәртин қанаатландыратуғын  $\widehat{Q}^*$  операторын анықтаймыз. Бундай операторды  $\widehat{Q}$  операторының комплексли түйинлеси деп атайды.

$$\langle \psi^* | \tilde{Q} \varphi^* \rangle = \langle \tilde{Q} \varphi^* | \psi^* \rangle^* = \langle (\tilde{Q} \varphi^*)^* | \psi \rangle = \langle \tilde{Q}^* \varphi | \psi \rangle$$

скаляр көбеймесиниң (1.7.8)-қәсийетин итибарға алыш (1.8.2)-аңлатпаның оң тәрепин түрлендиримиз. (1.8.6)-анықлама бойынша  $(\tilde{Q} \varphi^*)^* = \tilde{Q}^* \varphi$  екенлигин биз пайдаландық. Усының нәтийжесинде (1.8.2)-формула

$$\langle \varphi | \widehat{Q} \psi \rangle = \langle \tilde{Q}^* \varphi | \psi \rangle$$

түрине енеди. (1.8.4)-аңлатпа менен салыстырыўдан

$$\widehat{Q}^+ = \tilde{Q}^* \quad (1.8.7)$$

теңлиги келип шығады. Бул аңлатпада  $\tilde{Q}^*$  арқалы транспонирленген  $\tilde{Q}$  операторына комплексли түйинлес болған оператор белгиленген. (1.8.7)-аңлатпа  $\widehat{Q}^+$  эрмитлик операторының улыўма айтқанда комплексли түйинлес оператор  $\widehat{Q}^*$  менен сәйкес келмейтуғынлығын көрсетеди.

Мейли оператор комплексли санға көбейтиўди аңғартатуғын болсын:  $\hat{C} = c$ . Бул оператордың эрмитлик түйинлес операторын табамыз. (1.8.5)-аңлатпаға сәйкес

$$\langle \varphi | \hat{C} \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{C}^* \psi \rangle.$$

Демек  $\hat{C}^*$  операторының да базы бир сан болыўы керек. Соныңтан (1.7.9)-қәсийеттен пайдаланып

$$\hat{C} \langle \varphi | \psi \rangle = (\hat{C}^+)^* \langle \varphi | \psi \rangle$$

аңлатпасын жазыўға болады. Буннан  $\hat{C} = (\hat{C}^+)^*$ , яғни  $\hat{C}^+ = \hat{C}^*$  екенлиги келип шығады. Демек

$$\text{егер } \hat{C} = c \text{ болса } \hat{C}^+ = c^* \quad (1.8.8)$$

шәрти орынланады екен ҳәм  $\hat{C}^+ = \hat{C}^*$ .

Биз  $\widehat{Q}$  операторы менен салыстырыў ушын ( $\widehat{Q}$  операторы менен сәйкеслендириў ушын) операторлардың үш түрин анықладық: транспонирленген оператор  $\tilde{Q}$ , эрмитлик түйинлес оператор  $\widehat{Q}^+$  ҳәм комплексли түйинлес оператор  $\widehat{Q}^*$ . Енди меншикли мәнислериниң ҳақыйқый мәнислер болыўы ушын оператордың қандай шәртлерди қанаатландырыуның шәрт екенлигин анықтаймыз.  $\widehat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$  теңлемесин  $\psi_n$  функциясына скаляр көбейтемиз:

$$\langle \psi_n | \widehat{Q}\psi_n \rangle = q_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle.$$

$\psi_n$  функциясының квадраты ҳақыйқый мәниске иие (нормировкаланған функциялар ушын квадраты мәниси 1 ге тең). Сонықтан  $q_n$  шамасының ҳақыйқый болыўы ушын теңдиктиң шеп тәрепинен ҳақыйқый болыўы керек. Бундай жағдайда

$$\langle \psi_n | \widehat{Q}\psi_n \rangle = \langle \psi_n | \widehat{Q}\psi_n \rangle^*$$

ямаса (1.7.8)-аңлатпаны есапқа алғанда

$$\langle \psi_n | \widehat{Q}\psi_n \rangle = \langle \widehat{Q}\psi_n | \psi_n \rangle$$

теңлиги орынланады. (1.8.4)-аңлатпа менен салыстырыў бул шәрттиң  $\widehat{Q}$  операторы өзине түйинлес болған  $\widehat{Q}^+$  операторы менен сәйкес болатуғын жағдайда орынланатуғынлығы көрсетеди.

$$\widehat{Q} = \widehat{Q}^+ \tag{1.8.9}$$

теңлиги орынланатуғын операторды өзи өзине түйинлес ямаса эрмит операторы деп атайды. (1.8.9)-аңлатпаны есапқа алсақ эрмитлик болыў шәртин

$$\widehat{Q} = \tilde{Q}^* \tag{1.8.10}$$

туринде жазыў мүмкин.

Солай етип биз әхмийетли жуўмаққа келдик: физикалық шамаларға өзи өзине түйинлес  $\widehat{Q}$  (эрмитлик) операторлар сәйкес келеди. Бундай операторлар ушын

$$\langle \psi | \widehat{Q}\psi \rangle = \langle \widehat{Q}\varphi | \psi \rangle \tag{1.8.11}$$

аңлатпасы дұрыс болады. [(1.8.4)- ҳәм (1.8.9)-аңлатпаларға қараңыз]. Оň тәрептеги  $\widehat{Q}$  операторын  $\widehat{Q}^+$  операторы сыпатында қарап бул аңлатпаны былайынша да жаза аламыз:

$$\langle \psi | \widehat{Q}\psi \rangle = \langle \varphi \widehat{Q} | \psi \rangle \tag{1.8.12}$$

(өзи өзине түйинлес операторлар ушын «дийўалды» оператордың қәлеген тәрепине қойып жазыўға болады).

(1.8.11)-аңлатпадан эрмит операторы ушын

$$\int \varphi^* \widehat{Q}\psi \, dV = \int \psi \widehat{Q}^* \varphi^* \, dV \tag{1.8.13}$$

аңлатпасының орын алатуғынлығын көриўге болады. Бул аңлатпаны өзи өзине

түйинлес оператордың анықламасы түрінде қараўға болады.

Эрмит операторларының меншикли функцияларының өз-ара ортогоналлық екенлигин көремиз. (1.7.3)-теңлемени  $Q$  шамасының  $m$ -хәм  $n$ -меншикли мәнислері ушын жазамыз:

$$\hat{Q}\psi_m = q_m \psi_m, \text{ хәм } \hat{Q}\psi_n = q_n \psi_n.$$

Бириңи теңлемени скаляр түрде оң тәрептен  $\psi_n$  шамасына, ал екиншисин шеп тәрептен  $\psi_m$  шамасына көбейтемиз. Нәтийжеде

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}\psi_m | \psi_n \rangle &= q_m \langle \psi_m | \psi_n \rangle, \\ \langle \psi_m | \hat{Q}\psi_n \rangle &= q_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \end{aligned}$$

аңлатпаларын аламыз. Оператордың эрмитлик екенлигіне байланыслы бул теңлемелердин шеп тәреплери өз-ара тең [(1.8.11)-аңлатпаны қараңыз]. Соныңтан жоқарыдағы теңлемеден төменги теңлемени алсақ

$$(q_m - q_n) \langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0$$

теңлемесине ийе боламыз. Буннан  $q_m \neq q_n$  шәрти орынланғанда (яғни  $m \neq n$  болған жағдайда<sup>6</sup>)  $\psi_m$  хәм  $\psi_n$  функцияларының скаляр көбеймелери нолге тең болатуғының келип шығады:  $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0$ . Бул жағдай  $\psi_m$  хәм  $\psi_n$  функцияларының ортогоналлық екенлигин аңғартады.

1-3 параграфта пси-функцияның ықтыярлы комплексли көбейтиші дәллигинде анықланатуғының атап өтилген еди. Дискрет спектр жағдайында барлық үақытта да бул көбейтишини  $\Psi$  функцияларының ҳәр бириңін квадратының 1 ге тең етип сыйлап алғыу мүмкін. Бундай аүұлда меншикли функциялар системасы ортонормировкаланған система болып табылады. Солай етип биз (1.7.10)-формуланы дәлилледік. Буннан былай биз дискрет спектрдин меншикли функцияларын 1 ге нормировкаланған деп есаптаймыз.

Ең ақырында (1.7.5)-аңлатпаны дәлиллеў ушын меншикли функциялардың ортонормировкаланың қәсийетинен пайдаланамыз. (1.7.10)-аңлатпаны итибарға алып (1.7.4)-аңлатпаны пси-функцияның нормировка шәртине қоямыз [(1.4.2)-аңлатпаға қараңыз]:

$$\begin{aligned} 1 &= \int \psi^* \psi \, dV = \int \left( \sum_m c_m^* \psi_m^* \right) \left( \sum_n c_n \psi_n \right) dV = \\ &= \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_m |c_m|^2. \end{aligned}$$

Бул жағдайды дәлиллеў талап етилген еди.

## § 9. Операторларды матрицалық формада көрсетиў

Биз дәслеп матрикалар, матрикалар үстіндеги алгебралық әмеллер ҳаққында қысқаша тоқтап өтемиз.

**Матрицаның анықламасы.** К есаплаў системасынан  $K'$  есаплаў системасына

<sup>6</sup> Биз ҳәр бир  $q_m$  шамасына бир меншикли функция сәйкес келеди деп болжаймыз (демек биз қарап атырған жағдайда айның орын алмайды деген сез).

еткенде вектордың қураўшылары

$$a'_i = \sum_k \alpha_{ik} a_k, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{M.1})$$

$$a_i = \sum_k \alpha_{ki} a'_k, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{M.2})$$

формулаларының жәрдеминде түрлендирилетуғынлығы мәлим.

Өтиў коэффициентлерин квадрат кесте түринде жазыў мүмкин:

$$A = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{vmatrix}. \quad (\text{M.3})$$

Бул кестени түрлендириў матрицасы деп атайды.  $\alpha_{ik}$  шамалары матрицаның элементлери деп аталады. Биринши индекс қатардың номерин, ал екинши индекс бағананың номерин анықлады.

Белгилеўлерди анықладап аламыз. Матрицаның элементлерин еки индекси бар киши ҳәриплердин жәрдеминде белгилеймиз. Ал матрицаның өзитиң белгилеў ушын үлкен ҳәрипти пайдаланамыз (мысалы матрицаның элементи  $\alpha_{ik}$ , матрицаның өзи А арқалы белгиленеди). Вектордың қураўшыларын бир индекске ийе киши ҳәриплердин жәрдеминде, ал векторды болса тап сондай, бирақ жуўан ҳәрип пенен белгилеймиз (мысалы  $a$ : вектордың қураўшылары болса, а вектордың өзи болады).

Вектордың қураўшыларын түрлендириў операциясы болған (M.1) операциясын символлық түрде векторды матрицаға көбейтиў түринде жаза аламыз:

$$a' = aA. \quad (\text{M.4})$$

Кери түрлендириў болған (M.2) түрлендириўдин коэффициентлері

$$A^{-1} = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{32} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{vmatrix} \quad (\text{M.5})$$

матрицасын пайда етеди. Бул матрицаны кери матрица деп атайды. Кери матрицаның элементлери  $\alpha'_{ik}$  арқалы белгилеп

$$\alpha_{ik} = \alpha_{ki} \quad (\text{M.6})$$

аңлатпасын жаза аламыз.

А матрицасынан қатарларын бағаналар менен алмастырыў жолы менен алынған матрицаны транспонирленген матрица деп атайды ҳәм  $\tilde{A}$  арқалы белгилейди. Егер транспонирленген матрицаның элементлерин  $\tilde{\alpha}_{ik}$  арқалы белгилесек

$$\tilde{\alpha}_{ik} = \alpha_{ki} \quad (\text{M.7})$$

теңлигин аламыз.

(M.6)- ҳәм (M.7)-формулалардан (M.5) кери түрлендириў матрицасының транспонирленген туўры түрлендириў матрицасына сәйкес келетуғынлығы көринип тур:

$$A^{-1} = \tilde{A}. \quad (\text{M.8})$$

(M.8) қатнасы барлық матрикалар ушын орынланбайды<sup>7</sup>. (M.8) шәрттин қанаатландыратуғын матрикалар ортогоналлық матрикалар деп аталады.

(M.2) кери түрлендирийи символлық түрде былайынша жазылады

$$a = A^{-1}a'. \quad (\text{M.9})$$

Мәселениң формаль түрдеги математикалық тәрепин қозғамай (M.4) ҳәм (M.9) қатнасларын [басқа сөзлер менен айтқанда (M.1) ҳәм (M.2) қатнасларын] бир есаплау системасынан екинши есаплау системасына өткендеги түрлендириўлер деп қараўға болмайды, ал бир векторды екинши векторға түрлендириў деп қараў керек. Бул векторлардың екеўи де бир есаплау системасына тийисли болады. Тап усындан трактовканы нәзерде тутып түрлендириў формулаларын былайынша жазамыз:

$$b = Aa, \quad (\text{M.10})$$

$$a = A^{-1}b. \quad (\text{M.11})$$

Солай етип  $A$  матрикасын  $a$  векторына тәсир етип оны  $b$  векторына айландыратуғын сыйықлы оператор деп қараўымыз керек екен.

(M.10) ҳәм (M.11) түрлендириўлерин анық түрде жазамыз. Улыўмалырақ түрде мәселени шешиў ушын  $a$  ҳәм  $b$  векторларын үш өлшемли кеңисликте емес,  $n$  өлшемге ийе кеңисликте анықланған деп есаптаймыз. (M.1) ҳәм (M.2) аңлатпаларына сәйкес мыналарды аламыз:

$$b_i = \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} a_k \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (\text{M.12})$$

$$a_i = \sum_{k=1}^n \alpha'_{ik} b_k \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (\text{M.13})$$

Бул аңлатпаларда  $\alpha'_{ik}$  арқалы кери түрлендириў матрикасының элементтери белгиленген ( $A^{-1}$  матрикасының элементтери белгиленген). Ортогоналлық матрица ушын  $\alpha'_{ik} = \alpha_{ki}$ .

$A$  ҳәм  $A^{-1}$  матрикалары енді  $n$  қатарға ҳәм  $n$  бағанаға ийе болады. Мысалы

$$A = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & \alpha_{nn} \end{vmatrix}. \quad (\text{M.14})$$

(M.14) матрикасы квадрат матрица болып табылады. Бул матрицағы қатарлар саны бағаналар санына тең. Квадратлық матрикалар менен бир қатарда туўры мүйешли матрикалар да пайдаланылады. Оның қатарларының саны  $m$  бағаналар саны  $n$  ге тең емес:

---

<sup>1</sup> Улыўма айтқанда матрикалардың барлығы кери матрицаға ийе бола бермейди. Бундай матрикаларды айрықша ямаса айныған матрикалар деп атайды. Бирақ матрица ҳәтте айнымаған болса да оның кери матрикасы менен транспонирленген матрикасы бир бири менен сәйкес келмейи мүмкін.

$$A = A_{(m,n)} = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \dots & \alpha_{mn} \end{vmatrix} \quad (\text{M.15})$$

Матрицаның символындағы биринши индекс қатарлар санын, ал екиншиси бағаналар санын анықлады. Егер усындаған жағдайларда гүмән пайда етпейтуғын болса биз индекслерди жазбаймыз.

Солай етип улыўма жағдайда матрица деп туұры мүйешли кесте түринде жазылған  $m \times n$  элементлериниң жыйнағына айтады екенбиз. Функциялар ямаса басқа да шамалар матрицаның элементлери бола алады. Соныңтан сол шамалар үстинде алгебралық операциялар жүргизиў керек болады.  $m$  қатарға ҳәм  $n$  бағанаға ийе матрицаны  $(m \times n)$ -матрица ямаса  $m \times n$ -тәртипли матрица ямаса  $m \times n$  өлшемге ийе матрица деп атайды.  $m \times 1$  тәртипли матрицаны, яғни бир бағанаға ийе матрицаны гейде бағана деп те атайды. Ал  $1 \times n$ -тәртипли матрица бир қатардан туралы ҳәм соныңтан оны гейде тек қатар деп те атайды.

Егер  $A$  ҳәм  $B$  еки матрицаның сәйкес элементлери бир бирине тең болса яғни  $\alpha_{ik} = \beta_{ik}$  шәрти орынланса), онда матрицаларды бир бирине тең матрицалар ( $A = B$ ) деп атайды.

Егер  $A$  ҳәм  $B$  матрицалардың сәйкес элементлери  $\alpha_{ik} = -\beta_{ik}$  қатнасы арқалы байланысқан болса, онда бундай матрицалар бир биринен тек белгиси бойынша айырмаса ийе деп есаплайды ( $A = -B$ ).

(M.14) квадрат матрицасы (яғни  $m \times n$ -тәртипли матрица) (M.15) түриндеги матрицаның дара жағдайы болып табылады.  $n$  өлшемли кеңисликте векторды басқа векторды түрлендертуғын матрицаның квадрат матрица болыуының керек екенлеги айқын

Егер матрицаның элементлери

$$\alpha_{ik} = \alpha_{ki} \quad (\text{M.16})$$

шәртин қанаатландыратуғын болса, онда матрицаны симметриялы матрица деп атайды. Симметриялық матрицаның өзиниң транспонирленген матрицасы менен сәйкес келетуғынлығы түсиникли:

$$A_{\text{симм}} = \tilde{A}_{\text{симм}}. \quad (\text{M.17})$$

Элементлери

$$\alpha_{ik} = -\alpha_{ki} \quad (\text{M.18})$$

шәртин қанаатландыратуғын матрицаны антисимметриялық ямаса қыя симметриялы матрица деп атайды. Антисимметриялық матрица өзиниң транспонирленген матрицасынан белгиси бойынша ғана айралады:

$$A_{\text{антисимм}} = -\tilde{A}_{\text{антисимм}}. \quad (\text{M.19})$$

Тек диагоналлық элементлери нолге тең емес (яғни  $\alpha_{ik}$  элементлеридеги  $i$  ҳәм  $k$  индекслериниң мәнислери өз-ара тең) квадрат матрицаны диагоналлық матрица деп атайды. Диагоналлық матрица

$$A = \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{vmatrix} \quad (\text{M.20})$$

түринде жазылады. Бул матрицаның элементлерин ылайынша көрсетиўге болады:

$$\lambda_{ik} = \lambda_k \delta_{ik}. \quad (\text{M.21})$$

Бул аңлатпада  $\delta_{ik}$  арқалы Кронекер символы белгиленген [(VI. 12)-аңлатпаға қараңыз].

Егер координаталар системасын өзгертетуғын болсақ (яғни  $e_1, e_2, \dots, e_n$  базислерин өзгертетуғын болсақ), онда а ҳәм  $b$  векторларының қураўшылары да өзгереди [(M.10)-формулаға қараңыз]. Матрица-оператордың элементтери де өзгереди. Базы бир жағдайларда (егер  $A$  матрицасы симметриялық болса)  $A$  матрицасын диагоналлық матрицаға айланатуғындай етип базисти сайлап алыў да мүмкін.

Бир координаталар системасынан екинши координаталар системасына өткенде матрицаның элементтери өзгереди. Бирақ матрицаның изи деп аталауғын диагоналлық элементлердин суммасы өзгериссиз қалады ( $\text{Sp } A$  арқалы аңлатылады, немисше Spur сөзи из деген мәниссти береди). Солай етип матрицаның изи барлық координаталар системасында бирдей мәниске ийе, яғни инвариант болып табылады:

$$\text{Sp } A = \sum_i \alpha_{ii} = \text{inv}. \quad (\text{M.22})$$

Матрицаның анықлауышы да (определители де) өзгериссиз қалады:

$$\det ||\alpha_{ik}|| = \text{inv}. \quad (\text{M.23})$$

Егер  $E$  матрицасы менен  $a$  векторы көбейтилгенде

$$a = Ea$$

теңлиги орын алатуғын болса  $E$  матрицасын бирлик матрица деп атайды.

Бирлик матрицаның элементтериниң  $\delta_{ik}$  ға тең екенлигине аңсат көз жеткизиўге болады [(M.12)-аңлатпада  $\alpha_{ik} = \delta_{ik}$  деп есапланғанда  $b_i = a_i$  теңлигине алып келеди]. Солай етип

$$E = \|\delta_{ik}\| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (\text{M.24})$$

Бул матрицаның диагоналлық екенлигин атап өтемиз.

**Матрицалар алгебрасы.** Матрицалар өзиниң мәниси бойынша алгебралық объектлер болып, олардың үстинен қосыў, алыў ҳәм көбейтиў операцияларын орынлаў мүмкін (матрицаларды бөлиў операциясы деген операция болмайды).

А ҳәм  $B$  матрицаларының суммасы (қосындысы) деп  $\Gamma = A + B$  матрицасына айтамыз<sup>8</sup>. Бул матрицаның элементтери

<sup>8</sup> Үлайынша айттылады: «гамма» тең матрица «альфа» плюс матрица «бета» («B» арқалы грек алфавитиндеги ұлken «бета» ҳәрипи белгиленген, ал «Г» грек алфавитиндеги «гамма» ҳәрипин

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ik} + \beta_{ik}. \quad (\text{M.25})$$

Матрицалардың айырмасы  $\Gamma = A - B$  деп элементлери

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ik} - \beta_{ik} \quad (\text{M.26})$$

формуласы менен анықланатуғын  $\Gamma$  матрицасына айтамыз.

Солай етип операторлардың қосындысы да оператор болып табылады екен.

Тек ғана бирдей тәртипке ииे матрицаларды (яғни бирдей сандағы қатарларға ҳәм бирдей сандағы бағанаға ииे матрицаларды) бир бири менен қосыуға ямаса алғыуға болатуғынлығы анық.

$A$  матрицасының  $\eta$  скалярына көбеймеси деп элементлери

$$\beta_{ik} = \eta \alpha_{ik} \quad (\text{M.27})$$

болған  $B = \eta A$  матрицасына айтамыз.

Енди матрицаларды көбейтиүди қарауға өтемиз.  $A$  матрицасының  $a$  векторына тәсир етийиниң нәтийжесинде  $b$  векторы алынады деп есаптайық. Ал  $B$  матрицасы  $b$  векторына тәсир еткенде оны с векторына айландыратуғын болсын. А ҳәм  $B$  матрицаларының көбеймеси деп  $a$  векторын с векторына айландыратуғын  $\Gamma$  матрицасын түсениү тәбийий. Солай етип

$$\begin{aligned} b &= Aa, \text{ яғни } b_m = \sum_k \alpha_{mk} a_k, \\ C &= Bb = B\eta Aa, \text{ яғни } c_i = \sum_m \beta_{im} b_m = \sum_m \beta_{im} \sum_k \alpha_{mk} a_k = \sum_k a_k \sum_m \beta_{im} \alpha_{mk}. \end{aligned}$$

Екинши тәрептен

$$C = \Gamma a, \text{ яғни } c_i = \sum_k \gamma_{ik} a_k.$$

С ҳәм  $c_i$  ушын жазылған еки формуланы салыстырыў матрицаларды көбейтиүдин қағыйдасын береди:

$$\Gamma = BA \text{ көбеймеси } \gamma_{ik} = \sum_m \beta_{im} \alpha_{mk}. \quad (\text{M.28})$$

Бул қағыйдаға сәйкес тәмендеги операцияларды орынлаўымыз керек:  $\Gamma$  матрицасының  $i$ -қатары менен  $k$ -бағанасы кесилискең орында турған элементти алғы ушын  $B$  матрицасының  $i$ -қатарының ҳәр бир элементин  $A$  матрицасының  $k$ -бағанасының ҳәр бир элементи менен көбейтип, алынған көбеймелерди қосып шығыуымыз керек.

Улыўма айтқанда матрицаларды көбейтиў коммутативлик емес, яғни

$$BA \neq AB.$$

Ал

$$BA = AB \quad (\text{M.30})$$

шәрти орынланатуғын матрицаларды коммутацияланыуышы матриналар деп атайды.

бидиреди).

Матрикалардың көбеймесиниң ассоциативлик екенлигин аңсат көрсетиүгө болады:

$$(\Gamma B) A = \Gamma(BA). \quad (\text{M.31})$$

Демек В матрицасын дәслеп Г матрицасына көбейтип болып, көбеймени А ға көбейтsek алынған нәтийже А ҳәм В матрикаларын көбейтип болғаннан кейин алынған көбеймени Г матрицасына көбейткенде алынатуғын нәтийжеге тең болады екен. Ҳақыйқатында да матрикаларды бир бирине көбейтиў қағыйдасы бойынша:

$$\begin{aligned} \{(\Gamma B) A\}_{ik} &= \sum_m (\Gamma B)_{im} \alpha_{mk} = \sum_m \left( \sum_l \gamma_{il} \beta_{lm} \right) \alpha_{mk} = \\ &= \sum_l \gamma_{il} \left( \sum_m \beta_{lm} \alpha_{mk} \right) = \sum_l \gamma_{il} (BA)_{lk} = \{\Gamma(BA)\}_{ik} \end{aligned}$$

(турлендириўлердин барысында биз т ҳәм 1 индекслери бойынша суммалаў тәртибин өзгерттік). Солай етип (M.33) қәсийетиниң дұрыслығы дәлилләнді.

Бир бирине квадратлық емес матрикаларды (туұры мүйешли матрикаларды) да көбейтиў мүмкін. Бул жағдайда (M.29)-схемадан екинши матрицаның бағаналар саны менен биринши матрицаның қатарлар саны тең болыўының керек екенлиги келип шығады. Екинши матрицаның бағаналар саны қанша болса көбейме матрицаның қатарларының саны да соншама болады. Бул жағдайды келеси мысалда түсіндіремиз:

$$\begin{aligned} &\left\| \begin{array}{cccc} \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \dots & \beta_{nn} \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{ccc} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} \end{array} \right\| = \\ &= \left\| \begin{array}{ccc} \sum \beta_{1n} \alpha_{n1} & \sum \beta_{1n} \alpha_{n2} & \sum \beta_{1n} \alpha_{n3} \\ \sum \beta_{2n} \alpha_{n1} & \sum \beta_{2n} \alpha_{n2} & \sum \beta_{2n} \alpha_{n3} \\ \dots & \dots & \dots \\ \sum \beta_{nn} \alpha_{n1} & \sum \beta_{nn} \alpha_{n2} & \sum \beta_{nn} \alpha_{n3} \end{array} \right\|. \end{aligned}$$

Егер екинши матрица квадрат матрица болса, яғнай ՝  $n \times n$  тәртибине ийе, ал биринши матрица  $n$  элементине ийе тек бир бағанаға болса, онда матрица-көбейме  $n$  элементке ийе бир бағанадан турады:

$$\left\| \begin{array}{cccc} \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \dots & \beta_{nn} \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{c} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{array} \right\| = \left\| \begin{array}{c} \sum \beta_{1k} \alpha_k \\ \sum \beta_{2k} \alpha_k \\ \dots \\ \sum \beta_{nk} \alpha_k \end{array} \right\|. \quad (\text{M.32})$$

Бир бағанаға ийе матрицаны бир қатарға ийе матрицаға көбейткенде тек бир сан алынады (егер матрицаның элементлери функциялар болатуғын болса функция алынады):

$$\left\| \begin{array}{cccc} \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_n \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{c} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{array} \right\| = \sum_k \beta_k \alpha_k. \quad (\text{M.33})$$

Мысалы дара жағдайда  $\|\beta\|$  матрицасының орнына транспонирленген  $\|\alpha\|$  матрицасын алсақ, онда (M.33)-аңлатпа

$$\|\alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \dots \quad \alpha_n\| \begin{vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{vmatrix} = \sum_k \alpha_k^2$$

түрине енеди. Демек тек бир бағанаға ийе  $A_{(n,1)}$  матрицасы ушын

$$\tilde{A}_{(n,1)} A_{(n,1)} = \sum_{k=1}^n \alpha_k^2 \quad (\text{M.34})$$

аңлатпасы орынлы болады.

Егер бир бағанаға ийе матрицаның элементи сыпатында вектордың кураўшыларын, ал квадрат матрица сыпатында А матрица-операторын алатуғын болсақ, онда (M.32)-аңлатпа

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{vmatrix} \quad (\text{M.35})$$

түрине енеди. Бул аңлатпада  $b_i = \sum_i \alpha_{ik} a_k$  [(M.12)-аңлатпа менен салыстырыңыз]. (M.35) аңлатпасының (M.10)-аңлатпа менен эквивалент екенлигин аңсат аңғарыўға болады. Демек векторды бир бағанаға ийе матрица түринде көрсетиүге болады екен.

Е бирлик матрицасының ықтыйярлы А матрицасына көбеймесин қараймыз. (M.28)-қағыйда бойынша

$$(AE)_{ik} = \sum_i A_{im} \delta_{mk}$$

аңлатпасын жазамыз ( $\delta_{mk}$  шамалары Е матрицасының элементлери болып табылады). Бул суммада тек  $m = k$  шәрти орынланатуғын қосылыўшы нолге тең болмайды. Демек  $(AE)_{ik} = (A)_{ik}$ . Тап сол сыйқлы

$$(EA)_{ik} = \sum_i \delta_{im} A_{mk} = (A)_{ik}.$$

Жоқарыда айтылғанлардан бирлик матрицаға көбейткенде А матрицасының өзгөрмейтуғынлығы келип шығады:

$$EA = AE = A. \quad (\text{M.36})$$

Соңғы жазылған аңлатпа бирлик матрицаның қәлеген А матрицасы менен коммутацияланатуғынлығы (орынларын алмастырыўға болатуғынлығы) келип шығады.

Қандай да бир векторға дәслеп А түрлендириўин қоллансақ ҳәм буннан кейин оған кери болған  $A^{-1}$  түрлендириўин қоллансақ, бизин дәслепки векторға қайтып келетуғынлығымыз анық

$$a = A^{-1}Aa. \quad (\text{M.37})$$

Буннан туұры ҳәм кери матрикалардың көбеймесиниң бирлік матрицаға тең болатуғының көремиз:  $A^{-1}A = E^9$ . Соның менен бирге туұры ҳәм кери матрикалардың көбеймелері коммутативлик екенлиги (коммутацияланатуғының) айқын болады:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = E. \quad (\text{M.38})$$

А ҳәм  $A^{-1}$  матрикаларының көбеймесин (M.28)-формула бойынша жазсақ туұры ҳәм кери матрикалардың элементтери арасындағы байланысты табамыз:

$$\sum_m \alpha'_{im} \alpha_{mk} = \sum_m \alpha_{im} \alpha'_{mk} = \delta_{ik}. \quad (\text{M.39})$$

Ортогоналлық матрица ушын [яғнай (M.8)-шартты қанаатландыратуғын матрица ушын]  $\alpha'_{ik} = \alpha_{ki}$  [(M.6)-аңлатпаға қараңыз]. (M.39)-аңлатпада тап усындаі алмастырыуды орынласақ

$$\sum_m \alpha_{ml} \alpha_{mk} = \delta_{ik}, \quad (\text{M.40})$$

$$\sum_m \alpha_{lm} \alpha_{km} = \delta_{ik} \quad (\text{M.41})$$

формулаларына ийе боламыз. Солай етип ортогоналлық матрицаның элементтери (M.39)- ҳәм (M.40)-қатнасларды қанаатландырады екен.

Енди операторларды матрикалар түринде көрсетиў мәселесине қайтып келемиз.

$$f = \widehat{Q}\varphi \quad (1.9.1)$$

теңлемесин матрикалық формада жазыўға болады. Буның ушын  $f$  ҳәм  $\varphi$  функцияларын базы бир жәрдемши  $\widehat{R}$  операторының меншикли функциялары болған  $\psi_k^{(r)}$  функциялары бойынша қатарға жаямыз, соның менен бирге  $\psi_k^{(r)}$  функцияларын ортонормировканған деп есаптаймыз. Яғнай

$$\langle \psi_m^{(r)} | \psi_n^{(r)} \rangle = \delta_{mn}. \quad (1.9.2)$$

Солай етип

$$\varphi = \sum_n a_n \psi_n^{(r)}, \quad (1.9.3)$$

$$f = \sum_k b_k \psi_k^{(r)}. \quad (1.9.4)$$

Бул аңлатпаларда

---

<sup>9</sup> Бул аңлатпадан кери матрицаны белгилеў ушын қолланылатуғын  $A^{-1}$  белгилеўинин мәниси аңсат түсіндіриледи ( $E = \text{«бир»}$  деген мәнисти береди).

$$a_n = \langle \psi_n^{(r)} | \varphi \rangle, b_k = \langle \psi_k^{(r)} | f \rangle \quad (1.9.5)$$

[(1.7.11)-формулаға қараңыз].

$\psi_m^{(r)}$  функцияларын белгилеп сайладап алғанда  $\varphi$  функциясы  $a_n$  коэффициентлердин жыйнағы арқалы, ал  $f$  функциясы  $b_k$  коэффициентлерининжыйнағы менен анықланады. Соныңтан, айтайдық,  $\varphi$  функциясын (яғни  $1 \times \infty$  тәртибидеги матрицаны) былайынша

$$\varphi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (1.9.6)$$

ямаса төмендегидей қатар (яғни  $1 \times \infty$  түриндеги матрица) түринде жаза аламыз<sup>10</sup>:

$$\varphi = (a_1 a_2 \dots a_n \dots). \quad (1.9.7)$$

Тап сол сияқты таллаўлар  $f$  функциясы ушын да дұрыс.

(1.9.3)- ҳәм (1.9.4)-қатарларды (1.9.1)-теңлемеге қойсақ,  $a_n$  ҳәм  $b_k$  коэффициентлері тек сан болғанлықтан  $\widehat{Q}$  операторына тәсир етпейтуынлығын есапқа алсақ

$$\sum_k b_k \psi_k^{(r)} = \sum_n a_n \widehat{Q} \psi_n^{(r)} \quad (1.9.8)$$

теңлигине ийе боламыз. Бул теңликтин еки тәрепин де  $\psi_m^{(r)}$  функцияларына скаляр көбейтемиз:

$$\sum_k b_k \langle \psi_m^{(r)} | \psi_k^{(r)} \rangle = \sum_k a_n \langle \psi_m^{(r)} | \widehat{Q} \psi_n^{(r)} \rangle. \quad (1.9.9)$$

(1.9.2)-формулаға сәйкес  $b_k$  ның алдында турған коэффициенти  $\delta_{mk}$  ға тең. Соныңтан шеп тәрепте турған сумма  $b_m$  ге тең ҳәм биз

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n \quad (1.9.8)$$

аңлатпасына келемиз. Бул аңлатпада  $Q_{mn}$  символы арқалы

$$Q_{mn} = \langle \psi_m^{(r)} | \widehat{Q} \psi_n^{(r)} \rangle = \int (\psi_m^{(r)})^* \widehat{Q} \psi_n^{(r)} dV \quad (1.9.9)$$

---

<sup>10</sup> Тап сол сияқты берилген базисте (яғни ек ортлары системасында) а векторы оның кураушылары болған  $a_k$  санларының жыйнағы менен анықланады.

аңлатпасы белгиленген.

(1.9.1)-теңлеме  $\varphi$  функциясының  $f$  функциясына түрлендириүге жәрдем беретуғын қағыйданы анықтайты. Ал (1.9.8)-теңлеме болса  $a_n$  коэффициентлериниң жыйнағын (бул коэффициентлер жыйнағы  $\varphi$  функциясын береди)  $b_m$  (бул коэффициентлер жыйнағы болса  $f$  функциясын береди) коэффициентлері жыйнағына түрлендириудиң қағыйдасын анықтайты. Демек (1.9.8)-теңлеме (1.9.1)-теңлемениң басқа формадағы жазылыуы екен.  $a_n$  коэффициентлері бул формулада  $\varphi$  функциясын береди, ал  $b_m$  коэффициентлері  $f$  функциясын береди.  $Q_{mn}$  шамаларының жыйнағы  $\hat{Q}$  операторы болып табылады. Бул жыйнақ бағаналары менен қатарларының саны шексиз үлкен болған квадрат матрица түринде жазылады:

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1n} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2n} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{m1} & Q_{m2} & \cdots & Q_{mn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \quad (1.9.10)$$

$f$  ҳәм  $\varphi$  функциялары арасындағы матрицалық қатнасқа сырттан қарағанда (1.9.1)-теңлемеге уқсас форма бериүге болады. Буның ушын

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b \\ \cdots \\ b_m \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & Q_{mn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} \quad (1.9.11)$$

аңлатпасының [бул аңлатпаның оң тәрепинде еки матрицаның көбеймеси тур] (1.9.8)-формулаға эквивалент екенligин көрсетемиз.

Матрицаны матрицаға көбейтирудиң қағыйдасы бойынша [(M.28)-формула] Г ҳәм А матрикалары бир бирине көбейтилгенде ( $B = GA$ ) алынған В матрицасының  $\beta_{mk}$  элементтері  $\gamma_{mn}$  ҳәм  $\alpha_{nk}$  элементтері арқалы байланынша есапланады

$$\beta_{mk} = \sum_n \gamma_{mn} \alpha_{nk}. \quad (1.9.12)$$

Егер А матрицасы элементтері  $\alpha_{n1} = \alpha_n$  болған тек бир бағанаға ийе болса (1.9.12)-формула В матрицасының элементтері ушын  $\beta_{m1} = \sum_n \gamma_{mn} \alpha_n$  мәнислерин берди. Демек көбейме-матрица да элементтері  $\beta_{m1} = b_m$  болған бағана болып табылады екен. Соның менен бирге

$$\beta_m = \sum_n \gamma_{mn} \alpha_n. \quad (1.9.13)$$

$\alpha_n, \gamma_{mn}$  ҳәм  $\beta_m$  шамаларының орнына сәйкес  $a_n, Q_{mn}$  ҳәм  $b_m$  шамаларын алып биз (1.9.8)-аңлатпаға келемиз. Солай етип (1.9.11)-матрицалық жазыўдың дурыс екенлиги дәлилленеди.

Солай етип  $\hat{Q}$  операторын (1.9.10)-матрица түринде жазыў мүмкін екен. Бул матрицаның элементтери (1.9.9)-формула бойынша есапланады. Бул элементтер «базисти» сайлап алышудан ғәрзели. Яғни олардың мәнислері меншикли функциялары  $\varphi$  ҳәм  $f$  функцияларын қатарға жайыў ушын қолланылатуғын

қосымша  $\hat{R}$  операторынан ғәрэзли.  $\varphi$  ҳәм  $f$  функцияларын қатарға жайыў коэффициентлериниң мәнислери де  $\hat{R}$  операторын сайлаап алышудан ғәрэзли.  $a_n$  коэффициентлериниң жыйнағы,  $b_m$  коэффициентлериниң жыйнағы ҳәм  $Q_{mn}$  матрицасы ҳаққында гәп еткенде  $r$ -көринисте алышған  $\varphi$  функциясы,  $f$  функциясы ҳәм  $\hat{Q}$  операторы нәзерде тутылады. Егер  $\hat{R}$  координата операторы болса, онда функциялардың ҳәм оператордың координаталық көриниси ҳаққында айтылады. Егер  $\hat{R}$  импульс операторы болып табылатуғын болса импульслик көринис алышады ҳәм тағы басқалар. Қәлеген қатнасқа кириўши барлық операторлар менен функцияларды бирдей көринисте алыш керек.

Егер (1.9.9)-формулада  $\Psi_k$  функциясы сыпатында  $\hat{Q}$  операторының өзиниң меншикли функциялары  $\Psi_k^{(q)}$  алышатуғын болса, онда өзиниң меншикли көринисинде оператор алышады. Бул жағдайда (1.9.9)-формуланың жәрдеминде матрицалық элементлерди есаплаү ушын пайдаланылатуғын функциялардың  $\hat{Q}\Psi_n = q_n \Psi_n$  теңлемесин қанаатландырыуы ушын тәмендегидей әпиўайыластырыў орын алады:

$$Q_{mn} = \langle \Psi_m^{(q)} | \hat{Q} \Psi_n^{(q)} \rangle \langle \Psi_m^{(q)} | q_n \Psi_n^{(q)} \rangle = q_n \varphi_{mn}. \quad (1.9.14)$$

Алышған нәтийжелер мынаны аңғартады: оператордың матрицасы өзиниң меншикли көринисинде диагоналлық оператор болып табылады, диагоналлық элементлер оператордың меншикли мәнислерине сәйкес келеди:

$$(Q_{mn}) = \begin{pmatrix} q_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & q_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & q_3 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \quad (1.9.15)$$

Егер  $\hat{Q}$  операторы өзиниң меншикли көринисинде алышған болса ( $\varphi$  ҳәм  $f$  функциялары да  $q$ -көринисинде алышған) (1.9.8)-аңлатпа тәмендегидей болып әпиўайыласады:

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n = \sum_n q_{mn} \delta_{mn} a_n = q_m a_m. \quad (1.9.16)$$

Бул нәтийже мыналарды аңлатады:  $b_m$  коэффициентлери  $a_m$  коэффициентлерин өзиниң меншикли көринисинде операторды анықтайтуғын диагоналлық матрицының сәйкес диагоналлық элементине көбейтий арқалы алышады.

(1.9.1)-теңлемеде  $\varphi$  сыпатында  $\hat{R}$  операторының  $\Psi_k^{(r)}$  меншикли функциясын аламыз:

$$f = \hat{Q} \Psi_k^{(r)}. \quad (1.9.17)$$

Бундай жағдайда (1.9.2) менен (1.9.5) ке сәйкес  $a_n = \delta_{nk}$ . Бул мәнисти (1.9.8)-аңлатпаға қойып

$$b_m = \sum_n Q_{mn} = Q_{mk}$$

формуласын аламыз. Демек (1.9.4) аңлатпасын есапқа алған ҳалда (1.9.17)-

функцияны былайынша жазыўға болады екен:

$$\hat{Q}\Psi_k^{(r)} = \sum_m O_{mk}^{(r)}\Psi_m^{(r)} \quad (1.9.18)$$

(биз матрицалық элементте оның  $r$  көринисинде есапланғанлығын көрсетиў ушын жоқарыда ( $r$ ) индексин жаздық).

(1.9.18)-қатнасты былайынша трактовкалаў мүмкин:  $|O_{mk}|^2$  шамасы ҳалы  $\hat{Q}\Psi_k^{(r)}$  функциясы менен тәрийипленетуғын системаның  $\Psi_m^{(r)}$  ҳалында турыўының итималлығын анықтайты. Басқа сөзлер менен айтқанда  $|O_{mk}|^2$  шамасы  $\hat{Q}$  операторы менен тәрийипленетуғын тәсирдиң астында системаның  $\Psi_k^{(r)}$  ҳалынан  $\Psi_m^{(r)}$  ҳалына өтийиниң итималлығын береди. Усы жағдайға сәйкес  $O_{mk}$  шамасын  $k$  ҳалынан  $m$  ҳалына өтийдин матрицалық элементи деп атайды.

Матрицаларға тийисли болған бир неше анықламаларды келтиремиз. Егер

$$(\tilde{A})_{mn} = A_{mn} \quad (1.9.19)$$

шәрти орынланатуғын болса, онда  $\tilde{A}$  матрицасын  $A$  матрицасына қатнасы бойынша транспонирленген деп атайды.

Солай етип транспонирленген матрица дәслепки матрицадан қатарларды бағаналар менен алмастырыў жолы менен алынады.

Элементлери  $A$  матрицасының элементлери менен комплексли түйинлес болған  $A^*$  матрицасын  $A$  матрицасы менен комплексли түйинлес матрица деп атайды. Олар ушын төмендегидей теңлик орын алады:

$$(A^*)_{mn} = (A_{mn})^*. \quad (1.9.20)$$

$A$  матрицасына эрмитлик түйинлес матрица деп

$$A_{mn}^+ = (\tilde{A}_{mn})^* = A_{mn}^* \quad (1.9.21)$$

қағыйдасы менен анықланатуғын  $A^+$  матрицасына айтамыз.

Демек  $A^+$  матрицасы  $A$  матрицасынан транспонирлеў ҳәм комплекс түйинлеслеў операцияларын избе-из орынлаў жолы менен алынады екен. (1.9.21)-аңлатпа эрмитлик түйинлес операторды анықтайтуғын (1.8.7)-аңлатпаға сәйкес келеди.

Ең ақырында

$$A_{mn} = A_{mn}^* = A_{mn}^+ \quad (1.9.22)$$

шәртин қанаатландыратуғын  $A_{mn}$  матрицасын өзи өзине түйинлес ямаса эрмитлик деп аталады [(1.8.9)- ҳәм (1.8.10)-аңлатпаларды салыстырыңыз]. Солай етип эрмитлик матрица жағдайында транспонирленген матрицаның элементлери дәслепки матрицаның комплексли түйинлес элементлерине сәйкес келеди.

Эрмитлик түйинлес матрицаның анықламасы болған (1.9.21)-аңлатпаның эрмитлик түйинлес оператордың (1.8.7)-анықламасына сәйкес келетуғынлығын көрсетемиз. (1.9.9)-, (1.8.7)- ҳәм (1.8.3)-аңлатпаларға сәйкес

$$A_{mn}^+ = \langle \psi_m | \psi_n \hat{A}^+ \rangle = \langle \psi_n \hat{A}^+ | \psi_m \rangle^* = \langle \psi_n | \hat{A}^+ \psi_m \rangle^* = A_{nm}^*.$$

Демек дәслепки анықлама сыптында (1.8.7)-анықламаны алғып биз (1.9.21)-анықламаға келдик.

Еки функцияның скаляр көбеймеси болған  $\langle \varphi | \psi \rangle$  көбеймесине эквивалент болған матрицалық аңлатпаны табамыз. Бул функцияларды базы бир  $\hat{R}$  операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз:

$$\varphi = \sum_m a_m \psi_m, \quad \psi = \sum_n b_n \psi_n.$$

Бул аңлатпаларды (1.7.9)-аңлатпаға қойсақ

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \left\langle \sum_m a_m \psi_m \mid \sum_n b_n \psi_n \right\rangle = \sum_{m,n} a_m^* b_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \\ &= \sum_{m,n} a_m^* b_n \delta_{mn} = \sum_n a_m^* b_n \end{aligned} \tag{1.9.23}$$

аңлатпаларын аламыз [(1.7.10)-аңлатпаға қараңыз].

$r$  – көринисинде  $\varphi$  ҳәм  $\psi$  функциялары

$$\varphi \sim A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi \sim B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

матрикалары менен анықланады. (1.9.23)-аңлатпаны алғыу ушын  $A^+$  ҳәм  $B$  матрикаларын бир бирине көбейтиү керек. Ҳақыйқатында да матрикаларды көбейтиү қағыйдасы бойынша

$$(a_1^* \quad a_2^* \quad \dots) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n a_n^* b_n.$$

Солай етип биз

$$\langle \varphi | \psi \rangle = A^+ B \tag{1.9.24}$$

формуласына келдик. (1.7.7)-формуладағы интеграл белгисиниң астындағы  $\varphi$  комплексли түйинлес функцияға (1.9.24)-формуладағы эрмитлик түйинлес матрица сәйкес келеди.

$Q$  шамасының орташа мәниси ушын матрицалық аңлатпаны табамыз. Бұның ушын биз қарап атырған ҳалдың пси-функциясын базы бир  $\hat{R}$  операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз. (яғни  $r$  – көринисиндеғи пси-функциясын аламыз):  $\psi = \sum c_k \psi_k^{(r)}$  ҳәм бул аңлатпаны (1.7.14)-формулаға қоямыз:

$$\langle q \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \mid \hat{Q} \sum_n c_n \psi_n \right\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle \psi_m | \hat{Q} \psi_n \rangle.$$

$\langle \psi_m | \hat{Q} \psi_n \rangle$  аңлатпасы  $\hat{Q}$  операторының  $r$  – көринисиндеғи матрицалық элементи болып табылады. Демек

$$\langle q \rangle = \sum_{n,m} c_m^* Q_{mn} c_n \quad (1.9.25)$$

формуласын аламыз. Бул формула (1.7.14)-формуланың матрицалық аналогы болып табылады.

Егер  $\hat{Q}$  операторын меншикли көринисинде алсақ (бундай жағдайда пси-функцияны -көринисинде алтың керек болады) матрицалық элементлер  $Q_{mn} = q_n \delta_{mn}$  ге тең болады [(1.9.14)-аңлатпаға қараңыз]. Соныңтан (1.9.25)-формула (1.7.12)-формулаға сәйкес келетуғын

$$\langle q \rangle = \sum_{n,m} c_m^* q_n \delta_{mn} c_n = \sum_{n,m} c_m^* q_n c_m$$

формулаға айланады.

Ақырында  $\hat{Q}\psi = q\psi$  теңлемесин матрицалық түрде шешиүге бола ма? деген мәселеге айқынлық киргиземиз [яғни  $-$ -көринисиндеги  $Q_{mn}$  матрицасын билген ҳалда  $Q$  шамасының  $q_n$  меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын ( $r$ -көринисиндеги) табыў менен шуғылланамыз]. Теңлемеге  $\psi(x)$  тың орнына  $\hat{R}$  операторының меншикли функциялары бойынша жайылған қатардың  $\psi_n(x)$  функцияларын қоямыз:

$$\sum_n c_n \hat{Q}\psi_n(x) = q \sum_n c_n \psi_n(x).$$

Бул аңлатпаны  $\psi_m(x)$  функцияларына скаляр көбейтемиз:

$$\sum_n c_n \langle \psi_m | \hat{Q}\psi_n \rangle = q \sum_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle$$

Шеп тәрептеги  $c_n$  көбейтишиси  $Q_{mn}$  шамаларының өзи болып табылады ( $Q_{mn}$  шамаларының -көринисиндеги  $\hat{Q}$  операторының матрицалық элементи екенлигин аңғарамыз). Демек

$$\sum_n c_n Q_{mn} = q \sum_n c_n \delta_{mn} = qc_m. \quad (1.9.26)$$

(1.9.26)-аңлатпада  $m = 1, 2, \dots$  мәнислерин қойыў жолы менен биз шексиз көп санлы  $c_1, c_2, \dots$  белгисизлерине ииे сызықлы бир текли теңлемелер системасын аламыз ( $Q_{mn}$  шамалары берилген деп есаптаймыз):

$$\begin{aligned} (Q_{11} - q)c_1 + Q_{12}c_2 + \dots + Q_{1m}c_m + \dots &= 0, \\ Q_{21}c_1 + (Q_{11} - q)c_2 + \dots + Q_{2m}c_m + \dots &= 0, \\ &\dots \\ Q_{m1}c_1 + Q_{m2}c_2 + \dots + (Q_{mm} - q)c_m + \dots &= 0. \\ &\dots \end{aligned} \quad (1.9.27)$$

1-томның VII-қосымшасында егер анықлаўшысы нолге тең болса ғана бир текли сызықлы теңлемелер системасының нолге тең емес шешимлериниң болатуғынлығы атап өтилген еди:

$$\begin{vmatrix} Q_{11} - q & Q_{12} & \dots & Q_{1m} & \dots \\ Q_{21} & Q_{22} - q & \dots & Q_{2m} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ Q_{mq} & Q_{m2} & \dots & Q_{mm} - 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0. \quad (1.9.28)$$

(1.9.28)-аңлатпа белгисиз  $q$  шамасының шексиз үлкен дәрежеси ушын жазылған аңлатпа болып табылады. Оны шекли болған N дана қатар ҳәм бағана ушын (1.9.28) түріндеги аңлатпаның  $N \rightarrow \infty$  шегіндеги аңлатпа сырттында қарауға болады. Әлбетте (1.9.28)-аңлатпа бундай шек болған бар жағдайда ғана мәниске ийе бола алады.

(1.9.28)-теңлеме шексиз көп санлы  $q_1, q_2, \dots, q_m, \dots$  түбірлерге ийе болады. Бул түбірлердин барлығы  $\psi(x)$  ты  $r$ -көринисинде (бундай көринисте  $Q_{mn}$  берилген) анықлайтуғын  $c_1, c_2, \dots, c_m, \dots$  коэффициентлериниң ноллик емес болған мәнислери алынатуғын  $q$  шамаларының мәнислери болып табылады. Демек (1.9.28)-теңлемениң түбірлері  $Q$  шамасының меншикли мәнислери болып табылады екен.

(1.9.27)-системаға  $q = q_1$  мәнисин қойып ҳәм оны  $c_n$  белгисизине қаратса шешип  $q = q_1$  теңлигине сәйкес келетуғын  $\hat{Q}$  операторының меншикли функциясын анықлады. (1.9.27)-теңлемелер системасына  $q = q_2$  мәнисин қойып екинши меншикли функцияны анықлайтуғын коэффициентлер жыйнағын табамыз. Бундай операцияларды шексиз даўам ете бериү мүмкін. Солай етип  $Q_{mn}$  матрицасы менен берилген  $\hat{Q}$  операторының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыу мәселеси шешиледи.

Егер  $Q_{mn}$  матрицасы өзиниң меншикли көринисинде анықланған болса матрицаның барлық диагоналлық емес элементлери нолге тең болады ҳәм (1.9.28)-теңлеме мынадай түрге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} Q_{11} - q & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & Q_{22} - q & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & Q_{mm} - 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0.$$

Бул теңлемениң түбірлериниң  $q_1 = Q_{11}, q_2 = Q_{22}, \dots$  шамаларына тең екенлиги айқын. Демек биз белгилі болған нәтийжеге қайта келемиз: өзиниң меншикли көринисинде жазылған матрицаның диагоналлық элементлери бул шаманың меншикли мәнислерине тең.

Солай етип  $Q_{mn}$  матрицасын өзиниң меншикли көринисине алып келиү ушын (1.9.28)-теңлемедей теңлеме дүзиү ҳәм оның түбірлерин табыу керек. Диагоналлық түрге алып келинген матрицада бул түбірлер матрицаның элементлери болып табылады [(1.9.15)-аңлатпаға қараңыз].

Коммутацияланатуғын операторлар меншикли функциялардың улыўмалық системасына ийе болады (бул ҳаққында келеси параграфта толығырақ айтылады). Демек олардың матрикаларын бир ўақытта диагоналлық түрге алып келиү мүмкін екен.

## 1-10. Операторлар алгебрасы

Сызықлы операторларды бир бирине қосыу ҳәм бир бирине көбейтиү мүмкін. Буннан былай биз сөзлерди жийи қайталамаү ушын «сзызықлы» сөзин пайдаланбаймыз. Бирақ барлық ўақытта да сзызықлы оператор нәзерде тутылады.

$\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторларының суммасы  $\widehat{C} = \widehat{A} + \widehat{B}$  деп

$$\widehat{C}\varphi = (\widehat{A} + \widehat{B})\varphi = \widehat{A}\varphi + \widehat{B}\varphi \quad (1.10.1)$$

шәрти менен анықланатуғын операторға айтамыз. (1.10.1)-аңлатпаны (1.9.9)-аңлатпаға қойып  $\widehat{A}$ ,  $\widehat{B}$  ҳәм  $\widehat{C}$  операторлары арасындағы матрицалық формадағы байланысты анықтаймыз

$$C_{mn} = A_{nm} + B_{mn}. \quad (1.10.2)$$

Бул аңлатпа матрикаларды қосыў қағыйдасына сәйкес келеди [(М.25)-формулаға қараңыз].

$\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторларының көбеймеси деп

$$\widehat{R}\varphi = (\widehat{A} \widehat{B})\varphi = \widehat{A}(\widehat{B}\varphi) \quad (1.10.3)$$

шәртин қанаатландыратуғын  $\widehat{R} = \widehat{A} \widehat{B}$  операторына айтамыз ( $\widehat{R}\varphi$  функциясын табыў ушын дәслеп  $\widehat{B}\varphi$  функциясын табыў керек, буннан кейин бул табылған функцияға  $\widehat{A}$  операторы менен тәсир етемиз. (1.9.8)-формулаға сәйкес

$$K_{mn} = \langle \Psi_m | \widehat{A} \widehat{B} \Psi_n \rangle = \langle \Psi_m | \widehat{A}(\widehat{B}\Psi_n) \rangle. \quad (1.10.4)$$

Бул аңлатпада  $\Psi_k$  арқалы  $\widehat{R}$  операторының меншикли функциясы белгиленген.

$\widehat{B}\Psi_n$  функциясын басқа қәлеген функция сыяқлы сол  $\widehat{R}$  операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жайыўға болады (яғни  $\widehat{B}\Psi_n = \sum c_k \Psi_k$  түринде).  $c_k$  коэффициентлері ушын (1.7.11)-формула бойынша  $c_k = \langle \Psi_k | \widehat{B}\Psi_n \rangle$  шамасы алынады. Соңғы аңлатпа  $\Gamma$ -көринисиндеги  $\widehat{B}$  операторының  $B_{kn}$  матрицалық элементи болып табылады. Демек

$$\widehat{B}\Psi_n = \sum_k B_{kn} \Psi_k. \quad (1.10.5)$$

(1.10.5)-аңлатпаны (1.10.4)-аңлатпаға қойыў мынаны береди

$$K_{mn} = \langle \Psi_m | \widehat{A} \sum_k B_{kn} \Psi_k \rangle = \sum_k B_{kn} \langle \Psi_m | \widehat{A} \Psi_k \rangle = \sum_k B_{kn} A_{mk}.$$

Ең ақырында көбейтиўшилердин орынларын алмастырып

$$K_{mn} = \sum_k A_{mk} B_{kn} \quad (1.10.6)$$

формуласына келемиз. Бул формула матрикаларды бир бирине көбейтиў қағыйдасын қанаатландырады.

Операторлардың көбеймесинин анықламасы бойынша оператордың квадраты  $\widehat{Q}^2$  дегенимизде  $\widehat{Q}$  операторы функциясына еки рет тәсир етиўди түсинемиз:

$$\widehat{Q}^2\varphi = \widehat{Q}(\widehat{Q}\varphi). \quad (1.10.7)$$

Тап усындај жоллар менен оператордың жоқары дәрежелери де анықланады

$\hat{K} = \hat{A}\hat{B}$  операторлардың көбеймеси менен транспонирленген операторды табамыз. Транспонирленген оператордың анықламасын ҳәм еки функцияның скаляр кобеймесиниң (1.7.8)-қәсийетин пайдаланып төмендегидей түрлендириўлер дизбегин жаза аламыз:

$$\begin{aligned}\langle \psi | \tilde{A}\tilde{B}\psi \rangle &= \langle (\tilde{B}\psi)^* | \tilde{A}\psi^* \rangle = \langle \tilde{A}\psi^* | (\tilde{B}\psi)^* \rangle = \\ \langle (\tilde{A}\psi^*)^* | \tilde{B}\psi \rangle &= \langle \psi^* | \tilde{B}(\tilde{A}\psi^*) \rangle \langle \psi^* | \tilde{B}\tilde{A}\psi^* \rangle.\end{aligned}$$

Усының менен бир қатарда анықлама бойынша

$$\langle \psi | \hat{K}\psi \rangle = \langle \psi^* | \tilde{K}\psi^* \rangle.$$

Алынған нәтийжелерди бир бири менен салыстырсақ

$$\hat{A}\hat{B} = \tilde{B}\tilde{A} \quad (1.10.8)$$

теңлигине ииे боламыз ҳәм еки оператордың көбеймесине транспонирленген оператор кери тәртипте алынған транспонирленген көбейтишілердин көбеймесине тең екенлигин коремиз.

Транспонирленген матрикалар ушын да тап сондай қатнаслар орын алады. (1.10.6)-аңлатпаға сәйкес  $A$  ҳәм  $B$  матрикаларының  $AB$  көбеймесиниң матрикалық элементи  $(AB)_{mn} = \sum_k A_{mk}B_{kn}$  формуласының жәрдеминде анықланады. (1.9.19)-аңлатпаны пайдаланып

$$\begin{aligned}(\hat{A}\hat{B})_{mn} &= (AB)_{mn} = \\ = \sum_k A_{nk}B_{km} &= \sum_k \tilde{A}_{kn}\tilde{B}_{mk} = \sum_k \tilde{B}_{mk}\tilde{A}_{kn} = (\tilde{B}\tilde{A})_{mn}\end{aligned}$$

аңлатпасын жазамыз. Буннан

$$\hat{A}\hat{B} = \tilde{A}\tilde{B} \quad (1.10.9)$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын көремиз

(1.8.6)-формулаға сәйкес

$$(\hat{A}\hat{B}\varphi)^* = (\hat{A}\hat{B})^*\varphi^*.$$

Усының менен бир қатарда

$$(\hat{A}\hat{B}\varphi)^* = [\hat{A}(\hat{B}\varphi)]^* = \hat{A}^*(\hat{B}\varphi)^* = \hat{A}^*\hat{B}^*\varphi^*.$$

Бул аңлатпаларды бир бири менен салыстырыудан

$$(\hat{A}\hat{B})^* = \hat{A}^*\hat{B}^*. \quad (1.10.10)$$

аңлатпасы алынады.

Енди  $\hat{A}\hat{B}$  операторы менен эрмитлик түйинлес операторды табамыз.  $\hat{A}\hat{B}$  операторын бир оператор деп қарап (1.8.5)-аңлатпаны

$$\langle \varphi | \hat{A}\hat{B}\psi \rangle = \langle \varphi(\hat{A}\hat{B})^+ | \psi \rangle$$

түринде жазамыз. Егер  $\hat{A}\hat{B}\varphi = \hat{A}(\hat{B}\varphi)$  екенлигин есапқа алсақ, онда

$$\langle \varphi | \hat{A}\hat{B}\psi \rangle = \langle \varphi \hat{A}^+ | \hat{B}\psi \rangle = \langle (\varphi \hat{A}^+) \hat{B}^+ | \psi \rangle = \langle \varphi \hat{A}^+ \hat{B}^+ | \psi \rangle$$

аңлатпасын жазамыз. Бул аңлатпалардың екеүин де салыстырыў

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{A}^+ \hat{B}^+. \quad (1.10.11)$$

қатнасын береди.

Алынған нәтийже мыналарды билдиреди: түйинлеслик пайда етилгенге шекем функцияға  $\hat{B}$  операторы менен тәсир етеди, ал буннан кейин алынған нәтийжеге  $\hat{A}$  операторы менен тәсир етеди. Түйинлеслик пайда етилгеннен кейин функцияға даслеп  $\hat{A}$  операторы менен тәсир етеди. Буннан кейин алынған нәтийжеге  $\hat{B}$  операторы менен тәсир етиў керек. Демек түйинлеслик  $\hat{A}$  ҳәм  $\hat{B}$  операторларының тәсир етийиниң избе-излигин өзгертеуди екен. Бул жағдай көбейтиштердиң саны екіден артық болған жағдайлар ушын да дұрыс.

$\hat{C}\hat{Q}$  түриндеги операторды аламыз. Бул жерде  $\hat{C}$  операторы тек  $c$  санына көбейтиў болсын. (1.10.11)-аңлатпаға сәйкес  $(\hat{C}\hat{Q})^* = \hat{C}^+ \hat{Q}^+$ . 1-8 параграфта егер  $\hat{C}^+ = c$  болған жағдайда  $\hat{C}^+ = \hat{C}^*$  теңлигиниң орынланатуғының көрсетилген еди. Усы жағдайды есапқа алған ҳалда

$$(\hat{C}\hat{Q})^+ = \hat{C}^* \hat{Q}^+. \quad (1.10.12)$$

Дара жағдайда

$$(i\hat{Q})^+ = -i\hat{Q}^+. \quad (1.10.13)$$

$\hat{A}$  ҳәм  $\hat{B}$  операторларының көбеймесине эрмитлик түйинлес болған матрицаны табамыз. (1.9.21)-аңлатпаға сәйкес

$$(AB)_{mn}^+ = (AB)_{nm}^* = \left( \sum_k A_{nk} B_{km} \right)^* = \sum_k A_{nk}^* B_{km}^* = \sum_k B_{mk}^+ A_{kn}^+.$$

Алынған нәтийже

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \quad (1.10.14)$$

теңлигиниң орынланатуғының аңғартады.

Демек еки матрицаның көбеймесине эрмитлик түйинлес матрица кери избе-изликтө алынған эрмитлик түйинлес матрикалардың көбеймесинен турады екен.

Енді биз эрмитлик түйинлес операторды усы оператор тәсир ететүүн функцияның оң тәрепине қойып жазыўдың себебин түсіндіриў мүмкіншилигине ийемиз. Буның ушын (1.9.8)-теңлемеге итибар беремиз. Бул теңлеме  $\hat{Q}$  операторының тәсиринде  $\varphi$  функциясын  $f$  функциясына айландырыўды тәрийиплейди. Бул теңлемени былайынша жазамыз:

$$b_{m1} = \sum_n Q_{mn} a_{n1}. \quad (1.10.15)$$

«1» индекси  $a$  ҳәм  $b$  матрицаларының тек бир бирден бағанаға ийе екенлигин билдиреди. (1.10.15)-қатнастыбылайынша жаза аламыз:

$$b = Qa. \quad (1.10.16)$$

Бул аңлатпада  $b$ ,  $Q$  ҳәм  $a$  шамалары сәйкес матрицалар болып табылады. (1.10.16)-аңлатпа менен эрмитлик түйинлесликке ийе аңлатпаны жазамыз ҳәм (1.10.14) формуласынан пайдаланамыз:

$$b^+ = (Qa)^+ = a^+ Q^+. \quad (1.10.17)$$

Матрицаларды эрмитлик түйинлеске айландырғанда бағаналар қатарлар менен алмастырылады, матрица элементтери өзлериниң комплексли түйинлеслери менен алмастырылады. [(1.9.21)-аңлатпаны қараңыз]. Демек  $b^+$  ҳәм  $a^+$  матрицалары да бир бирден қатарларға ийе болады. (1.10.7)-аңлатпадағы матрицаны кестелер түринде көрсетсек

$$(b_1^* b_2^* \dots b_m^* \dots) = (a_1^* a_2^* \dots a_n^* \dots) \begin{pmatrix} Q_{11}^* & Q_{21}^* & \cdots \\ Q_{12}^* & Q_{22}^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.10.18)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада  $Q_{mn}^*$  элементтерине ийе матрица  $\hat{Q}^+$  операторын көрсетеди.

(1.10.17)- ҳәм (1.10.18)-аңлатпаларда  $Q^+$  матрицасы  $a^+$  матрицасының оң тәрепинде турғандаған дурыс нәтийжениң шығатуғынлығын аңсат көриўге болады (матрицаларды бир бирине көбейткенде қатардың бағанаға көбейтилетуғынлығын еске түсиремиз). Буннан  $Q^+$  матрицасын усы матрица тәсир ететуғын функцияның оң тәрепине жазыўдың көрек екенлиги келип шығады.

Улыўма айтқанда операторлардың көбеймеси коммутативлик емес:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$$

Бул жағдайдың дурыс екенлигине  $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$  ҳәм  $\hat{B} = x$  операторларының мысалында исениүгे болады. Ҳақыйқатында да:

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B})\varphi &= \frac{\partial}{\partial x}(x\varphi) = x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi. \\ (\hat{B}\hat{A})\varphi &= x \frac{\partial \varphi}{\partial x}. \end{aligned} \quad (1.10.19)$$

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \quad (1.10.20)$$

шәрти орынланатуғын операторларды бир бири менен коммутацияланатуғын операторлар деп атайды. Егер (1.10.20)-шәрт орынланбайтуғын болса операторлар бир бири менен коммутацияланбайдуғын операторлар деп есаптаймыз.

$$\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A} \quad (1.10.21)$$

шәрти орынланатуғны операторларды антикоммутацияланыўшы операторлар деп атайды.

$\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторларынан пайда етилген  $\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$  операторын бул оператордың коммутаторы деп атайды ҳәм  $[\widehat{A}, \widehat{B}]$  арқалы белгилейди. Солай етип

$$[\widehat{A}, \widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}. \quad (1.10.22)$$

(1.10.19)-аңлатпаға сәйкес

$$\left[ \frac{\partial}{\partial x}, x \right] = \frac{\partial}{\partial x}x - x \frac{\partial}{\partial x} = 1.$$

Бул  $\left[ \frac{\partial}{\partial x}, x \right]$  операторы менен базы бир  $\varphi$  функциясына тәсир еткенимизде биз қайтадан сол  $\varphi$  функциясын алатуғынымызды аңлатады. Функцияны өзгериссиз қалдыратуғын операторды бирлик оператор деп атайды. Демек  $\frac{\partial}{\partial x}$  ҳәм  $x$  операторларының коммутаторы бирлик операторға тең екен.

Коммутацияланатуғын операторлардың коммутаторы нолге тең.

Квантлық механикада операторлардың жәрдеминде физикалық шамалар көрсетиледи (сүүретленеди). Енди операторларды қосыў менен көбейтиў қағыйдаларының физикалық шамларды қосыў ҳәм көбейтиў менен қалай сәйкес келетуғынлығын анықтаймыз.

Мейли физикалық еки  $Q$  ҳәм  $R$  шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғны болсын.  $Q$  шамасы  $q_1$  мәнисине, ал  $R$  шамасы  $r_n$  мәнисине ийе болатуғын ҳалдың пси-функциясы бир ўақытта еки теңлемени қанаатландырыўы керек:

$$\widehat{Q}\psi_n = q_n\psi_n, \quad (1.10.23)$$

$$\widehat{R}\psi_n = r_n\psi_n. \quad (1.10.24)$$

Демек бул жағдайда пси-функциясы еки оператордың да меншикли функциясы болыўы керек. Солай етип бир ўақытта өлшенетуғын шамалардың операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады екен. (1.10.23) ҳәм (1.10.24) теңлемелерди қосып

$$(\widehat{Q} + \widehat{R})\psi_n = (q_n + r_n)\psi_n \quad (1.10.25)$$

аңлатпасын аламыз. Демек  $\widehat{Q} + \widehat{R}$  операторының меншикли мәнислери сол  $\widehat{Q}$  ҳәм  $\widehat{R}$  операторларының меншикли мәнислериниң қосындысына тең болады екен. Демек  $Q$  ҳәм  $R$  шамаларының қосындысы дегенимизде меншикли мәнислери қосылыўшы шамалардың меншикли мәнислериниң қосындысына тең болған  $Q + R$  шамасын түснүйимиз керек екен.

Бир ўақытта өлшенетуғын еки  $Q$  ҳәм  $R$  шамаларының көбеймеси деп меншикли мәнислери көбейтилетуғын шамалардың меншикли мәнислериниң көбеймесине тең  $QR$  шамасына айтамыз. Усыған байланыслы  $Q$  ҳәм  $R$  шамаларының көбеймесиниң операторын  $\widehat{K}$  арқалы белгилеп

$$\widehat{K}\psi_n = q_n r_n \psi_n \quad (1.10.26)$$

аңлатпасын жазыў мүмкин.

(1.10.24)-теңлемеге  $\widehat{Q}$  операторы менен тәсир етемиз ҳәм бул жағдайда (1.10.23)-теңлемени итибарға аламыз:

$$\widehat{Q}\widehat{R}\psi_n = r_n\widehat{Q}\psi_n = r_nq_n\psi_n = q_nr_n\psi_n. \quad (1.10.27)$$

Алынған нәтийжени (1.10.26)-аңлатпа менен салыстырыў (1.10.3)-қағыйдаға сәйкес келетуғын еки шаманың операторларының көбеймеси ушын  $\widehat{K} = \widehat{Q}\widehat{R}$  аңлатпасын береди.

Жоқарыда айтылғанлардан  $Q$  шамасының квадратына  $\widehat{Q}^2$  операторының жуўап беретуғынлығы келип шығады. Бул аңлатпада  $\widehat{Q}$  арқалы  $Q$  шамасының операторы белгиленген. Тап сол сыяқты  $Q^s$  шамасына  $\widehat{Q}^s$  операторының сәйкес келетуғынлығын анықлаудымыз мүмкін.

(1.10.23)-теңлемеге  $\widehat{R}$  операторы менен тәсир етип (1.10.24)-аңлатпаны есапқа алып

$$\widehat{R}\widehat{Q}\psi_n = r_n\widehat{R}\psi_n = q_nr_n\psi_n.$$

теңлигин аламыз. (1.10.27)-аңлатпа менен салыстырыў  $\widehat{Q}\widehat{R} = \widehat{R}\widehat{Q}$  екенлигин дәлилләйди, яғни  $\widehat{Q}$  ҳәм  $\widehat{R}$  операторлары бир бири менен коммутацияланады екен.

Алынған нәтийжелерден төмендегише жуўмақтар шығарыў мүмкін.

Егер еки физикалық шама бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғын болса, онда:

- 1) олардың операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады,
  - 2) олардың операторлары бир бири менен коммутацияланады.
- 1)- ҳәм 2)- тастыйықлаўлар бир биринен келип шығады. Биз жоқарыда 1)-тастыйықлаўдан 2)-тастыйықлаўдың келип шығатуғынлығын көрсеткен едик. Енди 2)-тастыйықлаўдан 1)-тастыйықлаўдың келип шығатуғынлығын дәлилләймиз.

Мейли  $\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болсын. Олардың меншикли функциялары

$$A\psi_n^{(a)} = a_n\psi_n^{(a)}, \quad (1.10.28)$$

$$B\psi_n^{(b)} = b_n\psi_n^{(b)} \quad (1.10.29)$$

теңлемелерин қанаатландырады. (1.10.28)-теңлемеге  $\widehat{B}$  операторы менен тәсир етемиз ҳәм  $\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторларының орынларын алмастырыўға болатуғынлығынан пайдаланамыз:

$$\widehat{B}\widehat{A}\psi_n^{(a)} = a_n\widehat{B}\psi_n^{(a)} \rightarrow \widehat{A}\left[\widehat{B}\psi_n^{(a)}\right] = a_n\left[\widehat{B}\psi_n^{(a)}\right].$$

Алынған нәтийже  $[\widehat{B}\psi_n^{(a)}]$  функциясының турақты с көбейтиші дәллигинде  $\widehat{A}$  операторының  $a_n$  меншикли мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциясына сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Яғни

$$\widehat{B}\psi_n^{(a)} = c\psi_n^{(a)}.$$

Алынған нәтийжеден өз гезегинде  $\psi_n^{(a)}$  функциясының  $\widehat{B}$  операторының меншикли функциясы екенлиги келип шығады. Соның менен бирге  $c = b_n$ . Солай етип  $\widehat{A}$  операторының қәлелеген меншикли функциясы болған  $\psi_n^{(a)}$  функциясы  $\widehat{B}$  операторыныңда меншикли функциясы болады екен. (1.10.29)-теңлемеге  $\widehat{A}$

операторы менен тәсир етип ҳәм жоқарыдағы таллаўларымыздай таллаўлардан кейин биз  $\widehat{B}$  операторының қәлелеген меншикли функциясының  $\widehat{A}$  операторының да меншикли функциясы болатуғынлығына ийе боламыз. Солай етип коммутацияланатуғын операторлардың улыўмалық меншикли функциялардың системасына ийе болатуғынлығын дәлилледик.

Параграфтың ақырында биз физикалық шамаларды сәүлелендиретуғын матрикалар ҳаққында бир неше ескертиўлер келтиремиз. Биз жоқарыда бир ўақытта өлшенетуғын  $Q$  ҳәм  $R$  физикалық шамаларына  $\widehat{Q}\widehat{R}$  операторының сәйкес келетуғынлығын көрдик. Усыған сәйкес бул шамалардың көбеймесиниң матрицасы  $\widehat{Q}\widehat{R}$  операторының матрицасы болып табылады. Бул матрица (1.10.6)-аңлатпаның жәрдеминде анықланады:

$$(QR)_{mn} = \sum_k Q_{mk} R_{kn}. \quad (1.10.30)$$

Алынған нәтийже еки шаманың көбеймесиниң матрицасының көбейтилетуғын шамалардың матрикаларының көбеймесине тең екенligин көрсетеди. Усыған сәйкес  $Q$  шамасының квадратының матрицасы

$$(Q^2)_{mn} = \sum_k Q_{mk} Q_{kn} \quad (1.10.31)$$

аңлатпасының жәрдеминде есапланады.

## 1-11. Анықсызлық қатнаслары

$\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторлары бир бири менен коммутацияланбайтуғын болса, онда усындағы операторларға сәйкес келетуғын физикалық шамалар бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алмайды. Усындағы шамалардың анықсызлықтарының бир бири менен қандай қатнасқа ийе екенligин анықлауға тырысамыз.

Өлшеўлер нәтийжелериниң пытыраңқылығының характеристикасы сыпатында айырым өлшеўлердин нәтийжелериниң бул шаманың орташа мәнисинен орташа квадратлық аўысышын аламыз. Айырым өлшеўлердеги аўысыш

$$\Delta a = a - \langle a \rangle.$$

Бул шама ушын оператор жазамыз

$$\widehat{\Delta A} = \widehat{A} - \langle a \rangle. \quad (1.11.1)$$

( $a$ ) шамасына сәйкес келетуғын оператор әдеттеги сан болып табылады).

Анықламасы бойынша орташа квадратлық аўысыш  $\sqrt{\langle (\Delta a)^2 \rangle}$  шамасына тең. Демек орташа квадратлық аўысышты табыў мәселеси  $\langle (\Delta a)^2 \rangle$  шамасын анықлауға алып келинеди екен. Егер  $\Delta a$  шамасы ушын  $\widehat{\Delta A}$  операторы жазылатуғын болса, онда  $(\Delta a)^2$  шамасы ушын  $(\widehat{\Delta A})^2$  операторының жазылышы керек (1-10 параграфқа қараңыз). Орташа мәнислерди есаплаудың улыўмалық қафыйдасы бойынша

$$\langle (\Delta a)^2 \rangle = \int \psi^* (\widehat{\Delta A})^2 \psi dV. \quad (1.11.2)$$

Тап сол сыйқлы

$$\langle (\Delta b)^2 \rangle = \int \psi^* (\widehat{\Delta B})^2 \psi \, dV. \quad (1.11.3)$$

Енди  $\eta$  ҳақыйқый параметринен ғәрэзли болған

$$\mathcal{I}(\eta) = \int |(\eta \widehat{\Delta A} - i \widehat{\Delta B})\psi|^2 \, dV \geq 0 \quad (1.11.4)$$

жәрдемши интегралын қараймыз. Бул интегралдың терис мәниске ийе болмайтуғының анық. Оны төмендегише жазамыз:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\eta) &= \int [(\eta \widehat{\Delta A} - i \widehat{\Delta B})\psi] [(\eta \widehat{\Delta A}^* - i \widehat{\Delta B}^*)\psi^*] \, dV = \\ &= \int (\eta \widehat{\Delta A}\psi - i \widehat{\Delta B}\psi)(\eta \widehat{\Delta A}^*\psi^* - i \widehat{\Delta B}^*\psi^*) \, dV. \end{aligned}$$

Интеграл белгисиниң астындағы қаўсырмаларды ашамыз ҳәм интегралды

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\eta) &= \eta^2 \int (\widehat{\Delta A}\psi) \widehat{\Delta A}^* \psi^* \, dV + i\eta \int (\widehat{\Delta A}\psi) \widehat{\Delta B}^* \psi^* \, dV - \\ &\quad - i\eta \int (\widehat{\Delta B}\psi) \widehat{\Delta A}^* \psi^* \, dV + \int (\widehat{\Delta B}\psi) \widehat{\Delta B}^* \psi^* \, dV \end{aligned}$$

түрінде жазамыз.

Операторлардың өзи өзине түйинлес екенлигинен пайдаланып  $(\widehat{\Delta A}\psi)$  ны (1.8.13)-аңлатпада қатнасатуғын функциялардың бири сырттында қарап ҳәр бир интегралда (1.8.13) түрлендириүин әмелге асырамыз. Усының менен бирге екинши ҳәм үшинши интегралларды байланыстырамыз. Нәтийжеде

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\eta) &= \eta^2 \int \psi^* (\widehat{\Delta A})^2 \psi \, dV - i\eta \int \psi^* (\widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B} - \widehat{\Delta B} \widehat{\Delta A}) \psi \, dV + \\ &\quad + \int \psi^* (\widehat{\Delta B})^2 \psi \, dV \geq 0 \end{aligned} \quad (1.11.5)$$

формуласына келемиз. Бириңши ҳәм үшинши интеграллар сәйкес  $\langle (\Delta a)^2 \rangle$  ҳәм  $\langle (\Delta b)^2 \rangle$  шамаларына тең [(1.11.2)- ҳәм (1.11.3)-аңлатпаларға қараңыз]. Екинши интеграл белгиси астында  $\widehat{\Delta A}$  ҳәм  $\widehat{\Delta B}$  операторларының коммутаторы тур. (1.11.5)-аңлатпадағы жормал бирліктен құтылыў ушын бул коммутаторды  $i\widehat{K}$  арқалы белгилеймиз, яғни

$$[\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}] = \Delta \widehat{A} \Delta \widehat{B} - \Delta \widehat{B} \Delta \widehat{A} = i\widehat{K} \quad (1.11.6)$$

белгилеўин киргиземиз.

(1.11.6)-аңлатпаға  $\widehat{\Delta A}$  ушын жазылған (1.11.1)-аңлатпаны ҳәм тап сол сыйқлы  $\widehat{\Delta B}$  операторы ушын жазылған аңлатпаны қоямыз:

$$(\widehat{A} - \langle a \rangle)(\widehat{B} - \langle b \rangle) - (\widehat{B} - \langle b \rangle)(\widehat{A} - \langle a \rangle) = i\widehat{K}.$$

Курамалы емес түрлендириўлерден кейин шеп тәрепи  $\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторларының коммутаторына айланады. Демек

$$[\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}] = [\widehat{A}, \widehat{B}] = i\widehat{K}. \quad (1.11.7)$$

Сонлықтан  $i\widehat{K}$  шамасын  $\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторларының коммутаторы деп есаплаўға болады. (1.11.6)-белгилеўден пайдаланып (1.11.5)-аңлатпаның екинши ағзасын

$$-i\eta \int \psi^*(i\widehat{K}) \psi dV = \eta \int \psi^* \widehat{K} \psi dV = \eta(k)$$

түринде жазыўға болады. Бул аңлатпада  $\langle k \rangle$  арқалы  $\widehat{R}$  операторының жәрдеминде сүүретленетуғын физикалық шаманың орташа мәниси белгиленген.

Жоқарыда айтылғанлардың барлығын нәзерде тутып (1.11.5)-формуланы былайынша жазыўға болады:

$$\mathcal{I}(\eta) = \eta^2 \langle (\Delta a)^2 \rangle + \eta(k) + \langle (\Delta b)^2 \rangle \geq 0. \quad (1.11.8)$$

Енди  $\alpha x^2 + \beta x + \gamma$  үш ағзалысының  $\alpha > 0$  шәрти орынланғанда  $x$  шамасы ҳеш қашан терис мәнислерге ийе болмайтуғын жағдай ушын коэффициентлер арасындағы қатнасты изертлеймиз. Буның ушын

$$\alpha x^2 + \beta x + \gamma = \alpha \left( x + \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2 + \gamma - \beta^2/4\alpha$$

түрлендириўин жүргиземиз. Бул аңлатпаның минималлық мәниси  $\gamma - \beta^2/4\alpha$  шамасына тең (бул мәниси қаўсырманың ишиндеги аңлатпа нолге айланатуғын  $x$  тың мәнисинде алынады). Демек үш ағзалының терис емес мәнислери ушын

$$\gamma - \beta^2/4\alpha \geq 0 \text{ ямаса } \alpha\gamma \geq \beta^2/4$$

теңсизликтериниң орынланыўы шәрт. Алынған нәтийжени (1.11.8) үш ағзалысына қолланып

$$\langle (\Delta a)^2 \rangle \langle (\Delta b)^2 \rangle \geq \langle k \rangle^2 / 4$$

шәртине келемиз. Буннан

$$\sqrt{\langle (\Delta a)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta b)^2 \rangle} \geq \langle k \rangle / 2 \quad (1.11.9)$$

теңлигин аламыз.

(1.11.9)-аңлатпа анықсызлық қатнасы деп аталады. Бул аңлатпадан бизге белгили болған нәтийіже келип шығады: Егер  $\widehat{A}$  ҳәм  $\widehat{B}$  операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болса, яғни  $\widehat{K} = 0$  болса, онда  $A$  ҳәм  $B$  шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алады.

## 1-12. Үзликсиз спектр

Егер  $\widehat{Q}$  операторы қ меншикли мәнислериниң үзликсиз спектрине ийе болатуғын болса, онда меншикли функцияларды номерлеүге болмайды. Бул функцияларды бир биринен айырыў ушын функцияның символына индекс сыйпатында усы функция

сәйкес келетуғын  $q$  меншикли мәнисин жазамыз. Мысалы  $\psi_q$  ҳәм тағы басқалар.

(1.7.4)-формуладан айырма соннан ибарат, ықтыйрылған  $\psi$  функциясын оператордың меншикли функциялары бойынша жайылған қатар интеграл түрине ийе болады:

$$\psi(x) = \int c(q)\psi_q(x)dq. \quad (1.12.1)$$

Интеграллау  $Q$  шамасы ийелей алатуғын мәнислердин барлық областлары бойынша жүргизиледи.  $c(q)$  коэффицинети  $q$  шамасының базы бир функциясы болып, ол пси-функцияны  $q$  көринисинде анықтайтын.

(1.8.13)-формуладан кейин жазылған формулалардағы  $\psi_m$  функциясын  $\psi_q$ , менен,  $\psi_n$  функциясын  $\psi_{q''}$  менен, усыған сәйкес  $q_m$  шамасын  $q'$ , ал  $q_n$  шамасын  $q''$  пепен алмастырып

$$\langle \psi_q | \psi_{q''} \rangle = \int \psi_q^* \psi_{q''} dV = 0 \quad (1.12.2)$$

формуласын аламыз. Бул формуладан тутас спектрдин меншикли функцияларының дискрет спектрдин меншикли функциялары сыяқты ортогоналлық екенлигин көремиз.

Үзликсиз спектрге ийе оператордың меншикли функцияларының нормировкасы мәселеси қурамалы мәселелердин бири болып табылады. Бундай функциялар ушын  $\int \psi_q^* \psi_q dV$  интегралы барлық үақытта тарқалыўшы болып шығады (яғни шексизликке айланады).

1-15 параграфта бул жағдайды импульс операторының меншикли функциялары мысалында көрсетемиз.

Үзликсиз спектрге тийисли функциялардың нормировкасын Дирактың дельта-функциясының жәрдемінде әмелге асырады.

### III бап

## ФИЗИКАЛЫҚ ШАМАЛАРДЫҢ МЕНШИКЛИ МӘНИСЛЕРИ ХӘМ МЕНШИКЛИ ФУКЦИЯЛАРЫ

### 1-13. Физикалық шамалардың операторлары

(1.4.3)- ҳәм (1.4.4)-формулаларды (1.7.14)-аңлатпа менен салыстырып координаталардың қәлегениниң операторының усы координатаға көбейтиў екенлигин көремиз:

$$x = \hat{x}, \quad y = \hat{y}, \quad z = \hat{z}. \quad (1.13.1)$$

Тап сол сыйқлы  $U(x, y, z)$  потенциаллық энергия операторының тәсирі де тек усы функцияға көбейтиўден ибарат болады:

$$\hat{U} = U. \quad (1.13.2)$$

(1.7.3)-теңлемеге тийкарланып және де бир физикалық шаманың операторының түрин табыўға болады. Ҳақыйқатында да толық энергия операторын  $\hat{H}$  арқалы белгилеп

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (1.13.3)$$

теңлемесин жазамыз<sup>11</sup>. Бул теңлемени (1.5.7)-теңлеме менен салыстырып

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U \quad (1.13.4)$$

екенлигине ийе боламыз. Бул операторды гамильтониан деп атайды.

Биз жоқарыда  $U$  шамасының потенциал энергия операторы  $\hat{U}$  екенлигин көрген едик.  $\hat{H}$  операторы болса толық энергия операторы болып табылады.  $H = T + U$  классикалық аңлатпасына сәйкес кинетикалық энергия операторының

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (1.13.5)$$

түрине ийе екенлигин көремиз. Бул аңлатпаны бөлекшениң кинетикалық энергиясы  $T$  менен импульси  $\mathbf{p}$  арасындағы байланысты сәүлелендиретуғын

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

аңлатпа менен салыстырып импульс операторы болған  $\hat{\mathbf{p}}$  шамасын  $\hbar\nabla$  шамасына ( $\nabla$  арқалы Гамильтон операторы белгиленген) деп болжаўға болады. (1.13.5)-оператордың аңлатпасындағы минус белгисин  $\hat{\mathbf{p}}$  шамасына плюс ямаса минус

---

<sup>11</sup>Кванттық механикада энергияны тезлик арқалы емес, ал импульс арқалы аңлатады. Аналитикалық механикада импульс арқалы аңлатылған энергияны Гамильтон функциясы деп атайды ҳәм Нарқалы белгилейди.

белгиси менен алынған жормал бирликті киргизиў менен алыўға болады. Классикалық механикаға шеклик өтиўдің жәрдеминде  $i$  көбейтишисин минус белгиси менен алыўдың керек екенлигин көрсетиўге болады. Демек

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (1.13.6)$$

Усыған сәйкес импульстин қураўшыларының операторлары

$$\hat{p}_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.13.7)$$

түрине ийе болады.

Биз барлық үақытта да квантлық механикада қабыл етилген қағыйда бойынша жүрдик: операторлар арасындағы қатнаслар классикалық физикадағы бақланатуғын сәйкес физикалық шамалар арасындағы қатнаслардай болыўы керек. Бул қағыйда 1-2 параграфта гәп етилген сәйкеслик принципиниң нәтийжеси болып табылады.

$\hat{\mathbf{p}}$  ҳәм  $\hat{\mathbf{r}}$  операторларының қандай түрге ийе болатуғының билгеннен кейин [(1.13.1)-формулаға сәйкес  $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ ] импульс моменти  $\mathbf{M}$  ушын операторды жазыўымызға болады. Оны қозғалыс муғдарының моменти операторы ямаса мүйешлик момент операторы деп атайды. Биз көбинесе мүйешлик момент операторы атамасынан пайдаланамыз. Классикалық механикада  $\mathbf{M} = [\mathbf{rp}]$ . Демек

$$\hat{\mathbf{M}} = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}] = [\mathbf{r}, -i\hbar\nabla] = i\hbar[\mathbf{r}\nabla]. \quad (1.13.8)$$

Векторлық көбеймени анықлағыш түринде жазамыз:

$$\hat{\mathbf{M}} = -i\hbar \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}.$$

Буннан мүйешлик момент қураўшылары операторлары ушын төмендегидей аңлатпа алыўға болады:

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{M}_z &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{M}_y &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (1.13.9)$$

Мүйешлик моменттиң квадраты операторы қураўшылары ушын жазылған операторлардың аңлатпалары арқалы анықланады:

$$\hat{\mathbf{M}}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2. \quad (1.13.10)$$

Көпшилиқ жағдайларда мүйешлик момент операторының квадраты ҳәм қураўшылары ушын сфералық координаталарды пайдаланған қолайлы болады. Хәр қыйлы координаталар арасындағы байланысларды сәўлелендиретуғын формулалар тиикарында

$$\widehat{\mathbf{M}}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (1.13.11)$$

$$\widehat{\mathbf{M}}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad (1.13.12)$$

формулаларын жаза аламыз.

(1.13.12)-формуладағы фигуралық қаўсырма ишинде турған аңлатпа сфералық координаталарда алынған Лаплас операторының мүйешлиқ бөлеги болып табылады. Бул аңлатпаны  $\Delta_{\vartheta,\varphi}$  арқалы аңлатып

$$\widehat{\mathbf{M}}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta,\varphi} \quad (1.13.13)$$

аңлатпасын жазыўға болады.

Координата  $\mathbf{r}$  дин (1.13.11) — (1.13.13) формулаларының ҳеш қайсысына да кирмейтуғынлығын аңғарамыз.

Мүйешлик момент операторы  $\delta\varphi$  шексиз киши мүйешине бурыў операторы менен тығыз байланысқан. Бундай бурыўға еки түрли трактовка бериў мүмкін. Бириңишен, координаталар системасы қозғалмайды, ал координата басы әтирапында биз қарап атырған бөлекшелер системасы бурылады. Екиншиден бөлекшелер системасы қозғалыссыз қалады, ал координаталар системасы бурылады ( $K$  системасы  $K'$  системасына өтеди). Еки жағдайда да бөлекшелердин координаталары өзгереди, яғни  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$  түрлендирийи орын алады. Координаталардың бирдей өзгерисин алыў ушын биз жоқарыда қараған еки жағдайда бурыўларды қарама-қарсы бағытта әмелге асырыў керек.

Координата көшерлерин бурғанда координаталардың өзгерислерин координаталарды түрлендирий операторы болған  $\hat{g}$  операторының тәсири деп қарау мүмкін:

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{g}\hat{\mathbf{r}}. \quad (1.13.14)$$

Кери түрлендириў

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{g}^{-1}\hat{\mathbf{r}}' \quad (1.13.15)$$

турине ийе болады.

Бөлекшелер системасын бурғанда координаталардың өзгерислерин  $\hat{G}$  операторының тәсири деп қарай аламыз:

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{G}\hat{\mathbf{r}}. \quad (1.13.16)$$

Бундай жағдайда

$$\hat{G} = \hat{g}^{-1} \quad (1.13.17)$$

екенлиги өз-өзинен айқын ( $\hat{g}$  ҳәм  $\hat{G}$  операторларын избе-из қолланғанда бөлекшелердин координаталары өзгериссиз қалады, яғни  $\hat{G}\hat{g} = 1$ ).

(1.13.14)- ҳәм (1.13.16)-түрлендириўлер менен байланыслы болған психикациясының өзгерисин қараймыз.

Бөлекшелер системасын шексиз киши  $\delta\varphi$  мүйешине бурғанда (әпиүайылық ушын биз системаны тек бир бөлекшеден турады деп есалтайық) бөлекшениң

радиус-векторы  $\delta\mathbf{r} = [\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]$  өсімін алады. Демек

$$\mathbf{r}' = \hat{G}\mathbf{r} = \mathbf{r} + \delta\mathbf{r} = \mathbf{r} + [\delta\mathbf{r}, \mathbf{r}]. \quad (1.13.18)$$

Пси-функцияның сәйкес өзгерисин оған  $\hat{R}_G$  операторының тәсіри сыпатында қарауға болады:

$$\psi(\mathbf{r}') = \hat{R}_G\psi(\mathbf{r}). \quad (1.13.19)$$

( $G$  индекси координатаның өзгериси бөлекшелер системасының бурылышы менен байланысқан екенлигин көрсетеди). (1.13.18)-аңлатпаны есапқа алып

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \nabla\psi(\mathbf{r})\delta\mathbf{r} = \\ &= \psi(\mathbf{r}) + \{[\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]\nabla\}\psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

түринде жазыға болады. Фигуралық қаўсырма ишинде турған векторлардың аралас көбеймеси ушын цикллық орын алмастырыуды әмелге асырып

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}') &= \psi(\mathbf{r}) + \{[\delta\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]\nabla\}\psi(\mathbf{r}) = (1 + \delta\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}\nabla])\psi(\mathbf{r}) = \\ &= \{1 + (i/\hbar)\delta\boldsymbol{\varphi}\hat{\mathbf{M}}\}\psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

аңлатпасын аламыз [(1.13.8)-аңлатпаға қараңыз]. (1.13.19)-аңлатпа менен салыстырыў

$$\hat{R}_G = 1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \delta\boldsymbol{\varphi}\hat{\mathbf{M}} \quad (1.13.20)$$

аңлатпасын береди.

Енди системаны дұр мүйешке бурғанда пси-функцияны түрлендириў операторын табамыз. Бундай операторды биз жоқарыда  $\hat{R}_g$  арқалы белгилейик. Координаталар системасын бурыў системаның ҳалын өзгертпейтуғын болғанлықтан жаңа координаталардың жаңа функциясы гөне координаталардың гөне функциясындай болады, яғни

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}). \quad (1.13.21)$$

Пси-функцияны бурыўды түрлендиретуғын бурыў операторы

$$\psi'(\mathbf{r}') = \hat{R}_g\psi(\mathbf{r}')$$

теңлигинен анықланады (функцияның аргументин белгилеудің парқы жоқ,  $\mathbf{r}'$  шамасының орнына шеп тәрепке де, оң тәрепке де  $\mathbf{r}$  шамасын қойыуға болады). Буннан (1.13.21)-аңлатпаны дыққатқа алып

$$\psi(\mathbf{r}) = \hat{R}_g\psi(\mathbf{r}') \quad (1.13.22)$$

аңлатпасын аламыз. (1.13.15)-аңлатпаны есапқа алып бол қатнастың түрин былайынша өзгертемиз:

$$\psi(\mathbf{r}') = \hat{R}_{g^{-1}}\psi(\mathbf{r})$$

(1.13.19)-аңлатпа менен салыстырыу  $\hat{R}_{g^{-1}} = \hat{R}_G$  екенлигин көрсетеди. Бул жағдай (1.13.17)-аңлатпаға сәйкес келеди.

(1.13.20)-қатнастың жәрдеминде мүйешлик момент операторына (18.8)-анықламаға салыстырғанда буннан да улыўмалырақ анықлама бериүге болады. Бул улыўмалық анықлама «орбиталық» қозғалыс ҳаққындағы көз-қарас пенен пүткіллей байланыслы емес. Соныңтан бул жаңа анықламаны буннан да қурамалы жағдайларға, мысалы спинлик момент ушын тарқатылыуы мүмкін

Классикалық формулалар менен уқсаслығына байланыслы барлық физикалық шамалар ушын операторларды ала бериүге болмайды. Мысалы спин сыйылыш шама бар. Бундай шаманың классикалық аналогы жоқ. Бундай шаманың операторлары кейинирек көлтирилип шығылады.

#### 1-14. Физикалық шамалардың операторларының коммутациясының қағыйдалары

Қәлеген еки координатаның операторларының бир бири менен коммутацияланатуғының өз-өзинен түснікли ( $\hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} = 0$  ұмбасқалар). Демек бөлекшениң барлық үш координатасы бир үақытта анық мәнислерге ийе болады екен. Тап усындаң тастыйықлау импульстин қураўшылары ушын да дұрыс ( $\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} = 0$ ).

$\hat{x} = x$  ұмбас  $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  операторларының коммутаторын табамыз. Буның ушын коммутатордың базы бир  $\psi$  функциясына тәсирин қараймыз:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \psi = x \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) = i\hbar\psi.$$

Алынған нәтийжеден

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad (1.14.1)$$

екенлиги келип шығады. (1.11.7)-аңлатпаға сәйкес бал жағдайда  $\hat{K}$  операторының орнында  $\hbar$  турыпты. Соныңтан  $\langle k \rangle = \hbar$  ұмбас (1.11.9)-аңлатпа төмендегидей түрге енеди:

$$\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle} \geq \hbar/2. \quad (1.14.2)$$

Биз әдетте (1.2.1)-аңлатпа түринде жазылатуғын Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасына келдик. Енди биз (1.2.1)-аңлатпадағы  $\Delta x$  ұмбас  $\Delta p_x$  шамаларының олардың орташа мәнислеринен орташа квадратлық аүысыўлары екенлигин түснійімиз керек.

$x \cdot \partial\psi/\partial y = \partial(x\psi)/\partial y$  болғанлықтан  $\hat{x}$  ұмбас  $\hat{p}_y$  операторлары коммутацияланатуғын операторлар болып шығады. Демек  $x$  шамалары бир үақытта анық мәнислерге ийе болатуғын бөлекшениң ҳалының болыўы мүмкін. Тап усындаң тастыйықлау  $x$  ұмбас  $p_z$ ,  $y$  ұмбас  $p_z$  лер ушын да орынлы.

$$x = x_1, \quad y = x_2, \quad z = x_3, \quad p_x = p_1, \quad p_y = p_2, \quad p_z = p_3$$

белгилеўлерин қабыл етсек координаталар операторлары менен импульстин қураўшылары операторлары арасындағы барлық коммутациялық қатнасларды бир

аңлатпа түринде былайынша жазамыз:

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_m] = i\hbar\delta_{km}. \quad (1.14.3)$$

Координата  $\hat{x}$  ҳәм импульс қураўшысы  $\hat{p}_y$  каноникалық түйинлес  $q$  ҳәм  $p$  шамаларының дара жағдайы болып табылады. Егер бул шамалардың операторлары бирдей функциялардың көплигинде анықланған болса анықсызлық қатнасы болған

$$\Delta q \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \quad (1.14.4)$$

қатнасы қәлеген  $q$  ҳәм  $p$  каноникалық түйинлес шамалардың қәлеген жубы ушын орынлы. Мысалы,  $\varphi$  ҳәм  $M_z$  каноникалық түйинлес өзгериүшилери ушын ( $\varphi$  арқалы азимуталлық мүйеш белгиленген)  $\Delta\varphi \cdot \Delta M_z \geq \hbar/2$  қатнасы тек  $\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle \ll \pi^2$  шәрти орынланған жағдайда ғана дурыс болады. Бул жағдайдың себеби мынадан ибарат: егер дәүири  $2\pi$  болған  $\Psi(\varphi)$  дәүирли функциялар көплигинде ғана оператор өзи өзине түйинлес бола алады.  $\varphi$  өзгериүшиси болса функциялардың усы көплигинде оператор болып табылмайды, себеби  $\varphi\Psi(\varphi)$  функциясы усы көпликке тийисли емес<sup>12</sup>.

Каноникалық түйинлес шамалардың қатарына энергия ҳәм ўақыт киреди. Демек

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2 \quad (1.14.5)$$

қатнасы орын алады деген сөз. Бул қатнас бойынша энергияны  $\Delta E$  дәллигинде анықлау  $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$  ўақыт интервалын киши емес ўақыт интервалын алыуы керек. Системаның базы бир ҳалының энергиясын өлшеү ҳалдың жасау ўақыты тан үлкен болмаған  $\Delta t$  ўақыт аралығында әмелге асатуғын болғанлықтан ҳал энергиясы  $\Delta E \sim \hbar/t$  шамасындағы анықсызлыққа ийе болады. Бул шаманы энергия қәддиниң кеңлиги деп атайды ҳәм  $\Gamma$  (грек имласындағы) арқалы белгилейди. Солай етип

$$\Gamma \sim \hbar/\tau. \quad (1.14.6)$$

Мүйешлик момент операторының координаталар ҳәм импульслер операторлары менен коммутацияланыў қағыйдаларын табамыз. (1.13.9)-аңлатпаны нәзерде тұтып мынаған ийе боламыз:

$$\begin{aligned} [\hat{M}_x, \hat{x}] \psi &= \\ &= -i\hbar \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) (x\psi) - x \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi \right\} = 0. \end{aligned}$$

Буннан  $[\hat{M}_x, \hat{x}] = 0$  теңлигинин орынланатуғынлығы келип шығады. Тап сондай аңлатпалар мүйешлик момент пенен координаталардың басқа да операторлары ушын да алынады. Солай етип

$$[\hat{M}_x, \hat{x}] = 0, \quad [\hat{M}_y, \hat{y}] = 0, \quad [\hat{M}_z, \hat{z}] = 0. \quad (1.14.7)$$

Енди биз  $\Psi$  функциясына  $[\hat{M}_x, \hat{y}]$  коммутаторы менен тәсир етемиз:

---

<sup>12</sup> А.С.Давыдов. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1973. стр. 55.

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{y}] \psi &= \\
&= -i\hbar \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) (y\psi) - y \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi \right\} = \\
&= -i\hbar \left\{ y^2 \frac{\partial\psi}{\partial z} - zy \frac{\partial\psi}{\partial y} - z\psi - y^2 \frac{\partial\psi}{\partial z} + yz \frac{\partial\psi}{\partial y} \right\} = i\hbar z \psi.
\end{aligned}$$

Демек  $[\hat{M}_x, \hat{y}] = i\hbar z$ . Цикллық орын алмастырыўларды әмелге асырсақ

$$[\hat{M}_x, \hat{y}] = i\hbar z, \quad [\hat{M}_y, \hat{z}] = i\hbar x, \quad [\hat{M}_z, \hat{x}] = i\hbar y \quad (1.14.8)$$

формулаларына ийе боламыз. (1.14.7)- ҳәм (1.14.8)-формулаларды бир қатнас түринде жазыўға болатуғынлығын аңғарамыз:

$$[\hat{M}_k, \hat{x}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} x_m. \quad (1.14.9)$$

Бул формулаларда  $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z, M_1 = M_x$  ҳәм басқалар.  $\epsilon_{klm}$  арқалы Кронекердин қыя симметриялы символы белгиленген.

Алынған формулалардан мүйешлик моменттиң қураўшысы менен сәйкес координатаның бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алатуғынлығын көрсетеди.  $M_x$  қураўшысы менен у координатасының (ямаса  $z$  координатасының) бир ўақытта анықланыўы мүмкин емес. Тап сол сыйақлы жағдай  $M_y$  ҳәм  $z$  (ямаса  $x$ ) координатасы, соның менен биргэ  $M_z$  ҳәм  $x$  (ямаса  $y$ ) координаталары арасында да орын алады.

$\psi$  функциясына  $[\hat{M}_x, \hat{p}_x]$  коммутаторы менен тәсир етейик:

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{p}_x] \psi &= \\
&= (-i\hbar)^2 \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( y \frac{\partial\psi}{\partial z} - z \frac{\partial\psi}{\partial y} \right) \right\} = 0.
\end{aligned}$$

Биз  $[\hat{M}_x, \hat{p}_x] = 0$  екенлигине ийе болдық. Тап усындағанда нәтийже сол сыйақлы қалған коммутаторлары ушын да алынады.  $[\hat{M}_x, \hat{p}_y]$  операторы ушын басқаша нәтийже алынады:

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{p}_y] \psi &= \\
&= (-i\hbar)^2 \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{\partial\psi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( y \frac{\partial\psi}{\partial z} - z \frac{\partial\psi}{\partial y} \right) \right\} = \\
&= (-i\hbar)^2 \left\{ y \frac{\partial^2\psi}{\partial y \partial z} - z \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} - y \frac{\partial^2\psi}{\partial z \partial y} - \frac{\partial\psi}{\partial z} + z \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} \right\} = \\
&= (-i\hbar)^2 \left( - \frac{\partial\psi}{\partial z} \right) = i\hbar \left( -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial z} \right) = i\hbar \hat{p}_z \psi.
\end{aligned}$$

Алынған нәтийжени (1.14.9)-формулаға усаған

$$[\hat{M}_k, \hat{p}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} \hat{p}_m \quad (1.14.10)$$

формуласы менен көрсетиў мүмкин.

(1.14.9)- ҳәм (1.14.10)-формулаларының жәрдеминде мүйешлик моменттиң қураўшыларының коммутаторларын аңсат алыўға болады:

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= \hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x = \\
&= \hat{M}_x (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) - (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) \hat{M}_x = \\
&= \hat{M}_x \hat{z} \hat{p}_x - \hat{M}_x \hat{x} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_x \hat{M}_x + \hat{x} \hat{p}_z \hat{M}_x.
\end{aligned}$$

$\hat{M}_x$  операторының  $\hat{x}$  пенен де,  $\hat{p}_x$  пенен де коммутацияланатуғынлығынан пайдаланып екинши қосылыўшыдағы  $\hat{M}_x$  пенен  $\hat{x}$  тың, ал үшинши қосылыўшыдағы  $\hat{M}_x$  пенен  $\hat{p}_x$  лардың орынларын алмастырамыз. Нәтийжеде

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= \hat{M}_x \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{M}_x \hat{p}_z - \hat{z} \hat{M}_x \hat{p}_x + \hat{x} \hat{p}_z \hat{M}_x = \\
&= (\hat{M}_x \hat{z} - \hat{z} \hat{M}_x) \hat{p}_x - \hat{x} (\hat{M}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{M}_x) = \\
&= i\hbar \epsilon_{xyz} \hat{y} \hat{p}_x - \hat{x} i\hbar \epsilon_{xyz} \hat{p}_y = i\hbar (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) = i\hbar \hat{M}_z
\end{aligned}$$

теңлигине иие боламыз [биз (1.14.9)- ҳәм (1.14.10)-формулалардан пайдаландық;  $\epsilon_{xyz} = \epsilon_{132} = -1$ ].

Цикллық орын алмастырыўларды әмелге асырып

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar \hat{M}_z, \quad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar \hat{M}_x, \quad [\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar \hat{M}_y \quad (1.14.11)$$

теңликлерин ямаса

$$[\hat{M}_k, \hat{M}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} \hat{M}_m. \quad (1.14.12)$$

теңлигин аламыз. Ең ақырында  $\hat{\mathbf{M}}^2$  ҳәм  $\hat{M}_x$  операторларының коммутаторларын есаптаймыз. (1.13.10)-аңлатпаны есапқа алып

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_x] &= \\
&= (\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2) \hat{M}_x - \hat{M}_x (\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2) = \\
&= \hat{M}_x^3 + \hat{M}_y^2 \hat{M}_x + \hat{M}_z^2 \hat{M}_x - \hat{M}_x^3 - \hat{M}_x \hat{M}_y^2 - \hat{M}_x \hat{M}_z^2.
\end{aligned} \quad (1.14.13)$$

теңлигине иие боламыз.  $\hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x = i\hbar \hat{M}_z$  екенлигин пайдаланып [(1.14.11)-аңлатпаға қараңыз] екинши ҳәм бесинши қосылыўшыларды байлайынша түрлендиримиз:

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

$\hat{M}_z \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}_z = i\hbar \hat{M}_y$  қатнасын пайдаланып үшинши ҳәм алтыншы қосылыўшыларды тап сондай етип түрлендиримиз:

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

Бизлер түрлендирген аңлатпаларды (1.14.13)-формулаға қойсақ оң тәрепи нолге айланады. Тап усындаған нәтийжелер  $\hat{\mathbf{M}}^2$  менен  $\hat{M}_y$  ҳәм  $\hat{M}_z$  коммутаторлары арасында да алынады. Солай етип

$$[\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_x] = 0, \quad [\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_y] = 0, \quad [\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_z] = 0. \quad (1.14.14)$$

нәтийжесине ийе боламыз.

(1.14.11)- ҳәм (1.14.14)-формулаларынан биз мынадай жуўмақ шығарамыз: бир ўақытта тек  $\mathbf{M}$  векторының квадраты ҳәм координаталар көшерине түсирилген проекциялардың тек биреуі ғана анық мәниске ийе бола алады. Қалған еки проекцияның шамалары анық мәниске ийе бола алмайды (бул талапқа үш проекция да бир ўақытта нолге тең болған жағдай кирмейди). Демек  $\mathbf{M}$  векторы ҳақында тек оның «узынлығы» ҳәм базы бир координата көшери менен усы вектор арасындағы мүйештиң мәниси ҳақында ғана айта алады екенбиз.  $\mathbf{M}$  векторының бағытын анықлау мүмкіншилиги жоқ.

### 1-15. Координата ҳәм импульс операторларының меншикли функциялары

Координата операторының меншикли функцияларын табамыз.  $\hat{x} = x$  болғанлықтан (1.7.3)-теңлеме

$$x\psi_{x'} = x'\psi_{x'} \quad (1.15.1)$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада  $x'$  арқалы базы бир ҳақыйқый сан, ал  $\psi_{x'} = \psi_{x'}(x)$  арқалы  $x$  тың  $x'$  шамасына тең меншикли мәнисине тең меншикли функция белгиленген. δ функциясының белгили болған  $x\delta(x) = 0$  қәсийетлеринен пайдаланып  $x - x'$  аргументи ушын төмендегидей аңлатпа жазамыз:

$$(x - x') \delta(x - x') = 0.$$

Қаўсырманы ашып  $x\delta(x - x') - x'\delta(x - x') = 0$  теңлигин аламыз. Буннан

$$x\delta(x - x') = x'\delta(x - x').$$

(1.15.1)-теңлеме менен салыстырыў

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x') \quad (1.15.2)$$

теңлемесин береди. Бул  $\hat{x}$  операторының  $x - x'$  теңлигине сәйкес келиүши меншикли функциясы болып табылады.  $\hat{x}$  операторының спектриниң үзликсиз екенлиги айқын.

$\delta(x - x')$  ҳәм  $\delta(x - x'')$  функцияларының скаляр көбеймесин есаптаймыз.  $\delta(x)$  функциясы ҳақыйқый болғанлықтан

$$\langle \delta(x - x') | \delta(x - x'') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') \delta(x - x'') dx.$$

Егер  $\delta(x - x') = f(x)$  ҳәм  $x'' = a$  деп есапласақ, онда бул интегралды  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$  формасына алып келиў мүмкін.  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$  формуласы тиімдіктеріндең біз есаплайын деп атырған интеграл  $f(a)$  функциясына, яғни  $\delta(x'' - x')$  функциясына тең. Солай етип

$$\langle \delta(x - x') | \delta(x - x'') \rangle = \delta(x'' - x').$$

Бул (1.15.2)-функцияларының дельта-функцияға нормировкаланғанлығын көрсетеди ( $x\delta(x) = 0$  формуласына итибар беріңиз).

$\psi_\alpha(x)$  функциясын ( $\alpha$  арқалы ұлдатын индекси белгиленген)  $\hat{x}$  операторының (1.15.2)-меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз. (1.12.1)-аңлатпаға сәйкес

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} c(x') \psi_{x'}(x) dx' = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} c(x') \delta(x - x') dx' = c(x). \end{aligned} \quad (1.12.3)$$

Биз алған нәтийже координаталық көринистеги пси-функцияның  $\psi_\alpha(x)$  функциясының өзи екенлигин аңғартады. Тап усындай жуўмаққа (1.12.7)-формула бойынша  $c(x')$  функциясын есаплау жолы менен де келиўге болады.  $q$  шамасын  $x'$  пенен алмастырып

$$c(x') = \langle \psi_{x'} | \psi_\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{x'}^*(x) \psi_\alpha(x) dx$$

аңлатпасын аламыз. Дельта-функция ҳақында болып табылады. Соныңтан  $\psi_{x'}^* = \psi_{x'} = \delta(x - x')$ . Демек

$$c(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') \psi_\alpha(x) dx = \psi_\alpha(x').$$

$x$  өзгериўшисиндең штрихты алып таслап биз  $c(x) = \psi_\alpha(x)$  аңлатпасына келемиз.

Үш өлшемли жағдайда  $\psi_\alpha = \psi_\alpha(x, y, z) = \psi_\alpha(\mathbf{r})$ . Ал  $\hat{\mathbf{r}}$  операторының меншикли функциялары  $\psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  функциялары болып табылады [бұны биз (1.15.2)-формулаға алып келгендей есаплаўларды жүргизиў жолы менен әмелге асырамыз].  $\psi_\alpha$  функцияларын  $\psi_{\mathbf{r}}$  функциялары бойынша қатарға жайып (1.15.3)-нәтийжеге сәйкес келетуғындаң нәтийжени аламыз:

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x, y, z) &= \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{r}'} dV = \\ &= \int c(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV = c(\mathbf{r}) = c(x, y, z). \end{aligned} \quad (1.15.4)$$

(1.7.3)-теңлемени  $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$  импульс операторы ушын жазамыз:

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

Бул теңлемениң шешими

$$\psi = C e^{(i/\hbar) p_x x} \quad (1.15.5)$$

функциясы болып табылады.  $\hat{p}_x$  операторының спектриниң үзлиksиз болатуғынлығы өз-өзинен түснікли.

(1.15.5) функциясын 1 ге нормировкалауға тырысамыз. Буның ушын

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |C e^{(i/\hbar) p_x x}|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |C|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx.$$

интегралын есапладап көремиз. Бул интеграл қәлелеген  $C \neq 0$  болған жағдайда тарқалады (шексизликке айланады). Демек  $\hat{p}_x$  операторының меншикли функцияларын 1 ге нормировкалау мүмкін емес екен. 1-12 параграфта гәп етилгениндей биз келген нәтийже үзлиksиз спектрге иие меншикли функциялардың барлығы ушын орынлы болады. Бундай жағдайда дельта-функцияға нормировка етиледи.

(1.15.5)-түрдеги еки функцияның скаляр көбеймесин есаплаймыз:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{p'_x} | \Psi_{p''_x} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^* e^{-i(p'_x/\hbar)x} \cdot C e^{i(p''_x/\hbar)x} dx = \\ &= C^* C \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i[(p''_x - p'_x)/\hbar]x} dx. \end{aligned}$$

$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = 2\pi\delta(x)$  формуласындағы  $k$  ҳәм  $x$  шамаларының ийелеген орынларын (роллерин) алмастырып

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = 2\pi\delta(k) \quad (1.15.6)$$

формуласын аламыз. Бул формулага сәйкес

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i[(p''_x - p'_x)/\hbar]x} dx &= 2\pi\delta[(p''_x - p'_x)/\hbar] = \\ &= 2\pi\hbar\delta(p''_x - p'_x). \end{aligned} \quad (1.15.7)$$

(биз  $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$  анықламасынан пайдаландық). Солай етип

$$\langle \Psi_{p'_x} | \Psi_{p''_x} \rangle = C^* C \cdot 2\pi\hbar\delta(p''_x - p'_x).$$

Буннан әхмийетли жуўмақ шығарамыз: (1.15.5)-функцияларды дельта-функцияға нормировкалаў ушын  $|C|$  шамасын  $1/(2\pi\hbar)^{1/2}$  шамасына тең етип алышымыз керек екен. Пси-функция  $e^{i\alpha}$  фазалық көбейтиүшиси дәллигине шекем анықланатуғын болғанлықтан  $C$  шамасын ҳақыйқый ҳәм  $1/(2\pi\hbar)^{1/2}$  шамасына тең деп есаплаў мүмкин.

Демек импульс операторының дельта-функцияға нормировкаланған меншикли функцияларды мыналарға тең:

$$\psi_{p_x}(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{(i/\hbar) p_x x}. \quad (1.15.8)$$

$\mathbf{p}$  операторының үш өлшемли дельта-функцияға нормировкаланған меншикли функцияларының

$$\psi_{\mathbf{p}} = (2\pi\hbar)^{-3/4} e^{(i/\hbar) \mathbf{p} \mathbf{r}} \quad (1.15.9)$$

түрине ийе болатуғынлығына аңсат көз жеткериўге болады.

## II бөлім

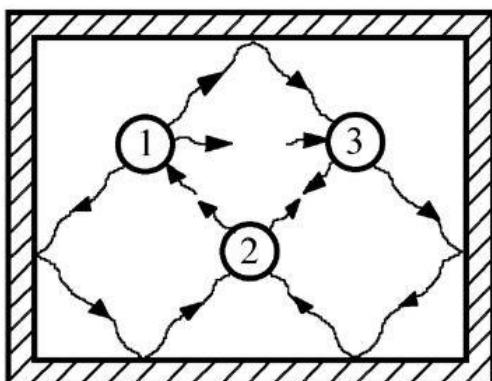
### Квантлық физиканың тиіккарлары

#### 2-1-1. Жыллылық нурланыўы нызамлары

**Жыллылық нурланыўы.** Қыздырылған денелерде ишкі энергияның бир бөлеги нурланыў энергиясына айлана алады. Соңлықтан қыздырылған денелер жийиликлердин үлкен диапазонындағы электромагнит толқынларының дереги болып табылады. Бундай нурланыўды жыллылық нурланыў деп атайды.

Экспериментлер жыллылық нурланыўының үзлиksiz спектрге иие екенлигин көрсетеди. Бул қыздырылған денениң жийиликлер ямаса толқын узынлықтарының қәлелеген диапазонында базы бир мұғдардағы нурланыў энергиясын нурландыратуғындығын аңлатады. Денениң нурланыў энергиясының спектр бойынша тарқалыўы температурадан ғәрэзли. Барлық денелер ушын температураларын жоқарылауы менен нурланыў энергиясының максимумы спектрдин қысқа толқынлы участкасына қарай жылжыйды ҳәм нурланыўдың улыўмалық энергиясының мәниси үлкейеди. Мысалы орайлық жылтытыў тармағына туастырылған батареялар (температурасы  $T \approx 350$  K) көзге көринбейтуғын инфрақызыл участкада энергияның пигине иие болатуғын болса, Қуаштың бети ( $T \approx 6 \cdot 10^3$  K) энергиясының тиіккары бөлегин жақтылық диапазонында нурландырады. Ядролық партланыўда болса (температурасы  $T \approx 10^6$  K) энергияның үлкен бөлеги қысқа толқынлы рентген ҳәм гамма-нурланыўы менен алып кетиледи.

Егер қыздырылған бир неше денени нурланыўды пүткіллей өткермейтуғын қабық пenen (куты менен) қапласақ (1-сүйрет), онда бир қанша үақыт өткеннен кейин "нурландырышы" денелер + қуұыслықтағы (кутыдағы) нурланыў" арасында термодинамикалық тең салмақлық орнайды. Бундай жағдайда барлық денелердин температуралары теңлеседи, ал денелер ҳәм нурланыў арасындағы энергияның тарқалыўы үақыттың өзгеріүи менен өзгериссиз қалады. Системаның усындағы тең салмақлық ҳалы орнықлы ҳал болып табылады. Бундай орнықлы ҳалды сырттан тәсир түсирип өзгертсек те тең салмақлық ҳал қайтадан орнайды. Термодинамикалық тең салмақлық қабықта да орнайды. Қабықтың дийўаллары қәлелеген материалдан соғылыўы мүмкін ҳәм оның температурасы өзгериссиз етип услап турылады.



1-сүйрет.

Жыллылық нурланыұның нурланып атырған дene менен тең салмақлықта тura алыў қәбилетлиги денелердиң басқа жыллылық нурланыұнынан айырмашылыққа иие. Соныңтан нурландырышы дene менен тең салмақлықта туратуғын нурланыў тең салмақлық нурланыў деп аталады.

Тең салмақлық нурланыўға усы нурланыў менен тең салмақлықта турған денениң температурасын белгилеў мүмкін. Бундай жағдайда тең салмақлық термодинамиканың нызамларын жыллылық нурланыұнына да пайдаланыў мүмкіншилиги пайда болады. Бул өз гезегинде тең салмақлық жыллылық нурланыўы ушын ўақытқа байланыслы өзгермейтуғын ишки энергия, басым, энтропия ҳәм басқа да термодинамикалық характеристикаларды анықлау ҳәм есаплау мүмкін дегенди билдиреди.

Тең салмақлық жыллылық нурланыўы бир текли, яғни оның энергиясының тығыздығы қуыссызтың барлық ноқаттарында бирдей. Бундай нурланыў изотроп ҳәм поляризацияланған емес – бундай нурланыў барлық тәреплерге бирдей болып тарқалады, Е ҳәм Н векторларының тербелій бағытлары да ҳәр қыйлы.

**Жыллылық нурланыұның характеристикалары.** Жыллылық нурланыұның спектраллық қурамын тәриплей ушын қыздырылған денениң бетинин бир бирлиги тәрепинен бир ўақыт бирлиги ишинде нурланатуғын жийиликлердин киши диапазоны болған  $\omega$  шамасынан  $\omega + d\omega$  шамасы арасындағы нурланыў энергиясын қараймыз. Денениң бир бирлик майданынан барлық тәреплерге қарай нурланып атырған нур энергиясының ағымы  $dR$  шамасының мәниси спектраллық диапазонның кеңлигине пропорционал, яғни  $dR = r d\omega$ . Жийиликлердин бир бирлик диапазонына сәйкес келиүши  $r$  энергиясын денениң спектраллық шығарышылық қәбилетлиги ямаса жарқынлықтың энергиялық спектраллық тығыздығы деп атайды. Тәжирийбелер ҳәр бир дene ушын спектраллық шығарышылық қәбилетликтин жийиликтиң белгили бир функциясы екенлиги көрсетеди. Бул функцияның түри денениң температурасы  $T$  өзгергенде өзгереди. Буннан кейин берилген температурада жийиликтиң базы бир функциясы болған усындай функционаллық ғәрэзлик  $r = r(\omega, T)$  түриндеги ғәрэзлигинин орнына жыллылық нурланыўы теориясында қабыл етилген  $r(\omega, T) \equiv r_{\omega, T}$  белгилеүин пайдаланамыз.

Денениң майдан бирлигинен жийиликлер диапазонының барлығынан нурланатығын энергияның улыўмалық ағысы

$$R = \int_0^{\infty} r_{\omega, T} d\omega \quad (2.1.1)$$

формуласының жәрдеминде бериледи ҳәм бул шаманы денениң интеграллық шығарышылық (нурландырышылық) қәбилетлиги ямаса оның энергиялық жарқынлығы деп атайды. Si бирликтер системасында энергиялық жарқынлық  $\text{Вт}/\text{м}^2$  бирликтеринде, ал спектраллық шығарышылық қәбилетлик  $\text{Дж}/\text{м}^2$  бирликтерине иие.

Денениң шығарышылық (нурландырышылық) қәбилетлигин нурланыў ушын толқын узынлығы болған  $\lambda$  шамасының функциясы деп қараў мүмкін.  $\lambda$  менен жийилик  $\omega$  жақтылықтың ваккумдеги тезлиги с арқалы былайынша байланысқан:  $\lambda = 2\pi c/\omega$ . Бундай жағдайда төмендегидей теңликке иие боламыз:

$$r_{\omega, T} d\omega = r_{\lambda, T} d\lambda. \quad (2.1.2)$$

Буннан шығарыўшылық қәбилетлик бойынша жийиликлер шкаласындағы ҳәм толқын узынлықлары шкаласындағы байланыстырыўшы формууланы аламыз

$$\Gamma_{\lambda,T} = \Gamma_{\omega,T} (d\omega/d\lambda) = \Gamma_{\omega,T} (2\pi c/\lambda^2). \quad (2.1.3)$$

(2.1.3)-аңлатпада туўынды ( $d\omega/d\lambda$ ) алдынағы "минус" белгиси жазылмады. Бул "минус" белгиси толқын  $\lambda$  узынлығының үлкейиўи менен жийилик  $\omega$  ның кемейетуғынлығын ғана аңлатады.

Денелер тәрепинен бетке келип түсип атырған нурланыўды жутыў процессин тәриплөў ушын денениң спектраллық жутыў қәбилетлиги болған  $a_{\omega,T}$  шамасын киргиземиз. Буның ушын жийиликлердин  $\omega$  дан  $\omega + d\omega$  ға шекемги киши интервалын айырып аламыз ҳәм денениң бетине келип түсиўши  $d\Phi_{\omega}$  ағысын қараймыз. Егер усы ағыстың бир бөлеги болған  $d\Phi_{\omega}'$  ағысы дene тәрепинен жутылатуғын болса, онда денениң  $\omega$  жийилигидеги жутыўшылық қәбилетлигин өлшем бирлигине ийе емес төмендегидей шаманың жәрдеминде анықтаймыз

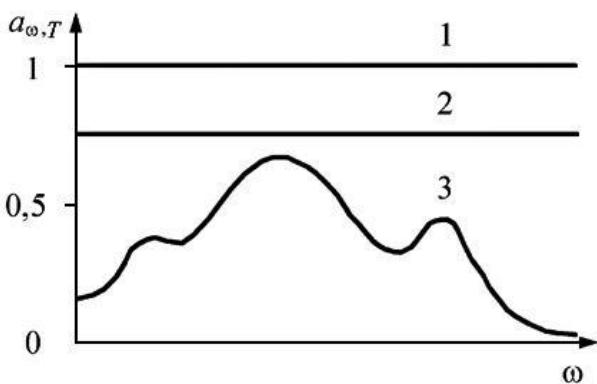
$$a_{\omega,T} = d\Phi_{\omega}' / d\Phi_{\omega}. \quad (2.1.4)$$

Бул шама жийилиги  $\omega$  шамасына тең келип түсиўши нурланыўдың жутылған үлесин береди.

Тәжирийбелер қәлеген денениң темпертурасына байланыслы ҳәр қыйлы жийиликтеги нурларды ҳәр қыйлы етип жутатуғынлығын көрсетеди. Сонықтан денениң жутыўшылық қәбилетлиги  $a_{\omega,T}$  жийilik  $\omega$  ның функциясы болып табылады. Ал бул функцияның түри денениң темпертурасы  $A$  ның өзгериўи менен өзгериске ушырайды.

Өзиниң анықламасы бойынша денениң жутыў қәбилетлигиниң шамасы 1 ден үлкен бола алмайды. Жутыў қәбилетлиги бирден кем ҳәм жийиликлердин барлық диапазонында бирдей болған денени сур дene деп атайды.

Жыллылық нурланыўы теориясында абсолют қара дene айрықша орынды ийелейди. Абсолют қара дene деп барлық жийиликлерде ҳәм барлық температураларда жутыўшылық қәбилетлиги бирге тең, денени Г.Кирхгоф абсолют қара дene деп атауды усынды. Ҳақыйқый денелер болса өзлерине келип түскен нурланыўдың тек бир бөлімін ғана шағылыстырады (2.1.2-сүйрет). Ҳэтте қара күйе де өзиниң қәсийетлери бойынша абсолют қара дeneге тек оптикалық диапазонда ғана жақынлайды.

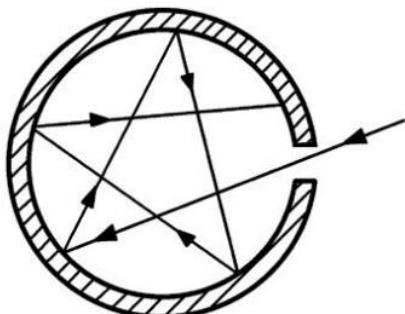


1.2-сүйрет.  
Хәр қыйлы денелердин жутыўшылық қәбилетлиги.  
1 – абсолют қара дene;  
2 – сур дene;  
3 – ҳақыйқый дene.

Абсолют қара дene жыллылық нурланыўы теориясында этalon дene болып табылады. Тәбиятта абсолют қара дene болмаса да, жутыўшылық қәбилетлиги бирден айырмасы жүдә киши болған модельди аңсат жүзеге келтириў мүмкин.

Абсолют қара денениң усындағы моделин жабық қуұыслық түринде соғып алғыға болады (2.1.3-сүрет). Бул қуұыслық диаметри усы қуұыслықтың диаметринен әдеүір киши болған кишкене тесикшеге ийе. Усының менен бир қатарда қуұыслықтың қәлелеген формаға ийе ҳәм қәлелеген материалдан исленген болыўы мүмкін.

Киши тесикше оған келип түсиўши нурланыўдың дерлик толық жутылыўына алғып келеди. Тесикшениң диаметри қаншама киши болған сайын оның жутыўшылық қәбилеттігі бирге умтылады. Ҳақыйқатында да тесикше арқалы қуұыслыққа киргендегі нурланыў қуұыслықтың дийўалларына келип түседи ҳәм бул дийўалларда шалама-шекки жутылады. Егер тесикшениң диаметри киши болса нурланыў усы тесикшеден шығаман дегенше ишкі дийўалларда көп санлы шағылышыўларға ушырайды. Усының нәтийжесинде келип түсиўши нурлар дерлик толығы менен жутылады.

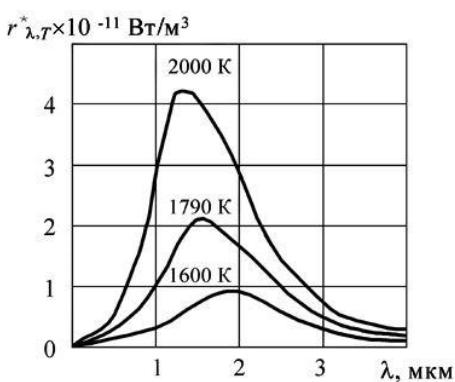


1.3-сүрет.

Абсолют қара денениң модели.

Биз жоқарыда қарап өткен моделде тесик арқалы ишке кириўши толқындық қайтып шықпайды ҳәм сонлықтан келип түскен нурлар толығы менен жутылады деп есаптай аламыз. Сонлықтан киши тесикшеге абсолют қара денениң қәсийеттери бериледи.

Егер қуұыслықтың ишкі дийўалларын  $T$  температурада услап тұрсақ, онда тесикше нурланады. Бул нурланыўды температурасы  $T$  ға тең болған абсолют қара денениң нурланыўы деп есаплаўға болады. Бул нурланыў энергиясының спектр бойынша тарқалыўын изертлеў арқалы абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыплығы болған  $r_{\omega,T}^*$  ҳәм  $r_{\lambda,T}^*$  шамаларын экспериментте анықлаў мүмкін (Ленгли, Э.Прингслей, О.Люммер, Ф.Курлбаум ҳәм басқалар). Ҳәр қыйлы температураларда откөрілген усындағы экспериментлердин нәтийжелери 1.4-сүретте көлтирилген.



1.4-сүрет.

Абсолют қара дene ушын нур шығарыўшылық уқыплығы  $r_{\lambda,T}^*$  шамасының температурадан ғәрзелиги.

**Кирхгоф нызами.** Қәлелеген денениң нур шығарыўшылық уқыплығы менен жутыў уқыплығы арасында байланыстың орын алғыў керек. Себеби тең салмақлық нурланыў менен откөрілген тәжирийбелерде (2.1.1-сүрет) системадағы тең салмақлық егер ҳәр бир дene үақыт бирлигинде қанша энергияны

нурландыратуғын болса, тап сондай әнергияны жутатуғынлығын да билдиреди. Бул жағдай денениң қандай да бир жийиликтеги нурларды күшли түрде нурландыратуғын болса, тап сондай жийиликтеги нурларды күшли жутатуғынлығын аңлатады. Усы жағдайды толық тең салмақтық принципи деп атаемиз (принцип детального равновесия).

Толық тең салмақтық принципине сәйкес тәбияттағы барлық денелер ушын (соның ишинде абсолют қара деңе ушын да) берилген температурадағы нур шығарыўшылық қәбилетлигиниң нурды жутыў қәбилетлигине қатнасы бирдей мәниске ийе ҳәм жийиликтиң (толқын узынлығының) универсаллық функциясы болады.

1959-жылы нурланыў менен тең салмақтықта туратуғын системалардың термодинамикалық нызамлықтарын үйрениўдин барысында Г.Кирхгоф тәрепинен ашылған бул нызамды байлайынша жазамыз:

$$\left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_1 = \left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_2 = \left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_3 = \dots = \frac{r_{\omega,T}^*}{1} = f(\omega, T) \quad (2.1.5)$$

ямаса

$$\left( \frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_1 = \left( \frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_2 = \left( \frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_3 = \dots = \frac{r_{\lambda,T}^*}{1} = \varphi(\lambda, T) \quad (2.1.6)$$

Бул аңлатпалардағы 1, 2, 3... ҳәр қылыш ҳақыйқый денелерге сәйкес келеди.

Кирхгоф нызамынан  $f(\omega, T)$  ҳәм  $\varphi(\lambda, T)$  универсаллық функцияларының сәйкес жийиликлер шкаласындағы ҳәм толқын узынлықтары бойынша абсолют қара денениң спектраллық нур шығарыўшылық қәбилетлиги  $r_{\omega,T}^*$  ҳәм  $r_{\lambda,T}^*$  екенлиги келип шығады. Соныңтан олар арасындағы байланыс (2.1.3)-формула менен анықланады.

Жыллылық нурланыўы теориясында абсолют қара денениң нурланыўы универсаллық характерге ийе. Ҳақыйқый денелер барлық үақытта да қәлеген температурада нурды абсолют қара денеге салыстырғанда кемирек нурландырады. Абсолют қара денениң нур шығарыўшылық қәбилетлигин (яғни Кирхгофтың универсаллық функциясы) ҳәм ҳақыйқый денениң жутыўшылық қәбилетлигин билген ҳалда Кирхгоф нызамы бойынша деңе тәрепинен жийиликлердин ямаса толқын узынлықтарының қәлеген диапазонында нурландырылатуғын әнергияның мәнисин анықлау мүмкін.

**Стефан-Больцман нызамы.** Й.Стефанның 1879-жылы өткерген экспериментлері ҳәм Л.Больцманның 1884-жылы орынланған теориялық изертлеўлери абсолют қара денениң жыллылық нурланыўының әхмийетли нызамын дәлиллеўге мүмкіншилик берди. Бул нызам бойынша абсолют қара денениң әнергиялық жарқынлығы оның абсолют температурасының төртінши дәрежесине туұры пропорционал. Оны байлайынша жазамыз

$$R^* = \sigma T^4. \quad (2.1.7)$$

Ескертий: Ендигиден байлай жулдызша белгиси менен абсолют қара денениң жыллылық нурланыўының характеристикаларын белгилеймиз.

Хәзирги үақытлары өткериленген өлшеўлер Стефан-Больцман тұрақтысы ушын  $\sigma = 5,6686 \cdot 10^{-8}$  Вт/(м<sup>2</sup>(К<sup>4</sup>)) шамасын береди.

Хақыйқый денелер ушын Стефан-Больцман нызамы тек сапалық жақтан орынланады. Олар ушын температуралық жоқарылауы менен энергиялық жарқынлық үлкейеди. Бирақ ҳақыйқый денелер ушын энергиялық жарқынлықтың температурадан ғәрзелиги әпиүайы болған (2.1.7)-аңлатпа менен тәриплебейди, ал төмендегидей түрге ийе болады

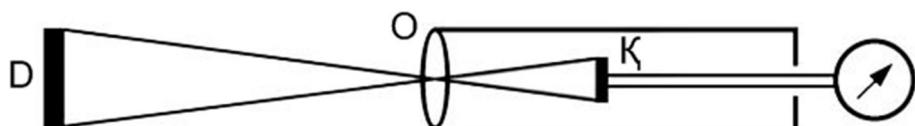
$$R = A_T R^* = A_T \sigma T^4 \quad (2.1.8)$$

(2.1.8)-аңлатпадағы  $A_T$  коэффициентиниң мәниси барлық үақытта да 1 ден киши ҳәм оны денениң интеграллық жутыў қәбилетлиги деп атайды. Ат ның мәнислері улыўма жағдайда температурадан ғәрзели ҳәм техникалық жақтан әхмийетли болған көп санлы материаллар ушын белгилі. Мысалы, температуның жеткилик дәрежедеги кең интервалында металлар ушын  $A_T = 0,1 \div 0,4$ , ал көмир менен металлардың окислері ушын  $A_T = 0,5 \div 0,9$  ға тең.

Хақыйқый қара емес денелер ушын эффективли радиациялық температура  $T_p$  түснегин киргизиў мүмкін. Тап усында  $T_p$  температурадағы абсолют қара дene ҳақыйқый денедей энергиялық жарқынлыққа ийе болады. Радиациялық температура  $T_p$  ның мәниси барлық үақытта да ҳақыйқый температура  $T$  ның мәнисинен киши. Ҳақыйқатында да әтирапымызда бар денелер ушын  $R = \sigma T_p^4 = A_T \sigma T^4$ . Буннан  $T_p = \sqrt[4]{A_T}$  екенлигине, яғни  $T_p < T$  теңсизлигиниң орынланатуғынына ийе боламыз. Себеби әдеттеги денелер ушын  $A_T < 1$  теңсизлигиниң орынланатуғының бәршеге түснекли.

Күшли қыздырылған денелердин радиациялық температурасын радиациялық пиromетрдин жәрдеминде анықлау мүмкін (2.1.5-сүйрет). Бундай әсбапта (пиrometrde) алыстағы қыздырылған дерек  $D$  ның сүйрети  $O$  объективиниң жәрдеминде қабыллағыш  $K$  ға нурландырыштың сүйрети усы қабыллағыштың сүйретиниң ұстине түсетуғындай етип проекцияланады. Қабыллағышқа жақтысы түсетуғын нурланыў энергиясының мәнисин баҳалау ушын әдетте металл ямаса ярым өткізгиш болометрлер яки термоэлементлер қолланылады. Болометрлердин жумыс ислеў принципи келип түсиўши нурланыў ағысын жутыўдың салдарынан металдың ямаса ярым өткізгишиң электрик қарсылығының өзгериүине тийкарланған. Термоэлементлердин келип түскен нурларды жутыўшы бетиниң температурасының өзгериўи оларда термоэлектр қозғаушы күшиниң пайда болыўына алып келеди.

Болометр ямаса термоэлементке тутастырылған әсбаптың көрсетиўи пиromетрдин қабыллағышына келип түскен нурланыў энергиясына пропорционал болады. Пиromетрди ҳәр қыйлы температуралардағы абсолют қара дene эталонының нурланыўы бойынша градуировкалас, усы әсбаптың шкаласы бойынша қыздырылған денелердин радиациялық температураларын анықлау мүмкін.



1.5-сүйрет. Оптикалық пиromетрдин принципиаллық схемасы.

Нурландырышының материалының интеграллық жутыў қәбилетлигин билиў арқалы экспериментте өлшенген нурланыўдың радиациялық температурасы  $T_p$  ны биле отырып оның ҳақыйқый температурасы болған  $T$  шамасын

$$T = \frac{T_p}{\sqrt[4]{A_T}}$$

формуласының жәрдемінде есаплап анықтай аламыз. Мысалы егер вольфрам нырландырыштың қыздырылған бетин бақлағанда радиациялық пиromетр  $T_p = 933$  К температуралық болса, онда оның ҳақырыңын температурасы  $T = 1500$  К шамасына тең болады (вольфрам А = 0,15)

**Винниң аұйысыў нызамы.** 1893-жылы немис физиги В.Вин иш тәрепинде идеал шашыратышы айналық дийўаллары бар қуұыслықтың ишинде нурланыуды қысыў менен байланыслы болған термодинамикалық процессті теориялық жақтан қарап шықты. Қозғалышы айнада нурлар шашырағандағы Допплер эффектиның есабынан жийиликтиң өзгериүін есапқа алып Вин абсолют қара денениң нур шығарыўшылық қәбиттегиленген

$$r_{\omega,T}^* = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (2.1.9)$$

түрине ийе екенлигин көрсетти. Бул жерде  $f$  арқалы қандай түрге ийе екенлигин термодинамикалық усыллар менен анықлауға болмайтуғын базы бир функция белгиленген.

Винниң бул формуласындағы жийиликтен (2.1.3)-формулаға сәйкес толқын узынлығына өтсек

$$r_{\lambda,T}^* = \frac{(2\pi c)^4}{\lambda^5} f\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right) \quad (2.1.10)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада нур шығарыўшылық уқыплығы  $r_{\lambda,T}^*$  ушын температура  $T$  ның тек  $\lambda T$  көбеймеси түринде ғана киретуғынлығы көринип түр. Бул жағдай  $r_{\lambda,T}^*$  функциясының базы бир өзгешеликтерин болжап айтыўға мүмкіншилик береди. Мысалы бул функция белгили бир  $\lambda_m$  толқын узынлығында максимумға ийе болады. Соның менен бирге бул толқын узынлығының мәниси температуры өзгергенде  $\lambda_m T = \text{const}$  шарты орынланатуғын шамаларға өзгереди.

Солай етип В.Вин жыллылық нурланыўы нызамын ашты. Бул нызам бойынша абсолют қара денениң нур шығарыўшылық қәбиттегиленген максимумы сәйкес келетуғын толқын узынлығы  $\lambda_m$  оның абсолют температурасына кери пропорционал өзгереди. В.Винниң жыллылық нурланыўы нызамын байлайынша жазамыз:

$$\lambda_m = \frac{b}{T} \quad (2.1.11)$$

Экспериментлерде анықланған бул нызамдағы турақты шаманың мәниси  $b = 2,898 \cdot 10^{-3}$  мК шамасына тең болып шықты.

Винниң нызамын әдетте аўысыў нызамы деп атайды. Гәп "аўысыў нызамы" ҳақында айтылғанда абсолют қара денениң температурасы жоқарылағанда оның нур шығарыўшылығының максимумының ийелеген орнының қысқа толқынлар областына аўысатуғынлығы нәзерде тутылады. 1.4-сүйретте келтирилген экспериментлердин нәтийжелери бул жуўмақтың тек сапалық жақтан дұрыс екенлигин көрсетип ғана қоймай (2.1.11)-формулаға сәйкес санлық жақтан да нызамның дұрыслығын тастыйықтайылады.

Хақыйқый денелер ушын Винниң аўысыў нызамы тек сапалық жақтан ғана орынланады. Қәлекен дene ушын температураның жоқарылауы менен дene энергияны ең көп нурландыратуғын толқын узынлығы қысқа тәрепке қарай жылышады. Бирақ бул жылышыў әпиүайы (2.1.11)-формула менен тәрипленбейди. Сонықтан бул формуланы ҳақыйқый денелердин нурланыўы ушын санлық шамалардың мәнисин сапалық жақтан баҳалау ушын ғана қолланыўға болады.

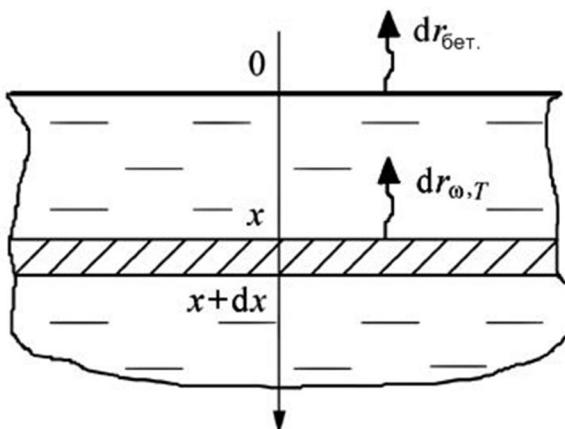
**Тұнде көриў (қараңғыда көриў).** Тұнғи ўақытлары (ямаса қараңғыда) адам әтирапындағы затларды көре алмайды. Бирақ сол затлардың барлығы да ноллик емес температураға иие ҳәм сонықтан олар тұнде де электромагнитлик жыллылық нурланыўын нурландырады. Винниң аўысыў нызамы болған (2.1.11)-формуланың жәрдеминде температурасы белгили болған денениң нур шығарыўшылық қәбилетлигиниң максимумына сәйкес келиўши толқын узынлығының шамасын баҳалау мүмкин. Баҳалаулар орташа температура 300 К болған жағдайда жыллылық нурланыўының тийкарғы бөлімінің узынлығы шама менен 10 мкм болған инфрақызыл нурланыўға сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Спектрдин көзге көринетуғын областындағы нурланыў ( $0,4 < \lambda < 0,7$  мкм) бундай температураларда жүдә киши энергияға иие болып, қуралланбаған көзге пүткіллей көринбейди.

Аспан тәрепке қарай жер денелериниң системасы түйік емес. Сонықтан Жердин бетиндеги денелер ҳәм олардың нурланыўы арасында тең салмақтың ҳалы жүзеге келмейди. Сонықтан температурасы Жердин бетиниң температурасынан жоқары болған денелер нурландыратуғын объектлер сыпатында микротолқынлық диапазонда бақлана алады. Инфрақызыл нурлардың усындай дереклерин тек арнаўлы әсбаплардың жәрдемінде көриў мүмкин. Бундай әсбапларда адам көзине көринбейтуғын микротолқынлық нурлар инфрақызыл нурлардың арнаўлы датчикleri тәрепинен электр сигналларына түрлендіриледи. Бул сигналлар кинескоплардағы электронлық дәстелерди басқарады ҳәм оның экранында қуралланбаған көз бенен көринбейтуғын денелердин сүүретин пайда етеди.

ХХ әсирдин ақырында тұнде көриў техникасының рауажланыўында үлкен өзгерислер жүз берди. Жаңа типтеги электронлық-оптикалық түрлендіргишилер дөретилди. Ҳәзирги ўақытлардағы биноклдердин, тұнде нышанаға алғыўға мүмкіншілік беретуғын дүзилислердин жәрдемінде бақлаушы бир неше жүз метр қашықтыға адамның, бир неше километр қашықтыға қозғалып баратырған танктиң анық сүүретин көре алады. Ал тұнде көриўге мүмкіншілік беретуғын пилотажлық көз әйнеклер вертолётларды қуралланбаған көз бенен көриў шекленген шарайтларда да күни тұни эксплуатациялауға мүмкіншілік береди.

**1.1-мәселе.** Көлеми жеткиликли дәрежеде үлкен болған қәлекен затты алайық. Оның қалыңдығының бир бирлигine  $E_{\omega,T}$  нур шығыраўшылық ҳәм  $A_{\omega,T}$  жутыўшылық қәбилетлиги сәйкес келетуғын болсын. Бундай денениң бетиниң абсолют қара денедей болып нурландыратуғынлығын көрсетиңиз. Мәселени шешкенде денениң бетине перпендикуляр бағытта тарқалатуғын нурланыў менен шеклендісін.

**Шешими:** Мейли  $x > 0$  ярым кеңислигин ийелеп турған заттың қатламының температурасы  $T$  болсын (2.1.6-сүүрет). Бул затта координаталары  $x$  ҳәм  $x + dx$  болған жуқа қатламды айырып алып қараймыз. Бул жуқа қатламның бетиниң бир бирлигі бетке қарай бағытланған,  $\omega$  жийилигидеги  $d\Gamma_{\omega,T} = E_{\omega,T}dx$  шамасындағы энергияны нурландырады.



1.6-сүйрет.

1.1-мәселени шешиў ушын арналған сүйрет.

Қатламның бетинен шығаман дегенше бул нурлар қалықтығы  $x$  болған жұтышы денениң қатламы арқалы өтеди. Усының нәтийжесинде Бургер нызамы бойынша нурланыў энергиясының ағымы экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди ҳәм  $x = 0$  болған беттен өткенде энергияның мәниси

$$dr_{\text{поб}} = dr_{\omega,T} \exp(-A_{\omega,T}x) = E_{\omega,T} \exp(-A_{\omega,T}x) dx$$

шамасына тең болады. Барлық қатламлар бойынша нурланыуды қосып (суммалап) қатламның бетиниң нур шығарышылық уқыптылығын табамыз:

$$r_{\text{поб}} = \int_0^{\infty} E_{\omega,T} \exp(-A_{\omega,T}x) dx = \frac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}} \int_0^{\infty} \exp(-\xi) d\xi = \frac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}}$$

Бирақ Кирхгоф нызамы бойынша  $E_{\omega,T}/A_{\omega,T} = r_{\omega,T}^*$ . Бул аңлатпада  $r_{\omega,T}^*$  арқалы абсолют қара денениң нур шығарышылық уқыптылығы белгиленген. Соныңтан  $r_{\text{бет}} = r_{\omega,T}^*$  ҳәм усының менен биз қатламның бетиниң абсолют қара денедей болып нурландыратуғынлығын дәлилледік.

Бул әхмийетли жуўмақ (биз буны мысал ретинде келтиримиз) үлкен көлемге ийе жоқары температуралы плазманың бетинен (мысалы Қояштың бетинен) нурланатуғын электромагнит толқынлардың спектрлик қурамы бойынша абсолют қара денениң нурланыуына неликтен жүдә жақын екенлигин көрсетеди.

**1.2-мәселе.** Қояштың нур шығарыў қәбилетлигиниң максимумы  $\lambda_m = 0,48$  мкм ге сәйкес келеди. Қояштың нурланыуын абсолют қара денениң нурланыуына жақын деп қарап Жер дөгерегинде қозғалышы орбиталық станцияның қуяштығы  $R = 10$  квт болған Қояш батареяларының панеллериниң майданларының қосындысының мәнисин бағалаңыз. Қояш батареясының пайдалы тәсир коэффициентин  $\eta = 20\%$  деп есаплаңыз. Астрономиялық шамалардың мәнислерин кестелерден алыш керек.

Шешими: Винниң аўысыў нызамынан (2.1.11)-формула бойынша Қояштың бетиниң температурасын есаптаймыз

$$T = b/\lambda_m = (2,9 \cdot 10^{-3})/(0,48 \cdot 10^{-6}) \approx 6000 \text{ K.}$$

Енди  $R = \sigma T^4$  Стефан-Больцман нызамы бойынша Қояштың энергиялық жарқынлығын ҳәм оның бетиндеги нурланыудың қуяшты болған  $W$  шамасын табамыз

$$W = R \cdot 4\pi R_K^2 = 4\pi\sigma T^4 R_K^2.$$

Бул аңлатпадағы  $R_{\text{K}}^2$  Қуяштың радиусы болып табылады.

Қуяш барлық тәреплерге изотроп түрде энергияны нурландырады деп есаплаймыз ҳәм усы тийкарда Қуяш турақтысы болған С шамасының мәнисин табамыз. Бул шама радиусы Жер менен Қуяш арасындағы қашықтыққа ( $R_{\text{KJ}}$  шамасына) тең болған орайында Қуяш турған сфералық беттиң бир бирлик майданынан өтетуғын нурланыў энергиясының ағысына тең.  $R_{\text{KJ}} = 1,49 \cdot 10^{11}$  м. Бундай жағдайда

$$C = \frac{W}{4\pi R_{\text{C3}}^2} = \sigma T^4 \cdot \left( \frac{R_{\text{C}}}{R_{\text{C3}}} \right)^2 = 1,6 \cdot 10^3 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2}$$

Солай етип Жердин әтирапындағы космослық кеңисликте Қуяштан жетип келетуғын нурлардың бағытына перпендикуляр қойылған беттиң бир бирлиги арқалы бир секундта 1,6 кДж Қуяштың нурланыўы өтеди екен. Бул энергияның бир бөлеги қуяш батареясында электр энергиясына айланады. Қуяш батареясының пайдалы тәсир коэффициентин есапқа алған ҳалда батареяның электрлик қуұатын табамыз

$$P = \eta C S.$$

Буннан Қуяш батареясының панелиниң майданын табамыз

$$S = P / (\eta C) = 10^4 / (0,2 \cdot 1,6 \cdot 10^3) = 31,2 \text{ м}^2.$$

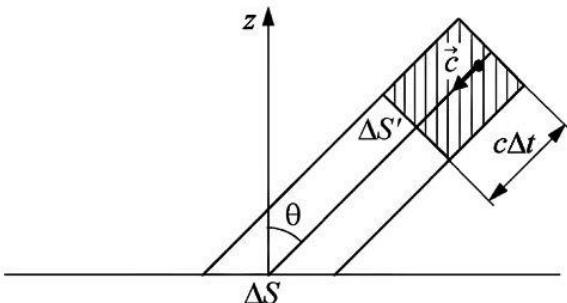
## 2-1-2. Нурланыўдың квантлық теориясы

**Тең салмақтың нурланыў энергиясының көлемлик тығызлығы.** Тең салмақтың жыллылық нурланыўы теориясының тийкарғы мәнисин қарап шығамыз. Буның ушын идеал түрдеги шағылыштырыўшы дийўалларға ийе қуұыслық қабырғасының узынлығы 1 ге тең куб формасына ийе деп есаплаймыз. Бул әпиүайыластырылған жағдай болса да алатуғын жуұмақтар улыўмалық характерге ийе болады. Бул қуұыслыққа температурасы  $T$  ға тең болған өлшемлери бойынша киши абсолют қара денени жайластырамыз. Бул дene тәрепинен электромагнит толқынларды шығарыў ҳәм жутыўдың есабынан қуұыслық тең салмақтың жыллылық нурланыўы менен толады. Оның энергиясының тығызлығын  $u(T)$  арқалы белгилеймиз ҳәм бул функцияның абсолют температура  $T$  ға байланыслы екенligин атап өтемиз. Жыллылық нурланыўының энергиясының бул көлемлик тығызлығын жийиликлер спектри бойынша жайыў мүмкін. Бул математикалық аңлатпа төмендегидей түрге ийе болады:

$$u(T) = \int_0^\infty u_{\omega,T} d\omega \quad (2.1.12)$$

Бул жерде  $u_{\omega,T} \equiv u(\omega,T)$  функциясы  $\omega$  жийилиги жанындағы жийиликтиң бир бирлигине сәйкес келиўши нурланыў энергиясының көлемлик тығызлығын анықтайты. Бул функцияны  $T$  температурадағы жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық тығызлығы деп атайды.

Әлбетте, жыллылық нурланыуының энергиясының спектраллық тығызлығы усы нурланыў менен тең салмақтың турған абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыплығы менен байланыслы. Бул байланысты абсолют қара денениң бетинде алынған  $\Delta S$  элементар майданың қасындағы нурланыұды қараў арқалы анықлауға болады (2.1.7-сүйрет).



1.7-сүйрет.

Биз сайлап алған майданың қасындағы қәлеген ноқатта жыллылық нурланыуы  $4\pi$  денелик мүйеши шеклеринде мүмкін болған барлық бағыттарда бирдей болып тарқалған. Сонлықтан  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$  денелик мүйешине сәйкес келиүши нурланыў энергиясының тығызлығын (яғни  $\Delta S$  майданына оған түсирилген нормалға  $\theta$  мүйеши бағытында түсетуғын энергияның тығызлығын) былайынша жаза аламыз:

$$d\tilde{u} = u(T) \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (2.1.13)$$

Бирақ, егер энергиясының тығызлығы усындай болған нурланыў вакуумде жақтылықтың тезлиги с менен  $\Delta S$  бетине  $\theta$  мүйеши менен келип түсетуғын болса, онда  $\Delta t$  ўақыты ишинде усы майданға 1.7-сүйретте штрихланған көлемдеги барлық нурланыў энергиясы келип түседи. Оның санлық шамасы мынаған тең:

$$dw = d\tilde{u} c \Delta t \Delta S' = d\tilde{u} c \Delta t \Delta S \cos \theta = \frac{c}{4\pi} u(T) \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi \Delta S \Delta t \quad (2.1.14)$$

Мүмкін болған барлық мүйешлерде түсетуғын нурланыў энергиясын суммаласақ ўақыттың бир бирлигі ишинде беттиң бир бирлик майданына түсетуғын нурланыў энергиясының ағысы болған  $\Phi$  шамасын табамыз:

$$\Phi = \frac{c}{4\pi} u(T) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \cos \theta \cdot \sin \theta d\theta \cdot d\theta = \frac{c}{4} u(T) \quad (2.1.15)$$

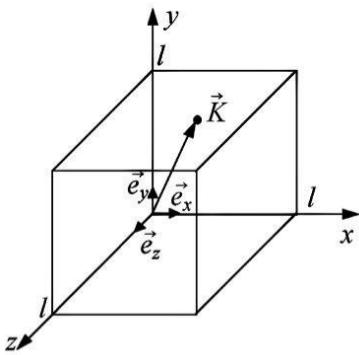
Термодинамикалық тең салмақтың ҳалында тап усындай  $\Phi$  ағысы абсолют қара денениң бир бирлик бетинен де нурланыуы керек. Бирақ, анықлама бойынша энергияның усындай ағысы абсолют қара денениң жарқынлығы болып табылады. Сонлықтан

$$R^* = \frac{c}{4} u(T) \text{ ямаса } u(T) = \frac{4}{c} R^*. \quad (2.1.16)$$

Жоқарыда айтылған барлық гәpler  $\omega$  жийилигидеги нурланыўдың барлық спектраллық қураўшысы ушын да орынлы болады. Соныңтан тап сондай аңлатпа менен абсолют қара денениң нур шығарыўшылық үқыплығы  $r_{\omega,T}^*$  менен тең салмақлық жыллышың нурланыўының энергиясының спектраллық көлемлик тығыздығы  $U_{\omega,T}$  шамасы да байланысқан:

$$r_{\omega,T}^* = \frac{c}{4} U_{\omega,T} \text{ ямаса } U_{\omega,T} = \frac{4}{c} r_{\omega,T}^*. \quad (2.1.17)$$

**Рэлей-Джинс формуласы.** Жоқарыда қарап өтилген дийўаллары идеал шағылыстыратуғын кублық формасындағы қуұыслықта электромагнит майданы тек туўры ҳәм шашыраған толқынлардың суперпозициясы түринде жасайды. Басқа сөз бенен айтқанда қуұыслықтың ишинде электромагнит майданы қуұыслықтың дийўалларында түйинлерге ийе турғын электромагнит майданлары түринде болады.



1.8-сүүрет.

Декарт координаталар системасының көшерлерин кублық қуұыслықтың үш өзара перпендикуляр қабырғасы бойлап түсиремиз (2.1.8-сүүрет) ҳәм  $\vec{e}_x$ ,  $\vec{e}_y$  және  $\vec{e}_z$  арқалы сәйкес координата көшерлери бағытында түсирилген бирлик ортларды белгилеймиз. Бундай жағдайда х көшери бағытында тарқалатуғын толқын ушын турғын толқынның пайда болыўы ушын

$$l = n_1 \frac{\lambda}{2}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots \quad (2.1.18)$$

шәртининң орынланыўы талап етиледи. Бул шәрт бойынша шашыратыўшы дийўаллар арасындағы қашықлық  $l$  узынлығында пүтин сан еселенген ярым толқын узынлығының жайласыўы керек. Бундай толқын ушын толқын векторы  $\vec{k} = k_x \vec{e}_x$  болғанлықтан (бул аңлатпада  $k_x = \frac{2\pi}{\lambda}$ ) х бағытында турғын толқынлардың пайда болыўы шәртин толқынлық санға қойылатуғын шәрт сыпатында жаза аламыз:

$$k_x = n_1 \frac{\pi}{l}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots \quad (2.1.19)$$

Тап усындағы талқылаўларды у ҳәм з көшерлери бағытында тарқалатуғын толқынлар ушын да өткере аламыз. Бул талқылаўлар туўры ҳәм шағылысқан нурлардың суперпозициясы болған турғын толқын ушын улыўмалық жуўмақты

келтирип шығарыўға мүмкиншилик береди. Ҳақыйқатында да кублық формаға ийе қуўыслық ишинде ықтыйярлы

$$\vec{k} = k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y + k_z \vec{e}_z$$

толқын векторына ийе турғын толқын ушын

$$k_x = n_1 \frac{\pi}{l}, \quad k_y = n_2 \frac{\pi}{l}, \quad k_z = n_3 \frac{\pi}{l}. \quad (2.1.20)$$

шәртиниң орынланыўы керек болады. Бул аңлатпада  $n_1, n_2$  ҳәм  $n_3$  арқалы бир биринен ғәрэзсиз  $0, 1, 2, \dots$  мәнислерин қабыл ететуғын пүтін санлар белгиленген.

(2.1.20) шәртлерин қуўыслық ишиндеги тоқынлардың толқынлық санына қойылатуғын шәрт сыпатында жаза аламыз

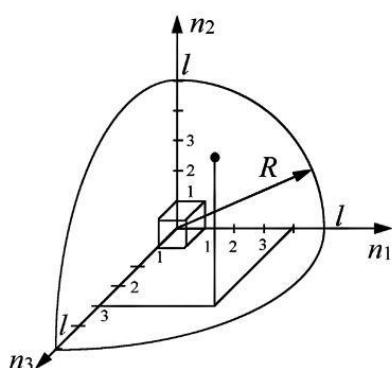
$$k = |\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\pi}{l} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}. \quad (2.1.21)$$

Бул формулада да  $n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots$   $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$  болғанлықтан биз қарап атырған кублық формаға ийе қуўыслықтағы тең салмақлық жыллылық нурланыўын ҳәр қайлы жийиликлерге ийе турғын электромагнит толқынларының жыйинағы деп қарай аламыз. Бул жийиликлердин мәнислері

$$\omega = \frac{\pi c}{l} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}, \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.22)$$

аңлатпасының жәрдемінде есапланады. Терис мәниске ийе болмайтуғын  $n_1, n_2, n_3$  санларының ҳәр бир үшінне бир турғын толқын сәйкес келеди. Усындағы турғын толқынлардың улыўмалық саны шексиз үлкен.

Қуўыслықтың ишиндеги жийилиги берилген  $\omega$  мәнисинен үлкен болмаған турғын электромагнит толқынларының санын анықтаймыз. Бұның ушын дискрет болған үш өлшемли  $Z^3$  кеңислигин қараймыз (2.1.9-сүйрет.). Бул кеңисликтеги координаталары  $n_1, n_2$  ҳәм  $n_3$  болған ҳәр бир ноқат тең салмақлы жыллылық нурланыўына ийе қуўыслықтағы бир турғын электромагнит толқынға сәйкес келеди. Бул ноқатлар  $Z^3$  кеңислигин көлемі бир бирлікке тең болған қутышаларға бөледи.



1.9-сүйрет.  
Дискрет болған үш өлшемли  $Z^3$  кеңислиги. Бул кеңисликтеги координаталары  $n_1, n_2$  ҳәм  $n_3$  болған ҳәр бир ноқат тең салмақлы жыллылық нурланыўына ийе қуўыслықтағы бир турғын электромагнит толқынға сәйкес келеди. Бул ноқатлар  $Z^3$  кеңислигин көлемі бир бирлікке тең болған қутышаларға бөледи.

Енди (2.1.22) шәртин  $Z^3$  кеңислигидеги сфералық беттиң теңлемеси сыпатында жазамыз

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2. \quad (2.1.23)$$

Бул аңлатпада  $R = \omega/c$  арқалы сфераның радиусы белгиленген.

Енди жийиликлериниң мәниси  $\omega$  шамасынан үлкен болмаған турғын толқынлардың саны болған  $\tilde{N}$  шамасын анықлауға болады. Буның ушын  $Z^3$  кеңислигидеги радиусы  $R$  ге тең болған шардың оң октантты ишиндеги ноқатлардың санын есаптаймыз.  $Z^3$  кеңислигидеги ҳәр бир қоқат пенен бир бирлик көлемге ийе қутыша байланысқа болғанлықтан радиусы  $R$  ге тең болған шардың  $1/8$  бөлөгиниң көлеми биз излеп атырған ноқаттар санын (турғын толқынлар санын) анықтаймыз. Соныңтан

$$\tilde{N} = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{1}{6} \frac{\omega^3 l^3}{\pi^2 c^2} = \frac{1}{6} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot V. \quad (2.1.24)$$

Бул жерде  $V = l^3$  арқалы биз қарап атырған тең салмақлы жылдылық нурланыўы жайласқан көлем белгиленген.

Электромагнит толқынларының көлденең толқын екенлигин атап өтепиз. Соныңтан қуұыслық ишинде  $\vec{l}$  шамасының ҳәр бир бағытында улыўма жағдайда өз-ара перпендикуляр тегисликлерде поляризацияланған еки толқын тарқала алады. Соныңтан жийилиги  $\omega$  дан үлкен болмаған турғын толқынлардың улыўмалық санын былайынша анықлау керек

$$N = 2\tilde{N} = \frac{1}{3} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} V. \quad (2.1.25)$$

(2.1.25) ти жийилик бойынша дифференциаллап қуұыслықтағы жийиликлери  $\omega$  дан  $d\omega$  ға шекемгі турғын толқынларды табамыз:

$$dN = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} V. \quad (2.1.26)$$

Егер енди  $\langle \varepsilon \rangle$  арқалы жийилиги  $\omega$  болған турғын электромагнит толқынның орташа энергиясын белгилесек, онда тең салмақлық жылдылық нурланыўының спектраллық тығыздығының анықламасы бойынша

$$u_{\omega,T} \cdot d\omega = \frac{dN \langle \varepsilon \rangle}{V}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Буннан (2.1.26)-аңлатпаны есапқа алып

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \langle \varepsilon \rangle \quad (2.1.27)$$

екенлигине ийе боламыз.

Жыллылық нурланыўы теориясын раўажландырыў барысында Д.Рэлей (1900-жылы) ҳәм Д.Джинс (1905-жылы) ҳәр бир турғын электромагнит толқынды еки еркинлик дәрежесине ийе объект сыйпатында қараўды усынды. Олардың биреўи электрлиқ, екиншиси магнитлик.

Энергияның еркинлик дәрежелери бойынша тең өлшეўли тарқалыўы ҳаққындағы классикалық теоремаға муўапық термодинамикалық тең салмақлық ҳалында системаның ҳәр бир еркинлик дәрежесине  $\frac{1}{2}kT$  шамасына тең энергия сәйкес келеди. Бул аңлатпада  $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К арқалы Больцман турақтысы белгиленген. Соныңтан Т температурасындағы тең салмақлық жыллылық нурланыўында жийилиги ω болған ҳәр бир турғын толқынға орташа

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2}kT + \frac{1}{2}kT = kT \quad (2.1.28)$$

энергиясы сәйкес келеди. Бундай жағдайда (1.27)-аңлатпадан

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \quad (2.1.29)$$

аңлатпасын келтирип шығарамыз. (2.1.17)-аңлатпаларының жәрдемінде тең салмақлық жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық тығыздығы ушын алынған бул формуланы абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыптығы ушын жазылған Рэлей-Джин формуласына түрлендириў мүмкін:

$$r_{\omega,T}^* = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT \quad (2.1.30)$$

Рэлей-Джинс формуласы абсолют қара денениң нурланыўы бойынша алынған эксперименталлық мағлыўматларға киши жийиликлер ямаса үлкен толқын узынлықтары областларында жақсы сәйкес келеди. Бирақ үлкен жийиликлер ямаса киши толқынлар областларында Рэлей-Джинс формуласы менен экспериментлерде алынған мағлыўматлар арасында үлкен айырма жүз береди. Усының менен бир қатарда (2.1.29) менен (2.1.30) ды барлық жийиликлер бойынша интегралласақ тең салмақлық нурланыўының энергиясының интеграллық тығыздығы  $u(T)$  ҳәм абсолют қара денениң энергетикалық жарқынлығы  $R^*$  ушын шексиз үлкен мәнис аламыз. Ҳақыйқатында да

$$u(T) = \frac{4}{c} R^* = \int_0^\infty u_{\omega,T} d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega \rightarrow \infty.$$

Буннан жыллылық нурланыўының классикалық теориясы бойынша нурланыў энергиясының шекли мәнислеринде зат пенен нурланыў арасында тең салмақтың орын алыўы мүмкін емес деген жуўмақ шығады. Бул жуўмақ тәжирийбе нәтийжелерине пүткиллей қайшы келеди.

Рэлей-Джинстың формуласындағы усындағы қарама-қарсылықтың нәтийжени П.С.Эренфест "ультрафиолет катастрофа" деп атады. Ал классикалық теория бойынша Рэлей-Джинстың формуласы дұрыс келтирилген шығарылған.

**Квантлар ҳақындағы гипотеза. Планк формуласы.** "Ультрафиолет катастрофа" классикалық физиканың бир қатар принципиаллық ишкі қарама-қарсылықтарға ийе екенлигин айқын көрсетти. Сонықтан жылдылық нурланыўы теориясында пайда болған машқалаларды шешиў ушын пүткіллей жаңа идеялардың керек екенлиги айқын болды.

Бундай физикалық идея 1900-жылы М.Планк тәрепинен квантлар ҳақындағы гипотеза түринде усынылды. Бул гипотеза бойынша заттар тәрепинен нурлар үзлиksiz нурландырылмайды ямаса жутылмайды, ал порциялар түринде нурландырылады ямаса жутылады. Энергияның шекли порцияларын М.Планк энергияның квантлары деп атады. Квантлық энергияның мәниси нурланыўдың жийилигинен ғәрэзли ҳәм

$$E = \hbar\nu \text{ ямаса } E = \hbar\omega \quad (2.1.31)$$

формулаларының жәрдеминде бериледи. Бул жерде  $\hbar = 2\pi\hbar$  арқалы жаңа фундаменталлық турақлы шама берилген. Бул турақлы шаманы Планк турақлысы деп атайды. Ҳәзирги ўақытлардағы мағлыўматлар бойынша

$$\hbar = (6,62618 \pm 0,00004) \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{s}$$

Бул турақлының өлшем бирлиги ""энергия  $\times$  ўақыт"" физикадағы "тәсир" ("действие") деп аталатуғын шаманың өлшемине сәйкес келеди. Сонықтан Планк турақлысын тәсир квантты деп те атайды.

Классикалық физика бойынша қәлеген физикалық шама, соның ишинде энергия да үзлиksiz өзгереди. Оның шексиз киши ўақыт ишиндеги өсими де шексиз киши шама. Тап усындай жағдай орын алғып атырған ўақытта усынылған квантлар ҳақындағы гипотеза физиканың буннан былай раýажланыўы ушын оғада үлкен тәсирин тийгизди. XX әсирдин басында усынылған Планктиң квантлар ҳақындағы гипотезасы квантлық механиканың дөретилийне алғып келди. Ҳәзирги заман физикалық теория болып табылатуғын квантлық механикада квантланыў идеясы ямаса дискретлик системаның ҳалын характерлеүши ҳәр қыйлы физикалық шамаларға тарқатылады. Тап усындай көз-қараста 1900-жылды квантлық физиканың туýылған жылы деп атаў мүмкин. Бул теория келеси 100 жыл даýамында ҳәр тәреплеме ҳәм жоқары тезликтер менен раýажланып, физиклерге атомлық құбылыслар қәддиндеги микродунъяның тамамланған ҳәм қарама-қарсылықсыз теориясын дөретиўге мүмкиншилик берди.

Бириňши этапта нурланыў энергиясының квантланыўы ҳақындағы гипотезаның жәрдеминде Планк теңсалмақлық жылдылық нурланыўының толық теориялық тәриплемесин берди ҳәм классикалық теорияның қарама-қарсылықтарын ақырына шекем қалдырмай шешти.

Нурланыўдың квантлық теорияның классикалық теориядан парқы ө жийилигидеги нурланыўдың орташа энергиясын есаплауда айқын көринеди. Планк гипотезасын есапқа алған ҳалда нурланыўдың орташа энергиясы

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P_n \varepsilon_n \quad (2.1.32)$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул формулада  $\varepsilon_n = n\hbar\omega$  арқалы нурланыў энергиясының мүмкин болған мәниси, ал  $P_n$  арқалы термодинамикалық тең

салмақлық ҳалында  $T$  температрада нурланыўдың  $\varepsilon_n$  энергиясына ийе болыў итималлығы белгиленген. Итималлықтың бул мәнисин Больцман тарқалыўының жәрдеминде анықлау мүмкін. Бул итималлықты базы бир константа дәллигинде

$$P_n = A e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}} \quad (2.1.33)$$

түринде жазамыз. Егер  $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$  екенлигин есапқа алсақ, онда  $A$  константасы ушын

$$A = \left( \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}} \right)^{-1}$$

формуласына ийе боламыз. Солай етип нурланыўдың квантлық теориянда жийилиги  $\omega$  болған нурланыўдың орташа энергиясы мына аңлатпаның жәрдеминде бериледи екен:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \hbar \omega e^{-\frac{n \hbar \omega}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n \hbar \omega}{kT}}} = \frac{\hbar \omega \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n \xi}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \xi}}. \quad (2.1.34)$$

Бул формуладағы  $\xi = \frac{\hbar \omega}{kT}$ . Бул формуланың бөлімінде турған сумманы геометриялық прогрессияның жәрдеминде анықтаймыз

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \xi} = \frac{1}{1 - e^{-\xi}}. \quad (2.1.35)$$

Бул қатнасты  $\xi$  бойынша дифференциаллап (2.1.34)-формуланың бөлімінде турған қатардың суммасын табамыз:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n \xi} = - \frac{dS}{d\xi} = \frac{e^{-\xi}}{(1 - e^{-\xi})^2}. \quad (2.1.36)$$

Сумманың табылған мәнисин (2.1.34)-аңлатпаға қойып жийилиги  $\omega$  шамасына тең болған нурланыўдың орташа мәниси ушын ақырғы аңлатпаны аламыз

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}. \quad (2.1.37)$$

Киши жийиликлерде  $\frac{\hbar \omega}{kT} \ll 1$  ҳәм  $e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar \omega}{kT}$ . Сонықтан (2.1.37)-формуладан классикалық теорияның формуласы болған  $\langle \varepsilon \rangle = kT$  формуласына кайтып келемиз. Бирақ үлкен жийиликлер областында (2.1.28)- ҳәм (2.1.37)-формулалар бойынша есапланған нурланыўдың орташа энергиялары пүткіллей ҳәр қылыш мәнислерге ийе болады. Ал тап усындај жийиликлер областында классикалық теория "ультрафиолет катастрофаға" алып келетүғын еди. Нурланыўдың квантлық теориясы эксперимент пенен теория арасындағы бул қарата-қарсылықты

сапластырады. Ҳақыйқатында да (2.1.37) ни (2.1.27) ге қойып тең салмақты жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық тығызлығы ушын Плантиң белгили формуласын аламыз:

$$u_{\omega,T} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (2.1.38)$$

Байланыс формуласы (2.1.17) абсолют қара денениң жийиликлердиң барлық диапазонындағы нур шығарыўшылығын тәриплейтуғын Планк функциясын

$$r_{\omega,T}^* \equiv f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (2.1.39)$$

түринде жазыўға мүмкіншилик береди.

Планк функциясы абсолют қара денениң барлық жийиликлерде ҳәм барлық температураларда нурланыўы бойынша экспериментлерде алынған нәтийжелерге сәйкес келеди. Төменги жийиликлерде нурланыўдың квантлық теориясының (2.1.39)-формула Рэлей-Джинстиң (2.1.30)-формуласына өтеди. Жоқары жийиликлерде  $\hbar\omega \gg kT$ ,  $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \gg 1$  теңсизликтери орынланатуғын жоқары жийиликлерде (2.1.39)-формула

$$f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \quad (2.1.40)$$

формуласына айланады. Бул формуланың құрылышын В.Вин 1893-жылы болжаған еди.

Жоқарыда баян етилген Планк формуласын келтирип шығарыўусылы тарийхый жақтан ең бириňши рет қолланылған усыл болып табылады. Кейинирек бул мәселе квантлық физиканда басқа да усыллардың жәрдеминде шешилди. Олардың бир қаншасы алдымыздағы параграфларда қарап өтиледи.

1.3-мәселе. Нурланыўдың квантлық теориясының тийкарғы аңлатпаларын пайдаланып Стефан-Больцман нызамын келтирип шығарыңыз ҳәм Стефан-Больцман турақтысының мәнисин есаплаңыз.

Шешими: (2.1.39)-Планк функциясын барлық жийиликлер бойынша интеграллап абсолют қара денениң энергетикалық жарқынлығын табамыз. Интеграллаудың нәтийжесинде

$$R^* = \int_0^\infty r_{\omega,T}^* d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = \frac{k^4 T^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

аңлатпасын аламыз. Алынған нәтийже  $R^* = \sigma T^4$  түринде жазылатуғын Стефан-Больцман нызамына сәйкес келеди. Бул аңлатпадағы турақты

$$\sigma = \frac{k^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\omega x^3 dx}{e^x - 1}$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

Меншикли емес

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

интегралының мәнисин Mathematica 8.0 программалаў тилинин жәрдеминде есаплаймыз ҳәм  $\frac{\pi^4}{15}$  нәтийжесин аламыз. Соныңтан Стефан-Больцман турақтысы ушын

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}$$

мәнисин аламыз.

Планктың өзи экспериментте анықланған  $\sigma$  турықтысының мәнисин пайдаланған ҳәм жоқарыдағы формула бойынша  $\hbar$  тың мәнисин есаплаған.

1.4-мәселе. Абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыптығы ушын жазылған Планк функциясының жәрдеминде жыллыштық нурланыўы ушын Винниң  $\lambda_m T = b$  нызамындағы  $b$  турақтысының мәнисин есаплаңыз.

Шешими: (2.1.3)-формула бойынша  $\omega = 2\pi c/\lambda$  өзгериүшисин алмастырып, (2.1.39)- Планк функциясын түрлендириудың жәрдеминде абсолют қара денениң нур шығарыў уқыптығын толқын узынлығының функциясы түринде табамыз:

$$r_{\lambda, T}^* \equiv \Phi(\lambda, T) = \frac{4\pi^2 c^2 \hbar}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{\left\{ \exp\left(\frac{2\pi c \hbar}{\lambda k T}\right) - 1 \right\}}.$$

$z = 2\pi c \hbar / (\lambda k T)$  белгилеўин пайдаланып  $\Phi$  функциясын

$$\Phi = A \frac{z^5}{(e^z - 1)}, \quad A = \text{const}$$

түринде жазамыз.  $\Phi$  функциясының қандай  $z = z_m$  мәнисинде максимумға ийе болатуғынлығын табамыз. Буның ушын

$$\frac{d\Phi}{dz} = A \frac{5z^4(e^z - 1) - z^5 e^z}{(e^z - 1)^2}$$

түрүндисиң алып, оны нолге теңеймиз ҳәм  $z = z_m$  экстремаллық мәниси ушын

$$5(e^{z_m} - 1) - z_m^5 e^{z_m} = 0$$

трансцендент теңлемесин ямаса

$$Z_m = 5 \left(1 - e^{-z_m}\right)$$

формуласын аламыз. Бул мәселени Mathematica 8.0 тилинде де шешиў мүмкін. Бундай жағдайда  $Solve[\frac{5z^4(e^z-1)-z^5e^z}{(e^z-1)^2} == 0, z]$  аңлатпасының шешими ретинде  $z \rightarrow 5 + ProductLog[-\frac{5}{e^5}]$  шешимине ийе боламыз (биз бул жерде  $m$  индексин жазбадық).  $N[z \rightarrow 5 + ProductLog[-\frac{5}{e^5}]]$  аңлатпасы бойынша жүргизилген есаплаўлар  $z \rightarrow 4.965114231744276$  нәтийжесин, яғни  $Z_m = 4,965$  шамасын береди.

Демек

$$\frac{2\pi c\hbar}{\lambda_m kT} = 4,965$$

теңлиги орынланған жағдай ушын алынған  $\lambda = \lambda_m$  толқын узынлығында абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыплығы максимумына жетеди екен.

Буннан

$$\lambda_m T = b = \frac{2\pi c\hbar}{4,965k} = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$$

екенлигине ийе боламыз.

## 2-1-3. Фотон газы ҳәм оның қәсийетлері

**Нурланыўдың фотонлық теориясы.** М.Планктың квантлар ҳаққындағы гипотезасын рајажландырып А.Эйнштейн 1905-жылы нурланыўдың (жақтылықтың) квантлық қәсийеттери оның тек заттардан шығарылғанында ҳәм заттарда жутылғанында ғана емес, ал нурлардың кеңисликте тарқалғанында да көринеди деп болжады. Ньютон тәрепинен XVIII ғасирдин басында усынылған жақтылықтың корпускулалық теориясын қайтадан тиклеп нурланыўды көп сандағы бөлекшелерден турады, бул бөлекшелердин ҳәр қайсысы энергия квантына ийе болып кеңисликте жақтылықтың вакуумдағы тезлигидей тезлик  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$  пенен қозғалады деген гипотезаны усынды. Усындей бөлекшелердин қәсийеттерин қарап шығамыз.

Фотон деп аталатуғын нурланыўдың бөлекшеси ультраполятивистлик деп аталатуғын зарядланбаған бөлекше болып табылады. Фотонның қәсийеттери арнаўлы салыстырмалық теориясының тийкарғы қатнасларының жәрдеминде ғана тәрипленийи мүмкін. Мысалы бул теориядан фотонның массасы нолге тең болған элементар бөлекше екенлиги келип шығады. Бул жағдай фотонның барлық үақытта с тезлиги менен қозғалатуғынлығын ҳәм тынышлық ҳалында тұра алмайтуғынлығын көрсетеди. Егер фотон басқа элементар бөлекше менен соқлығысыўдың ақыбетинде "тоқтайтуғын" болса, онда ол энергиясын соқлығысқан бөлекшеге берип жоқ болады.

Фотонның энергиясы

$$\varepsilon_\Phi = h\nu = hc/\lambda. \quad (2.1.41)$$

жақтылық ушын ( $\lambda \sim 500$  нм) бир неше электронвольттен өткір гамма-нурлары ушын ( $\lambda = 10^{-3}$  нм) миллионлаған электронвольтке шекемги кең диапазонда жатады.

С тезлиги менен қозғалышы фотон импульске ийе болады. Оның импульси менен энергиясы арасында  $P_\Phi = \epsilon_\Phi$  түріндеги релятивистлик қатнас орын алады. (2.1.32)-аңлатпаны есапқа алып

$$P_\Phi = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (2.1.43)$$

теңлигин жаза аламыз.

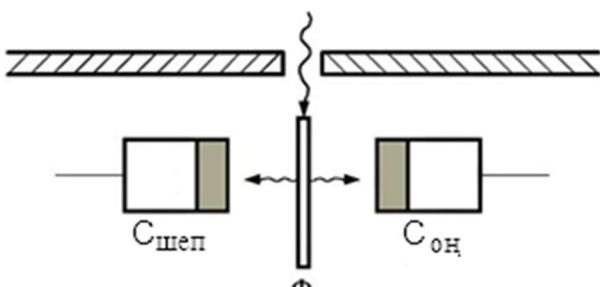
Фотон ушын модули  $k = 2\pi/\lambda$  шамасына тең, ал тарқалыў бағыты  $\vec{k}$  векторы жәрдеминде анықланатуғын нурланыў ушын (2.1.43)-формуланы төмендегидей векторлық түрде жазыў мүмкін

$$\vec{P}_\Phi = \hbar \vec{k} \quad (2.1.44)$$

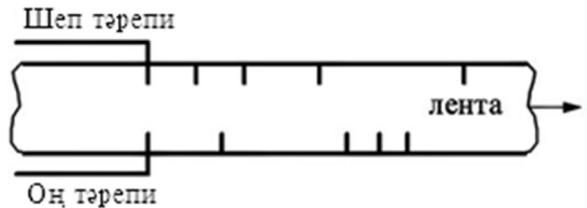
**Боте тәжирийбеси.** Экспериментте нурланыўға тийисли болған айырым фотонды табыўға бола ма? деген сораў бериледи. Егер фотон үлкен массаға ҳәм үлкен энергияға ийе болғанда бул сораўға аңсат жуўап беріүге болар еди. (2.1.42)-ҳәм (2.1.43)-аңлатпалардан бундай фотонның қысқа толқынлы әлектромагнит нурланыўда (мысалы рентген нурларында) болатуғынлығын аңлаўға болады.

Рентген нурларының фотонын табыў ушын В.Боте 1925-жылы орынлады. Бул экспериментте жуқа металл фольга  $\Phi$  (2.1.10-а сүйрет) рентген нуры менен нурландырылды. Усының менен бирге фольганың өзи әззи екинши нурланыўдың дерегине айланды.

Толқынлық көз-қараслар бойынша ҳәтте жүдә әззи нурлардың энергиясы кеңисликте оң ҳәм шеп тәреплерге қарай бир текли тарқалған болады. Бундай жағдайда шеп ҳәм оң тәреплерде жайластырылған есаплағыштар бир үақытта бирдей шамаларды көрсеткен болар еди. Соның менен бирге усындағы жағдайларда шептеги ҳәм оң тәрептеги есаплаұшы дүзилислер менен тутастырылған жазып алғашы әсбаплар қозғалышы қағаз лентада бирдей тамғаларды қойған болар еди (2.1.10-б сүйрет).



1.10-а сүйрет.



1.10-б сүйрет.

Нурланыўдың корпускулалық фотонлық теориясы көз-қарасында екинши нурланыўдың энергиясы бир фотонның энергиясындай киши болғанда, фотонлар фольгада тек оң тәрепке ямаса тек шеп тәрепке нурландырылған болар еди. Бундай жағдайда қозғалышы қағаз лентаға түсирилген тамғалар бир бирине сәйкес келмей қалады.

Тәжирийбе (2.1.10-б сүүрет) нурланыўдың фотон теориясының жуўмағын тастыбылады ҳәм усының менен бирге фотонның бар екенлиги экспериментте дәлилленди

С.И.Вавиловтың басшылығында өткерилген экспериментлер көзге бир секундтың ишинде бир неше жұз фотон келип түскенде адамның көзиниң жақтылықты сезетуғынлығын көрсетти. Соныңтан әззи жақтылық дәстеси бар болған жағдайда нурландырылатуғын фотонлардың санының өзгерислери менен байланыслы болған флюктуацияларды көз бенен де аңғарыў мүмкин.

Энергиясы 0,1 эВ болған инфрақызыл нурланыў областында жалғыз фотонды да сезетуғын детектор ислеп шығылған. Бул детектор аса өткізгіш ниобий нитридінен соғылған.

**Фотон газының ҳал теңлемесі.** Фотонлық теорияның көз-қарасы бойынша тең салмақлы жылдылық нурланыўын қуұыслықты толтырып турған фотон газы деп қараўға болады. Бул газдин барлық бөлекшелери пүткиллей тәртипсиз қозғалады ҳәм соныңтан сол қозғалыслар барлық бағыттар бойынша теңдей итималлықта ийе.

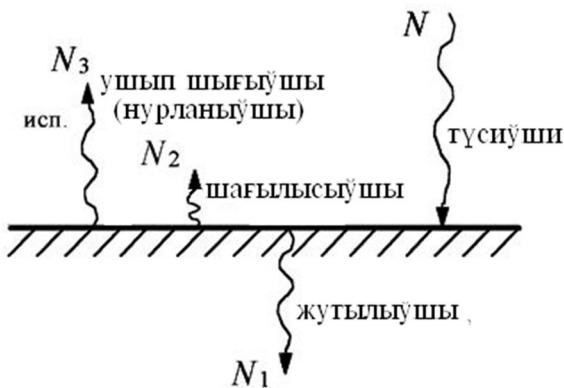
Әлбетте фотонлар газын классикалық идеал газдай болып таллаўға болмайды. Фотон газының бөлекшелери (фотонлар) тезликтер бойынша тарқалыўға ийе емес, ал олардың энергия бойынша тарқалыўын классикалық Максвелл-Больцман тарқалыўы менен тәриплеўге болмайды. Фотонлардың энергиялар бойынша тарқалыўын квантлық статистиканың жәрдемінде келтирип шығарыў мүмкин (усы қолланбаның 6.5 бөлімин қараңыз). Буның ушын дәслеп бир бириңен парқы жоқ бөлекшелерден туратуғын системалардың квантлық теориясын талқылап алғы керек болады. Ҳәзир болса биз улыўмалық термодинамикалық нызамлар ҳәм тең салмақлық жылдылық нурланыўы ушын келтирип шығарылған аңлатпалар тийкарында фотонлар газының базы бир қәсийетлерин таллаў менен шекленемиз

Ең дәслеп фотонлар газы ушын ҳал теңлемесин келтирип шыгарамыз. Бул теңлеме фотонлар газының термодинамикалық параметрлері болған басымды, көлемди ҳәм температуралық параметрлері менен байланыстырады. Газлердің молекулалық-кинетикалық теориясындағыдан жоллар менен фотон газының қуұыслықтың дийўалларына түсіретуғын басымын есаптаймыз ҳәм келип түсиўши фотонлардың импульслериниң ыдыстың дийўалларына берилүйиниң салдарынан басымның пайда болатуғынлығын еске түсіремиз

Барлық фотонлардың ишинен биз дәслеп  $\omega$  жийилигидеги нурланыўға сәйкес келиўши фотонларды бөлип аламыз ҳәм оның көлемлік концентрациясын  $N_{\omega}$  арқалы белгилеймиз. Бирдей ҳұқықта ийе болғанлықтан бир бириңе перпендикуляр ҳәм ыдыстың дийўалларына да перпендикуляр болған бағытларды қараймыз. Ҳәр бир дийўалға қарай барлық фотонлардың үштен бири қозғалады деп есаптаймыз. Олардың да тек ярымы ғана дийўалға қарай, ал қалған ярымы дийўалға қарама-қарсы бағытта қозғалады. Фотонлар с тезлиги менен қозғалатуғын болғанлықтан дийўалдың майданының бир бирлигине бир ўақыт бирлиги ишинде келип түсетуғын фотонлар саны былайынша жазылады

$$N = \frac{1}{6} n_{\omega} c$$

Егер заттың дийўалының жутыўшылық қәбилетлигин  $a_{\omega,T}$  арқалы белгилесек, онда дийўалға келип жетиўши  $N$  дана фотонның  $N_1 = a_{\omega,T} N$  данасы дийўал тәрепинен жутылады, ал  $N_2 = (1 - a_{\omega,T}) N$  данасы шағылышады.  $N_1 + N_2 = N$  екенлиги өз-өзинен түсиникли (2.1.11-сүүрет).



1.11-сүйрет.

Дийўалдың бетине келип түсіүши, беттен шағылысышы ҳәм беттен нурланыұшы фотонлардың санын есаплау ушын керекли болған сүйрет.

"Зат – нурланыў" системасындағы термодинамикалық тең салмақтың шәрти беттен нурландырылатуғын (ушып шығыұшы) фотонлардың саны  $N_3$  (яғни бир шамасының бирлик майданнан ўақыт бирлигинде нурландырылатуғын фотонлар саны) жутылған фотонлар саны  $N_1$  ге тең болыўын талап етеди. Тек  $N_3 = N_1$  шәрти орынланатуғын жағдайда ғана денениң ишкі энергиясы ўақыттың өтийи менен өзгериссиз қалады. Соның менен бирге ўақыттың өтийи менен нурланыў энергиясы да өзгермейди.

Қәлеген жутылған ҳәм шығарылған фотон дийўал  $p_\Phi$  импульсин береди. Оның шамасы (2.1.43)-формуланың жәрдеминде есапланады. Шағылысқан фотон өзиниң дәслепки бағытын қарама-қарсы бағытқа өзгертеди. Соныңтан дийўалға  $2p_\Phi$  импульсин береди. Демек бир ўақыт бирлигинде дийўалдың майданының бир бирлигине

$$N_1 p_\Phi + N_2 2p_\Phi + N_3 p_\Phi = 2(N_1 + N_2)p_\Phi = 2N p_\Phi$$

шамасына тең импульс бериледи. Ньютоның екинши нызамы бойынша дийўалға берилген бул импульс жийилиги  $\omega$  болған нурланыұдың дийўалға түсирген басымы  $P_\omega$  ны анықлады. Демек

$$P_\omega = 2N p_\Phi = \frac{1}{3} n_\omega c p_\Phi = \frac{1}{3} n_\omega \varepsilon_\Phi = \frac{1}{3} u_\omega. \quad (2.1.45)$$

Бул аңлатпада  $u_\omega$  арқалы жийилиги  $\omega$  болған нурланыұдың энергиясының тығыздығы белгиленген.

Хәр қыйлы жийиликтеги нурланыұдың фотонларының дийўалға түсиретуғын басымын суммалап  $T$  температурасында тең салмақтың турған фотон газының улыұмалық басымын

$$P = \frac{1}{3} \int_0^\infty u_{\omega,T} d\omega = \frac{1}{3} u(T) \quad (2.1.46)$$

түринде табамыз. Бул аңлатпада  $u(T)$  арқалы мүмкін болған барлық жийиликлердеги нурланыў энергиясының интеграллық тығыздығы белгиленген. (2.1.7) ҳәм (2.1.16) ларды есапқа алсақ

$$u(T) = \frac{4}{c} R^* = \frac{4\sigma}{c} T^4, \quad (2.1.47)$$

аңлатпасына ийе боламыз, сонлықтан фотон газының басымы ушын төмендеги формуланы аламыз

$$P = \frac{4\sigma}{3c} T^4. \quad (2.1.48)$$

Бул аңлатпада  $\sigma$  арқалы Стефан-Больцман турақтысы, с арқалы жақтылықтың вакуумдағы тезлиги белгиленген.

Солай етип фотон газы түсиретуғын басымның шамасы оның абсолют температурасының төртінши дәрежесине пропорционал, фотон газы жайласқан күйісліктың көлеминен ғәрзесиз екен. Мысалы  $T = 10^3$  К шамасын (2.1.48)-формулаға қойсақ  $P = 2,5 \cdot 10^4$  Па басымын аламыз. Температураның артыўы менен фотон газының басымы кескин түрде артады ҳәм  $T = 10^8$  К де  $P = 2,5 \cdot 10^{16}$  Па =  $2,5 \cdot 10^{11}$  атм ға жетеди.

**Фотон газының термодинамикалық характеристикалары.** Енди көлеми  $V$ , температуры  $T$  болған күйіслікты толтырып турған фотон газының ишки энергиясын есаптаймыз. (2.1.47)-формуланы есапқа алсақ

$$U = u(T)V = \frac{4\sigma}{c} T^4 V \quad (2.1.49)$$

екенлигин табамыз. Сонықтан турақты  $V$  көлемин ийелеп турған фотон газының жыллылық сыйымлығы ушын

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V=\text{const}} = \frac{16\sigma}{c} T^3 V \quad (2.1.50)$$

аңлатпасын аламыз.

Классикалық идеал газдин жыллылық сыйымлығы температурадан ғәрзесиз шама еди. Фотон газының жыллылық сыйымлығы болса оның абсолют температурасының кубына пропорционал екен.

Фотон газы ушын белгили болған термодинамикалық аңлатпа  $dQ = TdS = dU + PdV$  формуласын пайдаланып, (2.1.48) бенен (2.1.49) ды есапқа алып

$$dS = \frac{dU + PdV}{T} = \frac{16\sigma}{c} T^2 V dT + \frac{16\sigma}{3c} T^3 dV = d\left(\frac{16\sigma}{3c} T^3 V\right)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Буннан абсолют температура нолге умтылғанда ( $T \rightarrow 0$ ) энтропия  $S$  тиң де нолге умтылатуғының (яғни  $S \rightarrow 0$ ) есапқа алсақ, онда фотон газының энтропиясын табамыз:

$$S = \frac{16\sigma}{3c} T^3 V. \quad (2.1.51)$$

алынған термодинамикалық аңлатпалар фотон газы қатнасатуғын ҳәр қыйлы процесслерди қарап шығыўға мүмкіншилик береди. Мысалы (2.1.48) ден изотермалық процесстүң ( $T = \text{const}$ ) изобаралық та процес ( $P = \text{const}$ ) екенлигин көриўге болады.

Егер фотон газын кеңейткенде ямаса қысқанда оның энтропиясы өзгермейтуғын болса ( $S = \text{const}$ ), онда бундай процессте фотон газының қоршаған орталық пенен энергия алмаспайтуғынлығын көриүге болады ( $dQ = 0$ ). Бундай процессти адиабаталық процесс деп атайды. (2.1.51) дән фотон газы ушын адиабаталық процесстин тәнлемесиниң

$$T^3 V = \text{const} \quad (2.1.52)$$

түрине ийе болатуғынлығын көремиз. (2.1.48)-аңлатпаны есапқа алсақ бул формула

$$PV^{4/3} = \text{const} \quad (2.1.53)$$

түрине келеди.

**Әлемниң жыллылық нурланыўы.** Жоқарыда келтирилген мағлыўматлар нурланыў энергиясының жоқары температураларда системаның ишкі энергиясына үлкен үлес қосатуғынлығын көрдик. Бундай системаның бири ретинде жоқары температуралы плазманы көрсетиў мүмкин. Заттың бундай ҳалында фотон газы (нурланыў) бөлекшелер газы менен бир қатарда (электронлар, ионлар ҳәм басқалар) системаның рең ҳұқықтылық элементи сыйпатында есапқа алыныўы шәрт. Жоқары температуралы плазманың көплеген қәсийетлери фотон газының бөлекшелер газы менен тәсирлесиўи тийкарында түсиндириледи.

Усындаған тәсирлесиўге қызықты болған мысалды Әлемниң эволюциясының ең басланғыш дәүирлерин тәриплейтуғын ҳәзирги заман космологиялық теориясында да табыўға болады. Бул теория бойынша бизин Әлемимиз бүннан 13-14 млрд жыл бурын Үлкен партланыўдың салдарынан пайда болған.

Партланыўдың ақыбетинде жұдә киши көлемде жұдә жоқары температурада ҳәм жұдә жоқары тығызлықтарда Әлемниң барлық затлары жайласқан. Г.Гамовтың берген мағлыўматлары бойынша партланыўдан 100 секунд өткеннен кейин заттың тығызлығы сүйдің тығызлығынан мыңлаған есе үлкен, ал температура болса термоядролық партланыўдың орайында пайда болатуғын температурадан ( $T \sim 10^9$  K) салыстырmas дәрежеде жоқары болған.

Ыссы от шарда материя жоқары температуралы плазма ҳалында болады. Бул плазма тийкарынан электронлардан, протонлардан, нейтронлардан, нейтринолардан ҳәм олардың антибөлекшелеринен турған. Бундай ҳалдағы затлар нурланыў ушын мөлдир бола алмайды ҳәм сонлықтан нурланыў затта "қақпанға" түскен ҳалға түседи.

1922-жылдың дәретилген А.А.Фридманның теориясына сәйкес партланыўдан кейин Әлем үлкен тезликлер менен кеңейе баслаған. Кеңейиўдин ақыбетинде Әлемдеги затлардың ҳәм нурланыўдың температурасы төменлеген ҳәм партланыўдан соңғы шама менен 300 мың жылдан кейин  $T \approx 3000$  K шекем төменлеген. Тап усы ўақытлары затлардың тығызлығы  $\rho = 10^{-17}$  кг/м<sup>3</sup> шамасына шекем киширейген. Бундай шарайтларда электронлар, протонлар ҳәм нейтронлар биригеди ҳәм водород, гелий ҳәм басқа да жеңил элементлердин атомлары пайда болады. Бундай нейтрал атомлардан туратуғын орталық нурланыў ушын мөлдир болады ҳәм нәтийжеде нурланыў затлардан "айрылып шығады". Усы дәүирлерден баслаган фотон газы Әлемниң барлық көлемин ийелейди ҳәм Әлем менен бирге кеңейеди. Фотон газының бундай кеңейиўин адиабаталық кеңейиў деп атауға болады

(2.1.52)-аңлатпадан Әлемниң көлеми үлкейген сайын оны толтырып турған фотон газының температурасы да төменлейди. Әпијайы есаплаўлар (бундай есаплаўлар 1.6-мәселеде келтирилген) усындай кеңейиў процессиниң салдарынан пүткіл Әлем ҳәзирги ўақытлары температурасы шама менен 3 К шамасындағы тең салмақтық нурлар менен толған болыўы керек. Ондай электромагнитлик нурларды микротолқынлық нурлар деп атайды. Әлемниң эволюциясының ең басланғыш моментлеринде пайда болған бул космослық жылдылық нурланыўын белгили астрофизик И.С.Шкловский реликтлик деп атады. Есаплаўлар ҳәзирги ўақытлары Әлемниң ҳәр бир куб сантиметринде реликтлик нурланыўдың шама менен 700 фотонының бар екенлигин көрсетеди.

1965-жылы Америкалы радиоинженерлер А.Пензиас ҳәм Р.Уилсон радиотелескоптың қабыллағышын жумысқа таярлаудың барысында әззи фонлық радиоشاуқымның бар екенлигин тапты. Олар өткерген изертлеўлер бундай радиотолқынлардың космос кеңлигинин барлық тәреплеринен бирдей интенсивликте келетуғынлығын ҳәм бул толқынлардың энергиясының максимумы  $\lambda_m = 0,96$  мм ге сәйкес келетуғынлығын көрсетти. Винниң аүйсыў нызамы болған (2.1.11) аңлатпасынан усындай толқын узынлығы ушын тең салмақтық жылдылық нурланыўының энергиясының максимумының сәйкес келетуғынлығын нурланыўдың температурасының  $T = 2,7$  К екенлиги келип шығады. Солай етип радиоинженерлер тәрепинен дерлик тосыннан Әлемде жұдә ертеде болып өткен физикалық процесслердин излери табылды.

1978-жылы физика бойынша халық аралық Нобель сыйлығы берилген реликтлик нурланыўдың ашылыўы ҳәзирги заман илимдерин әхмийетли жетискенлериниң бири болып есапланады. Бул ашылыў Әлемниң он миллиард жылдан да көбірек ўақыт ишиндеги эволюциясын тәрийиплейтуғын "ыссы" кеңейиуші Әлем теориясының дұрыс екенлигин тастыйықлады. Бул теориядан өзиниң рауажланыўының басланғыш дәўирлеринде Әлемниң ҳәзирги дәўирлердеги Әлемге пүткіллей усамағанлығын көрсетеди. Бул теориядан сол ўақытлары Әлемниң үлкен партланыўдың ақыбетинде пайда болған аса тығыз плазмадан ҳәм жұдә жоқары температурадағы нурланыўдан турғанлығы келип шығады. Бул жерде биз Жердеги шарайтларда ашылған нызамлардың космослық масштаблардағы физикалық құбылыслар ушын да дұрыс екенлигин көремиз. Усы жуўумағымыздың әхмийети жұдә уллы.

1.5-мәселе. Т температурасындағы тең салмақтық жылдылық нурланыўы менен толған кеңисликтің көлеминиң бир бирлигіндеги фотонлардың санын анықлаңыз ҳәм фотонлардың концентрациясының температурадан ғәрезлигиниң графигин сыйыңыз.

Шешими: Жийиликлери  $\omega$  дан  $\omega + d\omega$  ға шекемги жийиликлер интервалындағы фотонлар ушын көлемлік концентрация  $n_\omega$  түснегин киргизсек, онда барлық жийиликлердеги биз излеп атырған фотонлардың концентрациясы

$$n_\Phi = \int_0^\infty n_\omega d\omega$$

түринде анықланады. Анықлама бойынша нурланыў энергиясының спектраллық тығыздығы  $U_{\omega,T} = \hbar\omega n_\omega$  шамасына тең. Сонықтан (2.1.38) Планк формуласын есапқа алып

$$n_\Phi = \int_0^\infty \frac{U_{\omega,T}}{\hbar\omega} d\omega = \frac{1}{\pi^2} \left( \frac{kT}{\hbar c} \right)^3 \int_0^\infty \frac{\xi^2 d\xi}{\exp(\xi/kT) - 1} = \frac{1}{\pi^2} \left( \frac{kT}{\hbar c} \right)^3 I$$

екенлигин табамыз.

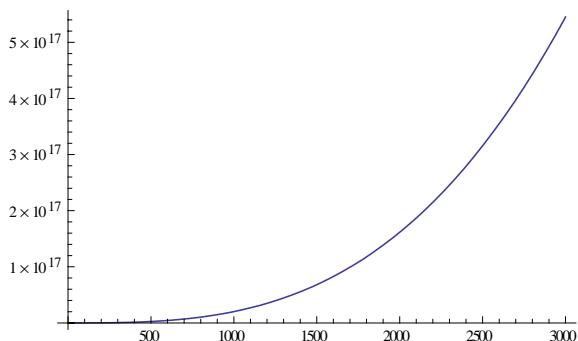
Бул формуладағы меншикли емес интегралдың мәнисин Mathematica 8.0 тилинде  $N\left[\int_0^{\infty} \frac{\xi^2}{\text{Exp}[\xi]-1} d\xi\right]$  аңлатпасын жазыў жолы менен шешемиз. Компьютер 2.4041138063191885 шамасын береди. Усыған байланыслы фотонлардың концентрациясын есаплаў ушын

$$n_{\Phi} = \frac{2,4}{\pi^2} \left( \frac{kT}{\hbar c} \right)^3$$

формуласын аламыз. Есаплаўлар төмнедеги нәтийжелерди береди

T, K	$n_{\Phi}, \text{m}^{-3}$
10	$2 \cdot 10^{10}$
300	$5,45 \cdot 10^{14}$
1000	$2 \cdot 10^{16}$

Биз  $n_{\Phi}$  шамасының температура T дан ғәрэзлигиниң графигин де дүзиўимиз мүмкин. Оның ушын  $\text{Plot}\left[\frac{2,4}{\pi^2} \left( \frac{kT}{\hbar c} \right)^3, \{T, 0, 3000\}\right]$  аңлатпасын жазамыз (температура T ушын 0ден 3000 K ге шекемги интервал алынған. Алынған график



турине ийе болады. Бөлекшелер концентрациясының температурадан тап усындай болған ғәрэзлилиги фотон газының өзине тән өзгешелиги болып табылады.

1.6-мәселе. "Ыссы" Әлем теориясында Әлемниң раýажланыўының дәслепки дәүиринде нурланыўдың заттардан "бөлинип шығыўы"  $T = 3000$  K температурада ҳәм  $\rho = 10^{-17}$  кг/м<sup>3</sup> тығызлықта жүзеге келди деп есапланады. Ҳәзирги үақытлары Әлемниң тығызлығының  $\rho_0 = 10^{-29}$  г/см<sup>3</sup> =  $10^{-26}$  кг/м<sup>3</sup> екенлигин есапқа алып ҳәзирги үақыттағы Әлемдеги реликтлик нурлардың температурасының шамасын баҳалаңыз.

Шешими: Әлемди толтырып турған нурланыў (реликтлик нурланыў) Әлем менен бирге адиабаталы түрде кеңейеди деп есаптаймыз. Бундай жағдайда (2.1.52) ни есапқа алған ҳалда

$$T^3 V = T_0^3 V_0$$

екенлигин табамыз. Бул аңлатпада  $T_0$  арқалы биз излеп атырған температура,  $V$  ҳәм  $V_0$  арқалы Әлемниң басланғыш ҳәм ҳәзирги көлемлери белгиленген. Әлемдеги заттардың массасын M арқалы белгилеймиз ҳәм бул шаманы өзгермейди деп есаптаймыз. Бундай жағдайда Әлемниң ертедеги ҳәм ҳәзирги үақытлардағы тығызлықтары ушын  $\rho = \frac{M}{V}$  ҳәм  $\rho_0 = \frac{M}{V_0}$  аңлатпаларын жаза аламыз. Демек

$$T_0^3 = \frac{V}{V_0} T^3 = \frac{\rho_0}{\rho} T^3$$

аңлатпасына ийе боламыз. Буннан

$$T_0 = T \sqrt[3]{\rho_0 / \rho}$$

формуласын аламыз.  $\rho$  менен  $\rho_0$  шамаларының мәнислерин қойып

$$T_0 = 10^{-3} \cdot T = 3 \text{ K}$$

екенлигине ийе боламыз.

Усы ўақытларға шекем кеңейиүши Әлемдеги нурланыў тап усындей шамаға шекем төменлеген.

## 2-1-4. Квантлық оптика

Планк пенен Эйнштейнниң квантлық теорияларының тийкарғы талапларына сәйкес нурланыў, соның ишинде жақтылықта корпускулалық қәсийетлерге ийе болады. Демек белгили бир шарайтларда бул қәсийетлер оптикалық экспериментлерде бақланыўы керек.

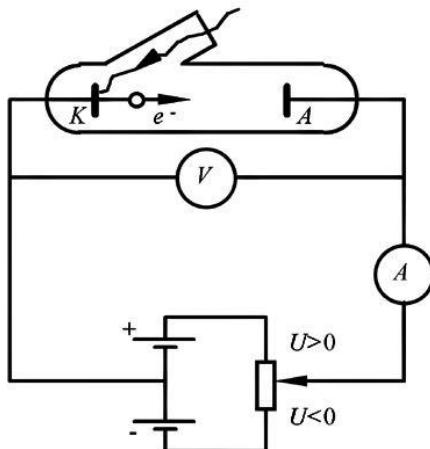
Оптикалық құбылыслардың бир қатар классын түсіндіриў ушын нурланыў энергиясының квантлары ҳәм оларды алып жүриўши фотонлар түсіниги керек болады. Фотонлар түсіниги қолланылатуғын оптикалық құбылыслардың классын квантлық оптикасы деп атайды. Бундай құбылыслар тийкарынан нурланыўдың затлар менен тәсир етисиўи менен байланыслы. Бундай тәсир етисиў ҳаққында гәп еткенимизде затлардың бөлекшелери менен нурланыў бөлекшелериниң (фотонлардың) тәсирлесиўин нәзерде тұтыў керек. Квантлық оптиканың усындей еки құбылысын қарап өтемиз

**Фотоэффект.** Сыртқы фотоэффект деп сыртқы нурланыўдың тәсиринде затлардан электронлардың ушып шығыўына айтамыз. Ең дәслеп фотоэффект 1887-жылы Г.Герц тәрепинен ашылды. Ол еки металл шарик арасындағы газ разрядының пайда болыўын изертледи ҳәм изертлеў барысында шариклердин биреүин ультрафиолет нурлар менен нурландырғанда еки шарик арасындағы ушқынлы разрядтың әдеўир үлкен интенсивлик пенен пайда болатуғынлығын тапты. Нурланыўдың тәсиринде металдан ушып шығатуғын бөлекшелердин салыстырмалы зарядын өлшегенде олардың электронлар екенлиги мәлим болды.

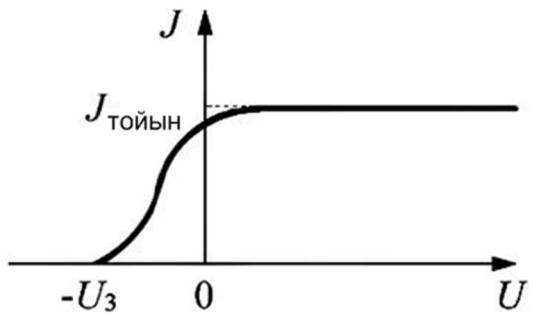
Нурланыўдың тәсиринде электронлардың ушып шығыўы барлық затларда да бақланатуғын болса да фотоэффектти көбинесе металлар менен байланыстырады. Металларда атомлардан "еркин" болған электронлар бар, бул электронлар металдың бетине жақын орынларда базы бир энергетикалық барьер тәрепинен услап турылады деп есапланады. Металдан ушып шыққанда сол барьер арқалы өтиў ушын электрон шығыў жумысын орынлайды ҳәм буның ушын өзиниң кинетикалық энергиясының бир бөлегин жумсайды. Металлардан электронлардың шығыўы ушын исленетуғын жумыс А ның муғдары бир неше электрон-вольтке тең.

Сыртқы фотоэффектти 1888-жылы А.Г.Столетов толығырақ изертледи. Ол схемасы 1.12-сүйретте көрсетилгендей еки электродлы вакуумлы лампа түриндеги фотоэлементти пайдаланды. Фотоэлементтеги К катодынан көзге көринетуғын жақтылық ямаса ультрафиолет нурлар менен жақтыланырғанда электронлар ушып шығады. Бундай электронларды фотоэлектронлар деп атайды. Катодтан

ушып шыққан электронлар А анодына келип жетип шынжыр арқалы электр тоғының өтийин тәмийинлейди. Бул тоқтың шамасы гальванометр ямаса миллиамперметр жәрдеминде өлшенеди. Шынжырға тоқ көзин тутастырыудың арнаўлы схемасы фотоэлементке түсирилген кернеүдин полярлығын өзгертиүге мүмкіншиликтен береди.



1.12-сүйрет. А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлементтің схемасы.



1.13-сүйрет. А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлементтің вольт-амперлик характеристикасы.

А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлементтің келип түсиүши жақтылық ағысы өзгермейтуғын жағдайдағы вольт-амперлик характеристикасының (яғни фототоқтың шамасы  $J$  тың кернеү  $U$  дан ғәрзелиги) сапалық түри 1.13-сүйретте келтирілген.

Оң кернеү тезлетиүши электр майданына сәйкес келеди. Бундай майданда катодтан ушып шыққан электронлар жайласқан. Сонықтан оң кернеўлер областында катодтан шығарылған электронлардың барлығы анодқа жетеди ҳәм тойының тоғы болған  $J_{\text{тойын}}$  тоғын пайда етеди.

Тәжирийбелерде бақланатуғны киши оң кернеўлердеги фототоқтың шамасының азмаз кемейиүи анод пенен катод арасындағы контактты потенциаллар айырмасы менен байланыслы. Биз фотоэффекттің нызамлықтарын үйрениү барысында контакттық потенциаллар айырмасын есапқа алмаймыз.

$U < 0$  болған кери кернеўлерде катодтан ушып шыққан электронлар тормозлаұшы электр майданына тап болады. Бул майданды басып өтиў ушын ол базы бир муғдардағы кинетикалық энергияға ийе болыўы шәрт. Кинетикалық энергиясы киши болған электрон тормозлаұшы майдан арқалы өтип анодқа барып жете алмайды. Бундай электрон катодқа қайтып келеди ҳәм фототоқтың шамасына үлес қоса алмайды. Сонықтан кери кернеўлер областындағы фототоқтың әстелик пенен кемейиүи катодтан ушып шығып атырған электронлардың ҳәр қылыш кинетикалық энергияларға ийе болатуғынлығын көрсетеди.

Кери кернеүдин базы бир шамасында фототоқтың шамасы нолге тең болады. Кернеүдин белгилеймиз ҳәм оны иркиүши потенциал деп атайды. Усы кернеүге сәйкес келиўши тормозлаұшы (иркиүши) электр майданы катодтан ушып шыққан электронлардың барлығын иркеди. Бундай электронлардың ишине кинетикалық энергиясы максимал  $E_m$  болған электронлар да киреди.

Иркиүши потенциалдың мәнисин өлшеп

$$E_m = \frac{1}{2} m_0 v_m^2 = e U_s \quad (2.1.54)$$

аңлатпасы жәрдеминде фотоэлектронлардың максималлық энергиясын ямаса максималлық тезлиги болған  $v_m$  шамасын анықтайды.

Экспериментлерде фотоэффекттиң төмендегидей тийкарғы нызамлықтары табылды:

1. Белгили бир узынлықтағы монохроматтық жақтылық ушын тойының фототогының шамасы катодқа келип түсиүши жақтылық ағысына пропорционал

2. Фотоэлектронлардың максималлық кинетикалық энергиясының шамасы жақтылық ағысының шамасына байланыслы емес, ал нурланыудың жийилигинен ғәрзели.

3. Катодтың ҳәр бир материалы ушын шегаралық жийилик  $v_{sh}$  бар болып, жийилиги бул жийиликтен кем болған нурланыу ( $v < v_{sh}$ ) фотоэффектти пайда етпейди. Бул шегаралық жийиликти фотоэффекттиң қызыл шегарасының жийилиги деп атайды. Толқын узынлығы шкаласында бул жийиликке қызыл шегараның толқын узынлығы  $\lambda$  жиегінде шегарасының  $v$  жиегінде шегарасының  $v$  болыуы түсінілген. Берилген металл ушын толқын узынлығы тек  $\lambda < \lambda_{sh}$  теңсизлигин қанаатландыратуғын ғана узынлықтағы нурланыу фотоэффектти жүзеге келтиріди.

Фотоэффекттиң жоқарыда келтирілген нызамлықтарын классикалық физика көз-қараслары тәрепинен түсіндіриүге умтылыўлар экспериментте алынған нәтийжелер менен қарама-қарсы болған жуўмақларды берди. Ҳақыйқатында да классикалық физика бойынша фотоэлектронлардың максималлық кинетикалық энергиясы катодқа келип түсиүши жақтылықтың ағысына пропорционал болыуы керек. Ал экспериментлер болса максималлық кинетикалық энергияның жақтылықтың ағысына емес, ал жийилигине байланыслы екенлигин көрсетеди. Соныңтан фотоэффекттиң қызыл шегарасының болыуы толқынлық теорияның болжайларына қарама-қарсы келеди.

Фотоэффекттиң үйрениү бойынша өткөрілген экспериментлердин нәтийжелерин түсіндіриү ушын 1905-жылы А.Эйнштейн энергия квантын алып жүриүши нурланыу бөлекшелери болған фотонлар концепциясы усынды. Усындағы теорияның жәрдеминде металл менен нурланыудың тәсирлесіүін фотонның металдағы еркин электрон менен серпимли емес тәсирлесіүі сыпатында қарады ҳәм фотоэффекттиң нызамлықтарын аңсат түсіндірди. Ҳақыйқатында да бундай процессте металдағы еркин электрон барлық энергияны фотоннан алады. Ал фотонның энергиясы болса жийиликке түрі пропорционал. Металдан жулып алынатуғын электронлардың саны ҳәм соған байланыслы болған тойының фототогының мәниси металдың бетине келип түсиүши фотонлардың санына байланыслы. Фотонлардың саны болса нурланыу энергиясының ағысынан анықланады.

Егер усындағы модельде электронның металдың ишинде металдың бетине қарай қозғалыуы барысында энергиясын жоғалтатуғынлығын есапқа алмасақ, онда энергияның сақланыу нызамы

$$hv = A + E_m \quad (2.1.55)$$

аңлатпасын жазыўға мүмкіншилик береди. Бул жерде  $E_m = mv^2/2$  арқалы фотоэлектронлардың максималлық кинетикалық энергиясы белгиленді.

Бул теңлемеден фотоэффекттиң екинши ҳәм үшинши нызамлары бирден келип шығады. Ҳақыйқатында да (2.1.55)-теңлемеден фотоэлектронлардың максималлық энергиясының металдың бетине келип түсиүши нурлардың жийилигине байланыслы екенлиги көринип тур. Соның менен бирге  $h\nu < A$  болса фотоэффект бақланбайды. Бундан фотоэффекттин қызыл шегарасы ушын толқын узынлығы менен жийиликтиң мәнисин есаплауға мүмкіншилик беретуғын әпиүйай формуаларды аламыз

$$\nu_k = A/h \text{ ҳәм } \lambda_k = hc/A. \quad (2.1.56)$$

Солай етип нурланыудың квантлық теориясы фотоэффектти түсіндіриуде табысқа ериседи екен. Фотоэффектти квантлық түсіндіриуде еркін электронның фотонды жута алмайтуғынлығы ҳақындағы жуўмақ гұман туудырыуы мүмкін (2.1.7-мысалды қараңыз). Ҳақыйқатында да еркін электрон фотонды жута алмайды. Бундай процесстің журийин энергия менен импульстің сақланыуы нызамлары қадаған етеди. Бирақ электронның кристалдың атомлары менен тәсир ететуғынлығын есапқа алсақ бундай жағдайдан аңсат шығындың мүмкіншилиги пайда болады. Сонлықтан электрон тәрепинен фотон жутылғанда фотонның импульсиниң бир бөлеги металдың пәнжересине бериледи.

Фотоэффекттиң әхмийетли санлық характеристикасы ретинде квантлық шығын У ти көрсетиү мүмкін. Бул шама металға келип түсиүши бир фотонның неше электронды ушырып шығаратуғынлығын билдиреди. Қөпшилик металлар ушын қызыл шегара қасында квантлық шығындың мәниси  $10^{-4}$  электрон/фотон шамасын қурайды. Квантлық шығындың мәнисиниң киши екенлиги мына жағдайларға байланыслы: металды таслап шығатуғын электрон өзиниң фотоннан алған энергиясын сақлауы керек. Сонлықтан бундай электрон металдың бетинен 0,1 мкм дең үлкен емес тереңликтерде жайласқан болыўы керек. Усының менен бир катарда металдың бети нурларды қүшли шағылыстырады. Фотонлардың энергиясының мәнисиниң өсиюи менен (яғнайы фотонлардың жийилигиниң өсиюи менен) квантлық шығындың мәниси де үлкейеди ҳәм энергиясы шама менен 1 электрон-вольт болған фотонлар ушын  $0,01 \div 0,05$  электрон/фотон шамасына жетеди. Рентген нурлары ушын (рентген фотонларының энергиясының шамасы  $10^3$  эВ тың әтирапында) бетке келип түсиүши ҳәр бир он фотонға металдан ушып шығынды бир электрон сәйкес келеди.

**Комптон эффекти.** Фотонлардың энергиясы үлкен болғанда (мысалы өткір рентген нурлары ушын шама менен 0,1 МэВ ти қурайды) заттың электронлары тәрепинен фотонның жутылығы процессиниң итималлығы кемейеди. Бул жағдайда электромагнит нурланыу затлар менен тәсирлескенде усы нурлардың бағытының өзгеріүи менен шашырауы жүз береди.

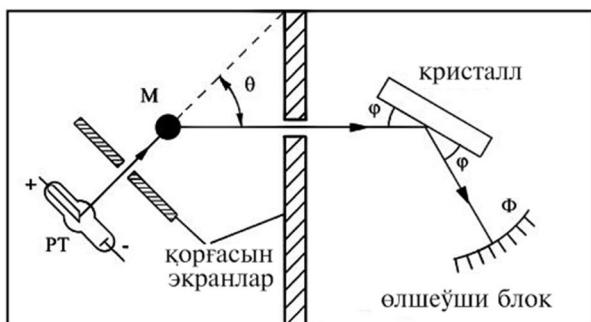
1923-жылы А.Комптон рентген нурларының парафиндеги шашырауын изертледи ҳәм бул изертлеүлердин барысында шашыраған толқынлардың толқын узынлығы  $\lambda'$  тың парафинге келип түскен толқынның узынлығы  $\lambda$  дең үлкен екенлигин тапты. Толқынның затларда шашырауының нәтийжесинде толқын узынлығының өзгеріүи кейинирек Комптон эффекти атамасын алды. Квантлық оптиканың бул эффектин ашқаны ҳәм түсіндіргени ушын А.Комптонға 1927-жылы Нобель сыйлығы берилди.

Комптон пайдаланған эксперименталлық дүзилистиң схема түриндеги сүйрети 1.14-сүйретте келтирилген. РТ рентген трубкасы айланынды платформаға бекитилген. Бул нышана М ге келип түсиүши  $\theta$  мүйешиниң мәнисин өзгертиүгө мүмкіншилик береди.

Шашыраған толқынның толқын узынлығы усы толқынның кристалдағы дифракциясының жәрдемінде анықланды. Рентген нурларының кристаллардағы дифракциясы теориясы бойынша Вульф-Брэгг шәрти деп аталатуғын

$$2d \sin \phi = k\lambda', \quad k = 1, 2, \dots, \quad (2.1.58)$$

шәрти орынланғанда (бул аңлатпада  $d$  арқалы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықтық,  $\phi$  арқалы рентген нурларының сол кристаллографиялық тегисликлерге түсій мүйеші,  $\lambda'$  арқалы  $M$  нышанасы тәрепинен шашыратылған рентген толқынларының толқын узынлығы белгиленген) келип түскен шашыраған рентген толқынның кристалдағы шағылышы (дифракциясы) орын алады. Сонықтан  $d$ ,  $\phi$ ,  $k$  шамаларын анық билген жағдайда  $M$  нышанасында шашыраған толқынның толқын узынлығы болған  $\lambda'$  шамасын анықлау мүмкін. (2.1.58)-формула бойынша  $\phi$  мүйеші менен  $\lambda'$  толқын узынлығы арасындағы сәйкеслик тийкарында фотопленкада алынатуғын дақтық мүйешлик координатасы бойынша шашыраған толқынның толқын узынлығын есаплау мүмкіншилиги тууылады. Комптонның дәслепки тәжирийбелеринде фотопленканың орнына қозғалыстырилған ионизациялық камера пайдаланылған.



1.14-сүйрет. А.Комптон пайдаланған эксперименталлық дүзилистиң схема түриндеги сүйрети.



1.15-сүйрет. Нурланыудың фотонлық теориясы Комптон эффектин фотонның электронлардағы серпимли соқылышының нәтийжесі деп түсіндиреди

Комптон өз экспериментлеринде шашыраған рентген толқынларының толқын узынлығының нышанаға келип түскен рентген толқынларының толқын узынлығынан үлкен екенлегин анықлады. Толқын узынлығының өзгерислери нышананың материалынан ғәрэзсиз ҳәм шашыраў мүйеші  $\theta$  ға байланыслы болып шықты. Тәжирийбелерде Комптон

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \Lambda_K (1 - \cos\theta) \quad (2.1.59)$$

теңлигиниң орын алатуғының анықлады. Бул формуланы Комптон формуласы деп атайды. Тұрықты шама болған  $\Lambda_K$  шамасының  $\Lambda_K = 2,426 \cdot 10^{-12}$  м мәнисин Комптонның өзи экспериментлеринде анықлады.

Шашырағанда нурлардың толқын узынлығының үлкейиүин электромагнит толқынларының толқынлық теориясы тийкарында түсіндіриў мүмкін емес. Дж.Томсон классикалық теорияда шашырауды келип түсіүши толқынның электр майданының тәсиринде электрон мәжбүрий тербелетуғын ҳәм усының салдарынан

сол электронның өзи антenna сыйқылдылықтарын тарқататуғылығын көрсетти. Соның менен биргे шашыраған толқынның жийилиги менен келип түсken толқынның жийилиги бирдей болады.

Солай етип Комптон эффекти квантлық оптиканың құбылыслары қатарына киреди екен. Нурланыұдың фотонлық теориясы болса бол эфектті фотонның затлардың электронларында серпимли соқлығысының нәтийжеси деп түсіндіреди (2.1.15-сүйрет). Бул жағдайда (2.1.59)-Комптон формуласы фотон менен электронның серпимли соқлығысын процессиндеги энергия менен импульстің сақланыў нызамларының нәтийжеси болып табылады.

Хақыйқатында да еркин электрон дәслеп тынышлықта турған есаплаў системасында соқлығысынан кейинги электронның мүмкін болған тезликлерин есапқа алған ҳалда энергияның сақланыў нызамын былайынша жаза аламыз

$$\frac{hc}{\lambda} + mc^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (2.1.60)$$

Бул формулада  $mc^2$  арқалы тынышлықта турған электронның энергиясы, ал  $\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$  арқалы соқлығысқаннан кейин  $v$  тезлигин алған электронның энергиясы белгіленген. Бул формуланы

$$\frac{hc}{\lambda} + mc^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \gamma mc^2$$

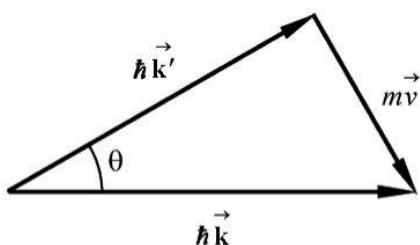
түринде де жаза аламыз. Бул жерде  $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ .

Энергияның сақланыў нызамы болған (2.1.60)-аңлатпа Комптон эффектин сапалық жақтан түсіндіре алатуғынлығын атап өтемиз. Себеби  $mc^2 < \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ . Сонлықтан  $\lambda' > \lambda$ .

Фотон электрон менен серпимли түрде соқлығысқанда импульстің сақланыў нызамы да орынланады. Бул нызам (2.1.44)-аңлатпаны есапқа алған ҳалда

$$\vec{h}\vec{k} = \vec{h}\vec{k}' + \vec{m}\vec{v} \quad (2.1.61)$$

түринде жазылады. Бул жерде  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $k' = 2\pi/\lambda'$ ,  $\theta$  болса  $k$  ҳәм  $k'$  векторлары арасындағы мүйеш (оны шашыраў мүйеши деп атайды).



1.16-сүйрет.  
Комптон эффектінде орын алатуғын импульстің сақланыў нызамының векторлық диаграммасы.

1.16-сүйретте келтирилген векторлық диаграмманың тиімдегінде импульслер үш мүйешлигинен

$$(mv)^2 = \hbar^2 k^2 + \hbar^2 k'^2 - 2\hbar^2 kk' \cos\theta$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын табамыз ямаса

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2 \frac{h^2}{\lambda\lambda'} \cos\theta \quad (2.1.62)$$

(2.1.60) ты

$$\frac{mc}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = mc + \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}$$

түрине келтирип ҳәм бул теңлиktи квадратқа көтерип

$$\left(\frac{mc}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right)^2 = (mc)^2 + 2mch\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) + \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 \quad (2.1.63)$$

аңлатпасына иие боламыз.  $\left(\frac{mc}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right)^2 - (mc)^2 = (mv)^2$  екенлигин есапқа алсақ (2.1.63) тибынша жазамыз

$$(mv)^2 = 2mch\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) + \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 \quad (2.1.64)$$

(2.1.62)- менен (2.1.64)-аңлатпалардан

$$2mch\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = \frac{2h^2}{\lambda\lambda'}(1 - \cos\theta) \quad (2.1.65)$$

аңлатпасына иие боламыз. Ал (2.1.65)-аңлатпадан Комpton формуласын аламыз

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) = \Lambda_K(1 - \cos\theta). \quad (2.1.66)$$

$\Lambda_K = \frac{h}{mc}$  шамасын массасы  $m$  болған бөлекшениң комптонлық толқын узынлығы деп атайды. Биз қарап атырған жағдайдағы (фотонның электрондағы шашырауы)  $\Lambda_K = 2.42 \cdot 10^{-12}$  м шамасын электронның комптонлық толқын узынлығы деп атайды.

(2.1.66)-аңлатпа менен (2.1.59)-аңлпаларды бир бири менен салыстырыў нурланыудың квантлық теорияның нәтийжелери менен эксперименттиң нәтийжелериниң бир бирине дәл сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Бул формулаардан толқын узынлығының максималлық өзгерисиниң  $\theta = 180^\circ$  болған жағдайда орын алатуғынлығы келип шығады. Оның мәниси  $\Delta\lambda_m = 2\Lambda_K$ . Бирақ  $\Lambda_K$  шамасының киши болатуғынлығының себебинен толқын узынлығының еркин электрондағы шашырауында өзгерисин әмелде тек қысқа толқынлы рентген ямаса гамма толқынларында бақлау мүмкін деген жуўмақ шығарамыз.

Затлардағы электронлардың басым көпшилиги еркин емес, ал атомлар менен байланысқан екенлиги атап өтийимиз шәрт. Егер нурланыў кванттының энергиясы электронның байланыс энергиясынан үлкен болса, онда бундай электрондағы шашырау еркин электрондағы шашыраудай болады. Бирақ атом менен байланысқан

электронда шашырағанда жағдайда фотон атомның тутасы менен энергия алмасады. Бундай шашырауда формуладағы электронның массасының орнына атомның массасын қойыу керек болады. Бирақ бул жағдайда толқын узынлығының өзгеріүі жүдә киши болып, бундай киши шаманы экспериментте бақлау мүмкіншілігі дерлик жоғалады.

**1.7-мәселе.** Фотон еркин электрон менен серпимли емес соқырысқанда электронның фотонды жұтыуы сақланыу нызамлары тәрепинен қадаған етилген процесс екенligин көрсетиңиз.

**Шешими:** Фотон менен соқырыспастан бурын электрон тынышлықта турған есаплау системасында серпимли емес соқырысың орын алатуғын жағдайлар ушын энергияның сақланыу нызамыбының жазылады

$$mc^2 + h\nu = \gamma mc^2 \text{ ямаса } E_0 + h\nu = E.$$

Бул жерде  $E_0$  арқалы тынышлықта турған электронның энергиясы, ал  $E$  арқалы фотон менен серпимли емес соқырысқан электронның энергиясы белгиленген. Салыстырмалық теориясы бойынша  $E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2}$ . Алынған аңлатпаларда  $p$  арқалы фотонды жүткеннан кейин электрон алған импульс белгиленген.

Биз қарап атырған процесс ушын импульстің сақланыу нызамынан

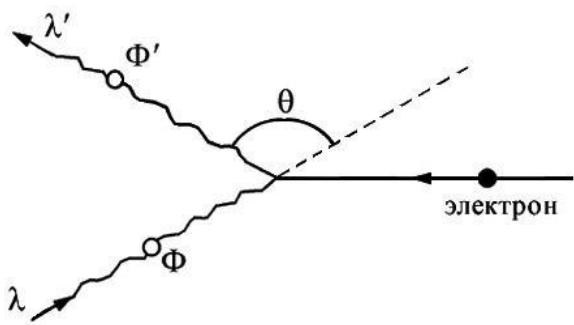
$$p = \frac{h\nu}{c}$$

формуласын аламыз. Алынған формуланы квадратқа көтерип

$$2mc^2h\nu + (h\nu)^2 = c^2p^2 \text{ ҳәм } c^2p^2 = (h\nu)^2$$

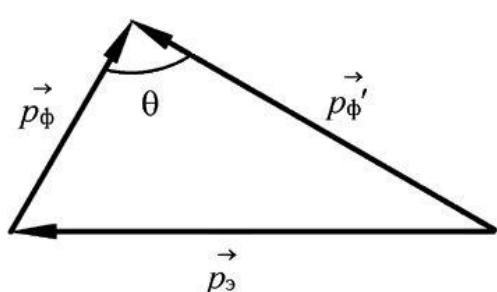
аңлатпаларына ийе боламыз.  $m \neq 0$  теңсизлиги орынланатуғын жағдайлар ушын бул теңдиктиң орынланыуы мүмкін емес. Буннан еркин электронның фотонды жута алмайтуғынлығы келип шығады. Бундай процесс тек үшинши бөлекшениң қатнасындаға орын алғыу мүмкін. Бундай жағдайда үшинши бөлекше фотонның энергиясы менен импульсiniң бир бөлегин алғыу шәрт.

**1.8-мәселе.** Релятивисттик электронлар дәстесинде шашыраған толқынның толқын узынлығының фотон менен электрон серпимли соқырысқанда электрон толық тоқтайтуғын жағдайда қанша шамаға өзгеретуғынлығын есаплаңыз. (2.1.17-сүйрет).



1.17-сүйрет.

1.8-мәселени шешиү ушын арналған



1.18-сүйрет.

1.9-мәселени шешиү ушын арналған

схема.

импульслердин векторлық диаграммасы.

Шешими: Соқлығысқаннан кейин электрон тынышлықта туратуғын есаплауы системасындағы энергияның сақланыу нызамыбы лайынша жазылады

$$\frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \frac{hc}{\lambda} = mc^2 = \frac{hc}{\lambda'}.$$

Электрон менен келип түсиүши фотонның импульслериниң қосындысы Ф шашыраған фотонның импульси болған  $\Phi'$  шамасына тең болыуы керек. Соныңтан 1.18-сүйретте келтирилген импульслердин векторлық диаграммасынан

$$p_3^2 = p_\Phi^2 + p_{\Phi'}^2 - 2p_\Phi p_{\Phi'} \cos\theta$$

яmasa

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h^2}{\lambda\lambda'} \cos\theta$$

аңлатпаларын аламыз. Бул аңлатпаларды дыққат пенен талласақ  $\lambda$  шамасын  $\Psi'$  шамасына алмастырғанда (2.1.60)- ҳәм (2.1.62)-аңлатпаларға өтетуғынлығына көз жеткериүге болады. Соныңтан таллауды қайталамай шашыраған толқынның толқын узынлығының өзгериси ушын төмендеги ең ақырғы формууланы

$$\lambda' - \lambda = \Lambda_K(1 - \cos\theta)$$

түринде жазамыз. Бул формуладан электронда шашыраған фотонның толқын узынлығының үлкейгенлигин сезиүге болады. Себеби фотон релятивистлик электрон менен соқлығысқанда электроннан қосымша энергия алады.

Бундай эффектti Комptonның кери эффекти деп атайды. Комptonның кери эффекти бойынша космослық объектлердин рентген нурланыуын түсіндіриүгө болады.

## 2-1-5. Жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализми

Жақтылықтың физикалық тәбияты қандай? деген сорауға жуўап беріү қоршаған тәбиятты дұрыс түснійүү ушын да, физика илиминиң буннан былай рауажланыуы ушын да оғада уллы әхмийетке ийе

XIX әсирдин ақырында жақтылықтың тәбияты ҳақындағы мәселе толық шешилди ҳәм ол кеңисликте тарқалатуғын электромагнит толқынлары деп есапланды. Усының нәтийжесинде жақтылықтың толқынлық теориясы үлкен пәтлер менен рауажланды. Бул теория жақтылықтың интерференциясы менен дифракциясы, жақтылықтың поляризациясы сыйқылды қубылыштарды табыс пенен түсіндірді.

Бирақ XX әсирдин басында-ақ жақтылықтың заттар менен тәсир етисиүин изертлеўлердин барысында фотоэффект (фотоэлектрик эффект), Комpton эффекти, фотохимиялық реакциялар сыйқылды қубылыштар табылды. Бул қубылыштарды жақтылықтың толқынлық теориясы түсіндіре алмады. Бул теория тийкарында келтирилип шығарылған болжаулар квантлық оптиканың

экспериментлерде анықланған нызамлықтарына пүткіллей қайшы келди. Бул кубылысларды түсіндіриў ушын А.Эйнштейн 1905-жылы жақтылықтың корпускулалық (бөлекшелік) теориясын усынды. Бул теория Ньютоның жақтылық корпускулалары ҳаққындағы идеяларын рауажландырып жақтылықты фотонлар деп аталатуғын көп санлы бөлекшелердин ағысы деп қарады. Жақтылықтың фотонлық теориясы квантлық оптиканың қубылысларын сапалық жақтан да, санлық жақтан да жеңил түсіндіре алды.

Солай етип бир объектте электромагнит толқынларды ҳәм фотонларды бирlestiriip биз жақтылықтың тәбияты ҳаққындағы сораўға жуўап бере аламыз деген пикир пайда болды. Жақтылық дегенимиз толқын да, бөлекше де болып табылады. Бирақ бул жуўыпты тереңирик үйрениў толқынлар менен бөлекшелерди әпиўайы механикалық бирlestiriүдин дұрыс емес екенлигин көрсетеди. Себеби электромагнит толқынлары ҳәм бөлекшелердин ағымы түсініклери бир бириң бийкарлайды.

Жақтылық толқыны дегенимиз кеңисликте тарқалған локализацияланбаған электромагнит толқыны болып табылады. Толқынның электромагнит энергиясының көлемлік тығызлығы оның амплитудасының квадратына туýры пропорционал ҳәм бул тығызлықтың шамасы қәлеген киши шамаға өзгере алады (яғни үзликсиз өзгереди).

Фотон болса кеңисликтиң базы бир ноқаты қасында локалласқан ҳәм ўақыттың өтийи менен кеңисликте қозғалады. Бундай моделде жақтылық энергиясы үзликсиз түрде өзгермейди. Жақтылық энергиясының өзгериси дискрет түрде болып, барлық ўақытта энергияның минималлық порциясынан (кванттынан) пүтин сан еселенген мәниске ийе болады. Ал энергияның ең минималлық порциясына (кванттына) жеке фотон ийе болады.

Бир материаллық объектте бириңиң болыўын екиншиси бийкарлайтуғын қәсийетті қалайынша қарама-қарсылықсыз бирlestiriү мүмкін? Бул сораўға жуўап уллы философлардың мийнетлеринде бар. Олар тәбияттың материаллық объекттери ишки қарама-қарсылықтарға ийе, олар бир бириңе салыстырғанда қарама-қарсы болған сапаларды бирlestireди деген жуўмақта келди. Мысалы қарама-қарсылықтардың бирилиги ҳәм гүреси идеясы Гегель диалектикасының тийкарғы мазмұнын қурайды.

Тап усындаң диалектикалық жуўапты ҳәзируги заман физикасы жақтылықтың тәбияты ушын береди. Жақтылық дегенимиз материаллық объект болып, ол толқынлық қәсийетке де, корпускулалық қәсийетлерге де ийе. Ҳәр қыйлы физикалық қубылысларда бул қәсийетлер ҳәр қыйлы дәрежеде жүзеге келеди. Базы бир шарайтларда, мысалы бир қатар оптикалық қубылысларда жақтылық өзиниң толқынлық қәсийетлерин көрсетеди. Бундай жағдайларда биз жақтылықты электромагнит толқынлары деп қараймыз. Басқа оптикалық қубылысларда жақтылық өзиниң корпускулалық қәсийетлерин көрсетеди. Бундай жағдайда жақтылықты фотонлардың ағымы деп караўымызға туýры келеди. Базы бир жағдайларда жақтылықтың толқынлық қәсийетин де, корпускулалық қәсийетин де көриў мүмкін. Мысалы Комpton тәжирийбесінде (2.1.14-сүйретке қараңыз) нышанадағы шашыраўдың бириңиң этапында жақтылық өзин фотонлардың ағысы сипатында көрсетеди, бирақ өлшеў блогында бул нурланыў электромагнит толқын сипатында кристалда дифракцияға ушырайды.

Жақтылықтың толқынлық ҳәм корпускулалық теориялары тийкарында сапалық жақтан да, санлық жақтан да түсіндіриў мүмкін бир қатар оптикалық қубылыслар да бар. Мысалы еки теория да жақтылықтың затларға түсіретуғын басымын есаплағанда бирдей аңлатпалардың алыныўына алыш келеди. Бул жағдай

толқынлық моделде де, корпускулалық моделде де жақтылықта энергия, импульс сыйқылыш материаллық характеристикалардың бар екенлиги менен байланыслы.

Солай етип жақтылықтың тәбияты ҳаққындағы көз-қараслар мәниси бойынша тереңлеген сайын жақтылықтың қарама-қарсылықты тәбиятқа ийе екенлигине көз жеткеремиз. Бундай жағдайды жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализми деп атайды. Базы бир объектлер менен жақтылық толқындағы болып тәсир етиседи, ал басқа бир объектлер менен тәсир етискенде жақтылықтың толқын емес, ал материаллық бөлекшелердин ағысы сыйпатында тәсир етиседи. Д.Джинстың жазыўы бойынша "Сол еки картинаның (корпускулалық ҳәм толқынлық картинаның) ҳеш биреүи де жақтылықтың тәбияты ҳаққындағы толық шынлықты айта алмайды". Ҳәтте еки картина бир бирине қарама-қарсы болса да, бир картина екиншисин толықтырады. Уллы физик Н.Бор былай жазған еди: "Қарама-қарсылықтар карсылық емес, ал бир бириң толықтырыў"

Жақтылықтың толқынлық ҳәм корпускулалық теориялары арасындағы тартыс тәреплердин биреүиниң жеңисине де, жеңилийине де алып келген жоқ. Бул тартыстың барысында бул теорияларды бирlestirетуғын жақтылықтың тәбияты ҳаққындағы жаңа түсніктер пайда болды.

Физика илиминде жақтылық толқынлық қәсийетке де, корпускулалық қәсийетке де ийе бириңи объект болып табылады. Биз төменде физиканың раýажланыўының барысында бундай объектлер классының әдеýир кеңейгенлигин көремиз.

Бул параграфтың ақырында биз фотонның қозғалысын толқынлық электромагнит майданы менен анықланатуғны статистикалық итималлық нызамларына бағынады деп есапласақ толқынлар менен бөлекшелерди буннан да тығыз байланыстыра алатуғынлығымызды атап өтемиз. Ҳақыйқатында да электромагнит толқынның амплитудасының квадраты, яғни интенсивлигі кеңисликтиң ҳәр бир ноқатында фотонды, яғни жақтылық ағысының усы ноқатындағы фотонлардың концентрациясын табыўдың итималлығын береди деп есаплаймыз. Бундай жағдайда еки саңлақ арқалы өтиўши жақтылықтың интерференциясын жақтылықтың корпускулалық тоериясы көз-қарасы менен де түснідириў мүмкіншилиги туўылады. Экранға бир жақтылық нұры түскен жағдайда экранның ҳәр қыйлы ноқатларына фотонның келип түсиў итималлығы бирдей мәниске ийе ҳәм сонлықтан экранның бирдей болып жақтыланыўын бақлаймыз. Жақтылық еки саңлақтан өткенде фотонның экранның ҳәр қыйлы ноқатларға барып түсиўиниң итималлығы өзгереди. Интерференциялық максимумлар пайда болатуғын орынларда бул итималлықтың мәниси кескин түрде өседи, ал интерференциялық минимумларда – кескин кемейеди. Усындай жоллар менен кеңисликтеги фотонлардың ағысы өзгерислерге ушырайды. Бул өзгерислерди толқынлық майдан басқарады.

Биз материаллық объектлердин корпускулалық ҳәм толқынлық қәсийетлерин бирlestirиў усылын таптық. Тап усындай усыл, яғни толқынның жәрдеминде бөлекшелердин қозғалысын тәриплеў усылы квантлық механиканың тийкарын қурайды. Ал квантлық механиканың тийкарын тәриплеўди биз келеси бапларда баслаймыз.

## 2-2-1. Де Бройль гипотезасы

**Бөлекшелердин толқынлық қәсийети.** Материяның корпускулалық-толқынлық дуализми. Оптикалық қубылыслардағы корпускулалық-толқынлық дуализмниң ашылыуы физиканың буннан былай рајағланыуы ушын уллы әхмийетке ийе болды. Физикалық объект болған электромагнит нурланыудың екилик корпускулалық-толқынлық тәбиятты анықланды. Бундай екилик тек оптикалық қубылысларға тән болыуы мүмкін емес деген пикирдин пайда болыуы тәбийий

1924-жылды француз физиги Луи де Бройль батыл гипотезаны усынды. Бул гипотеза бойынша корпускулалық-толқынлық дуализм универсаллық характерге ийе. Де Бройль гипотезасы бойынша ҳәр бир материаллық бөлекше толқынлық қәсийетке ийе. Оның үстине бөлекшениң корпускулалық ҳәм толқынлық характеристикаларын байланыстыратуғын аңлатпалар (қатнаслар) электромагнит нурланыуындағы қатнаслар менен бирдей болады. Биз фотонның энергиясы  $E$  менен импульси  $p$  ның цикллық жийилик  $\omega$  ҳәм толқын узынлығы  $\lambda$  менен

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

аңлатпаларының жәрдеминде байланысқанлығын еске түсірип өтемиз. Де Бройль гипотезасы бойынша энергиясы  $E$ , импульси  $p$  болған қозғалыұшы бөлекшеге жийилиги

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (2.2.1)$$

ал толқын узынлығы

$$\lambda_B = \frac{\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (2.2.2)$$

болған толқын сәйкес келеди. Жийилиги  $\omega$  болған ҳәм  $x$  көшери бағытында тарқалатуғын тегис толқынды комплекс формада бере аламыз

$$\xi(x, t) = A \exp[-i(\omega r - kx)].$$

Бул аңлатпада  $A$  арқалы толқынның амплитудасы, ал  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  арқалы толқынлық сан белгиленген.

Де Бройль гипотезасы бойынша  $x$  көшери бағытында қозғалатуғын энергиясы  $E$  ҳәм импульси  $p$  шамасына тең еркін бөлекшеге

$$\Psi(x, t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right] \quad (2.2.3)$$

сол  $x$  көшери бағытында тарқалатуғын бөлекшениң толқынлық қәсийетин тәриплейтуғын тегис толқын сәйкес келеди. Бул толқында де Бройль толқыны деп атайды.

Бөлекшениң толқынлық ҳәм бөлекшелик қәсийетлерин байланыстырыўшы аңлатпалар

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (2.2.4)$$

түрине ийе. Бул аңлатпаларда  $\vec{p}$  арқалы бөлекшениң импульси, ал  $\vec{k}$  арқалы толқын векторы белгиленген. Бул аңлатпаларды де Бройль теңлемелери деп атайды.

**Де Бройль толқынларының қәсийетлери.** Ең дәслеп де Бройль толқынларының материяның толқынлары екенлигин ҳәм бул толқынлардың тарқалыў процессинде әдеттеги толқынлық нызамлар бойынша шағылышыўның, сыйныўының, интерференцияға ҳәм дифракцияға ушырауының мүмкин екенлигин атап өтемиз. Дәслеп де Бройль толқынның фазалық тезлиги болған  $v_{\phi}$  шамасын табамыз. Турақлы фазаға ийе толқынның ноқатларының тарқалыў тезлигин фазалық тезлик деп атайды. Мейли бөлекше  $x$  көшери бағытында қозғалатуғын болсын. Бундай жағдайда (2.2.3) толқынның фазасының турақлы болыў шәрти

$$Et = px = const$$

түринде жазылады. Бул аңлатпаны дифференциаллап

$$v_{\phi} = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p}$$

шамасына тең болатуғынлығына ийе боламыз.

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2c^2}} \text{ ҳәм } p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2c^2}}$$

теңликлери орынлы болғанлықтан де Бройль толқынның фазалық тезлиги ушын

$$v_{\phi} = \frac{c^2}{v} \quad (2.2.5)$$

аңлатпасын аламыз.  $v < c^2$  болғанлықтан де Бройль толқынның фазалық тезлиги жақтылықтың вакуумдеги тезлигинен үлкен болып шығады. Бирақ бул жағдай жақтылықтың тезлигинен үлкен тезлик пенен қозғалыўды қадаған ететуғын салыстырмалық теориясының постулаттарына қайшы келмейди. Салыстырмалық теориясы тәрепинен қойылатуғын шеклер тек масса ямаса энергияның көшиўлери ушын орынлы. Толқынның фазалық тезлиги болса бул процесслердин биреүин де тәриплемейди. Сонықтан фазалық тезликтин шамасына ҳеш қандай шек қойылмайды.

Енди де Бройль толқынларының  $v_{\text{гр}}$  группалық тезлигин табамыз. Анықламасы бойынша

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk}.$$

Бул аңлатпаны түрлендирип

$$v_{\text{гр}} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}$$

формуласын аламыз. Салыстырмалық теориясы бойынша бөлекше ушын  $E$  ҳәм  $p$  арасындағы байланысты [Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Теория поля. Физматлит. Москва. 2001. 47-беттеги (9.6)-формула]

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

түринде жазып атырған аңлатпаларда  $t$  арқалы бөлекшениң массасы белгиленген. Бул аңлатпаны дифференциаллап

$$2EdE = 2pc^2dp$$

яmasa

$$\frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Солай етип

$$\nu_{\text{рp}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = \nu$$

формуласын аламыз. Буннан де Бройль толқынының группалық тезлигинин бөлекшениң тезлиги  $\nu$  ға тең болатуынлығына көз жеткеремиз.

**Де Бройль толқынларының узынлығын релятивистлик емес ҳәм релятивистлик бөлекшелер ушын есаплау.** Де Бройль толқынының узынлығын  $\lambda_{db}$  арқалы белгилейик. Кинетикалық энергиясы  $E_k$  болған бөлекше ушын де Бройль толқынының узынлығы болған  $\lambda_{db}$  шамасын анықтайтуын аңлатпаны табамыз. (2.2.2) ге сәйкес

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Бул аңлатпада  $p$  арқалы бөлекшениң импульси белгиленген. Релятивистлик емес бөлекшелер ушын  $\nu \ll c$ ,

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \quad \text{ҳәм} \quad p = \sqrt{2mE_k}.$$

Сонлықтан

$$\lambda^{\text{р.e.}} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}}. \quad (2.2.6)$$

релятивистлик жағдайларда бөлекшениң тезлигинин мәниси жақтылықтың ваккумдағы тезлигинин шамасына жақын. Бул жағдайда импульс пенен кинетикалық энергия арасындағы байланыс

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E_k(E_k + 2mc^2)} = \sqrt{2mE_k} \sqrt{1 + \frac{E_k}{2mc^2}}$$

турине ийе. Бул аңлатпаны (2.2.2) ге қойсақ релятивистлик жағдай ушын

$$\lambda^p = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}\sqrt{1 + \frac{E_k}{2mc^2}}} \quad (2.2.7)$$

формуласын аламыз.

**Макро- ҳәм микрообъектлер ушын Де Бройль толқынының узынлығы.** Де Бройль толқынының толқын узынлығының шамасын көз алдыға келтириў ушын U тезленидириўши потенциаллар айырмасы арқалы өткен электронның де Бройль толқынының узынлығын табамыз. Анықтық ушын электронды релятивистлик емес деп есаптаймыз. Бундай жағдайда (2.2.6)-аңлатпаға сәйкес

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_K}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}. \quad (2.2.8)$$

(2.2.8) ге константалардың санлық мәнисин қойып

$$\lambda_{db} = \sqrt{\frac{150,4}{U}} \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

аңлатпасын аламыз. Солай етип тезлетиўши потенциаллар айырмасының шамасы онлаған вольттен бир неше киловольтке тең болғанда электронның де Бройль толқынының узынлығы  $10^{-10} \text{ м} = 10^{-8} \text{ см} = 1 \text{ Å}$  шамасында болады екен. Бул шаманың физика илими ушын үлкен әхмийетке ийе екенлигин ескертип өтемиз: атомлардың өлшемлери, қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы қашықлық шамасы жағынан  $10^{-10} \text{ м}$  әтирапында болады.

Енди макроскопиялық, бирақ жеткиликли дәрежеде кишине болған объект – массасы  $m = 10^{-6} \text{ г}$ , тезлиги шама менен  $1 \text{ мм/сек}$  болған шаң өлекшесиниң де Бройль толқын узынлығын анықтаймыз.

(2.2.2)-аңлатпаны пайдаланып

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34}}{10^{-9} \cdot 10^{-3}} \text{ м} = 6,6 \cdot 10^{-22} \text{ м}$$

шамасын аламыз. Табылған толқын узынлығы оғада киши шама болып, оның үлкенлиги атом ядросының өлшемлеринен де әдеүир киши (атом ядросының диаметри шама менен  $10^{-15} \text{ м}$ ).

Микро ҳәм макрообъектлер арасында принципиаллық айырма жоқ. Усыған байланыслы қандай шарайтларда өлекшениң қәсийетлеринде толқынлық қәсийет тийкарғы орынды ийелейди, ал қандай жағдайларда өлекшелердин қәсийетинде толқынлық қәсийет ҳеш қандай орын ийелемейди ҳәм толқынлық қәсийетті есапқа алмауға болады деген сораў тууылады. Бул сораўға жууап беріў ушын оптика менен аналогия келтиремиз (оптика менен уқсас мысал келтиремиз). Толқын узынлығы  $\lambda$  шамасы системаның өзиниң характеристири өлшемлери болған L шамасы менен барабар болғанда нурлардың толқынлық қәсийетлериниң максимал түрде көринетүүлүгү белгили. Яғни  $\lambda \sim L$  болыўы керек. Егер  $\lambda \ll L$  теңсизлиги орынланса нурлардың толқынлық қәсийети сезилмейди ҳәм бундай жағдайларда геометриялық ямаса нур оптикасынан пайдаланыўға болады.

Механикалық ҳәм оптикалық құбылыслар арасындағы терең аналогияның бар болыўына байланыслы классикалық Ньютон механикасы геометриялық оптикаға,

ал квантлық механикас (оны толқын механикасы деп те атайды) болса толқын оптикасына сәйкес келеди. Солай етип бөлекшелердиң толқынлық қәсийетлери олардың де Бройль толқынларының узынлығы бөлекшелер қозғалатуғын областтың өлшемлери  $L$  менен барабар болғанда ғана ең анық көринеди. Бул жағдайда  $\lambda_{\text{db}} \sim L$ . Жоқарыда талқыланған мысаллардың бириңисинде электронның де Бройль толқынның узынлығы  $\lambda_{\text{db}}$ , атомның өлшемлери, кристаллардағы атомлар арасындағы қашықтықтар шама менен бирдей мәниске ие. Демек электронлар атомлар менен тәсирлескенде ҳәм электронлар кристаллық денелерде қозғалғанда олардың толқынлық қәсийети максималлық рәүиште көринеди.  $\lambda_{\text{db}} << L$  болған жағдайларда болса (мысалы жоқарыда қарап өтилген шаң бөлекшеси жағдайында) бөлекшениң толқынлық қәсийетиниң әхмийети жоқ. Бундай жағдайда усындай объектлердин қозғалысын тәриплөү ушын классикалық механиканың нызамларынан пайдаланыў керек. Усы мәселени таллауға 2.5-мәселе бағышланған.

**Металлардағы электронлар толқынларының сынығы.** Металлдың ишиндеғи электронға кристаллық пәнжерениң түйинлеринде жайласқан оң зарядланған ионлардың электр майданы тәсир ететуғынлығы белгили. Бул майдан кристалдың ишинде дәүирли түрде өзгереди. Металлдың көлеми бойынша орталастырылған усы майданың потенциалы болған  $\phi$  шамасын металлдың ишки потенциалы деп атайды.

Металдан электронды жулып алғанда ушын шығыў жумысы  $A_{\text{шығ}}$  шамасына тең энергия жумсау керек. Шығыў жумысының мәниси менен металдың ишки потенциалы

$$A_{\text{шығ}} = e\phi_0$$

аңлатпасы бойынша байланысқан. Егер металлға сырттан электрон келип түссе оның энергиясы шығыў жумысына тең шамаға артады. Усының салдарынан электронлар толқынның фазалық тезлиги ҳәм де Бройль толқын узынлығы өзгериске ушырайды ҳәм нәтийжеде металдың бетинде электронлар толқынлары сынаады.

Мейли электрон вакуумнан келип металлға түсетеүін болсын. Бундай жағдайда сынығы көрсеткиши  $n_e$  электронның вакуумдағы фазалық тезлигинин (оны  $n_{\Phi}^v$  арқалы белгилеймиз) электронның металлдағы фазалық тезлигине (оны  $n_{\Phi}^m$  арқалы белгилеймиз) қатнасына тең болады:

$$n_e = \frac{n_{\Phi}^v}{n_{\Phi}^m}.$$

(2.2.5) қатнасын пайдаланып

$$n_e = \frac{c^2 v^v}{c^2 v^m} = \frac{v^v}{v^m}$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада  $v^v$  арқалы электронның ваккумдағы, ал  $v^m$  арқалы электронның металлдағы тезлиги белгиленген.

Мейли электрон дәслеп  $E_K$  шамасына тең болған кинетикалық энергияға ииे болған болсын. Металдың ишинде болса электронның кинетикалық энергиясы  $E_K + A_{\text{шығ}}$  шамасына тең болады. Бөлекшениң тезлиги менен кинетикалық энергиясы арасындағы классикалық байланысты пайдалансақ

$$v = \sqrt{\frac{2E_K}{m}}$$

аңлатпасынан

$$n_e = \sqrt{\frac{E_K + A_{\text{шығ}}}{E_K}} = \sqrt{1 + \frac{A_{\text{шығ}}}{E_K}}$$

формуласын аламыз. Электронның кинетикалық энергиясының шамасын тезлетиүши потенциаллар айырмасы  $U$  арқалы, ал шығыў жумысының мәнисин ишки потенциал  $\phi$  арқалы аңлатсақ, онда электронлық толқынлардың сыйыў көрсеткиши ушын төмөндегидей аңлатпаны аламыз:

$$n_e = \sqrt{1 + \frac{e\phi_0}{eU}} = \sqrt{1 + \frac{\phi_0}{U}}. \quad (2.2.9)$$

(2.2.9)-формулаға сәйкес сыйыў көрсеткиши  $n_e$  тек әсте қозғалатуғын электронлар ушын ғана сезилерліктей мәниске ийе болады екен. Бундай электронлар ушын  $U$  дың шамасы  $\phi_0$  ге салыстырғанда үлкен емес. Жоқары энергияға ийе электронлар ушын (бундай жағдайда  $U \gg \phi_0$ )

$$n_e \approx 1 + \frac{\phi_0}{2U}$$

хәм 1 ден азмаз ғана айырмаға ийе болады.

**2.1-мәселе.** Кинетикалық энергия  $E_K$  ниң қандай мәнисинде де Бройль толқын узынлығын релятивистлик емес формула жәрдеминде есаплағанда  $\epsilon = 1 \%$  шамасынан көп емес қәтеликке жол қойылады? Мәселени а) электронлар хәм б) протонлар ушын шешиңиз.

**Шешими:** Де Бройль толқынның толқын узынлығын анықлағанда жиберилетуғын салыстырмалы қәтелик  $\epsilon$  (2.2.6) менен (2.2.7) ни есапқа алғанда хәм релятивистлик емес формула бойынша

$$\epsilon = \frac{\lambda_{db}^{\text{p.e.}} - \lambda_{db}^{\text{p}}}{\lambda_{db}^{\text{p.e.}}} = 1 - \left(1 + \frac{E_K}{2mc^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

түрине ийе болады.  $E_K$  кинетикалық энергиясын  $\epsilon$  ниң функциясы сыйпатында аңлатсақ

$$E_K = 2mc^2[(1 - \epsilon)^\epsilon - 1]$$

аңлатпасына ийе боламыз. Мәселениң шәрти бойынша  $\epsilon = 0,01 \ll 1$  болғанлықтан Тэйлор қатарына жайыұды пайдаланып  $(1 - \epsilon)^\epsilon \approx 1 + 2\epsilon$  екенлигин табамыз. Бул жағдайды есапқа алсақ

$$E_K(\epsilon) = 2mc^2 \cdot 2\epsilon = 4\epsilon mc^2 = 4\epsilon E_0$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул формулада  $E_0 = mc^2$  арқалы бөлекшениң тынышлықтағы энергиясы белгиленген.

Электронның тынышлықтағы энергиясы  $E_0 = 0,511$  МэВ болғанлықтан электрон ушын  $E_K = 20,4$  кэВ екенлигин табамыз. Бул жағдай кинетикалық энергиясының шамасы  $E_K = 20,4$  кэВ болғанша  $\lambda_{db}$  толқын узынлығын анықлағандағы қәтелек 1 проценттен артық болмайтуғынлығын билдиреди.

Физикалық экспериментлерде зарядланған бөлекшелерди тезлетій әдетте электр майданында әмелге асырылады.  $U$  шамасына тең болған потенциаллар айырмасын өткенде электрон  $E_K = eU$  кинетикалық энергиясын алады. Кинетикалық энергияның мәниси биз жоқарыда алған  $E_K = 20,4$  кэВ шамасына тең болыўы ушын ол (электрон)  $U = 20,4$  кВ потенциаллар айырмасын өтийи керек.  $U$  дың киширек мәнислеринде (2.2.6)-формула бойынша есапланған  $\lambda_{db}$  толқын узынлығының мәнисин анықлауда жиберилетуғын қәтелектиң шамасы 1 проценттен әдеўир киши болады.

Протон ушын тынышлықтағы энергия  $E_0 = 938,2$  МэВ шамасына тең. Ал де Бройль толқынының толқын узынлығын анықлағанда жиберилетуғын қәтелектиң мәниси 1 проценттен артық болмайтуғын кинетикалық энергияның мәниси  $E_K = 37,5$  МэВ шамасына тең.

**2.2-мәселе.** Сызықты өлшемлери  $l$  болған структураларды изертлеў ушын массасы  $m$  болған бөлекшелерге тезлеткиш қандай энергияны берійи керек? Мәселени  $l = 10^{-15}$  м болған жағдай ушын (бул атом ядроларының өзлериңе тән сызықты өлшеми) электронлар ҳәм протонлар ушын шешій керек.

**Шешими:** Сызықты өлшемлери  $l$  болған структураларды изертлеў ушын де Бройль толқынының узынлығы  $\lambda_{db} \leq l$  болған бөлекшелер керек. Мәселениң шәртиндеги  $l$  ушын берилген шама оғада киши. Сонықтан толқын узынлығы усы  $l$  шамасы менен теңдей бөлекшелерди алыў ушын жүдә үлкен энергияға ийе релятивистлик бөлекше керек болады. Релятивистлик бөлекшениң де Бройль толқынының толқын узынлығы ушын жазылған (2.2.7)-аңлатпаны пайдаланып

$$\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}\sqrt{1 + \frac{E_k}{2mc^2}}} \leq l$$

аңлатпасын аламыз. Бул теңсизликти (теңлик белгисин есапқа алмаймыз)

$$E_k^2 + 2mc^2E_k - m^2c^2\frac{\Lambda_K^2}{l^2} \geq 0$$

түрине келтиремиз. Бул аңлатпада  $\Lambda_K = \frac{2\pi\hbar}{mc}$  арқалы бөлекше толқынының Комптонлық узынлығы белгиленген. Бул теңсизликти шешип

$$E_K \geq mc^2 \left( \sqrt{1 + \frac{\Lambda_K^2}{l^2}} - 1 \right)$$

аңлатпасын аламыз.

Электрон ушын Комптонлық узынлық  $\Lambda_K^e = 2,43 \cdot 10^{-12}$  м болғанлықтан

$$\frac{\Lambda_K^e}{l} \gg 1.$$

Усы шәртті есапқа алып электронлардың энергиясы ушын

$$E_K^e \geq mc^2 \frac{\Lambda_K^e}{l}$$

аңлатпасын аламыз. Санлық мәнислерин қойып  $E_K^e \geq 1,2$  ГэВ мәнисине ийе боламыз.

Протонлар ушын Комptonлық узынлық  $\Lambda_K^p = 1,32 \cdot 10^{-15}$  м. Бул шаманы есапқа алып  $E_K^p \geq 0,6$  ГэВ мәнисине ийе боламыз.

## 2-2-2. Де Бройль гипотезасын экспериментте тастыйықлау

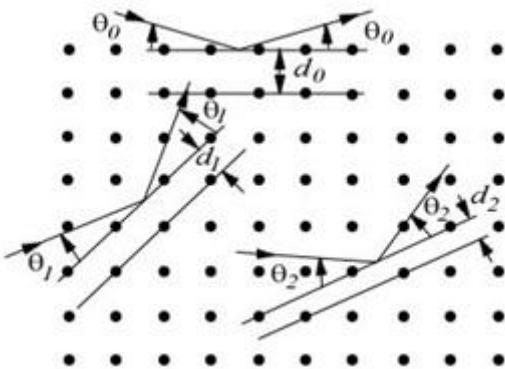
Қәлеген физикалық теорияның дурыс екенлигиниң критерийи барлық ўақытта да эксперимент болып табылады. Де Бройль гипотезасын экспериментте тексерип көриў өз ўақтында жүдә әхмийетли мәселелердин бири болды. Бириншиден бул гипотеза материяның терең фундаменталлық қәсийетлерине тийисли еди. Екиншиден бөлекшелерде толқынлық қәсийетлердин болыўы классикалық физикадағы дәстүрге айланған көз-қарасларға сәйкес келмейтуғын еди.

Бөлекшелердин толқынлық тәбиятын тастыйықлаған биринши эксперименталлық изертлеўлерди америкалы физиклер Клинтон Джозеф Дэвиссон менен Лестер Джермерер ҳәм олардан ғәрзесиз англиялы физик Джордж П.Томсон (1906-жылы электронды ашқаны ушын Нобель сыйлығы лауреаты болған Дж.Дж.Томсынның улы) тәрепинен 1927-жылы өткерилди. Бул жумысларда электронлардың кристаллық пәнжерелердеги дифракциясы пайдаланылды. Бул экспериментлерди толық таллаудың алдында төмендегидей жағдайларды атап өтемиз.

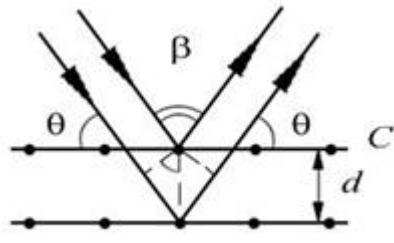
"Электронлардың толқынлық тәбиятын ашқанлығы" ушын 1929-жылы Луи де Броиль, ал "Электронлардың кристаллардағы дифракциясын экспериментте ашқанлығы" ушын К.Дж. Дэвиссон менен Джордж Томсон халық аралық Нобель сыйлықтарын алғыфа миясар болды.

Жоқарыда айтылып өтилгениндегі тезлетиўши потенциаллар айырмасының жүдә жоқары емес мәнислеринде (шама менен 100 вольт болғанда) электронның де Бройль толқынның узынлығы шама менен  $10^{-10}$  метрди қурайды. Бундай шама кристаллардағы атомлық тегисликлер арасындағы қашықлықтар ушын тән. Соныңтан рентген нурлары жағдайындағыдан, электронлық толқынлар ушын кристаллар дифракциялық пәнжерениң орнын ийелей алады.

Жетилискең кристаллардағы электронлардың дифракциясын қарап өтемиз. Жетилискең кристалл деп қурамында структуралық дефектлер болмаған кристалларға айтамыз. Де Бройль толқынның узынлығы  $\lambda_{\text{db}}$  болған электронлар ҳәр қыйлы атомлық тегисликлерде дифракцияға ушырай алады (2.2.1-а сүүрет). Бундай тегисликлерди кристалға келип түсиўши электронлар дәстеси менен шашыратыўшы кристалдың өз-ара ориентациясын сайлап алғы менен жүзеге келтириў мүмкін. Мейли кристалға келип түсиўши электронлар дәстеси менен шашыратыўшы тегисликлер арасындағы мүйеш  $\theta$  шамасына тең болсын (рентгенографияда, электронографияда ҳәм электрон микроскопиясында бундай мүйешти сырғанаў мүйеши деп атайды, русшасы "угол скольжения"). Эпиүайылық ушын симметриялық жағдайға итибар беремиз (2.2.1-б сүүрет). Бундай жағдайда кристалдың бети С шашыратыўшы тегисликлерге параллель болады (бундай жағдай әмелде көп ушыраспайды). Бундай жағдайда электронлар кристалдың бетине келип түсетуғын мүйеш  $\theta$  сырғанаў мүйеши болып табылады. Ал  $\beta = \pi - 2\theta$  мүйеши кристалға келип түсиўши ҳәм дифракцияға ушыраған электронлар дәстеси арасындағы мүйеш.



2.1-а сүйрет. Де Бройль толқынының узынлығы  $\lambda_{db}$  болған электронлар ҳер қыйлы атомлық тегисликлерде дифракцияға ушырай алады.



2.1-б сүйрет. Электронлардың дифракциясы ушын симметриялық жағдай (кристаллардың бети шашыратыұшы кристаллографиялық тегисликлерге паралель).

Кристаллардағы электронлардың дифракциясын теориялық жақтан таллау рентген нурларының кристаллардағы дифракцияға ушырауын таллауға үқсас. Егер  $\theta$  мүйешиниң мәниси

$$2d_{hkl} \sin \theta_{db} = n\lambda_{db} \quad (2.2.10)$$

Вульф-Брэгг шәртин қанаатландыратуғын жағдайда шашыраған толқынның интенсивли дифракциялық максимумы пайда болады. Бул теңлемеде  $\theta_{db}$  Брэгг мүйеши,  $d_{hkl}$  арқалы Миллер индекслері  $hkl$  болған шашыратыұшы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықтық белгиленген. Ендигиден былай әпиүайылық ушын  $hkl$  Миллер индекслерин жазбаймыз. (2.2.10)-формуладағы  $n$  шамасы 1, 2, 3, ... мәнислерин қабыл ететуғын пүтиң сан (оны дифракциялық максимумның тәртиби деп те атайды).

(2.2.10) Вульф-Брэгг шәртинин физикалық мәниси жүдә әпиүайы: егер қоңысылас атомлық тегисликлерде шашыраған толқынлардың жүрислериниң айырмасы пүтиң сан еселенген Де Бройль толқынның узынлығына тең болса дифракциялық максимум орын алады. Усындағы жағдайда кристаллографиялық тегисликлерде (дурысы кристаллографиялық тегисликлерде жайласқан атомларда) шашыраған толқынлар бир бириң күштейтеди. Бундай жағдайда конструктивлик интерференция пайда болады деп есаплайды.

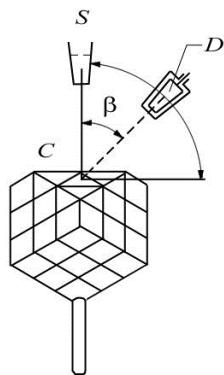
(2.2.10)-шәрт электронлар толқынларының кристаллардағы сыныуын есапқа алмаған ҳалда жазылғанлығын атап өтемиз. Егер сыныўды есапқа алатуғын болсақ Вульф-Брэгг шәртин былайынша жазамыз:

$$2d(n_e^2 - \cos^2 \theta_{db})^2 = n\lambda_{db}. \quad (2.2.11)$$

Бул формулада  $n_e$  арқалы электронлар толқыны ушын сыныў көрсеткиши белгиленген (2.2.3-мәселеге қараңыз).

**Дэвиссон ҳәм Джермер тәжирийбеси.** Дэвиссон ҳәм Джермерлер никель монокристаллындағы электронлардың дифракциясын изертледи. Никельдиң кристаллық структурасы рентген нурларының дифракциясы бойынша өткериленген тәжирийбелерден белгили еди. Олардың экспериментиниң схемасы 2.2-сүйретте көлтирилген. Электронлар пушкасынан (электронлар толқынларының дерегин әдетте электронлар пушкасы деп атайды) шыққан электронлар U тезлетиүши

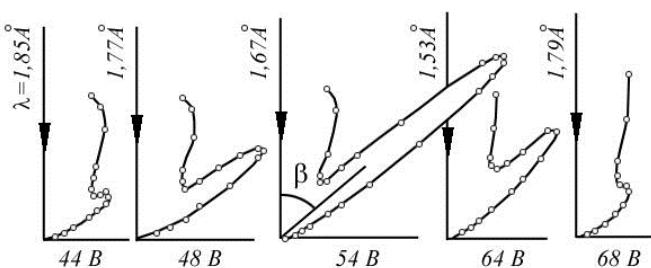
потенциаллар айырмасын өтеди ҳәм никель кристаллының шлифовкаланған бети С ға нормал бағытта келип түседи. Д детекторының жәрдеминде ҳәр қыйлы U кернеўлеринде ҳәр қыйлы  $\beta$  мүйешлерине шашыраған электронлардың саны изертленди. U дың ҳәр қыйлы мәнислерине (2.2.8)-аңлатпаға муўапық де Бройль толқынларының ҳәр қыйлы узынлықтарының сәйкес келетуғынлығын еске салып өткөзгөн.



2.2-сүйрет. Дэвиссон ҳәм Джермерлер тәрепинен электронлардың дифракциясын изертлеў бойынша өткөрілген экспериментиниң схемасы.

Дэвиссон ҳәм Джермердин тәжирийбесинде кристаллық пәнжере шашыратыўшы дифракциялық пәнжерениң орын ийеледи. Сонықтан де Бройль гипотезасының көз-қарасы бойынша (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәрти орынланғанда шашыраған толқынның амплитудасының үлкейиўи электронлардың усындағы мүйеш пенен шашыраўының итималлығының ҳәм кристалда шашыраған электронлардың санының үлкейиўин билдиреди.

Дэвиссон ҳәм Джермердин эксперименталлық изертлеўлериниң нәтийжелери 2.3-сүйретте көлтирилген. Бул сүйретте тезлетиўши потенциал U дың бир неше мәнисине сәйкес келиўши шашыраған толқынлардың поляр диаграммалары көлтирилген. U = 44 в болғанда (2.2.3-сүйрет)  $\beta = 134^\circ$  ( $\theta = 22,82^\circ$ ) шамасына тең мүйешинде дифракциялық максимум пайда бола баслады. U = 54 в көрнәүінде дифракциялық максимум максималлық интенсивликке ийе. U дың мәнисиниң буннан былай үлкейиўи менен дифракциялық максимум толық жоқ болғанша азаяды.



2.3-сүйрет.  
U тезлетиўши потенциалының ҳәр қыйлы мәнислериндеғи электронлардың дифракциялық шағылысының динамикасы.

Дэвиссон ҳәм Джермердин тәжирийбелеринде тезлетиўши потенциаллар айырмасы U = 54 в болғанда электронлардың максималлық шағылысының бақланды. Бундай потенциаллар айырмасында де Бройль толқынның узынлығы

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}} = 0,1668 \text{ нм} = 1,668 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

шамасына тең болады. Никель ушын  $d = 2,15 \cdot 10^{-10}$  м. Сонықтан Вульф-Брэгг теңлемеси бойынша  $\theta = 22,82^\circ$  шамасы ушын есапланған де Бройль толқынның толқын узынлығы  $\lambda_{db} = 0,166$  нм болып шығады.

Экспериментте ҳәм есаплаўлар менен алынған  $\lambda_{db}$  шамасының бирдей екенлиги бөлекшелердиң толқынлық қәсийетке ийе екенлиги ҳаққындағы де Бройль гипотезасының дұрыс екенлигиниң ең жақсы дәлилиниң бири болып табылады.



К.Дэвиссон ҳәм Л.Джермер

Дэвиссон ҳәм Джермерлер тәрепинен турақлы  $\beta$  мүйешинде (ямаса түрықлы  $\theta$  сырғанау мүйешинде) дифракцияға ушыраған электронлар толқынның интенсивлигиниң тезлендіриүши потенциаллар айырмасы  $U$  дан ғәрзлиги де изертленди. Бул экспериментлердин нәтийжелери 2.4-сүйретте көлтирилген. Экспериментлерде бақланған шашырау максимумлары бир бириңен  $\sqrt{U}$  шкаласында бир бириңен бирдей қашықлықтарда жайласқан болып шықты. Бул жағдай теорияда да орын алады. Ҳақыйқатында да

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}$$

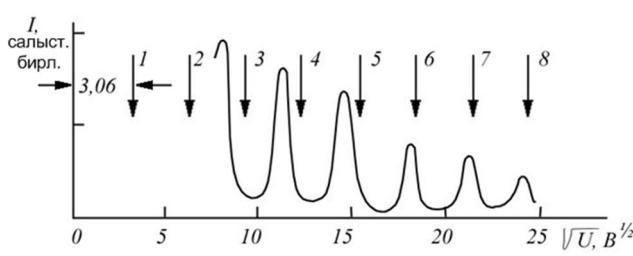
формуласы орын алғанлықтан (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәртинен

$$2d \sin[\theta] = n \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}$$

формуласына ийе боламыз.  $U$  арқалы тезлендіриүши потенциаллар айырмасының шамасы белгиленген (бул ҳаққында жоқарыда айтылды). Солай етип шашырау тәртиби  $n$  менен  $U$  арасындағы байланыстың

$$\sqrt{U} = \frac{\pi\hbar}{d \sin[\theta] \sqrt{2em}} n = const * n$$

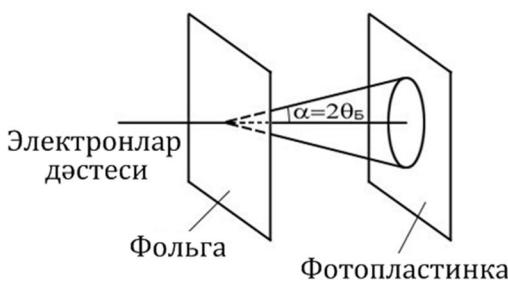
түрине ийе болатуғынлығын көремиз. Бул  $\sqrt{U}$  шамасына байланыслы шашырау максимумларының бир бириңен эквидистансиялық жайласыўына (яғни бирдей аралықтарда жайласыўына) сәйкес келеди.



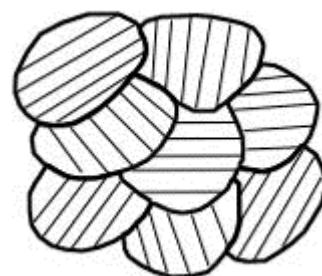
2.4-сүйрет. Турақлы  $\beta$  мүйешинде (ямаса түрықлы  $\theta$  сырғанау мүйешинде) дифракцияға ушыраған электронлар толқынның интенсивлигиниң тезлетиүши потенциаллар айырмасы  $U$  дың  $\frac{1}{2}$  дәрежесине ғәрзлиги.

Бул тәжирийбеде теория менен эксперимент арасында толық сәйкеслик орын алмады. Себеби эксперименталлық дифракциялық максимумлардың орны менен (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәрти тийкарында анықланған дифракциялық максимумлардың орны (олар 2.4-сүйретте вертикаль бағытланған стрелкалар менен белгиленген) арасында сезилерлікей айырма болды. Бундай айырма  $n$  ниң киши мәнислеринде (яғни тезлетиўши кернеў  $U$  дың киши мәнислеринде) жақсы сезиледи. Егер электронлар толқынларының металдағы сыныўын есапқа алсақ (Вульф-Брэгг шәрти буны есапқа алмайды), онда экспериметаллық нәтийжелер менен теориялық есаплаўлар берген нәтийжелер арасындағы айырма толығы менен жоғалады.

**Дж. П. Томсон тәжирийбеси.** Дж.П.Томсон экспериментлеринде электронлардың поликристаллық үлгилердеги дифракциясы изертленди. Бирдей энергияға ийе бағытланған (коллиматордан өткерилген) электронлар дәстеси метал поликристал фольганың бетине нормал бағытта түсирилди (2.2.5-сүйрет). Фольганың екинши тәрепинде орналастырылған фотопластинкада фольга арқалы өткен электронлар концентрли сақыйналар түриндеги дифракциялық сүйретти пайда етти. Биз дәслеп поликристаллық үлгиде электронлар дифракцияға ушырағанда фотопластинкада неликтен дифракциялық сақыйналардың пайда болатуғының түснидиремиз.

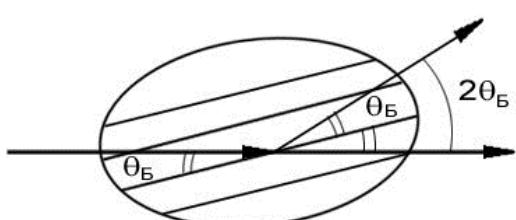


2.5-сүйрет. Электронлардың поликристаллық фольгадағы дифракциясы.

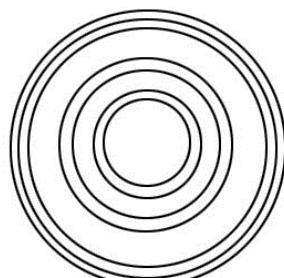


2.6-а сүйрет. Поликристаллық үлгинин структурасы.

Поликристалдардың көп санлы жүдә майды монокристаллық дәнешелерден туратуғының белгили. Бул дәнешелерди кристаллиттер деп те атайды. Поликристалдардағы кристаллиттер бир бирине салыстырғанда хаотик (тәртипсіз) түрде бағытланған. 2.6-б сүйретте кристаллиттердеги айырып алынған атомлық тегисликлер системасының бағыты параллель сзықтар менен көрсетілген. Бул бағыт бир кристаллиттен екинши кристаллитке өткенде ықтыярлы түрде өзгереди.



2.6-б сүйрет. Поликристалдағы дифракция. Бул жағдайда тек бир кристаллиттеги шағылысың көрсетілген.



2.7-сүйрет. Гүмис поликристаллындағы дифракциялық тәжирийбелердин нәтийжеси.

Электронлар дәстеси поликристалға келип түскенде қандай да бир атомлық тегисликлер системасы шашыратыуышы ҳалда, яғни Вульф-Брэгг шәрти орынланатуғын ҳалда жайласқан кристаллитлер табылады.

Пәнжере турақтысы (соның менен бирге кристаллографиялық тегисликлер семействосы ушын тегисликлер арасындағы қышықлық d) белгили, шағылысы ўтәртиби n де белгили, демек  $\lambda_{db}$  толқын узынлығы да, сырғанау мүйеши  $\theta_{db}$  да белгили болған жағдайды қараймыз. Мейли электронлар дәстеси кристаллиттин атомлық тегислигине  $\theta_{db}$  мүйеши менен түсетеуғын болсын. Бул жағдай 2.6-б сүүретте параллель сыйықтар менен көрсетилген. Дифракцияға ушыраған толқынның бағытының поликристалға келип түсиүши толқынның бағытына салыстырғанда  $2\theta_{db}$  шамасына бурылғанлығын аңсат түснүүге болады. Солай етип айырым алынған кристаллиттеги дифракция фотопластинкада ноқатты (қара дақты) береди.

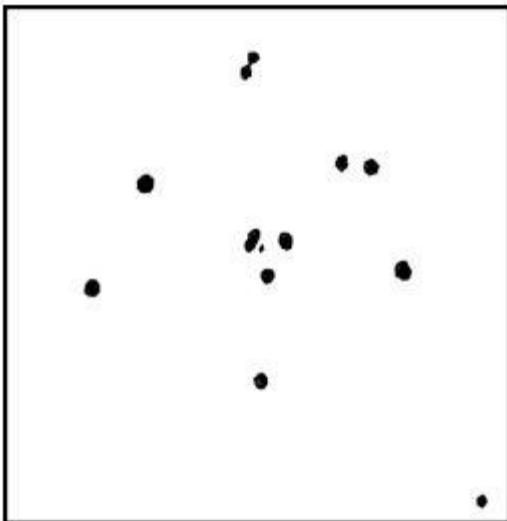
Мәселениң көшерлик симметриясына байланыслы (бул көшердин бағыты поликристалға келип түсиүши электронлар дәстесиниң бағыты болып табылады) усы көшерге шағылыстырыуышы атомлық тегисликлери  $\theta_{db}$  мүйешке бурылған кристаллитлер де фотопластинкада дифракциялық ноқатларды береди. Демек поликристалларға электронлар дәстеси келип түскенде белгили бир  $\theta_{db}$  мүйешиндеги дифракциялық шағылысы ўтәбесиндеги мүйеши  $\alpha = 2\theta_{db}$  болған конус бойынша болады дегенди аңғартады. Бул конус фотопластинка тегислиги менен кесискенде шеңберди береди. Кристалдың ҳәр қыйлы атомлық тегисликлери системаларының (яғни ҳәр қыйлы d лар) үлеси, соның менен бирге шағылысыўдың ҳәр қыйлы тәртиpleri болған n ди есапقا алыў фотопластинкада орайлары бир ноқатта жайласқан шаңберлер системасының пайда болыўына алып келеди.

Томсон тәжирийбелеринде энергиясы 17,5 - 56,5 кэВ болған үлкен тезликтен ииे электронлар пайдаланылды. Себеби киши тезликлер менен қозғалатуғын электронлар фольга тәрепинен күшли жутылады ҳәм бул жағдай поликристал арқалы өтиүши толқынның интенсивлигиниң жоғалыўына алып келеди. Поликристаллық фольгадағы электронлардың дифракциясын изертлеў бойынша өткерилген экспериментлердин нәтийжеси 2.7-сүүретте көлтирилген.

Электронлардың поликристаллардағы дифракциясын таллауда төмендегидей жүдә әхмийетли сораў пайда болды: Электронлар дәстеси келип түскенде поликристалдағы атомлар қозады ҳәм өзлериңен рентген нурларын шығарады. Демек фотопластинкада пайда болған дифракциялық сүүрет сол рентген нурларының поликристалдағы дифракциясының нәтийжеси шығар? Соңықтан дифракцияға ушыраған бөлекшелердин (электронлар ямаса рентген квантлары) тәбиятын анықлаў мақсетинде поликристалл фольга менен фотопластинка арасында магнит майданы пайда етилди. Егер дифракциялық картинаны электронлар пайда етсе, онда олар магнит майданы тәрепинен қозғалыў бағытын өзгертийи ҳәм усының нәтийжесинде дифракциялық картинаның майысыўы шәрт. Егер рентген нурлары дифракцияға ушыраса, онда рентген нурларына магнит майданы тәсир етпейди ҳәм дифракциялық сүүреттеги сақыйналар системасы өзгериссиз қалады. Магнит майданы менен өткерилген экспериментлер дифракциялық сүүреттеги электронлардың беретуғынлығын тастыыйылады.

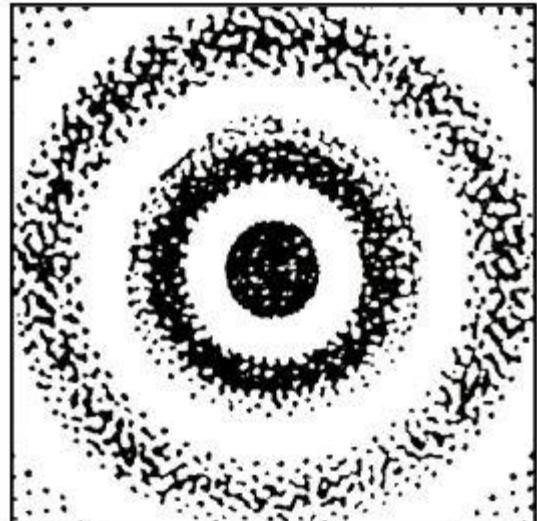
**Жеке электронлардың дифракциясы.** Жоқарыда қарап өтилген экспериментлер электронлардың жеткиликли дәрежеде интенсивли дәстелери менен өткерилиди. Соңықтан оларда бақланған толқынлық қәсийетлер жеке электронларға тийисли емес, ал бир бири менен тәсирлесетуғын электронлар ансамблине тийисли шығар? деген сораўдың пайда болыўы тәбийий. Усы жағдайға

байланыслы жеке электрон толқынлық қәсийетке ийе бола ала ма деген сорауға жуўап беріў ушын 1949-жылы Москва қаласында В.А.Фабриканттың басшылығындағы бир топар физиклер электронлардың оғада өззи дәстелери менен дифракциялық изертлеўлер өткерди. Бул тәжирийбелерде электронлардың кристал арқалы избе-из өтиўлери арасындағы ўақыт бир электронның әсбап арқалы өтетуғын ўақтынан 30000 есе үлкен етип алынды. Солай етип жалғыз электронның бир өзи кристалда дифракцияға урылады ҳәм усының салдарынан электронлардың бир бири менен тәсирлесиүи толық сапластырылды. Фотопластиинкадағы дифракцияға ушыраған электронлардың тарқалыўының сапалық түри 2.8-сүйретте келтирилген. Киши ўақыт аралықтарында өткерилген экспериментлерде фотопластиинкадағы ноқатлар (яғнай фотопластиинкаға электронлар келип түскен орынлар) пүткіллей тәртипсиз түрде тарқалған (2.2.8-а сүйрет). Бирақ экспериментлер узақ ўақыт даўамында өткерилсе ноқатлардың жайласыўларында тәртип көрине баслайды (2.2.8-б сүйрет). Фотопластиинкада орайлары бир ноқатта жайласқан сақыйналар пайда болады. Солай етип толқынлық қәсийеттин жеке электронға да тән екенлиги дәлилленди.



2.8-а сүйрет. Жеке электронлар менен қысқа ўақыт ишинде өткерилген эксперименттиң нәтийжеси.

Фотопластиинкадағы дифракциялық дақлар тәртипсиз түрде жайласқан.



2.8-б сүйрет. Жеке электронлар менен жеткилики дәрежеде узақ ўақыт өткерилген экспериметтиң нәтийжеси.

Фотоплатинкада дифракциялық сақыйналар пайда болған.

**Кристалларсыз өткерилген дифракция бойынша тәжирийбелер.** Де Бройлдың гипотезасын тастыбылау мақсетинде дәслепки экспериментлердин барлығы да кристалларды пайдаланыў менен өткерилди. Себеби кристаллардың өзи электронлардың дифракциясын бақлау ушын тәбият тәрепинен дөретилген дифракциялық пәнжерелер болып табылады. Буннан кейин электронлар менен оптикада жақсы белгили болған классикалық тәжирийбелерге уқсас дифракциялық тәжирийбелер өткерилди. Электронлардың ярым шексиз тегисликтиң шетиндеги, еки саңлақтағы ҳәм басқа да объектлердеги дифракциялары бақланды. Электронлардың бир текли емес электр майданындағы дифракциясын изертлеў бойынша да тәжирийбелер өткерилди. Бундай жағдайда бир текли емес электр майданы Френель бипризмасының орнын ийелейди. Бул экспериментлердин барлығы да электронларда толқынлық қәсийетлердин бар екенлигин дәлилледи.

**Рамзауэр эффекти.** 1921-жылы немис физиги К.Рамзауэр аргон атомларындағы электронлардың серпимли шашыраўын изертлеўдің барысында классикалық физиканың шеклеринде түсіндіриўге болмайтуғын қубылысты ашты. Тек бир неше жыллар өткеннен кейин бул қубылыстың электронларда толқынлық қәсийеттің бар екенligиниң және бир дәлили екенлигі түснікли болды. Бул қубылыс оптикада жақсы белгили болған Пуассон дағының электронлық аналогы болып табылады.

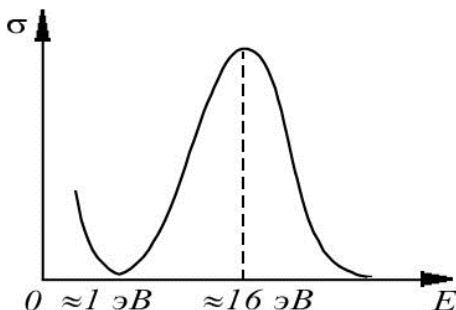
Рамзауэр энергиясы бир неше онлаған электрон-вольтке шекемги электронларды пайдаланды. Ол бундай электронлардың аргон атомларындағы серпимли шашыраўының кесе-кесими  $\sigma$  ны изертледи. Электронлардың серпимли шашыраў кесими

$$\sigma = \frac{N}{n\nu}$$

формуласының жәрдемінде анықланады. Бул формулада  $N$  арқалы ўақыт бирлигіндеги аргон атомларындағы электронлардың серпимли шашыраўлар актлериниң саны,  $n$  арқалы дәстедеги электронлардың тығызлығы, ал  $\nu$  арқалы олардың тезлиги белгиленген. Серпимли шашыраў кесими  $\sigma$  майданының бирлигине ийе ҳәм оның мәниси атомның әтирапында электрон шашыраўға ушырайтуғын нышананың майданына тең.

Серпимли шашыраў кесими электронлардың энергиясы  $E$  ден ғәрэзли. Ҳақыйқатында да  $E$  қаншама үлкен болса электронның тезлиги де үлкен ҳәм сонлықтан атом менен тәсир етискенде электрон қозғалыс бағытын өзгертий қыйынырақ болады. Демек электронлардың энергиясы (тезлиги) кемейгенде серпимли шашыраў кесиминиң шамасының киширейиў керек.

Рамзауэр алған нәтийжелер сапалық түрде 2.9-сүйретте келтирилген. Бул сүйретте энергиясы 16 эВ шамасындағы электронлар ушын аргон атомларындағы серпимли шашыраў кесиминиң ең үлкен мәниске ийе болатуғынлығы көринип тур. Энергиясы 16 эВ шамасынан киши ҳәм үлкен болған электронлардың серпимли шашыраў кесими киши. Электронның энергиясының шамасы  $E \approx 1$  эВ болғанда кесим  $\sigma$  ның мәниси дерлик нолге тең болады. Электронлардың энергиясы және де киширейгенде  $\sigma$  ның мәниси артады.



2.9-сүйрет.

Электронлардың аргон атомларынан серпимли шашыраў кесиминиң электронлардың энергиясынан ғәрэзлигі.

Кесим  $\sigma$  ның нолге айланыўы аргон атомларының электронлар ушын мәлдир болатуғынлығын көрсетеди. Бундай жағдайда электронлар аргон атомларында шашырамайды. Классикалық физиканың көз-қарасларына пүткиллей сәйкес келмейтуғын билең жағдайда электронның толқынлық тәбиятын есапқа алғанда өзиниң шешимин табады.

Оптикада экранда Пуассон дағы деп аталатуғын дақтың қалайынша пайда болатуғынлығы белгили. Мәлдир емес дисктеги жақтылықтың дифракциясында геометриялық саяның орайында жақтылық дақ пайда болады. Усы дақты Пуассон

дағы деп атайдыз. Рамзауэр өткерген тәжирийбелерде усындағы дисктиң орнын аргон атомы ийелейди. Егер электронның де Бройль толқынының узынлығы атомның диаметри менен салыстырғандай үлкенликте болса атомдағы толқынның дифракциясының нәтийжесинде электронлар толқыны ушын Пуассон дағы пайда болады. Бул аргон атомы арқалы электронлар өткенде өзиниң қозғалыў бағытын өзгертпейди дегенди аңлатады. Буннан кейин тап усындағы құбылыш басқа да инерт газлер болған криптонда да, ксенонда да табылды. Соның менен бирге Рамзауэр эффектиниң тек инерт газлердин атомларында ғана бақланатуғынлығы мәлим болды. Себеби инерт газлердин атомлары толық толтырылған сыртқы электронлық қабыққа ийе, олар сфералық симметрияға ҳәм соңықтан жеткиликті дәрежедеги анық сыртқы шегараға ийе.

**Нейtronлар ҳәм басқа да бөлекшелер дәстеси менен исленген тәжирийбелер.** Усы үақытқа шекем биз микробөлекшелердиң толқынлық қәсийетлерин талқылау барысында тиикарғы дыққатты электронларға аудардық. Бул тәбийи жағдай. Себеби бөлекшелерде толқынлық қәсийеттің бар екенлигин тастыйықлаушы экспериментлер электронлар менен орынланды. Бирақ де Бройль гипотезасына муýапық басқа бөлекшелер болған атомлар да, молекулалар да, электроннан кейин ашылған элементар бөлекшелер протонлар да, нейтронлар да, басқа да элементар бөлекшелер толқынлық қәсийетке ийе болыўы керек. Бирақ бундай бөлекшелердин басым көпшилиги электронларға салыстырғанда мыңлаған есе үлкен массаларға ийе. Де Бройль толқынның узынлығы масса  $m$  ге кери пропорционал болғанлықтан  $(\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{mv})$  бирдей тезликлерге ийе болған жағдайларда де Бройль толқынның узынлығының шамасы электронлардың де Бройль толқын узынлығынан мыңлаған есе киши болады. Үлкен салмаққа ийе болған бөлекшелердиң кристаллардағы дифракциясын бақлау ушын олардың толқын узынлығының үлкенлиги кристал турақтысының шамасы ( $\sim 10^{-10}$  м) менен барабар болыўы керек. Ал бундай бөлекшелердин кристаллық денелердеги дифракциясын бақлау тек киши тезликлер менен қозғалыұшы бөлекшелер жағдайында ғана мүмкін.

Эксперимент техникасының жетилисіүиниң нәтийжесинде кристаллардағы водород молекуларының ҳәм гелий атомларының дифракцияларын бақлауға мүмкіншілік берди. Дифракцияға ушыраған атомлар менен молекулалар киши тезликлерге ийе болғанлықтан кристалдың бетине келип түсіп тереңге өте алмайды. Соңықтан олар кристалдың атомлары тәрепинен оның бетинде пайда етилген еки өлшемли пәнжереде дифракцияға ушырайды.

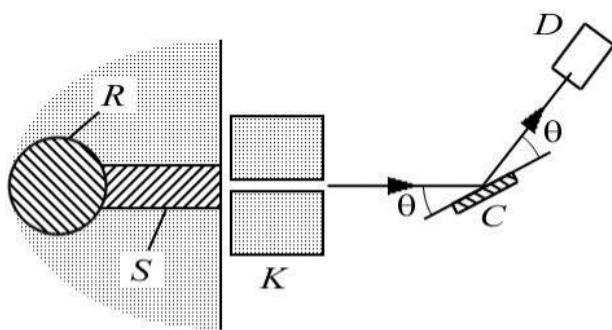
Нейтронлардың кристаллардағы дифракцияға ушырауы физика ҳәм техника ушын үлкен әхмийетке ийе болды. Нейтронларда электр заряды жоқ ҳәм соңықтан олар ҳәтте киши тезликлерде де кристал арқалы тарқала алады ҳәм үш өлшемли кеңисликтік кристаллық пәнжереде дифракцияға ушырайды. Нейтронлардың дереги ядролық реакциялар болып табылады. Соңықтан дифракциялық экспериментлерди өткериў ушын зәрүрли болған нейтронлар дәстеслерин ядролық реакторлардан ямаса зарядланған бөлекшелерди тезлеткишлерден алғы мүмкін.

Кристалларда дифракцияға тек жыллылық нейтронлары деп аталатуғын нейтронлар ушырай алады. Бундай нейтронлардың энергиясы газ молекуларының энергиясы менен барабар, яғни өжире температураларындағы ( $T \sim 300\text{K}$ )  $E = \frac{3}{2}kT$  шамасына жақын болыўы керек. бундай жыллылық нейтронларының де Бройль толқын узынлығы

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_n kT}} \quad (2.2.12)$$

шамасына тең болады. Бул аңлатпада  $m_n$  арқалы нейтронның массасы белгиленген. Өжире температураларында  $\lambda_{db}$  ниң шамасы шама менен  $10^{-10}$  м ге тең ҳәм усының салдарынан нейтронлардың кристаллардағы дифракциясын бақлау мүмкін.

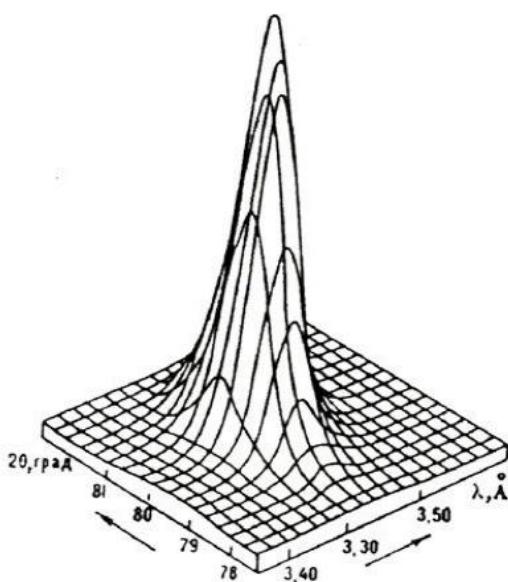
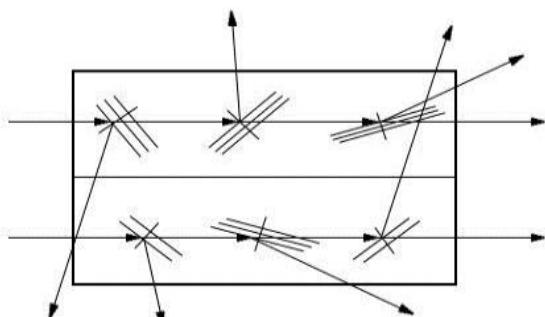
Нейтронлардың дифракциясы бириňши рет бақланған экспериментлер 1936-жылды Х.Хальбан, П.Прайсверк ҳәм Д.Митчел тәрепинен орынланды. Олардың экспериментлеринде радийли-берилийли нейтронлар дереги қолланылды. Бирақ ҳәзирги ўақыттарда нейтронлардың дифракциясы бақланатуғын экспериментerde нейтронлардың дереги ретинде ядролық реактор қолланылады (2.2.10-сүйрет).



2.10-сүйрет.

Нейтронлардың дифракциясын бақлауға мүмкіншилік беретуғын эксперименталлық дүзилистиң схемасы.

R ядролық реактордан шыққан нейтронлар S әстелеткиши арқалы өтип, бул астелеткиште өзиниң энергиясының бир бөлегин жоғалтады. Буннан кейин нейтронлар коллимациялаушы система K арқалы өтеди ҳәм бул системада жиңишке дәстеге айланады. Бул дәсте С кристаллына түседи ҳәм кристалда дифракцияға ушырайды. Дифракцияға ушыраған нейтронлар дәстесин D нейтронлар детекторы регистрациялайды (есапқа алады). Экспериментerde бақланатуғын дифракцияға ушыраған нейтронлардың интенсивигиниң Брэгг мүйеші  $\theta$  дан ҳәм де Бройль толқынының узынлығы  $\lambda_{db}$  дан ғәрзелиги 2.11-сүйретте көлтирилген.

2.11-сүйрет.  $\text{CsHSO}_4$  монокристаллынан шашыраған нейтронлардың

2.12-сүйрет. Поликристал фильтрдин жәрдеминде

интенсивлигиниң дифракциялық максимумы.

нейтронлар дәстесин фильтрлеү схемасы.

Нейтронларды әстелетиүши ретинде ядролары нейтронларды жүдә өззи жутатуғын графиттиң, бериллийдиң ҳәм басқа да элементлердин поликристаллары хызмет етеди. Әстелеткишлерде нейтронлар көп рет дифракцияға ушырайды ҳәм соның нәтийжесинде өз энергиясының артық бөлегин кристалдың ядроларына береди.

Усының менен бир қатарда поликристал әстелеткиште нейtron дәстесиниң спектриниң киши энергияға ийе бөлекиңиң бөлип алыныўы (фильтрлеў) жүзеге келеди. Бул қубылыс та нейтронлардың дифракциясына тийкарланған. Бул қубылысты толығырақ қарап шығамыз.

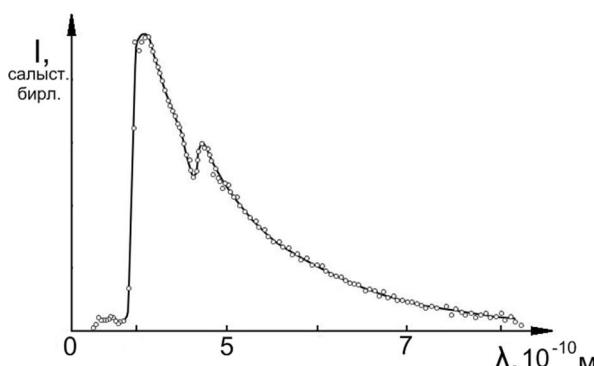
$$2d \sin\theta = n\lambda$$

Вульф-Брэгг шәртинен дифракциялық шағылышыўға қатнасатуғын максималлық узынлыққа ийе де Бройль толқынының узынлығының

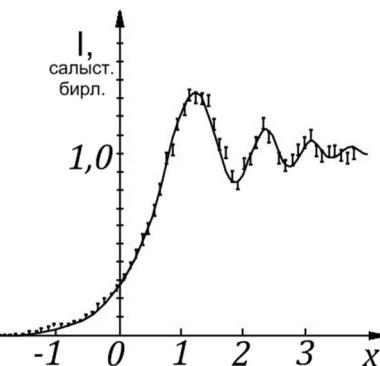
$$\lambda^{max} = \max \left\{ \frac{2d \sin\theta}{n} \right\} = 2d$$

шамасына тең болатуғынлығының аңсат түрде көрсетиүге болады. Бул аңлатпадағы  $\sin\theta$  ның ең үлкен мәниси 1 ге тең. Соңықтан  $\lambda^{max} = 2d/n$  ҳәм толқын узынлығының максимум мәниске ийе болыўы ушын  $n = 1$  шәртинин орынланыўы керек. Бул  $\lambda^{max}$  толқын узынлығын шегаралық толқын узынлығы деп атайды. Бул шәрт  $\lambda < \lambda^{max}$  болған тез қозғалыўшы нейтронлардың кристалда дифракцияға ушырайтуғынлығын ҳәм соның салдарынан өзиниң бағытын өзгертуғынлығын ҳәм әстелеткиш арқалы туўры бағытта өтетуғын дәстеден шығып қалатуғынлығын билдиреди (2.2.12-сүйрет).

Толқын узынлығы  $\lambda > \lambda^{max}$  болған киши энергияға ийе нейтронлар дифракцияға ушырамайды ҳәм (әстелеткиш) поликристал арқалы интенсивлигин дерлик өзгертпей өтеди. Бериллий поликристаллы арқалы өткен нейтронлар дәстесиниң интенсивлигиниң де Бройль толқын узынлығы  $\lambda$  шамасынан ғәрзелиги 2.13-сүйретте көрсетилген. Өткен дәстениң интенсивлигиниң кескин түрде киширейиүи  $\lambda \approx 0,4$  нм толқын узынлығынан баслап орын алады. Бул бериллий фильтри ушын шегаралық толқын узынлығының шамасына сәйкес келеди (бериллий ушын  $\lambda^{max} = 0,395$  нм).



2.13-сүйрет. Поликристал бериллий фильтри арқалы өткен нейтронлардың спектри.



2.14-сүйрет. Жутыўшы экранның шетинде дифракцияға ушыраган нейтронлар дәстесиниң интенсивлиги.

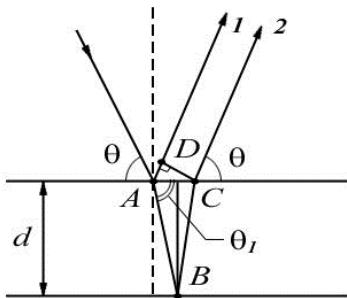
Полкристаллық фильтр арқалы өтетуғын киши энергияға ийе нейтронлар салқын нейтронлар деп аталады. 2.4-мәселеде усындағы нейтронлардың неликтен салқын нейтронлар деп аталатуғының түсіндіриледі

Нейтронлар ушын да, басқа бөлекшелер ушын да оптикада кеңен белгили болған дифракциялық тәжирийбелерди экспериментлерде бақлау мүмкін. 2.14-сүйретте мөлдир емес экранның шетиндеги нейтронлардың дифракциясын изертлеу бойынша өткөрілген экспериментлердин нәтийжеси келтирилген. Бул экспериментлерде толқын узынлығы 2 нм болған нейтронлар қолланылған. Графикте х қошери бойынша бир бирлик ени 30 мкм болған детектордың сандағының 100 мкм ге жылжыуына сәйкес келеди.

Улкен массаға ийе бөлекшелер (атомлар, молекулалар, нейтронлар) менен өткөрілген дифракциялық тәжирийбелер де Бройль гипотезасының универсаллық әхмийетке ийе екенligин көрсетти. Барлық бөлекшелер өзлеринин тәбиятына, ишкі құрылышына қарамастан толқынлардың қәсийетке ийе болады екен.

**2.3-мәселе.** Электронлық толқынлардың металлдағы сынығын есапқа алып Вульф-Брэгг шәртин жазыңыз.

**Шешими:** 2.1-бөлімде гәп етилгениндей, электронлар металдың бетине келип түскенде де Бройль толқынларының сынығы орын алады. Усы сыныұды есапқа алып Вульф-Брэгг шәртин жазамыз.



2.15-сүйрет.

Металлдағы электронлық толқынның сынығын есапқа алған ҳалдағы электронлардың дифракциясы.

Мейли электронлар атомлық тегисликтегі  $\theta$  сырғанау мүйеші менен түсетеуғын болсын. Сынған нур ушын сырғанау мүйешиниң шамасын  $\lambda_1$  арқалы белгилеймиз (2.2.15-сүйрет). Әпиүайылық ушын симметриялы жағдайды қараймыз, яғни атомлық тегисликлерди кристалдың бетине параллель деп есаптаймыз. Қоңысылас атомлық тегисликлерде шашыраған толқынлар ушын жүрислер айырмасы  $\Delta$  ны есапаймыз. Сыныұды есапқа алған ҳалда

$$\Delta = (AB + BC)n_e - AD = 2AB \cdot n_e - AC \cos\theta = \frac{2dn_e}{\sin\theta_1} - \frac{2d}{\tan\theta_1} \cos\theta$$

аңлатпасын аламыз. Электронлар толқыны ушын сыныў нызамы (Снелиус нызамы)

$$\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta_1\right)} = \frac{\cos\theta}{\cos\theta_1} = n_e$$

түрине ийе болады. Буннан  $\cos\theta$  ны есаплап ҳәм оны жүрислер айырмасы  $\Delta$  ға қойсақ

$$\Delta = \frac{2dn_e}{\sin\theta_1} - \frac{2dn_e \cos^2\theta_1}{\sin\theta_1} = 2dn_e \sin\theta_1 = 2d\sqrt{n_e^2 - \cos^2\theta}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Солай етип де Бройль толқынының сыныўын есапқа алған ҳалда қоңсылас тегисликлерде шағылысқан толқынлардың бир бириң күшетиү шәрти, яғни Вульф-Брэгг шәрти

$$2d\sqrt{n_e^2 - \cos^2\theta} = n\lambda_{db}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

түрине енди [(2.2.11)-аңлатпаға].

Биз алған Вульф-Брэгг шәрти тек электронлар ушын ғана емес, ал толқынлық қәсийетлерге ийе фотонлар, нейтронлар ҳәм басқа да бөлекшелер ушын орынланады. Бундай формуланы сыныў көрсеткишин 1 ден өзгере болғанда қолланыў керек болады. Егер  $n_e - 1 \ll 1$  болса биз алған шәрт әдеттеги сыныўды есапқа алмайтуғын жағдайдағы Вульф-Брэгг шәртине айланады.

**2.4-мәселе.** Графит пәнжересиниң турақтысы  $d = 0,335$  нм. Графит поликристаллы тәрепинен өткерилиетуғын ең қысқа узынлықтағы нейтронлар толқының температурасы  $T$  ны анықлау ушын (2.2.12) деги температура  $T$  ны  $\lambda_{db}$  шамасының функциясы сипатында көрсетемиз

$$T = \frac{(2\pi\hbar)^2}{3mk\lambda_{db}^2}.$$

Бул аңлатпаға  $\lambda_{db} = \lambda_{шег.} = 0,67 \cdot 10^{-9}$  м шамасын қойып

$$T = \frac{(62 \cdot 10^{-34})^2}{3 \cdot 1,675 \cdot 10^{-27} \cdot 1,38 \cdot (0,67 \cdot 10^{-9})^2} = 14 \text{ K}$$

нәтийжесин аламыз. Солай етип поликристалл фильтр арқалы өтиўши нейтронлардың температурасының ҳақыйқатында да жудә төмен екенлигин көремиз. Бундай нейтронларды салқын нейтронлар деп атайды.

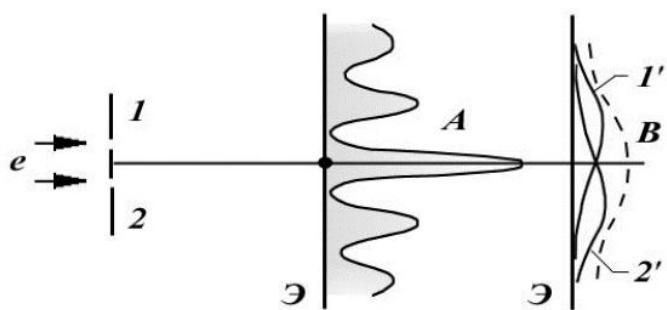
## 2-2-3. Анықсызлық қатнаслары

**Микробөлекшелердин қәсийеттери.** Микробөлекшелердиң толқынлық қәсийетлериниң ашылыўы бизиң принципиаллық жақтан пүткіллей жаңа типтеги объектлер менен жумыс ислесе баслағанымызды көрсетеди. Бир қатар экспериментлерде микробөлекшелер корпускулалық қәсийетті көрсетеди, ал екинши бир экспериментлерде бизлер оларды толқын түринде көремиз. Бирақ ҳақыйқатында олар толқын да, бөлекше де емес. Усы жерде микробөлекшелердин қәсийеттерин тәриплеў ушын классикалық усыллардың иске аспайтуғынлығы анық көринеди.

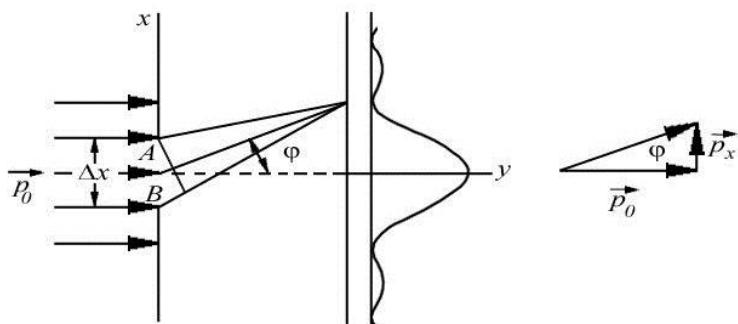
Микробөлекшениң толқыннан айырмасын көп санлы мысаллардың жәрдеминде көрсетиў мүмкін. Мысалы ярым мөлдир айнаны пайдаланып қәлеген толқынды екиге бөлип, олардың ҳәр қайсысын өз алдына изертлеў мүмкін. Микробөлекше болған электронды ямаса нейтронды бөлеклерге бөлиүге болмайды. Усы ўақытқа шекем ҳеш ким ярым электронды, бир ярым протонды ямаса шерек нейтронды көрген жоқ.

Микробөлекшениң классикалық нызамларға бағыннатуғын макробөлекшелерден тийкарғы айырмасының бири соннан ибарат, микробөлекшениң қозғалысын сипатлау ушын траектория түснігін қолланыўға болмайды. Бул жағдайда еки саңлақта алынатуғын электронлардың дифракциясы мысалында көрсетемиз. Қөп оқыў қолланбаларында бул экспериментти ойымызда өткерилиетуғын эксперимент деп атайды. Бирақ еки саңлақтағы электронлардың дифракциясын 1961-жылы Йенсен бақлады.

Мейли моноэнергиялы (бирдей энергияға ие) электронлардың паралель дәстеси еки саңлағы бар диафрагмаға келип түсетуғын болсын (2.2.16-сүүрет). Электронлар толқынлық қәсийетке ие болғанлықтан диафрагманың артына қойылған Э экранында интерференциялық сүүрет пайда болады. Интерференциялық сүүреттин максимумлар менен минимумлардың избез-излигинен туратуғынлығын билемиз. (А иймеклиги). Енди 1-саңлақ ашық ҳәм 2-саңлақ жабық болған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда экрандағы электронлардың тарқалыўы тек бир саңлақтың үлеси менен анықланады (1' иймеклиги). Тап сол сыйқыл 1-саңлақты жапсақ ҳәм 2-саңлақты ашсақ, онда 2' иймеклиги менен сипатланатуғын тарқалыұды аламыз. Егер ҳәр бир электрон белгили бир саңлақ арқалы өтетуғын болса (1- ямаса 2-саңлақтан), онда электронлардың тарқалыўы еки саңлақ та ашық турғандағы (яғни В иймеклиги) жағдайдағыдан болып тарқалған болар еди (2.2.16-сүүретте келтирилген 1' ҳәм 2' иймеклилериниң қосындысы пунктир сыйқы пenen көрсетилген). В иймеклигинин экспериментте алынған иймекликтен тикелей айырмасы электрон диафрагма арқалы өткенде еки саңлақты да "көреди" деген жүймақтың шығарылыуна алып келеди. Электрон диафрагма арқалы өткенде экранда пайда болатуғын интерференциялық сүүрет еки саңлақтың қатнасыуы менен ғана пайда болады деп түсндириледи. Электрон қандай да бир саңлақ арқалы өтти ҳәм соның салдарынан интерференциялық сүүрет пайда болды деп түсндириетуғын қәлелеген тырысыў интерференциялық сүүреттин бузылыуына алып келеди. Солай етип интерференциялық сүүретти бузбай электронның саңлақтардың қайсысынан өткенилігин көрсетій мүмкін емес болып шығады. Демек электронға ямаса қәлелеген басқа микробөлекшеге қандай да бир айқын траектория сәйкес келеди деп айтую мүмкін емес.



2.16-сүүрет.  
Моноэнергиялы  
электронлардың паралель  
дәстеси еки саңлағы бар  
диафрагмаға келип түсетуғын  
эксперименттиң схемасы.



2.17-сүүрет.  
Саңлақтағы электронның  
дифракциясы.

Микробөлекшениң толқынлық қәсийетке ийе екенлиги классикалық физиканың әхмийетли түсніклеринің бири болған траектория түснігінен бас тартыўға алып келеди. Классикалық көз-қараслар бойынша бөлекше ўақыттың ҳәр бир моментинде кеңисликтиң белгили бир ноқатында жайласады ҳәм бул ноқатта белгили муғдардағы импульске ийе болады. Демек бир ноқатта жайласқан электронның тап сол ўақыт моментинде екинши ноқатта да жайласыўы мүмкін емес. Квантлық көз қараслар бойынша толқынлық қәсийетлерге ийе болғанлығы себепли бир ўақыт моментинде микробөлекше кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында жайласа алады. Соныңтан микробөлекшелердин қозғалысын тәриплөу ушын траектория түснігінен пайдаланыў пүткіллей мүмкін емес болып табылады.

Классикалық бөлекшелердин қандай қәсийетлері микродұнья областларында сақланады? Сақланатуғын шамалар қатарына бөлекшениң массасы ҳәм энергия киреди. Қандай да бир микробөлекше басқа денелердин бөлекшелери менен тәсир етискенде оның энергиясы бөлекше бир ноқатта турған жағдайдағыдан болып сарыпланады.

**Анықсызлық қатнаслары.** Микробөлекшелердин корпускулалық-толқынлық тәбияты усы бөлекшениң ҳалын характерлеўши физикалық шамалардың мәнислерин дәл анықлаўға шек қояды. Бул шеклердин экспериментлердеги өлшеўлердин дәллиги менен ҳеш қандай байланысы жоқ. Соныңтан биз айтып атырған айырым физикалық шамалардың мәнислерин дәл анықлаў мүмкіншиликлеринің жоқлығы принципиаллық әхмийетке ийе. Мысал ретинде электронның саңлақтағы дифракциясын қараймыз.

Мейли электронлар мөлдир емес Э экранына нормал бағытта түсетуғын болсын. Экранда кеңлиги  $\Delta x$  шамасына тең саңлақ болсын (2.2.17-сүйрет).

Интерференциялық сүйрет экраннан соң жайласқан  $\Phi$  фотопластинкасында регистрацияланатуғын болсын. Экран тегислигидеги  $x$  көшерин саңлақقا перпендикуляр бағытқа қарай бағыттаймыз, ал у көшерин болса келип түсиўши электронлар дәстесиниң қозғалыс бағытында аламыз. Мейли келип түсиўши электронлар  $p_0$  муғдарындағы импульске ийе болсын. Бундай жағдайда квант-механикалық көз-қараслар бойынша бундай электронлар (2.2.4)-де Бройль теңлемеси тәрепинен анықланатуғын толқын векторы  $\vec{k}$  болған тегис толқын түринде сыртланады

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}_0}{\hbar}$$

Толқын барлық кеңислик бойынша тарқалған болғанлықтан ҳәр бир электрон саңлақ арқалы өтемен дегенше дәл  $p_0$  муғдарындағы импульске ( $p_x = 0, p_y = p_0, p_z = 0$ ) ҳәм мәниси пүткіллей белгисиз болған  $x$  координатасына ийе болады.

Электрон саңлақ арқалы өткенде ситуация пүткіллей өзгериске ушырайды.  $x$  координатасындағы анықсызлық саңлақтың кеңлиги  $\Delta x$  қа тең болады. Бирақ бул жағдайда электронлардың саңлақтағы дифракциясының салдарынан импульстиң мәнисинде  $\Delta p_x$  шамасына тең болған анықсызлық пайда болады. Мәселе соннан ибарат, саңлақ арқалы өткен электронлар экранда енди тегис толқын түринде емес, ал шашыраўшы толқын түринде тәриплениди. Бундай шашыраўшы толқынның интенсивлиги дифракция нызамларына сәйкес дифракция мүйеши  $\phi$  ге байланыслы болады. Дифракциялық сүйреттиң сапалық түри 2.17-сүйретте келтирілген.

Саңлақ арқалы өтиўдин барысында импульстиң  $x$  көшерине түсирилген проекциясы  $p_x$  та үлкен емес өзгериске ушырайды. Электронлардың дифракциясына муýапық  $p_x$  тың қандай шамаға өзгеретуғынлығын бағалайық.

Саңлақ арқалы өткен электронлардың басым көпшилиги орайлық дифракциялық максимумға барып түседи. Бул максимумның шегаралары  $\varphi_1$  дифракция мүйешиниң мәниси бойынша табылады.  $\varphi_1$  мүйеши дифракциялық сүүреттеги интенсивликтиң биринши минимумын береди. Дифракция теориясына сәйкес бул мүйеш

$$\Delta x \sin\varphi_1 = \lambda_{db}$$

шәртинен табылады. Биз барлық ўақытта  $\lambda_{db}$  арқалы электронның де Бройль толқынының толқын узынлығын белгилеп келдик.  $\varphi_1$  мүйешиниң киши екенлигине байланыслы  $\varphi_1 \sin\varphi_1 \approx \tan\varphi_1$ . Демек

$$\frac{\lambda_{db}}{\Delta x} = \sin\varphi_1 \approx \tan\varphi_1. \quad (2.2.13)$$

Екинши тәрептен  $\varphi_1$  мүйешиниң мәнисин электронның  $p_x$  ҳәм  $p_y$  қураўшылары арқалы да анықлауға болады:

$$\tan\varphi_1 = \frac{p_x}{p_y}.$$

$x$  көшериниң бағытында импульстин проекциясындағы анықсызлық  $\Delta p_x$  шамасының мәниси  $p_x$  тың өзиниң мәниси менен барабар деп есапладап

$$\tan\varphi_1 = \frac{\Delta p_x}{p_y}. \quad (2.2.14)$$

аңлатпасын аламыз. (2.2.13) пенен (2.2.14) аңлатпаларын бир бири менен салыстырып

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \lambda_{db} p_y$$

қатнасына ийе боламыз.

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{p_y}$$

екенлигин итибарға алып ең ақырғы нәтийжени аламыз

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\hbar. \quad (2.2.15)$$

(2.2.15)-аңлатпаны келтирип шығарыуды базы бир әпиүайыластырышы болжайлар пайдаланылған еди. Соныңтан  $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\hbar$  формуласы жуұық формула болып табылады. 3.7-бөлімде келтирилген қатаң түрдеги жуўмақ

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.2.16)$$

формуласын береди.

(2.2.16)-формула 1927-жылы немис физиги В.Гейзенберг тәрепинен алынды ҳәм соныңтан Гейзенбергтиң анықсызлық қатнаслары деп аталады. Бул қатнаслар

бойынша биз бөлекшениң координаталарын қаншама дәл тапсақ (яғни  $\Delta x$  шамасының мәниси қаншама киши болса), онда усы координатаға түсирилген импульстиң проекциясының мәнисин тапқанда жиберилетуғын анықсызлықтың мәниси  $\Delta p_x$  соншама үлкен болады (яғни  $\Delta x$  киши болса  $\Delta p_x$  үлкен ҳәм  $\Delta x$  үлкен болса  $\Delta p_x$  киши мәниске ийе болады деген сөз).

Анықсызлық қатнаслары анықсызлық принципиниң математикалық аңлатпасы болып табылады. Бул принцип бойынша координата менен импульстиң усы координатаға түсирилген проекциясы дәл мәнислерге ийе болатуғын ҳал тәбиятта бола алмайды.

(2.2.16)-аңлатпаның материяның корпускулалық-толқынлық дуализминиң салдары екенлигин және бир рет атап өтемиз. Бул дуализм бойынша бөлекше бир ўақытта толқынлық қәсийетке де, бөлешелик қәсийетке де ийе болады. Бул анықсызлық анау ямаса мынау экспериментте пайдаланылатуғын айқын физикалық әсбаптың шаманы өлшегендеге жиберетуғын қәтелиги менен ҳеш қандай байланысқа ийе емес. Бул қатнас микробөлекшениң характеристикаларын өлшеудің дәллігінің теориялық шегін береди.

Гейзенбергтиң анықсызлық қатнаслары бөлекшениң координатасының анықсызлығы менен импульсиниң усы координатаға түсирилген проекциясының анықсызлығын байланыстырады. Биз жоқарыда қарап өткен жағдайда х көшери ҳеш бир себеп пенен айырып алынған жоқ еди. Соныңтан (2.2.16)-қатнас басқа координата көшерлери ушын да орынлы

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда координатаны ҳәм импульстиң басқа координаталарға түсирилген проекцияларын анықлауға ҳеш қандай шек қойылмайды. Мысалы  $\Delta x$  пенен  $\Delta p_y$  ямаса  $\Delta p_z$  шамаларын анықлау дәлликтерине ҳеш қандай шек қойылмайды.

Квантлық механикада анықсызлық қатнаслары фундаменталлық әхмийетке ийе. Бул қатнаслар оғада әхмийетли физикалық нәтийжелерди алғыуға мүмкіншиликті береди. Соның менен бирге бул қатнаслар квант-механикалық мәселелерди шешкенде қурамалы болған дәл математикалық есаплаўларды жүргизбей-ақ көп шамалардың мәнислерин жеткиликли дәрежедеги дәллікте алғыуға имканят жаратып береди. Мысалы не себепли атомдағы электрон ядроға қулап түспейди, нeliкten атом ядросының ишинде электрон жоқ ҳәм басқа да әхмийетли сораўларға аңсат жуўап бериүге мүмкіншиликті береди. Анықсызлық қатнаслары жәрдемінде атомның өлшемлеринің шамасы, атомдағы электронның ең минималлық энергиясы ҳаққындағы мәселелерге айқын жуўап алғыуға болады.

Анықсызлық қатнасларының атомның орнықлылығы ҳаққында қалай жуўмақ шығаратуғынлығын көрсетемиз. Водород атомын аламыз ҳәм ондағы электрон ядроның (протонның) дөгерегіндегі радиусы  $r$  болған дөңгелек орбитада  $v$  тезлигі менен қозғалады деп есаптаймыз. Электронның орбита бойынша қозғалысы Кулон күшиниң тәсиринде жүзеге келетуғын болғанлықтан Ньютонның екинши нызамы бойынша

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (2.2.17)$$

аңлатпасын жаза аламыз. Енди анықсызлық қатнасларынан пайдаланамыз. Электронның координатасындағы анықсызлық орбитаның радиусы  $r$  ге тең. Ал

импульстиң анықсызлығы  $\Delta p$  ның шамасы импульс  $p$  ның шамасынан артық емес, яғни  $\Delta p \approx p = mv$ . Бул жағдайда (2.2.16)-аңлатпа мына түрге енеди:

$$rmv \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.2.18)$$

(2.2.17) менен (2.2.18) ди бириктирип

$$r > \frac{\pi \epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 0,13 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

шамасын аламыз. Демек электронның орбитасының радиусы, яғни водород атомының радиусы биз тапқан шамадан киши бола алмайды екен. Бул өз гезегинде электронның ядроға қулап түсе алмайтуғынлығын аңлатады. Сонықтан атом орнықлы система болып табылады.

Анықсызлық қатнаслары классикалық механиканың қолланылыў шеклерин де сзып бере алады. Бул жағдайды демонстрациялаў ушын (2.2.16)-аңлатпаны оған масса  $m$  киретуғын етип көширип жазамыз. (2.2.16) ға  $\Delta p_x = m\Delta v_x$  теңлигин қойып

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \quad (2.2.19)$$

теңсизлигин аламыз.  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$  Дж·сек жүдә киши шама болғанлықтан тезлиktиң анықсызлығы  $\Delta v_x$  тек массасы жүдә киши ҳәм жүдә киши  $\Delta x$  өлшемлеринде ғана сезилерліктей мәниске ийе болыуы мүмкин.

Мысал ретинде массасы  $m = 10^{-6}$  кг болған шаңың өлшемлеринде ғана сезилерліктей мәниске ийе болыуы мүмкин. Бундай бөлекшениң координатасын анықлауда жиберилетуғын қәтеликтиң шамасы  $\Delta x = 10^{-6}$  метрден артық емес. Бундай жағдайда шаң өлшемлеринде ғана сезилерліктей мәниске ийе болыуы мүмкин. Солай етип шаң бөлекшеси ушын, соңдай-ақ барлық макроскопиялық денелер ушын анықсызлық қатнаслары ҳеш қандай әхмийетке ийе емес. Олардың қозғалысын изертлегендеге квантлық механиканы емес, ал классикалық механиканы қолланыў керек.

Енди атомдағы электрон ушын анықсызлық қандай нәтийжелерди беретуғынын көріп өтемиз. Электронның массасы  $m = 0,91 \cdot 10^{-30}$  кг, оның координатасындағы анықсызлықты  $\Delta x \approx 10^{-10}$  м ге тең дейик. Бул жағдайда  $\Delta v_x \sim 10^6$  м/сек.

Бул шаманы атомдағы электронның тезлиги менен салыстырайық. Водород атомындағы электронның энергиясы шама менен 10 әВ шамасында. Бундай энергияға  $v = 10^6$  м/сек шамасындағы тезлик сәйкес келеди. Солай етип электронның тезлигиндеги анықсызлық  $\Delta v_x$  тың шамасы электронның өзиниң тезлиги  $v$  ға барабар екен деген жуұмақ келип шығады. Сонықтан атомдағы электронның қәсийетин тәриплей ушын квантлық механиканың нызамларын пайдаланыў керек болады.

Биз төменде координата менен импульстиң проекциясы менен бир қатарда бир ўақытта дәл мәнислерге ийе бола алмайтуғын басқа да физикалық шамалардың жупларының бар екенлигин көремиз. Олар ушын да (2.2.16)-аңлатпаға уқсас анықсызлық қатнаслары орын алады. Соңдай қатнаслардың ишинде энергияның анықсызлығы  $\Delta E$  менен ўақыттың анықсызлығы  $\Delta t$  шамасын байланыстыратуғын анықсызлық қатнаслары үлкен әхмийетке ийе. Бул қатнас мынадай түрге ийе

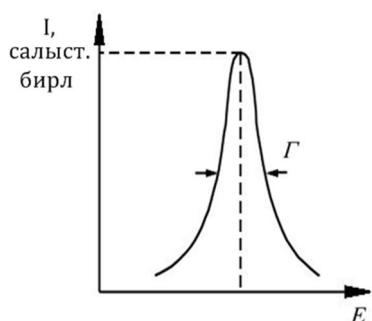
$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.2.20)$$

Бирақ бул жерде базы бир корректировка менен түснік беріу керек болады. Бул қатнасты толығырақ таллаймыз. Экспериментлерде квантлық ҳалдың толық энергиясы өлшенбейді, ал оның орнына әдетте система бир ҳалдан екинши ҳалға өткенде ҳәр ҳалға сәйкес келетуғын энергиялардың айырмасы өлшенеди. Бул айырма  $\Delta E = E_1 - E_2 = \Delta E_1 - \Delta E_2$  шамасына тең. Бул аңлатпада  $E_1$  менен  $E_2$  арқалы системаның дәслепкі ҳәм ақырғы ҳалларына сәйкес келетуғын энергияның муғдарлары белгиленген. Соның менен бирге  $\Delta E_1$  ҳәм  $\Delta E_2$  шамаларының белгилери ҳәр қыйлы болыуы мүмкін. Соның ушын (2.2.20)-аңлатпаның оң тәрепин екіге көбейтиүге туұры келеди. Нәтижеде энергия менен ўақыт ушын анықсызлық қатнасы мынадай түрге ийе болады:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (2.2.21)$$

Бул анықсызлық қатнасында ўақыттың анықсызлығы  $\Delta t$  шамасын системаның энергиясы  $E_1$  болған қозған ҳалдағы өмириниң узақтығы деп түсній керек. Бундай жағдайда  $\Delta E$  шамасы система энергиясы  $E_1$  болған ҳалдан энергиясы  $E_2$  болған ҳалға өткендеги энергияның мәнисинdegі шашаўлық (разброс) деп есаплауға болады.

(2.2.21)-анықсызлық қатнасларынан келип шығатуғын нәтийжелерди экспериментте де бақлауға болады. Бундай экспериментлер қатарына атомлық спектроскопияны көрсетиүге болады. Атомлардың нурланыў спектринин сзықтарының шексиз ушлы (енсиз) екенлиги белгилі. Егер спектр сзықтары шексиз енсиз болғанда  $\Delta E = 0$  теңлиги орынланған болар еди. Ал бул жағдай нурланған кванттың дәл мәнисине сәйкес келеди. Экспериментте бақланатуғын спектраллық сзықтар болса  $\Gamma$  арқалы белгиленетуғын (бул жерде грек ҳәриби жазылған) кеңлигине ийе болады. Буны сзықтардың тәбийий кеңлиги деп атайды.  $\Gamma$  ның шамасы жоқарыда айттылып өтилген фотонлардың энергиясының сзықтың ортасына сәйкес келиўши орташа мәнистиң әтирапындағы шашаўлығына сәйкес келеди. (2.2.18-сүйрет).



2.18-сүйрет.

Атомлардың нурланыў спектриндегі сзықтың формасының сапалық сүйрети.

(2.2.21) деген сзықтың кеңлиги атомлық қозған ҳалдағы жасаў ўақыты т менен былайынша байланысқанлығы келип шығады

$$\Gamma \cdot \tau \approx \hbar. \quad (2.2.22)$$

Экспериментте спектраллық сзыықлардың тәбийи кеңлиги Г шамасын өлшеп (2.2.22)-аңлатпаның жәрдемінде қандай да бир қозған ҳалдағы жасау ўақытын есаплау мүмкін. Көзге көринетуғын диапазонда нурланатуғын атомлардың спектраллық сзыықларының тәбийи кеңлиги ушын экспериментлерде  $\Gamma \sim 10^{-7}$  эВ шамасы алынады. Бул мәнисти (2.2.22) ге қойсақ атомның қозған ҳалдағы жасау ўақыты ушын  $\tau \approx 10^{-8}$  сек мәнисин аламыз. Атомлардың спектраллық сзыықларының кеңеиейи ҳақында биз төмениректе гәп етемиз

**Анықсызлық қатнасларынан келип шығатуғын нәтийжелер.** Анықсызлық қатнасларынан келип шығатуғын нәтийжелердин бириң би жоқарыда талладық ҳәм квантлық механикада бөлекшениң траекториясы ҳақында гәп етиўдің мәнисиниң жоқ екенлигин көрдік ( себеби толқында траектория болмайды). Классикалық көз-қараслар бойынша (классикалық механиканың нызамлары бойынша) бөлекше ҳәр бир ўақыт моментинде координатаға ҳәм импульске (тезликтке) ийе болады. Бул бөлекшениң белгили бир траектория бойынша қозғалатуғынлығын аңлатады. (2.2.16)-(2.2.19)-аңлатпалардан сол шамалардың биреүиниң ғана дәл мәниске ийе болатуғынлығын көремиз. Бөлекшениң координатасының белгили болыуы мүмкін (бул жағдайда  $\Delta x = 0$ ). Бундай жағдайда оның тезлигин анықлау мүмкін емес ( себеби  $\Delta v_x \rightarrow \infty$  шамасына тең болады). Егер бөлекшениң тезлиги дәл мәниске ийе болса (бундай жағдайда  $\Delta v_x = 0$ ), онда оның координатасы анық мәниске ийе бола алмайды (яғни  $\Delta x \rightarrow \infty$ ). Улыұма жағдайда болса корпускулалық-толқынлық дуализмниң салдарынан бөлекшениң координатасы да, импульси де белгили бир анықсызлықтарға ийе болады. Бул анықсызлықтар бир бири менен (2.2.16)-аңлатпа арқалы байланысқан.

Ядро физикасында кеңнен қолланылатуғын Вильсон камерасын еске түсіремиз. Вильсон камерасы арқалы өткенде жоқары энергияға ийе зарядланған бөлекшелер треклер деп аталатуғын из қалдырады. Бул көзге анық көринетуғын ямаса сүүретке түсирип алғыуға болатуғын из траектория болып табылады. Треклердин көриниүндеги бөлекшелердин толқынлық қәсийетиниң ақыбетинде келип шығатуғын шашалау (анықтырының төменлеуі) пүткиллей бақланбайды. Мәселе неден ибарат? Жуўаптың мәниси төмендегилерден ибарат.

Вильсон камерасындағы бөлекшелер қалдырған треклер сзыықлы өлшемлери  $\Delta x \approx 10^{-6}$  м болған думанның майда тамшылардан (тамшылар шынжырынан) турады. Бундай жағдайда импульстин анықсызлығы (2.2.16) ға сәйкес

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x} \sim 10^{-28} \text{ кг}\cdot\text{м}/\text{сек}$$

шамасына тең болады. Бул шама  $p$  импульстин мәнисине салыстырғанда жудә киши. Бул Вильсон камерасындағы бөлекшениң қәсийетлерин тәриплей ушын классикалық механиканың керек екенлигин билдиреди. Бул жағдайда сезилерликтей қәте жиберместен бөлекшениң траекториясы ҳақында айта аламыз.

Бундай жуўамақтар жоқары энергиялы бөлекшелер ушын толық тастыйықланады. Ҳақыйқатында да үлкен импульслерге ийе бөлекшелер ушын де Бройль толқынның узынлығы жудә киши болады. Бундай жоқары энергиялы бөлекшелерди классикалық бөлекшелер деп атауға болады.

Анықсызлық қатнасларына келип шығатуғын екинши әхмийетли нәтийжени қараймыз. Биз ҳәзир микробөлекшениң толық тынышлық ҳалының болмайтуғынлығын көрсетемиз.

Ҳақыйқатында да егер бөлекшениң координатасының өзгериү областы шекленген болса, яғни  $\Delta x = a$  болса, онда (2.2.16) ға сәйкес бундай бөлекшениң импульси

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a}$$

анықсызлығына ҳәм усыған сәйкес нолге тең емес энергияға ийе болады. Усы энергияның ең киши мәниси болған  $E_{min}$  шамасын баҳалаймыз. Импульс бойынша минималлық шашаўлық

$$\Delta p_{x\ min} = \frac{\hbar}{2a}.$$

$p_{x\ min} \approx \Delta p_{x\ min}$  деп болжап

$$E_{min} = \frac{p_{x\ min}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

аңлатпасын аламыз. Солай етип квантлық механикада бөлекше ҳеш қашан тынышлық ұалында тұра алмайды екен.

Енди анықсызлық қатнасларына келип шығатуғын үшинши әхмийетли нәтийжени қараймыз. Квантлық механикада бөлекшениң толық энергиясын кинетикалық ҳәм потенциал энергияларға бөлиү мәниси жоқ иске айланады. Кинетикалық энергия бөлекшениң импульсине, ал потенциал энергия болса бөлекшениң координатасына байланыслы. Бирақ (2.2.16)-аңлатпа бойынша координата менен импульс бир үақытта анық мәнислерге ийе болмайтуғын болғанлықтан толық энергия  $E$  бир үақытта дәл анықланған кинетикалық ҳәм потенциал энергиялардың қосындысына тең бола алмайды. Солай етип квантлық механикада кинетикалық энергия  $E_K$  менен потенциал энергия  $U$  дың бир заматтық мәнислеринің қосындысы толық энергияға тең болыўы мүмкін емес.

Биз төменде бул теңликтің энергиялардың орташа мәнислері ушын дұрыс болатуғынлығын көрсетемиз. Яғни  $\langle E \rangle = \langle E_K \rangle + \langle U \rangle$ .

**2.5-мәселе.** Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасын пайдаланып характерли сыйықлы өлшем  $L$  ге ийе кеңисликтиң базы бир обласындағы классикалық механиканың қолланылыў шеклерин баҳалаңыз.

**Шешими:** Биз жоқарыда бөлекшениң қозғалысында траектория түснегин тек фана оның координатасының анықсызлығы бөлекше қозғалатуғын областтың характерли өлшемлеринен киши болғанда (яғни  $\Delta x \ll L$  теңсизлиги орынланғанда) пайдаланыўға болатығынлығын айтып өткен едик.

(2.2.16)-аңлатпадан пайдаланамыз ҳәм бул аңлатпада  $\Delta p_x \approx p$  теңлиги орынланады деп есаптаймыз. Бөлекшениң координатасының анықсызлығы ушын

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \approx \frac{\hbar}{2p} = \frac{\lambda_{db}}{4\pi}$$

аңлатпасын аламыз. Демек  $\lambda_{db} \leq 4\pi\Delta x$ , ал  $\Delta x \ll L$  болғанлықтан  $\lambda_{db} \ll L$ . Усы теңсизлик орынланғанда бөлекшениң қозғалысын тәриплөў ушын классикалық механиканың нызамларын пайдаланыў керек деген жуўмақты шығарамыз.

**2.6-мәселе.** Энергия менен үақытты анықсызлық қатнасын пайдаланып атомның нурланыўы ушын спектраллық сыйықтың тәбийий кеңлигі болған  $\Delta\lambda$  шамасын табыңыз. Нурланыўдың толқын узынлығы  $\lambda = 500$  нм, ал атомның қозған ҳалдағы орташа жасаў үақыты  $\tau = 10^{-8}$  сек деп есаплаңыз.

**Шешими:**  $\lambda$  толқын узынлығына ийе толқынның энергиясы

$$E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$$

шамасына тең. Буннан энергия  $\Delta E$  менен спектраллық сыйықтың толқын узынлықтарының анықсызлықтарын (яғни  $\Delta E$  ҳәм  $\Delta\lambda$  шамаларының мәнислерин) есаплаймыз:

$$\Delta E = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda^2} \Delta\lambda.$$

$\Delta E = \Gamma$  екенлиги мәлім. Сонықтан (2.2.22)-аңлатпаны есапқа алып

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c t}$$

формуласын аламыз. Бул формулаға константалардың сан мәнисин қойсақ  $\Delta\lambda = 1,3 \cdot 10^{-14}$  м шамасын аламыз. Бундай жағдайда спектраллық сыйықтың салыстырмалы кеңлигі  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 2,6 \cdot 10^{-8}$  шамасындай болады. Биз усы жерде  $\Delta\lambda$  киши шамасының атомлардың нурланыуының монохромлықтың дәрежесин анықтайтуғынын атап өтемиз. Ал экспериментлерде алынатуғын спектраллық сыйықтардың кеңлигин сыйықтардың ҳақыйқы кеңлиги деп атайды) спектраллық сыйықтардың тәбийий кеңлигинен барлық ўақытта да үлкен болады. Бұған атомлардың жыллылық қозғалыслары себепли спектраллық сыйықтардың Допплерлик кеңейиүи ҳәм басқа да көп факторлар киреди.

## 2-2-4. Микробөлекшелерди затлардың структурасын изертлеў ушын қолланыў

Микробөлекшелерди пайдаланыў арқалы затлардың ҳәр қандай қәддидеги курылышын (ядролық, атомлық, молекулалық, атомлық-кристаллық, кристаллардың дефектлик курылышы ҳәм басқа да қәддилердеги) мүмкін екенлиги ҳәзирги ўақытлары кеңнен белгили. Бул жағдай бириңи рет 1911-жылы Англиялы физик Э.Резерфорд ҳәм оның менен бирге ислесиүши хызметкерлер тәрепинен α-бөлекшелердин атомлардағы шашыраўын изертлеў бойынша өткериленген тәжирийбеде айқын түрде көрсетилди. α-бөлекшелериниң жуқа металл фольгадағы шашыраўын изертлеўдің нәтийжесинде олар атомлардың планетарлық (ядолық) моделін ашты.

Резерфорд тәжирийбелеринде α-бөлекшелери пайдаланылды, тәжирийбелер шарайтларында олардың толқынлық қәсийеттери әхмийетке ийе болған жоқ. Сонықтан атом ядроларындағы α-бөлекшелериниң шашыраўын классикалық –көзқараслар бойынша таллаў мүмкін еди.

Биз төменде микробөлекшелердин жәрдемінде затлардың курылышын эксперименталлық изертлеў мүмкіншилигин қарап өтемиз ҳәм бул экспериментлерде олардың толқынлық қәсийеттери тийкарғы орын ийелейтуғын жағдайларды үйренемиз.

Рентген нурларының кристаллардағы дифракциясының ашылыуы қатты денелердин атомлық-кристаллық курылышын (структурасын) изертлеўдің жаңа усылы болған кристаллар рентгенографиясының пайда болыуына алып келди. Тап

сол сыяқлы электронлар менен нейтронлардың кристаллардығы дифракциясының ашылыўы да жаңа усыллардың (методлардың) пайда болыўын тәмийинледи. Электронлардың дифракциясына тийкарланған затлардың қурылышын изертлеў методын электронография, ал нейтронлардың дифракциясына тийкарланған методты нетронография деп атайды..

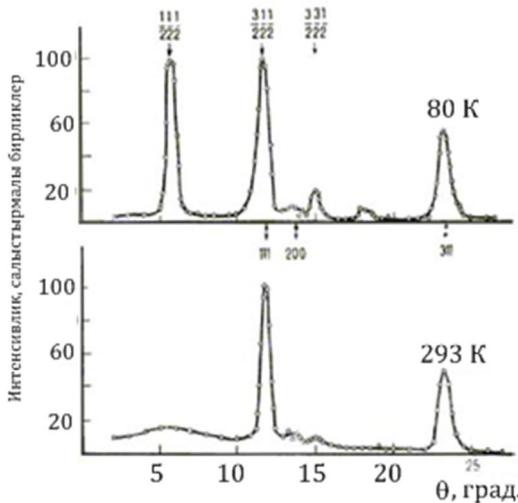
Электронография ҳәзирги ўақытлары кристаллардың, аморф денелердин, сүйкіліктердің, газлер менен пуўлардың молекулаларының қурылышын изертлеў ислеринде кеңнен қолланылады. Электронлар затлар тәрепинен құшли жутылатуғын болғанлықтан бул методтың жәрдеминде тек жуқа кристаллар ҳәм кристаллық пленкалар изертлениледи. Ал тәжирийбеде төменги энергияға ийе болған электронларды пайдаланғанда (бундай электронларды әстен қозғалатуғын электронлар деп атайды) олар кристалдың жұдә жуқа бетлик қатламына ғана өте алады. Соныңтан олар кристалдың жұдә жуқа бетлик қатламы ҳақында информацияларды бере алады. Әсте қозғалатуғын электронлардың дифракциясы ҳәзирги ўақытлары кристаллық затлардың бетиниң қурылышын изертлеўге мүмкіншиликті беретуғын ең информациалы усыллардың бири болып табылады. Бул методы жәрдеминде кристалдың бетиндеги кристаллық пәнжерениң қурылышының өзгерислерин, адсорбсия құбылыштарын ҳәм қатты денелердин кристаллизациясының ең басланғыш дәүирлерин үйрениў мүмкін.

Структуралық изертлеўлерде нейтронографиялық усыллар жұдә кең түрде қолланылады. Жоқарыда айтылып өтилгенинде нейтронлар электр зарядына ийе емес, жоқары өтиў қәбилетликтерине ийе. Бул қәсийетлер затлардың барлық көлеминиң қурылышын изертлеўге мүмкіншиликті береди. Жыллылық (әсте қозғалатуғын) нейтронлардың де Бройль толқынларының узынлығы конденсацияланған орталықтардағы атомлар ямаса молекулалар арасындағы қашықлыққа тең болғанлықтан, нейтронлардың дифракциясының жәрдеминде затлардың атомлық-кристаллық қурылышын анықлаў мүмкіншилиги туўылады. Нейтронлардың массасының шамасы атомлардың массасына жақын, ал жыллылық нейтронларының кинетикалық энергиясының шамасы затлардағы атомлар арасындағы тәсир етисиў энергиясының шамасы менен қатар. Соныңтан нейтронлардың серпимли емес шашыраўын изертлеўлердин нәтийжелери бойынша атомлар менен молекулалардың динамикалық қәсийетлерин үйрениў мүмкін.

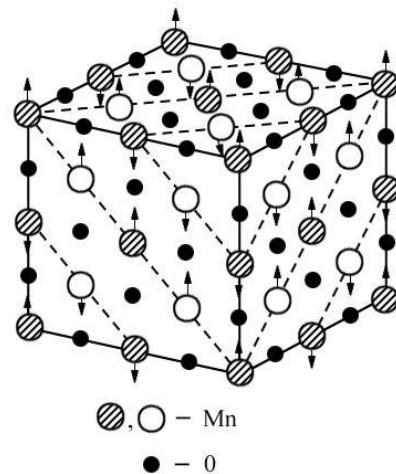
Нейтронларда магнит моментиниң болыўы дифракциялық изертлеўлерде затлардың магниттик қурылышын, яғни атомлардың магнит моментлериниң шамаларын, олардың өз-ара жайласыўларын, кристаллографиялық көшерлерге салыстырғандағы бағытларын үйрениўге мүмкіншиликті береди. Структуралық изертлеўлердин сәйкес методын магниттик нейтронография деп атайды. Ҳәзирги ўақытлары бул метод қатты денелердин магниттик структурасын тиккелей анықлаудың бирден бир усылы болып табылады.

2.19-сүретте MnO кристалларының магниттик қурылышын нейтронографиялық изертлеўлердин нәтийжелери көлтирилген. Өжире температураларында бул бирикпе парамагнетик болып табылады, ал  $T_N = 80$  К Неель ноқатынан (ферромагнетиклер ушын Кюри температурасының аналогы) төменги температураларда MnO антиферромагнетик ҳалына өтеди. Антиферромагнетик ҳал марганец атомларының магнит моментиниң антипараллель тәртиплесиўи менен характерленеди. Кристалдың еки температурасында (Неель температурасынан жоқарыда ҳәм төменде) дифракцияға ушыраған нейтронлар дәстесиниң интенсивликтерин салыстырыў (2.2.19-а сүрет) магнит моментлериниң тәртиплесиўиниң қосымша дифракциялық максимумлардың пайда болыўына алып келетуғынлығын көрсетеди. Қосымша максимумлардың пайда болыўына алып магниттик элементтар қутышасының өлшемлериниң өзгергенлигине сәйкес келеди.

Нейтронографиялық изертлеўлер барысында анықланған MnO кристаллының элементар қутышасындағы магнит моментлериниң тәртиплесиі 2.19-б сүйретте келтирилген. Бул сүйреттеги қара дөңгелеклер кислород атомларына, ал боялмаған дөңгелеклер марганец атомларын сәйкес келеди. Стрелкалардың жәрдеминде марганец атомларының магнит моментлериниң бағытлары көрсетилген.



2.19-а сүйрет. MnO кристалларының магнитлик структурасын 80 К ҳәм 293 К температураларда нейтронлардың дифракциясының жәрдеминде изертлеў барысында алынған нәтийжелер.



2.19-б сүйрет. MnO кристалларының элементар қутышасындағы марганец атомларының магнит моментлериниң өз-ара жайласыўлары. Стрелкалардың жәрдеминде магнит моментлериниң бағытлары көрсетилген.

Микробөлекшелердин толқынлық қәсийетлерин пайдаланатуғын және бир изертлеў областы электронлық микроскопия болып табылады. Қәлеген микроскоптың ажыратыла алыўшылық қәбилетлиги

$$l_{min} = 0,61 \frac{\lambda}{n \sin \alpha}$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул "Оптика" курсы бойынша белгили. Жоқарыда келтирилген формулада  $\lambda$  арқалы толқын узынлығы,  $n$  арқалы орталықтың сыныў қәбилеткиши белгиленген, ал  $2\alpha$  шамасын апертуралық мүйеш деп атайды.  $l_{min}$  шамасы микроскоптың жәрдеминде пайда етилетуғын сүйреттеги бир бириңен ажыратып көриў мүмкін болған еки ноқат арасындағы қашықтың минималлық мәниси. Оптикалық диапазонда  $l_{min} \approx 0,4\lambda$  шамасын аламыз. Бул шаманың мәниси жүзлеген нанометрге тең.

Жақтылық толқынларының орнына электронлар толқынын пайдалансақ микроскоптың ажыратыла алыўшылық қәбилетлиги мыңлаған есе артады. Бул жағдай электронлардың де Бройль толқынның толқын узынлығының жүдә киши екенлигі менен байланыслы. Ҳақыйқатында да тезлетиўши потенциалдың муғдары  $U = 10$  кв болғанда де Бройль толқынның толқын узынлығы 0,0122 нм шамасына тең болады. Бул шама атомлардың харakterли сыйықлы өлшемлеринен онлаған есе киши. Бирақ электронлық микроскопларда жүдә жоқары болған ажыратыла алыўшылықты пайда етиў сәти түсे бермейди. Себеби электрон микроскопындағы электронлар дәстелерин фокуслайтуғын электр ҳәм магнит линзалары әдеүир үлкен оптикалық кемшиликлерге - аберрацияларға ииे болады. Бирақ усы жағдайға

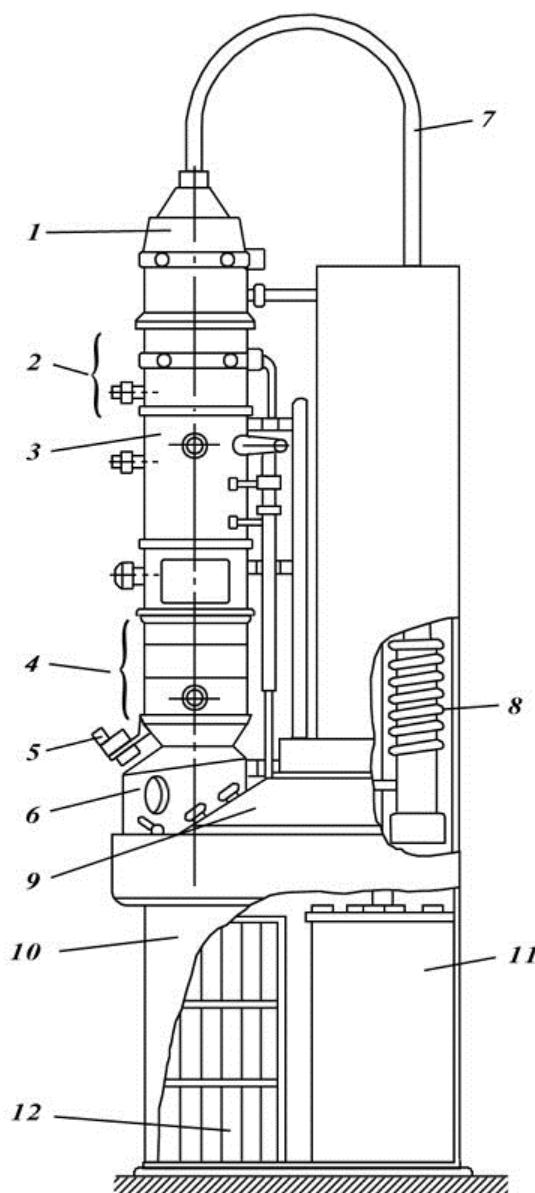
қарамастан ҳәзирги ўақыттағы электрон микроскопларының ажырата алышылық қәбилеттери  $l_{min} = 0,15 - 0,30$  нм шамаларын қурайды. Бул изертлениүши объектлердин атомлық ҳәм молекулалық құрылымдарын изертлеў ушын толық жеткиликли.

2.2.20-сүйретте электронлық микроскоптың дүзилиси схема түринде көрсетилген. Бундай микроскоп изертленетуғын объект арқалы өтиўши электрон дәстелеринде ислейди (рус тилинде "электронный микроскоп просвевающего типа" деп атайды). Жоқары ажырата алышылық қәбилетлигine ийе ҳәзирги заман электронлық микроскопларында тезлетьиүши кернеўдиң шамасы 100 - 400 кВ. Бундай жағдайларда заттың бир неше онлаған нанометр қалыңлықтағы қатламларын изертлеўге болады. Электрон микроскопының ишинде терең вакуум орнатылыўы керек.

Электронлық микроскоптың ишине орналастырылған электронлар ушын линзаның хызметин атқаратуғын арнаўлы формаларға ийе электромагниттен туратуғын дүзилислерди конденсорлар деп те атайды.

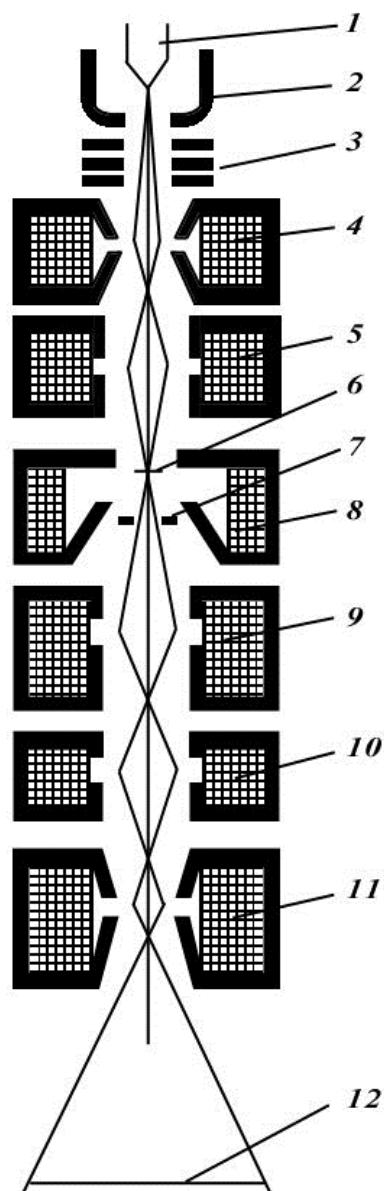
Электрон микроскопында кристаллық объекттиң үлкейтилген сүйретин былайынша алады. Кристалл арқалы туры өткен электронлар дәстеси ямаса кристалдың белгили бир кристаллографиялық тегисликлер семействосында дифракцияға ушыраған электронлардың дәстелериниң бири апертуралық диафрагманың жәрдеминде бөлип алынады. Буннан кейин бул дәсте микроскоптың проекциялық линзаларының жәрдеминде үлкейтиледи. Усыған байланыслы электрон микроскопында дифракцияға ушыраған көп санлы электронлар дәстелериниң қәлегенин экспериментатордың сайлап алыш мүмкіншилиги бар. Бундай жағдайларда бир электрон дәстесинде көринбейтуғын структуралық дефектлер екинши дәстени пайдаланғанда айқын түрде көринеди.

Электрон микроскопының оптикалық системасының схемасы 2.2.21-сүйретте көлтирилген. Бириңи ҳәм екинши конденсорлар тәрепинен пайда етилген электронлар дәстеси изертлениүши объектте диаметри киши болған дақ пайда етеди (диаметриниң шамасы 1 дең 20 мкм ға шекем). Объект арқалы өтиўши электронлар дәстеси проекциялық линзалар системасының жәрдеминде катодолюминесцентлик экранда объекттиң сүйретин пайда етеди. Бул экранның астында фотопластинкалар жайластырылған арнаўлы дүзилис орнатылған болады. Бул фотопласникаларға обьектлердин сүйрети түсириледи.



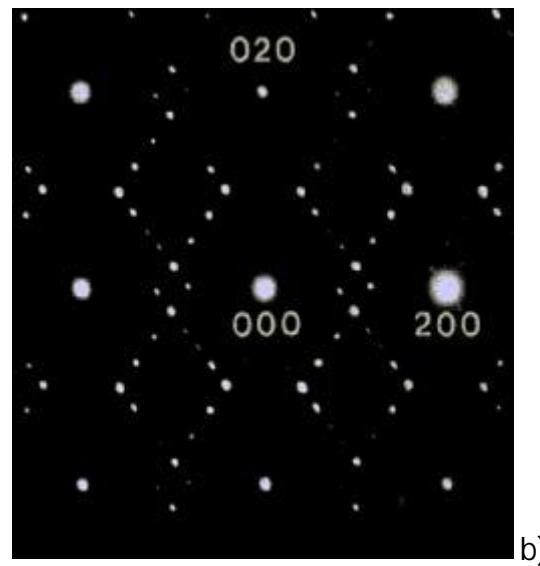
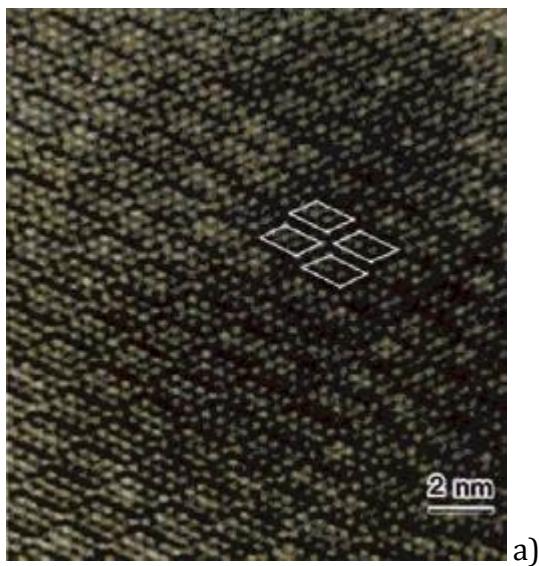
**2.2.20-сүйрет.** Электронлық микроскоптың дүзилисі: 1 – электрон пушкасы; 2 - конденсорлық линзалар; 3 - объектив линза, 4 - проекциялық линза; 5 – экранда пайда болған сүйретті көз бенен бақлау ушын арналған оптикалық дүзилис, 6 – көриў айналары; 7 – жоқары вольтли кабель; 8 - вакуум системасы, 9 – басқарыў пульти; 10 - стенд; 11- жоқары кернеў бериўши дүзилис; 12 – линзалар ушын электр тоғы дереги.

Электрон микроскопының жәрдемінде алынған сүйретлердин екеудің 2.2.22-сүйретте келтирілген. 2.2.22-а сүйрет жоқары ажыратса алышылық қәбілетке ийе электрон микроскопының жәрдемінде алынған алтын менен марганецтиң құймасының жуқа фольгасынан алынған. 2.2.22-б сүйрет изертленип атырған үлгинин әлемдегі электронлар толқынындағы дифракциялық сүйрети – электронограммасы



**2.2.21-сүйрет.** Электрон микроскопының оптикалық схемасы: 1 - катод; 2 – фокуслаұшы цилиндр, 3 – электронлар тезлеткиши; 4 – биринши конденсор (қысқа фокуслы); 5 – екінши конденсор (узын фокуслы); 6 – изертлениўши жуқа объект; 7 – объективтиң апертуралық диафрагмасы; 8 - объектив; 9-11 арқалы проекциялық линзалар белгиленген; 12 - катодолюминесцентли экран.

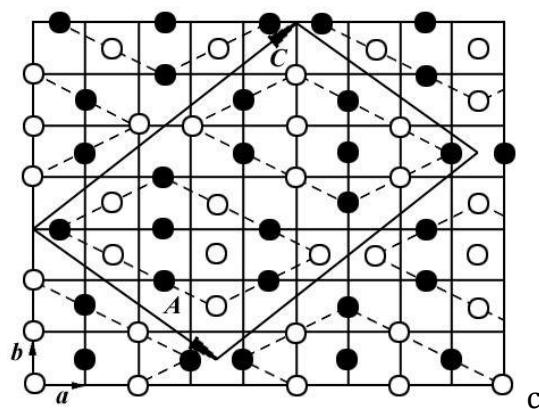
болов табылады. Усы эксперименталлық мағлыўматлар жәрдеминде алынған қуймадағы атомлардың жайласыў схемасы 2.22 сүйретте көлтирилген.



b)

2.2.22-а сүйрет. Электрон микроскопында алтын-марганец қуймасының жуқа фольгасынан изертлеўде алынған нәтийжелер.

- электрон-микроскопиялық сүйрет,
- изертленген кристаллық ұлгидеги электронлардың дифракциясы (электронограмма),
- электрон микроскопында алынған эксперименталлық мағлыўматлар тийкарында дүзилген алтын-марганец қуймасының структурасының модели.



## 2-3-1. Толқын функциясы

**Квантлық механикада бөлекшелердин қозғалысын тәрийиплеүдин өзгешеликтери.** Де Бройль гипотезасына сәйкес қозғалышы бөлекше толқынлық қәсийетке ийе болады. Егер бөлекше қозғалатуғын областтың өлшемлери  $L$  электронлардың де Бройль толқын узынлығы  $\lambda_{db}$  шамасы менен барабар ямаса оннан үлкен болса толқынлық қәсийетти есапқа алмаўға болмайды. Таллаулар  $\lambda_{db} \geq L$  шәртинің массасы киши ҳәм атомлардың сыйықлы өлшемлериндегі областта қозғалатуғын бөлекшелер ушын орынланатуғының көрсетеди. Бундай бөлекшелерди ендигиден былай микробөлекшелер деп атайды

Толқынлық қәсийетке ийе бөлекшердин қозғалысын тәрийиплеў ушын классикалық механиканың усылларынан пайдаланыўға болмайды. Классикалық механикада бөлекшениң ҳалы оның қәлеген ўақыт мометиндеги кеңисликлик координаталарын ҳәм тезлигин (импульсин) беріў менен анықланады. Бундай жағдайда бөлекшениң қозғалысы ўақыттың өтийи менен оның механикалық ҳалының өзгериүи менен байланыслы. Ал ҳаллардың үзликсиз өзгериси бөлекшениң белгили бир траектория бойынша қозғалысына сәйкес келеди.

Микробөлекшеде толқынлық қәсийеттиң болыўы оның координатасы менен импульсин бир ўақытта дәл анықлаўға мүмкиншилик бермейди. Бул Гейзенбергтиң (2.16)-анықсызлық қатнасларынан келип шығады. Демек микробөлекшениң механикалық ҳалы классикалық усыл менен берилмейди екен, ал оның қозғалысының траекториясы ҳаққындағы көз-қарасты микробөлекшелердин қозғалысларын тәрийиплеў ушын қолланыў принципиаллық жақтан мүмкин емес.

Бөлекшениң қозғалысын тәрийиплеўдин классикалық усылынан бас тартыў көпшиликтегі гүмән пайда етеди. Қозғалыс траекториясыз бөлекше кеңисликте қалай қозғалады? Мүмкин бизлер траекторияны тәрийиплеў ушын биз бөлекшениң қозғалысы менен байланыслы болған базы бир параметрлерди өлшей алмайтуғын шығармыз? Бирақ олай емес екенлигин және бир атап өтемиз. Физиканың рауажланыў тарихы бөлекшениң қозғалысын тәрийиплейтуғын классикалық усылдан, бөлекшениң траекториясы ҳаққындағы көз-қараслардан бас тартқан жағдайда ғана толқынлық қәсийетлерге ийе микробөлекшелердин қозғалысын дұрыс ҳәм толық тәрийиплеўге болатуғының ҳәм усындай бөлекшелердин қатнасында өткерилетуғын экспериментлердин нәтийжелерин болжап айтыўға болатуғының көрсетеди.

Толқынлық қәсийетлерге ийе болған бөлекшелердин қозғалысын тәрийиплейтуғын теорияны дәслепки ўақыттары толқын механикасы деп атады. Бирақ бул атама көп узамай квантлық механика атamasы менен алмастырылды.

Квантлық механика классикалық механикаға салыстырғанда улыўмараша физикалық теория болып табылады. Бирақ  $\lambda_{db} \ll L$  шәрти орынланғанда бөлекшениң толқынлық қәсийетлерин есапқа алмаўға болады ҳәм соңынан квантлық механиканың беретуғын нәтийжелери классикалық механиканың беретуғын нәтийжелери менен бирдей болады. Бундай жағдайды физика илиминдеги сәйкеслик принципи талап етеди. Бул принцип бойынша қәлеген жаңа теория (жаңа теория ески теорияға салыстырғанда әдетте улыўмалығы басым болады) өзинен бурынғы теорияны бийкарламаўы керек, ал жаңа теория бурынғы теорияны өзиниң дара жағдайы сыйпатында қамтып алышы шәрт. Соңынан ракетаның космослық кеңисликтеги қозғалысын, суў асты кемесиниң океан тереңликлериндеги орын алмастырыўларын, ҳәтте электронның электронлық-нур трубкасындағы қозғалысын тәрийиплеў ушын физика барлық ўақытта денелердин қозғалысын тәрийиплеўдин классикалық усылларынан пайдаланады. Тек

кеңисликлик масштаблар жұдә киши жағдайларда ғана (яғнай атом, атом ядросы масштабларында ғана) квантлық механика микродүньяның құбылысларын тәрийиплеу ушын бирден бир мүмкін болған аппаратқа айланады. Квантлық эффектлер атом системасы қәддинде көринетуғын болса да, бул эффектлер көплеген ҳәзирги заман дүзилислериниң ҳәм әсбап-ұскенелериниң жумысларының өзгешеликтерин анықтайды ҳәм алдыңғы технологиялардың тийкарында жатады.

Квантлық механикадағы бөлекшелердин қозғалысын тәрийиплеуге өтиў алдында теорияның тийкарында жататуғын бир қатар постулатларды көлтирип шығарамыз.

Квантлық механиканың биринши постулаты: Квантлық механикада бөлекшениң ҳалы  $\Psi(x, y, z, t)$  толқын функциясының жәрдеминде бериледи. Бул функция кеңисликлик координаталардың ҳәм ўақыттың функциясы болып табылады.

Квантлық механикада ислеп шығылған аппарат  $\Psi$  функциясы үстинде базы бир операциялар ислеўдиң нәтийжесинде микробөлекшениң қозғалысы ҳаққындағы толық информацияларды береди.

Толқын функциясының итималлық мәниси. Қәлелеген ўақыт моментиндеғи бөлекшениң координаталары менен импульсин көрсетиў ҳәм траекториядан бас тартыў арқалы микробөлекшениң ҳалын беріүдиң мүмкін емеслиги микробөлекшениң қозғалысын итималлық бойынша тәрийиплеу усылына алып келеди. Бул жағдай квантлық механикада бөлекшениң ҳалын анықлағанда берилген ўақыт моментинде кеңисликтин ҳәр қыйлы ноқатларында усы бөлекшени табыўдың итималлығын анықлау усылын көрсетиўдиң керек екенлигин аңғартады.

1926-жылы М.Борн квантлық механикадағы толқын функциясының итималлық жақтан мәнисин көлтирип шығарды:

$\Psi(x, y, z, t)$  толқын функциясының модулиниң квадраты  $t \geq 0$  ўақыт моментинде бөлекшени кеңисликтин координаталары  $x, y$  ҳәм  $z$  болған  $M = M(x, y, z)$  ноқатында табыўдың итималлығының тығыздығы  $w$  ны береди.

Демек

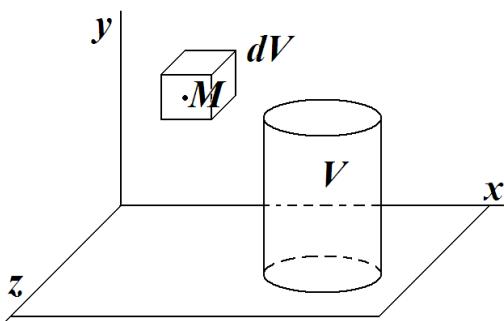
$$w = \frac{dP}{dV} = |\Psi|^2. \quad (2.3.1)$$

Улыўма жағдайда толқын функциясының комплексли функция болатуғынлығын атап өтемиз. Соңықтан бул функция ҳақыйқый ҳәм жормал бөлимелдерден турады. Усы жағдайға байланыслы физикалық мәниске функцияның өзи емес, ал ҳақыйқый шама болған оның модулиниң квадраты  $|\Psi|^2$  ийе. Толқын функциясының модулиниң квадратының мәнисин табыў ушын көпшилик жағдайларда толқын функциясы  $\Psi$  ди оның комплексли түйинлес функциясы болған  $\Psi^*$  функциясына көбейтеди.  $\Psi \cdot \Psi^* = |\Psi|^2$  теңлигинин дұрыс екенлигин комплексли сандар теориясында дәлилленеди.

(2.3.12)-формуланы түрлендирип

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi \cdot \Psi^* dV \quad (2.3.2)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада  $dP$  арқалы бөлекшениң берилген квантлық ҳал ушын усы бөлекшени базы бир ўақыт моментинде  $M$  ноқатын қоршап турған  $dV$  элементар көлеминде табыўдың итималлығы белгиленген (2.3.1-сүрет).



3.1-сүйрет.

Бөлекшениң берилген квантлық ҳал ушын оны базы бир үақыт моментинде  $M$  ноқатын қоршап турған  $dV$  элементар көлеминде табыўдың итималлығын есаплауышын арналған схема.

Бөлекшениң қозғалысын тәрийиплеў ушын  $N$  өлшемли ( $N = 1, 2$  ҳәм  $3$ )  $\mathbb{R}^N$  Евклид кеңислигинен пайдаланамыз. Бундай кеңисликти физикада әдетте конфигурациялық кеңислик деп атайды ҳәм бул кеңисликте туўры мүйешли координаталар системасын алады. Бундай координаталар системасында бөлекшениң х көшери бағытындағы бир өшемли қозғалысы ушын ( $N = 1$ ) "көлем" элементи  $dV = dx$ , тегисликтеги еки өлшемли ( $N = 2$ ) қозғалыс ушын  $dV = dx dy$ , ал үш өлшемли ( $N = 3$ ) қозғалыс ушын  $dV = dx dy dz$ . Кеңисликтік симметрияға ийе мәселелерди шешкенде цилиндрлик  $(r, \phi, z)$ , сфералық  $(r, \theta, \phi)$  координаталар системаларын пайдаланыў мүмкін. Бундай жағдайларда толқын функциясын усы координаталар менен үақыттың функциясы сыпатында анықлады.

(2.3.2)-формуладан  $\Psi(x, y, z, t)$  толқын функциясы жәрдеминде тәрийипленетуғын бөлекшениң берилген квантлық ҳалда бөлекшени шекли  $V$  көлеминин қәлеген областында табыўдың итималлығы  $P$  ны есаплауға болатуғынлығы келип шығады. Ҳақыйқатында да

$$P = \int dP = \int_V w dV$$

болғанлықтан (2.3.1) менен (2.3.2) дән

$$\begin{aligned} P &= \int_V \Psi \cdot \Psi^* dV \\ P &= \int_V |\Psi|^2 dV \text{ ямаса } P = \int_V \Psi \cdot \Psi^* dV \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

теңликлериниң орынланатуғынлығы келип шығады. (2.3.1) – (2.3.3) формулалар квантлық механикадағы толқын функциясының итималлық ямаса статистикалық мәнисинин бар екенligин анықлады.

**Толқын функцияларының қәсийеттери.** Егер (2.3.3) кеңислиги сыпатында барлық  $\mathbb{R}^N$  кеңислигін алсақ (бул кеңислик ушын  $V \rightarrow \infty$ ), онда барлық кеңисликте бөлекшени табыўдың итималлығы 1 ге тең болады. Демес толқын функциясының итималлықлық мәнисинен

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\Psi|^2 dV = 1 \text{ ямаса } \int_{\mathbb{R}^N} \Psi \cdot \Psi^* dV \quad (2.3.4)$$

екенлиги келип шығады. (2.3.4)-шәртті толқын функциясын нормировкалау шәрти деп атайды, усы шәртті қанаатландыратуғын толқын функциясын нормировкаланған толқын функциясы деп атайды.

Квантлық механиканың базы бир мәселелеринде (2.3.4) типиндеги нормировка шәрти орынланбауы мүмкін. Бундай мәселелерде бөлекше шексизликten қозғалып келеди ҳәм шексизликке алыслап кетеди. Соныңтан бундай мәселелерде толқын функциясының модулиниң квадраты шексизликте нолге умтылмайды ҳәм (2.3.4) шәртиндеги интеграл тарқалыўшы интегралға айланады. Бундай толқын функциясына мысал ретинде еркин қозғалыўшы денениң квантлық ҳалды тәрийиплейтуғын толқын функциясы де Бройльдың тегис толқыны болған толқын функциясын көрсетиўге болады. Нормировкаланбаған толқын функцияларын пайдаланғанда толқын функциясының модулиниң квадратының мәниси әхмийетли емес, ал кеңисликтиң еки ноқатындағы модуллериниң квадратының қатнасы әхмийетли. Бул қатнас кеңисликтиң усы еки ноқатлары қасында табыўдың итималлықтарының қатнасын береди. Нормировкаланбаған толқын функциясы қатнасатуғын мәселелерде нормировка шәртиниң базы бир аналогын итималлықтың ағысының тығызлығын пайдаланыў жолы менен алыш мүмкін. Бул физикалық шаманың анықламасы ҳәм оның толқын функциясы менен байланысы 3.3-параграфта келтирілген.

Толқын функциясының итималлық мәниси квантлық механиканың мәселелериндеги толқын функцияларына базы бир шеклерди ямаса шәртлерди белгилеп береди. Бул стандарт шәртлерди толқын функциясының регулярлық шәртлері деп атайды. Бун шәртлер өз ишине төмендегилерди алады:

1. Толқын функциясының шеклилік шәрти. Толқын функциясы (2.3.3)- ҳәм (2.3.4)-интеграллар тарқалыўшы интеграллар болып кететуғында шексиз үлкен мәнислерди қабыл ете алмайды. Солай етип бул шәрт толқын функциясының квадратлық интегралланатуғын функция болыўын талап етеди. Дара жағдайларда нормировкаланған толқын функциялары қатнасатуғын мәселелерде толқын функциясының модулиниң квадраты шексизликте нолгә умтылышы керек.

2. Толқын функциясының бир мәнислиги шәрти. Толқын функциясы координаталар менен ўақыттың бир мәнисли функциясы болыўы керек. Себеби бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы ҳәр бир ноқатта бир мәнисли анықланыўы лазы姆. Цилиндрлик ҳәм сфералық коорданаталар системаларын пайдаланатуғын мәселелерде бир мәнислик шәрти мүйешлик параметрлер бойынша толқын функцияларының дәйирлилигиниң пайда болыўына алыш келеди.

3. Толқын функциясының үзликсизлик принципи. Ўақыттың қәлеген моментинде толқын функциясы кеңисликлик координаталардың үзлиksiz функциясының болыўы шәрт. Соның менен бирге толқын функцияларының дара тууындылары болған

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y} \text{ ҳәм } \frac{\partial \psi}{\partial z}$$

функцияларында үзликсиз болыўы керек. Толқын функцияларының бул дара тууындылары тек сийрек ушырасатуғын идеалластырылған күш майданлары бар мәселелерде кеңисликтиң айырым ноқатларында үзилиске түседи. Бул ноқатларда бөлекше қозғалатуғын күш майданын тәрийиплеўши потенциал функция екинши әүлад үзилиске түседи.

**Квантлық ҳаллардың суперпозиция принципи.** Квантлық ҳалларың ең әхмийетли қәсийетлериниң бириң келтирип шығарамыз. Бул жағдай толқын функциясы ушын Шредингер теңлемесиниң сызықтылығынан келип шығады (бул ҳақында толығырақ келеси параграфта айттылады). Теңлемениң сызықтылығынан егер бөлекше  $\Psi_1$  толқын функциясы жәрдеминде тәрийипленетуғын квантлық

жалда ҳәм  $\Psi_2$  толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын басқа квантлық жалда да туратуғын болса, онда бөлекшениң

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 \quad (2.3.5)$$

толқын функциясы менен тәрийипленетуғын квантлық жалда да тұра алатуғынлығы келип шығады. Бул формулада  $C_1$  менен  $C_2$  арқалы улыўма жағдайда комплексли болатуғын шамалар белгиленген.

Демек қәлеген сандағы квантлық жаллардың суперпозициясы (қосындысы) ҳаққында да гәп етиүге болады, яғни

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 + \dots + C_N \Psi_N = \sum_{n=1}^M C_n \Psi_n \quad (2.3.6)$$

толқын функциясы менен тәрийипленетуғын квантлық жалдың да болатуғынлығы ҳаққында айттыға болады деген сөз. Бундай жалда  $C_n$  коэффициентиниң модулиниң квадраты  $\Psi$  толқын функциясы менен анықланатуғын система үстинде өлшеўлер өткөргендеге оның  $\Psi_n$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын жалда турғанлығының итималлығына тең. Соныңтан нормировкаланған толқын функциялары ушын

$$\sum_{n=1}^N |C_n|^2 = 1.$$

Жаллардың суперпозициясының квантлық механикалық суперпозиция принципи классикалық физикада аналога ийе емес. Ҳақыйқатында да классикалық теория бойынша еркин бөлекше ўақыттың берилген моментинде тек бир бағытта ямаса басқа бир бағытта қозғалыўы мүмкін.

Ал жалы толқын функциясы менен тәрийипленетуғын квантлық бөлекшениң қай тәрепке қарай қозғалатуғынлығы де Бройлдин еки тегис толқынының суперпозициясы болып табылады

$$\Psi(x, t) = \left( C_1 e^{\frac{i}{\hbar} px} + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar} px} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}.$$

Бундай бөлекше бир ўақытта  $x$  көшери бағыттында оң тәрепке қарай да, шеп тәрепке қарай да қозғалады. Классикалық механика бойынша бундай аўхалдың орын алғыу ҳеш бир ақылға сәйкес келмейди. Квантлық механика көз-қараслары бойынша бул жағдай мынаны аңғартады: Усындағы жалда туратуғын бөлекшениң қозғалыс бағытын анықлау бойынша тәжирийбелер сериясын өткөргендеге  $x$  көшери бағыттында оң тәрепке қарай қозғалатуғынлығы ҳаққында  $P_1 \sim |C_1|^2$  итималлығы менен, ал қарама-қарсы бағытта қозғалатуғынлығын ҳаққында  $P_2 \sim |C_2|^2$  итималлығы менен жуўап алынады.

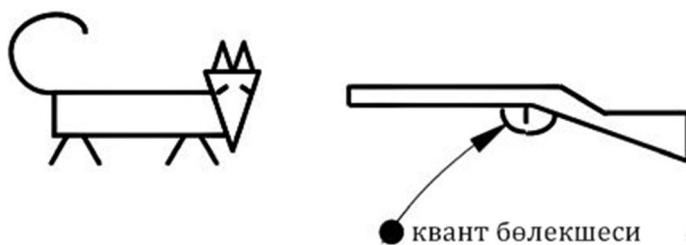
Тап сол сыйқылар  $x$  ҳәм  $y$  бағыттарында тарқалатуғын де Бройль толқынларының суперпозициясы болатуғын жалда

$$\Psi(x, y, t) = \left( C_1 e^{\frac{i}{\hbar} px} + C_2 e^{\frac{i}{\hbar} py} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

хәм "бөлекше қай бағытта қозғалып баратыр" деген сораўға бир мәнисли жуўап жоқ. Бөлекше  $x$  бағытында да, у бағытында да қозғалмақта деген сөз бөлекше  $x$  хәм у бағытлары ортасындағы биссектриса бағытында қозғалып баратыр деген мәнини бермейди. Бул жағдайда биз тек  $x$  бағытында бөлекше қандай да бир итималлық пенен, ал у көшериниң бағытында бөлекше екинши бир итималлық пенен қозғалады деп ғана айта аламыз. Усындаі нәтийже бөлекшениң қозғалыс бағытын анықлау ушын өткерилген өлшеўлер сериясында алынды.

Квантлық механиканың әпиүайы ғана сораўға сондай етип жуўап бериўи теориялық абсолюттлик нәтийже болып табылмайды. Усыған байланыслы квантлық компьютерлерин дөретиү мәселелери бойынша шуғылланып атырған ҳәзирги заман информациялық технологияларда тек еки ҳалға ("0" хәм "1") ийе логикалық элементлерди емес, ал нол менен бирдин базы бир итималлықтарға ийе суперпозициясы ҳалларында тұра алатуғын логикалық элементлерди дөретиү бойынша жумыслар исленбекте. Бундай элементтер компьютерлердин жумыс ислеў принциплерин пүткиллей өзгертеуди ҳәм информацияны қайта ислеў ямаса физикалық мәселелерди шешиүде есаплаўларды тезлететуғын ҳәм жумыслардың нәтийжелігін жоқарылататуғын алгоритмлерди дөретиүге имканияттар туýдырады.

Берилген физикалық шама анық мәниске ийе болатуғын ҳәм ҳаллардың суперпозициясынан алынатуғын ҳаллардың мүмкін болыўы квантлық механиканың өзине тән өзгешеликтериниң бири болып есапланады. Бундай өзгешеликтиң бар екенлигинен квантлық механика классикалық механикадан принципиаллық айырмашылыққа ийе болып шығады. Бир бөлекшениң усындаі "араласқан" ҳалын классикалық механиканың тилинде тәрийиплеў мүмкін емес. Соныңтан бир ўақытта классикалық ҳәм квантлық объекттер болып табылатуғын системаларды үрениүдиң кереги жоқ. Бундай системаларда шешиў мүмкін емес қарама-қарсылықтар пайда болады. Тап усындаі қарама-қарсылықтардың бириң Э.Шредингер тәрепинен усынылған парадокс айқын көрсете алады. Бул парадоксты "пышық парадоксы" деп атайды.



3.2-сүйрет.  
Шредингер пышығын демонстрациялайтуғын схема.

Мейли 3.2-сүйретте келтирілген жабық системада иши көринбейтуғын базы бир "куты" ның ишинде (ямаса қапшықтың) ишине пышық салынған болсын. Пышыққа қарай оқланған мылтық атыўға таяр тұрсын. Бизиң алдымызды классикалық объектлерден туратуғын система жайласқан. Енди мылтықтың қулағына қарай толқынлық қәсийетке ийе қозғалыўшы микробөлекшени жиберейик. Квантлық бөлекше мылтықтың қулағына келип тиисе мылтық атылады ҳәм пышық өледи.

Мейли бизиң бөлекшемиз  $\Psi_1$  толқын функциясы жәрдемінде тәрийипленетуғын бириңи квантлық ҳалда турған ҳәм бул ҳалда мылтықтың қулағының қасында бөлекшени табыўдың итималлығы нолге тең болсын. Демек микробөлекше бириңи ҳалда турған болса, онда қутыдағы пышық тири деген сөз.

$\Psi_2$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын бөлекшениң басқа да ҳалы болсын. Бул квантлық ҳалда мылтықтың қулағының қасында микробөлекшени

табыўдың итималлығы жоқары, дерлик бирге тең болсын. Бундай жағдайда пышықтың тири калмайтуғының таң қаларлық емес.

Халлардың суперпозициясы принципи бойынша микробөлекшіле биринши ҳәм екинши ҳаллардың суперпозициясынан туратуғын ҳәм

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_2 \quad (2.3.7)$$

толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалда да тұра алады. Бундай ҳалда бөлекшіле 1-ҳалда да, 2-ҳалда да бирдей итималлық пенен туратуғының өз-өзинен түснікли. Бирақ бул жерде (2.3.7)-толқын функциясы менен тәрийипленетуғын микробөлекшениң ҳалында пышық тири ме ямаса өли ме? деген қыйын сораудың пайда болыуы тәбийий нәрсе. Пышық болса ҳәм тири ҳәм өли ҳалда тұра алмайды. Солай етип пышық тири ме ямаса өли ме? Егер бир құтыны ашсақ пышықтың тири ямаса өли екенлигин козимиз бенен көремиз. Егер пышық өлген болса, онда ол қашан өлди деген сораў тууылады. Себеби құтыны ашпастан бурын пышық тири ме ямаса өли ме деген сораўға бир мәнисли жуўап жоқ еди. Сонда пышық құтыны ашқан ўақытта өлген болама? Бул сораўлардың ҳеш бирине де жуўап жоқ. Себеби мәселеде классикалық объект пенен кванттық объекти аралысқан корректли емес система талқыланған еди.

**3.1-мәселе.** Сфералық симметрияға ийе болған күш майданында орайдын г қашықтығында қозғалатуғын микробөлекшениң толқын функциясы

$$\Psi(r, t) = A \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{i}{t} Et\right)$$

түрине ийе болсын. Бул аңтападағы  $a$  арқалы мәниси белгилі болған турақлы, ал  $E$  арқалы бөлекшениң ўақыттан ғәрэзсиз болған толық энергиясы бегиленген

Анықлау керек: а) Турақлы көбейтиші А ның мәнисин;

б) бөлекшениң күш майданының орайынан ең итимал қашықтығын.

**Шешими:** а) А турақтысының мәнисин (2.3.4)-толқын функциясының нормировка шәртинен анықтаймыз. Буның ушын элементар көлем ушын радиуслары  $r$  ҳәм  $r + dr$  болған шар қатламының көлемин аламыз. Бундай қатамның көлеми  $dV = 4\pi r^2 dr$  шамасына тең. Нормировка шәрти

$$\int_0^\infty |\Psi(r, t)|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) r^2 dr = 1$$

аңлатпасына алып келеди. Интегралды есапладап

$$I = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) r^2 dr = \frac{a^3}{4}$$

нормировка шәртинен

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$$

екенлигине ийе боламыз.

б) Күшлик орайдан бөлекшениң ең итимал қашықлығын биз орайдын г қашықлығында, яғни бөлип алған шар қатламында бөлекшени табыудың итималлығын есаплау арқалы табамыз. Бул итималлық былайынша есапланады

$$dP = |\Psi|^2 4\pi r^2 dr = f(r) dr.$$

Бул жерде

$$f(r) = \frac{4r^2}{a^3} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right).$$

$\frac{df}{dr}$  туғындысын нолге теңеп  $r = a$  экстремаллық ноқатын табамыз. Бул ноқатта  $f(r)$  функциясы масимумына жетеди. Орайдан тап сол  $r = a$  қашықлығында бөлекшени табыудың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады. Бул қашықлықтың мәниси үақыттың өтийи менен өзгериске ушырамайды.

**3.2-мәселе.**  $t = 0$  үақыт моментинде  $x$  көшери бойлап қозғалыұшы бөлекшениң квантлық ҳалды тәрийиплейтуғын толқын функциясы

$$\Psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ibx\right)$$

түрине ийе болсын. Бул аңлатпада  $A$ ,  $a$  ҳәм  $b$  шамалары белгили болған ҳақыйқый константалар.

а) толқын функциясының ҳақыйқый бөліминин ҳәм б) толқын функциясының модулиниң квадратының  $x$  координатасынан ғәрэзлигин анықлаңыз.

Шешими: а) Толқын функциясының ҳақыйқый бөлімин табамыз:

$$Re\Psi = Re \left\{ A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) \exp(i \cdot b \cdot x) \right\} = A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) Re\{\exp(i \cdot b \cdot x)\}.$$

Комплексли санлар теориясындағы Эйлер формуласынан

$$Re\Psi = \frac{A}{2} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) \cos bx$$

екенлигине ийе боламыз.

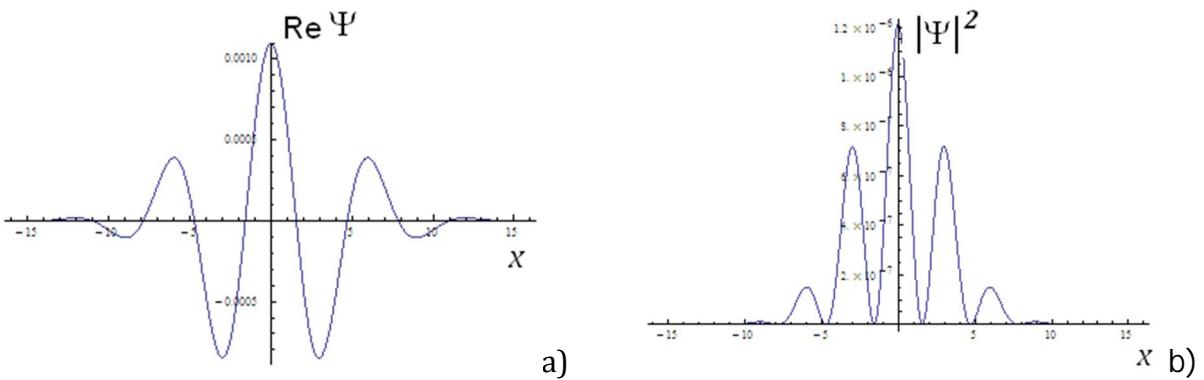
б) Толқын функциясының модулиниң квадратын анықлаймыз:

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} - i \cdot b \cdot x\right) A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + i \cdot b \cdot x\right).$$

Буннан

$$|\Psi|^2 = A^2 \exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right).$$

Табылған ғәрэзликтер сапалық түрде 3.3-сүретте келтирилген.



3.3-сүйрет. 3/2-мәселедеги толқын функциясының хақыйқый бөлегиниң (а) ҳәм модулиниң квадратының  $x$  координатасынан ғәрэзлиги (б).

### 2-3-2. Шредингер теңлемеси

Бөлекше қозғалатуғын құш майданының структурасын биле отырып бул бөлекшениң квант-механикалық халын тәрийиплеүши толқын функциясын қалай анықлауға болады? Ықыттың басланғыш моментиндеги толқын функциясын билип толқын функциясының үақытқа байланыслы эволюциясын қалай сыпталауға болады? Бул сораўларға жуўапты 1926-жылы Э.Шредингер тәрепинен келтирилип шығарылған релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарғы теңлемеси береди. Бундай теңлемени Шредингер теңлемеси деп атайды.

Биз ҳәзир скаляр потенциал майдандағы қозғалыўшы массасы  $m$  болған бөлекшени қараймыз. Оның потенциал функциясын  $U(x, y, z, t)$  арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда бөлекше  $F = -\text{grad}U$  құш майданында қозғалады ҳәм сәйкес толқын функциясы  $\Psi$  арқалы белгилеймиз. Шешими усы толқын функциясы болған Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U\Psi. \quad (2.3.8)$$

Бул теңлемеде  $i = \sqrt{-1}$  арқалы жормал бирлик белгиленген, ал  $\hbar$  арқалы рациональастырылған Планк турақтысы белгиленген.  $\Delta$  стандарт символы Лапластиң дифференциал операторын аңлатады. Бул оператор декарт координаталар системасында былайынша жазылады

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{dx^2} + \frac{\partial^2}{dy^2} + \frac{\partial^2}{dz^2}. \quad (2.3.9)$$

Улыўма жағдайда квантлық механиканың мәселелеринде дара туўындылы (2.3.8)-дифференциал теңлеме толқын функциясына қойылатуғын базы бир басланғыш ҳәм шегаралық шәртлерди есапқа алған ҳалда шешиледи.

Басланғыш шәрт  $t = 0$  үақыт моментиндеги толқын функциясының мәнисин береди.

Шегаралық шәртлер толқын функциясының регулярлығының нәтийжеси болып табылады. Бул жағдай толқын функциясының үзликсизлигин, бир мәнислигин ҳәм басқа да бир қатар қәсийетлерин тәмийинлейді. Бул шәртлер областлардың шегаралары ушын келтирилип шығарылады. Бул шегараларда потенциал функция  $U$  бириňши ҳәм екинши әүләд үзилислерге түседи. Усы шәртлерге толқын

функциясының кеңисликтиң шексиз алыстағы ноқатларындағы толқын функцияларына қойылатуғын шәртлер де киреди. Бул (2.3.4) нормировкасының орынланыўын тәмийинләйди.

Ньютоның классикалық механикасының нызамлары, термодинамиканың нызамлары, Максвеллдин электродинамика теңлемелері ҳәм басқа да тийкарғы физикалық теңлемелер сыйқы Шредингер теңлемеси де басқа қатнаслардан келтирилип шығарылмайды. Оны базы бир илимий қағыйда, нызам сыйпатында қабыл етиў керек. Оның дұрыслығы Шредингер теңлемеси жәрдеминде орынланған есаплаўлардың экспериментлер нәтийжелери менен сәйкес келиўинен дәлилленеди. Бундай сәйкестиң бар екенлиги келиўшилиқ атомлық ҳәм ядролық физиканың көпшилиқ құбылыслары ушын анық дәллилленди. Шредингер теңлемеси жәрдеминде болжап айттылған квантлық эффекттер оғада көп техникалық дүзилислердин, әсбаплардың, технологиялардың тийкарында жатыр.

Шредингер теңлемеси де Бройль гипотезасы ҳәм оннан келип шығатуғын материяның корпускулалық-толқынлық дуализми менен тығыз байланыслы. Ҳақыйқатында да тиккелей тексериўдин жәрдеминде кинетикалық энергиясы  $E = \frac{p^2}{2m}$  болған бөлекше күш майданлары жоқ орында  $x$  бағытында қозғалғанда сәйкес

$$i\hbar = \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (2.3.10)$$

түринде жазылатуғын Шредингер теңлемесиниң шешими

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right] \quad (2.3.11)$$

толқын функциясы болып табылады. Бундай толқын функциясы тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди. Бул факт Шредингер теңлемеси толқын теңлемеси болып табылады деп тастыйықлауға мүмкіншилиқ береди. Бул теңлемениң сыйықлы екенлиги квантлық ҳаллардың суперпозиция принципине муýапық келеди. Ал суперпозиция принципиниң физикалық мазмұны алдыңғы параграфта талқыланды.

Жоқарыда атап өтилгениндей квантлық механика өз ишине шектеги жағдайлар ушын классикалық механиканы да алады. Демек сәйкес шектеги өтиўлерди квантлық механиканың тийкарғы теңлемесинде де әмелге асырыўға болады деген сөз. Усындағы шеклик түрлендириўлердин нәтийжесинде Шредингер теңлемеси классикалық механиканың тийкарғы теңлемесине өтиў керек.

Квантлық механика менен классикалық механика арасындағы байланыс толқынлық ҳәм геометриялық оптика арасындағы байланысқа уқсас. Екеўинде де бир теориядан екинши теорияға өтиў салыстырмалы үлкен толқын узынлықтарынан салыстырмалы киши толқын узынлықтарына өтиўге сәйкес келеди. Бундай жағдайларда күш майданының ямаса орталықтың оптикалық қәсийетлериниң характерли областарының сыйықлы өлшемлери  $L$  менен салыстырыў керек болады. Бул жуўмақты тәмендеги кесте иллюстрациялайды.

Толқынлық оптика	Квантлық механика
$\lambda \geq L$	$\lambda_{db} \geq L$
Геометриялық оптика	Классикалық механика
$\lambda \ll L$	$\lambda_{db} \ll L$

Жоқарыда келтирилгендей салыстырыўларда классикалық бөлекшениң қозғалыс траекториясы геометриялық оптикадағы жақтылық нурының аналогы болып табылады.

Бөлекше ушын де Бройль толқынының толқын узынлығының киши екенлигин тәсир квантты  $\hbar$  ты мәселениң базы бир параметри деп есаплад, усы параметр бойынша  $\hbar \rightarrow 0$  өтийи менен тәмийинлеүге болады. Ҳақыйқатында да (2.2) де Бройль формуласында  $\hbar \rightarrow 0$  шегинде де Бройль толқынының узынлығы да нолге умтылады. Соныңтан квантлық механиканан классикалық механикаға өтий ушын шеклик өтий (2.3.8) Шредингер теңлемесинде  $\hbar \rightarrow 0$  шәрти орынланғанда әмелге асады. Бундай жағдайда Шредингер теңлемеси классикалық физиканың Гамильтон-Якоби теңлемесине айланады.

Шредингер теңлемесин шешиүдиң нәтийжесинде табылған толқын функцияларының жәрдеминде тек релятивистлик емес бөлекшелердин квантлық ҳалларды тәрийиплеў мүмкин. Релятивистлик емес бөлекшелер жақтылықтың вакуумдағы тезлигинен көп киши тезликлер менен қозғалады. Квантлық механиканда бөлекшелердин релятивистлик тезликлерине өтий 1928-жылы П.Дирак тәрепинен әмелге асырылды. Бундай өтий релятивистлик бөлекшелердин квантлық ҳалларды сыпатлаў ушын принципиаллық жақтан пүткиллей жаңа физикалық идеяларды талап етти. Нәтийжеде релятивистлик квантлық механика деп аталатуғын теория дөретилди. Бул теорияның тийкарында Дирак теңлемеси турады. Бул теңлеме Шредингер теңлемесин арнаўлы салыстырмалық теориясы тийкарында улыўмаластырады ҳәм ҳәзирги ўақытлары квантлық электродинамикада ҳәм элементар бөлекшелер физикасында (жоқары энергиялар физикасында) кеңнен қолланылады.

### 2-3-3. Итималлықтар ағысының тығызлығы векторы

Шредингер теңлемеси кеңислик пенен ўақыттың симметриясын есапқа алады. Соныңтан квантлық механиканың тийкары теңлемесинен массаның сақланыў нызамы, зарядтың сақланыў нызамы, басқа да сақланыў нызамын алыўға болады.

Бул жағдайды көрсетиў ушын  $S$  бети менен шегараланған  $V$  көлемин айырып аламыз.  $\Psi$  толқын функциясы менен берилген квантлық ҳалда бул көлемде бөлекшени табыудың итималлығы

$$P = \int_V |\Psi|^2 dV$$

түринде анықланады. Егер бул итималлық ўақыттың өтийи менен өзгеретуғын болса, онда  $S$  бети арқалы итималлықтың ағысы  $I$  дин бар екенлигин болжаўға болады. Бул ағыс  $P$  итималлығының өзгерисине алып келеди:

$$\frac{dP}{dt} = I. \quad (2.3.12)$$

Итималлық ағысы  $I$  ды барлық  $S$  бети бойынша тарқалған деп есаплад итималлық ағысының тығызлығы векторы болған  $\vec{J}$  векторын киргиземиз. Оның мәнисин былайынша анықтаймыз

$$I = - \oint_S \vec{j} \cdot d\vec{S}. \quad (2.3.13)$$

Бул аңлатпада  $d\vec{S} = dS \vec{n}$  ҳәм  $\vec{n}$  арқалы сыртқы нормалдың бирлик векторы белгиленген. (2.3.13) аңлатпсының оң тәрепиндеги минус белгиси сырттан итималлық ағысы киргенде  $V$  көлеминдеги Р итималлығының артатуғынлығын, ал итималлық ағысының бағыты  $V$  көлеминен сыртқа қарай болғанда Р итималлығының кемейетуғынлығын аңлатады.

(2.3.12)- ҳәм (2.3.13)-аңлатпалардан итималлықтың өзгериү тезлиги ушын

$$\frac{dP}{dt} = - \oint_S \vec{j} \cdot d\vec{S} \quad (2.3.14)$$

интеграллық қатнасын аламыз.

$$\oint_S \vec{j} \cdot d\vec{S} = \int_V \operatorname{div} \vec{j} dV$$

Остроградский теоремасы бойынша (2.3.14)-аңлатпа төмендегидей түрге түрлендириледи

$$\int_V \left( \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} \right) dV = 0. \quad (2.3.15)$$

Бул аңлатпадан  $V$  көлеминиң ықтыярлы болғанлығынан итималлық майданы ушын үзлиksизлик теңлемеси келип шығады. Үзлиksизлик теңлемеси былайынша жазылады:

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (2.3.16)$$

(2.3.16)-аңлатпадағы бириңи қосылыўшыны былайынша жазамыз

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (2.3.17)$$

Толқын функциясы  $\Psi$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U \Psi \quad (2.3.18)$$

Шредингер теңлемесиниң шешими болғанлықтан, онда толқын функциясының комплексли түйинлеси  $\Psi^*$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^* + U \Psi^* \quad (2.3.19)$$

теңлемесин қанаатландырады. (2.3.19)-аңлатпаны  $\Psi^*$  ге, ал (2.3.19)-аңлатпаны  $\Psi$  ге көбейткеннен кейин биринши аңлатпадан екиншисин алып таслаймыз. Бундай жағдайда

$$i\hbar \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi) \quad (2.3.20)$$

аңлатпасына ииे боламыз. (2.3.20) ны (2.3.17)-формуланың оң бөлимине қойып

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi) \quad (2.3.21)$$

аңлатпасын келтирип шығарамыз. Енди векторлық анализдин белгили болған формулаларын пайдаланыў арқалы төмендегидей еки теңликти жазамыз:

$$\operatorname{div}(\Psi \operatorname{grad} \Psi^*) = \operatorname{grad} \Psi^* \operatorname{grad} \Psi + \Psi \Delta \Psi^*$$

Хәм

$$\operatorname{div}(\Psi^* \operatorname{grad} \Psi) = \operatorname{grad} \Psi^* \operatorname{grad} \Psi + \Psi^* \Delta \Psi.$$

Буннан

$$\operatorname{div}(\Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi) = \Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi$$

қатнасын аламыз хәм бул қатнастың жәрдеминде (2.3.21) ди

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \left[ \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi) \right] = 0 \quad (2.3.22)$$

теңлемесине түрлендиримиз. (2.3.22) менен (2.3.16) ны бир бири менен салыстырып итималлықтың ағысы ушын төмендегидей аңлатпа аламыз

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi). \quad (2.3.23)$$

$\operatorname{grad} \Psi \equiv \nabla \Psi$  екенлигин есапқа алып (2.3.23) ти компактлырақ (жыйнақтырақ) формада жазамыз

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi). \quad (2.3.24)$$

Ағыстың тығыздығы нолге тең болмаған жағдайлардағы квантлық механиканың мәселелеринде бөлекшени тап соңдай бөлекшелердин ағысында қозғалады хәм олар (бөлекшелер) бир биринен ғәрэзсиз күш майданы менен

тәсирлеседи деп есаплаўға болады. Усындау интерпретацияны пайдаланғанда  $\vec{j}$  векторының ағысын усы векторға перпендикуляр бир бирлик беттен ўақыт берлигинде өтип атырған бөлекшелердин ағысы деп қараў мүмкіншилигине ийе боламыз..

Бундай жағдайда (2.3.14)- хәм (2.3.16)-аңлатпаларды интеграллық ҳәм дифференциаллық формаларда жазылған бөлекшелер санының сақланыў нызамы сыпатында қараўға болады.

Егер (2.3.16)-аңлатпаны бөлекшениң массасы  $m$  ге көбейтсек, онда  $\rho_m = m|\Psi|^2$  ҳәм  $\vec{j}_m = m\vec{j}$  шамалары кеңисликте қозғалатуғын заттың массасының тығызлығы ҳәм ағысы мазмұнына ийе болады. Ал (2.3.16)-теңлемениң өзи болса тутас денелер механикасындағы үзлиksизлик теңлемесине өтеди

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m = 0. \quad (2.3.25)$$

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда қозғалыўшы бөлекшелер өзи менен  $q$  зарядын да алып жүре алады (егер бөлекшелер зарядланған болса). Онда  $\rho_q = q|\Psi|^2$  ҳәм  $\vec{j}_q = q\vec{j}$  шамаларын зарядтың көлемлик тығызлығы ҳәм электр тоғының тығызлығы деп есаптай аламыз. Соңықтан (2.3.16)-аңлатпаның еки тәрепин де  $q$  шамасына көбейтип электродинамикағы белгили болған дифференциал формадағы электр зарядының сақланыў нызамын аламыз

$$\frac{\partial \rho_q}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_q = 0. \quad (2.3.26)$$

### 3.3-мәселе. Квантлық ҳал

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]$$

тегис де Бройль толқыны менен тәрийипленетуғын еркин қозғалыўшы бөлекше ҳаққындағы мәселедеги итималлықтың ағысының тығызлығын есаплаңыз.

Шешими: Комплекс түйинлес толқын функциясы

$$\Psi^*(x, t) = A \exp \left[ +\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]$$

болған толқын функциясын жазып градиентлердин нолге тең емес қураўшыларын табамыз

$$(grad\Psi)_x = \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \Psi,$$

$$(grad\Psi^*)_x = \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \Psi^*.$$

Енди (2.3.23)-формула бойынша итималлықтың ағысы тығызлығының  $x$  қураўшысын табамыз

$$j_x = \frac{p}{m} \Psi \Psi^* = \frac{p}{m} A^2 = \frac{k\hbar}{m} A^2.$$

Бул аңлатпада  $k = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda_{db}}$  арқалы толқынлық сан белгиленген.

Солай етип қозғалыұшы еркин бөлекше ушын итималлықтың ағысының тығызлығы де Бройль толқынның амплитудасына пропорционал екен. Буннан еркин бөлекшениң толқын функциясын  $j_x = 1$  теңлигиниң жәрдеминде нормировкалауға болатуғынлығы келип шығады. Бундай жағдайда де Бройль толқынның толқын узынлығы

$$A = \sqrt{\frac{m}{p}} = \sqrt{\frac{1}{\nu}}$$

шамасына тең болады. Бул аңлатпада  $\rho$  арқалы бөлекшениң импульси, ал  $\nu$  арқалы тезлиги белгиленген.

## 2-3-4. Физикалық шамаларды операторлардың жәрдеминде беріү

Толқын функциясын билий арқалы биз қарап атырған квантлық ҳалда турған бөлекшеге сәйкес келиүши қандай да бир физикалық шаманы өлшегенде алынатуғын нәтийжени қалай болжауға болады деген сораў келип туýады. Қозғалыұшы бөлекшелер менен байланыслы болған физикалық шамалар ҳаққында информациялар алыў ушын квантлық механиканда арнаўлы математикалық аппарат ислеп шығылған. Бул математикалық аппарат физикалық шамалардың операторлары ҳәм олардың толқын функцияларына тәсиринде нәтийжелери ҳаққындағы илимниң нәтийжелерин пайдаланады.

М.Борнның, П.Дирактың ҳәм басқа да физиклердиң жумысларында квантлық механиканың екинши постулаты дөретилди. Бул постулат бойынша ҳәр бир физикалық шамаға усы физикалық шаманың белгили бир операторы сәйкес келеди. Усындај жағдайда квантлық механикандағы операторлар арасындағы қатнаслар классикалық механикадағы сәйкес физикалық шамалар арасындағы қатнаслардай болады.

Бул постулаттың мәнисин ашып көрсетиў ушын бар қатар түсніктер беремиз. Оператор дегенимиз математикалық қағыйда болып табылады ҳәм бул қағыйда бойынша бир функцияны екинши функцияға түрлендиримиз. Операторды беріў дегенимиз сондай түрлендириўдиң рецептін беріў дегенди аңлатады. Бундай түрлендириўлер қатарына дәслепки функцияны санға ямаса басқа функцияға көбейтиўди, функцияны дифференциаллаўды, функцияның аргументлериниң орынларын алмастырып қойыўды ҳәм басқа да түрлендириўлер киреди.

Квантлық механиканда сәйкес оператордың белгиси ретинде ҳәриптиң үстине " ${}^{\wedge}$ " белгисин қояды. Мысалы  $\hat{x}$  арқалы  $x$  координатасының операторы,  $\hat{p}_x$  арқалы  $x$  көшериндеги импульс операторының проекциясы,  $\hat{U}$  арқалы потенциал энергия операторы белгиленген. Оператор усы оператордан кейин жазылған функцияға тәсир етеди деп есапланады. Бундай функциялар сыпатында квантлық механиканда толқын функциялары түсніледи. Бундай жағдайда  $\hat{a}\Psi = \hat{b}\Psi$  теңлиги ушын операторлардың  $\hat{a} = \hat{b}$  теңлиги де орынланады.

Квантлық механикандағы тийкарғы физикалық шамалардың операторларын анықтаймыз.

**1. Координата операторы.** Бул оператордың толқын функциясына тәсирі толқын функциясын сәйкес координатага көбейтийди нәзерде тутады, яғни

$$\hat{x}\Psi = x\Psi, \quad \hat{y}\Psi = y\Psi, \quad \hat{z}\Psi = z\Psi. \quad (2.3.27)$$

Жазыўдың символлық операторлық формасында бул операцияларды жазыўдың формасы

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z \quad (2.3.28)$$

түрине ииे болады. Бул формулаларды бирlestirip классикалық механикадағы  $\mathbf{r}$  векторына сәйкес келетуғын  $\hat{\mathbf{r}}$  операторын келтирип шығарыў мүмкин. Бундай операторды әдетте қураўшылары  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  болған базы бир вектор сыпатында қарайды. Сонықтан

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{i}\hat{x} + \mathbf{j}\hat{y} + \mathbf{k}\hat{z} \quad (2.3.29)$$

формуласының жәрдеминде жазыўымыз мүмкин.

**2. Импульс операторы.** Координаталар бойынша дифференциаллаў операцияларының жәрдеминде импульстин проекцияларының операторларын анықтаймыз. Бул анықлауды символлық операторлық формада

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.3.30)$$

түринде жазамыз. (2.3.30)-формулалардың үшегін де импульстин векторлық операторы болған  $\hat{\mathbf{p}} = i\hat{p}_x + j\hat{p}_y + k\hat{p}_z$  векторы түринде жазамыз. Оны былайынша жаза аламыз

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (2.3.31)$$

Бул формулада

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

Классикалық механикадағы

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z$$

аңлатпаны пайдаланып импульс квадраты операторы болған операторды

$$\hat{p}^2 = (\hat{p}_x)^2 + (\hat{p}_y)^2 + (\hat{p}_z)^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (2.3.32)$$

түринде анықтаймыз. Лаплас символын пайдаланып (2.3.32)-операторды компактлырақ түрде көширип жазамыз

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta. \quad (2.3.33)$$

**3. Импульс моменти операторы.** Бөлекшениң импульс моментин  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  түрінде анықтайтуғын классикалық механиканың формуласы бойынша оның координата көшерлерине түсирилген проекцияларының былайынша жазамыз:

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_z.$$

Бул аңлатпаларды импульс моментиниң проекциялары операторларын анықтайтуғын операторлық аңлатпаларға айландырамыз

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (2.3.34)$$

Импульс моментиниң квадраты операторы

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x \hat{L}_x + \hat{L}_y \hat{L}_y + \hat{L}_z \hat{L}_z \quad (2.3.35)$$

қағыйдасы бойынша дүзе аламыз.

Квантлық механиканың сфералық симметрияға ииे болған мәселелерин  $r, \theta$  ҳәм  $\varphi$  сфералық координаталар системасында шешкен қолайлар. Декарт координаталарынан сфералық координаталар системасына өткенде өзгериүшилерди алмастырыудың әпиүйайы болған алмастырыў формулаларынан пайдаланады:  $x = r \sin\theta \cos\varphi, y = r \sin\theta \sin\varphi, z = r \cos\theta$ . Бундай жағдайда (2.3.34)-хәм (2.3.35)-формулаларды

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left( \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left( \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi}. \end{aligned} \quad (2.3.36)$$

туриндеги формулаларға түрлендириў мүмкін. Бул жерде

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

арқалы сфералық координаталар системасындағы Лаплас операторының мүйешлилік белгиленген.

**4. Энергиялар операторы.** Бөлекшениң кинетикалық энергиясы менен оның импульсиниң квадратын байланыстыратуғын классикалық формула былайынша жазылады

$$E_K = \frac{p^2}{2m}.$$

Бул формула сәйкес операторлар арасындағы қатнасты жазыўға мүмкіншилик береди. Соныңқтан

$$\hat{E}_K = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \quad (2.3.37)$$

Егер бөлекшеше стационар күш майданында қозғалатуғын болса, онда оның потенциал энергиясы  $U = U(x, y, z)$  кеңисликтің қәлелеген ноқатында анықланған. Соныңқтан  $\hat{U}$  арқалы белгиленетуғын потенциал энергияның операторы  $U$  функциясына көбейтиў операторы сыпатында анықланады, яғни

$$\hat{U} \cdot \Psi = U \cdot \Psi \text{ ямаса } \hat{U} = U. \quad (2.3.38)$$

Классикалық механикада бөлекшениң толық энергиясы оның кинетикалық ҳәм потенциал энергияларының қосындысына тең болғанлықтан квантлық механиканда толық энергия операторы  $\hat{H}$  потенциал ҳәм кинетикалық энергиялар операторларының суммасы түринде анықланады. Соныңқтан

$$\hat{H} = \hat{E}_K + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U.$$

(2.3.33)-формула бойынша импульстиң квадраты ушын аңлатпаны ашып толық энергия операторын

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z) \quad (2.3.39)$$

түринде жаза аламыз.

Классикалық механикада координаталар менен импульс арқалы аңлатылған бөлекшениң толық энергиясын Гамильтон функциясы деп атайды. Соныңқтан квантлық механиканда толық энергия операторы болған  $\hat{H}$  операторын Гамильтон функциясының операторы ямаса гамильтониан деп атайды.

$\hat{H}$  гамильтониан квантлық механиканың тийкарғы операторы деп аталауды. Себеби бөлекшеге тәсир ететуғын күш майданының айқын түрин сайлап алыў арқалы биз математика тилинде квантлық системаның өзине тән барлық өзгешеликтерин жаза аламыз. Соныңқтан релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарғы теңлемеси болған Шредингер теңлемесин де

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (2.3.40)$$

операторлық түрде жазыў мүмкін.

Квантлық механикандағы операторлық усылдың физикалық мазмұны квант-механикалық оператордың мүмкін болған түрлерине базы бир шеклерди қояды. Мейли  $f$  физикалық шамасының операторы  $\hat{F}$  болсын. Бундай жағдайда қәлелеген  $\Psi_1$  ҳәм  $\Psi_2$  функциялары менен ықтаярлы турақтылар  $C_1$  менен  $C_2$  ушын

$$\hat{F}(C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2) = C_1\hat{F}\Psi_1 + C_2\hat{F}\Psi_2 \quad (2.3.41)$$

теңлигиниң орынланыўы керек. Усындағы қәсийетке ийе операторларды сыйықлы операторлар деп атайдыз. Физикалық шамалардың операторларының сыйықлылық қәсийети квантлық ҳаллардың суперпозиция принципи менен тығыз байланысқан. Теорияда сыйықлы операторларды пайдаланғанда ғана суперпозиция принципи бузылмайды.

Физикалық шаманың операторы хызметин тек сыйықлы өзи өзине түйинлес оператор атқара алады. Бундай операторды Эрмит операторы деп атайдыз. Тек усындағы операторға ғана ҳақыйқы (комплексли емес) физикалық шама сәйкес келеди. Өзи өзине түйинлес оператор деп өзиниң түйинлес операторы менен сәйкес келетуғын операторға айтамыз. Бундай жағдайда ықттыярлы  $\Psi_1$  ҳәм  $\Psi_2$  функциялары ушын төмендегидей интеграллық теңлик орынланады

$$\int_{\mathfrak{R}} \Psi_1^*(\hat{\Phi} \Psi_2) dV = \int_{\mathfrak{R}} \Psi_2^*(\hat{\Phi} \Psi_1) dV. \quad (2.3.42)$$

Солай етип квантлық механиканда ҳәр бир физикалық шамаға белгили бир сыйықлы өзи өзине түйинлес оператор жазылады екен. Тиккелей тексерип көриў жолы менен жоқарыда келтирілген операторлардың барлығының да сондай қәсийетлерге ийе екенлигине көз жеткериўге болады.

Квантлық механиканда қолланылатуғын тиикарғы операторларды төмендегидей кесте түринде беремиз.

Физикалық шама	Оператор	
Координата $r$ $x, y, z$	$r$ $x, y, z$	
Имульс $p$ $p_x, p_y, p_z$	$-i\hbar\nabla$ $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$	
Импульстиң орбиталық моменти (мүйешлик момент, импульс моменти операторы)	$L = [r \times p]$ $L_x = yp_z - zp_y,$ $L_y = zp_x - xp_z,$ $L_z = xp_y - yp_z$	$\hat{L} = -i\hbar[r \times \nabla]$ $\hat{L}_x = -i\hbar\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}\right),$ $\hat{L}_y = -i\hbar\left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}\right),$ $\hat{L}_z = -i\hbar\left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)$
Толық энергия $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(r)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z)$	

**3.4-мәселе.**  $\hat{p}_x$  импульс проекциясы операторының өзи өзине түйинлес оператор екенлигиниң шәрттін тексерип көриңиз.

**Шешими:** Нормировкаланған ҳәм стандарт шәртлерди (мысал шексизликтеги шәртлерди) қанаатландыратуғын  $\Psi_1(x, t)$  ҳәм  $\Psi_2(x, t)$  толқын функцияларын қараймыз. Стандарт шәртлерге сәйкес  $\Psi_{1,2}(\infty, t) = \Psi_{1,2}(x, t)$ . Бөлеклерге бөлип интеграллаудың жәрдеминде

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(\hat{p}_x \Psi_2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*\left(-i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial x}\right) dx = \frac{\hbar}{i} \Psi_1^* \Psi_2|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi_1^*}{\partial x}\right) dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 (\hat{p}_x \Psi_1)^* dx$$

екенлигине ийе боламыз. Солай етип биз

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* (\hat{p}_x \Psi_2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 (\hat{p}_x \Psi_1)^* dx$$

екенлигин дәлилледик. (2.3.42)-аңлатпаға сәйкес бир өлшемли жағдай ушын ( $N = 1$ ) бул жағдай  $\hat{p}_x$  операторының өзи өзине түйинлеслигин дәлиллейди. Тап усындай жоллар менен  $N = 2$  ҳәм  $N = 3$  болған жағдай ушын да оператордың өзи өзине түйинлес еkenлигин дәлиллеүге болады.

## 2-3-5. Операторлардың меншикли функциялары ҳәм меншикли мәнислері

**Меншикли функциялардың тийкарғы қәсийеттери.** Квантлық механиканда берилген  $f$  физикалық шамасы қабыл ететуғын мәнислерди оның меншикли мәнислері деп атайды. Бундай мәнислерди табыў  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли функциялары менен сәйкес меншикли мәнислерин табыў бойынша математикалық мәселе менен тығыз байланысқан.

Егер оператор менен базы бир функцияға тәсир еткенде тек санға көбейтилген сол функция келип шығатуғын болса, яғни

$$\hat{\Phi}\Psi = f\Psi \quad (2.3.43)$$

теңлиги орынланса бундай функцияны  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли функциясы, ал  $f$  санын оператордың меншикли мәниси деп атайды.

Квантлық механикандағы операторлар бир емес, ал көп санлы меншикли функцияларға ҳәм сол функцияларға сәйкес меншикли мәнислерге ийе бола алады. Меншикли мәнислердин жыйнағын оператордың спектри деп атайды.  $\hat{\Phi}$  операторының спектрин дискрет деп атайды, егер спектр  $n = 1, 2, 3, \dots$  ушын  $f_n$  мәнислериниң көплигинен туратуғын болса. Бул мәнислер  $\Psi_n$  меншикли функциялардың жыйнағына сәйкес келеди, ал  $\Psi_n$  меншикли функциялары болса

$$\hat{\Phi}\Psi_n = f_n \Psi_n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.3.44)$$

түриндеги теңлемелердин шешимлери болып табылады. Оператордың меншикли мәнислериниң спектри үзлиksiz де болыуы мүмкін. Бундай жағдайда (2.3.13)-аңлатпада  $f$  тиң мүмкін болған барлық мәнислері қатнасады.  $f$  тиң мүмкін болған мәнислері бир қатар интервалларда жататуғын жағдай ушын спектр айырым жолақлардан да турыуы мүмкін.

Бир қатар жағдайларда  $\hat{\Phi}$  операторының бир меншикли мәнисине бир емес, ал бир неше  $\Psi_{n1}, \Psi_{n2}, \Psi_{n3}, \dots, \Psi_{nk}$  меншикли мәнислериниң сәйкес келийи мүмкін. Бундай жағдайларды айнаған жағдайлар (вырежденные случаи), ал к санын айнау саны деп атайды.

(2.3.43)-аңлатпадан меншикли функциялардың базы бир турақлы шама дәллигинде анықланатуғынлығы көринип тур. Бул турақтының мәнисин әдетте меншикли функциялардың нормировка шәртинен анықлады.

Квантлық механикандағы физикалық шамаларға сәйкес келетуғын операторлардың меншикли мәнислериниң барлық үақытта да ҳақыйқый сан болып табылатуғынлығын ҳәм бул жағдайдың операторлардың өзи өзине түйинлеслигинен келип шығатуғынлығын дәлиллеймиз. Мейли  $\hat{\Phi}$  операторы өзи өзине түйинлес оператор, ал оның  $f$  меншикли мәнисине сәйкес келетуғын  $\Psi$  функциясы оның меншикли функциясы болсын. Анықламасы бойынша  $\Psi$  функциясы

$$\hat{\Phi}\Psi = f\Psi \quad (2.3.45)$$

теңлемесиниң шешими болып табылады. Бул жерде комплексли түйинлес операциясын орынлап

$$(\hat{\Phi}\Psi)^* = f^*\Psi^* \quad (2.3.46)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Егер (2.3.42)-аңлатпада  $\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi$  теңлигин қойсақ, онда

$$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* (\hat{\Phi}\Psi)^* dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi (\hat{\Phi}\Psi)^* dV \quad (2.3.47)$$

интеграллық қатнасын аламыз. Бул қатнас (2.3.45) пенен (2.3.46) ны есапқа алғанда

$$f \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* \Psi dV = f^* \int_{\mathbb{R}^N} \Psi \Psi^* dV \quad (2.3.48)$$

түрине енеди. Буннан  $f = f^*$  екенлигине ийе боламыз. Демек өзине түйинлес операторлардың меншикли мәнислери барлық үақытта ҳақыйқый шама болып табылады.

Квантлық механикандағы операторлардың меншикли функцияларының әхмийетли болған ортогоналлық қәсийетин дәлиллеймиз. Егер өзи өзине түйинлес болған  $\hat{\Phi}$  операторының ҳәр қыйлы мәнистеги  $f_n$  ҳәм  $f_m$  меншикли мәнислерине сәйкес келиүши еки меншикли функциялары  $\Psi_n$  ҳәм  $\Psi_m$  болса, онда олар төмендеги

$$\hat{\Phi}\Psi_n = f_n \Psi_n \text{ ҳәм } \hat{\Phi}\Psi_m = f_m \Psi_m \quad (2.3.49)$$

теңлемелердиң шешими болады.

$\Psi_n$  ҳәм  $\Psi_m$  функциялары ушын жазылған  $\hat{\Phi}$  операторының өзи өзине түйинлес болыуының (2.3.42)-шәрти енди

$$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* (\hat{\Phi}\Psi_m) dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_m (\hat{\Phi}\Psi)^* dV \quad (2.3.50)$$

түрине енди. (2.3.49) ды есапқа алсақ бул аңлатпадан

$$f_m \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = f_n^* \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_m \Psi_n^* dV \quad (2.3.51)$$

теңлигин аламыз. Өзи өзине түйинлес болған оператор ушын  $f_m = f_n$  екенлигин есапқа алсақ, онда (2.3.51)-аңлатпа

$$(f_m - f_n) \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = 0 \quad (2.3.52)$$

турине енеди. Егер  $n \neq m$  болса, онда  $f_m \neq f_n$  ҳәм (2.3.52)-аңлатпадан ҳәр қыйлы меншикли мәнислерге сәйкес келиўши меншикли функциялардың ортогоналлық шәртин аламыз

$$\text{Егер } n \neq m \text{ болса } \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = 0. \quad (2.3.53)$$

Егер  $\Psi_n$  ҳәм  $\Psi_m$  функциялары бирге нормировкаланған болса, онда (2.3.53) ортогоналлық шәртин ортонормировкаланғанлық шәрти сыпатында жаза аламыз

$$\int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm}. \quad (2.3.54)$$

Бул аңлатпадағы  $\delta_{nm}$  шамасы Кронекер символы деп аталады. Егер  $n \neq m$  болса  $\delta_{nm} = 0$ , ал  $n = m$  болған жағдайларда  $\delta_{nm} = 1$ .

Сызықты өзи өзине түйинлес операторлардың математикалық теориясында квантлық механиканың операторларының меншикли функцияларының системасының функциялардың толық системасы болып табылатуғының дәлилләйди. Бул қәлелеген  $\Psi$  толқын функциясының өзиниң меншикли функциялары бойынша қатарға жайылатуғының көрсетеди. Бул қатарды былайынша жазамыз

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n. \quad (2.3.55)$$

Бул қатардың коэффициенттерин (улыұма жағдайларда бул коэффициентлер комплексли шама болып табылады) меншикли функциялардың ортогоналлығын пайдаланып табыуға болады. Ҳақыйқатында да, (2.3.55)-қатарды  $\Psi_m^*$  ге көбейтемиз ҳәм барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз. Бундай жағдайда суммалау менен интеграллаудың тәртибин өзгертип

$$\int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_m^* \Psi dV = \sum_n C_n \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_m^* \Psi_m dV = \sum_n C_n \delta_{nm} = C_m \quad (2.3.56)$$

аңлатпаларын келтирип шығарамыз. Буннан т белгилениүин н ге өзгертип (2.3.55)-қатардағы  $C_n$  коэффициенттерин есаплау формуласын аламыз:

$$C_n = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi dV. \quad (2.3.57)$$

Егер  $\widehat{\Phi}$  операторы  $F$  интервалы ишиндеги  $f$  меншикли мәнислериниң үзлиksiz спектрине ийе болса, онда қәлелеген толқын функциясын меншикли функцияларға жайыу интеграллауға өтеди. Соnлықтан

$$\Psi = \int_F C_f \Psi_f df \quad (2.3.58)$$

формуласына ийе боламыз ҳәм бундағы  $C_f$  коэффициентиниң үзлиksiz көплиги

$$C_f = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_f^* \Psi dV \quad (2.3.59)$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

**Квантлық механиканың операторларының меншикли мәнислериниң спектри.** Квантлық механикандағы операторлардың меншикли мәнислерин табыу проблемаларының физикалық мазмұны 3.6-параграфта қарап өтиледи. Бул математикалық мәселедей болып көринетуғын мәселениң квантлық механикандағы оғада үлкен әхмийетин айқын көрсетеди.

Операторлардың меншикли мәнислериниң спектрин табыу ҳаққындағы мәселелердин бир қатарын қарап өтемиз.

1. Координата операторы  $x$  тың меншикли мәнислериниң спектри үзлиksiz спектр болып табылады. Ҳақыйқатында да бул оператордың толқын функциясына тәсири оны координатаға көбейтиүге алып келеди. Соnлықтан  $\hat{x}$  операторының меншикли мәнисин табыу бойынша мәселениң -теңлемеси

$$\hat{x}\Psi = x\Psi \quad (2.3.60)$$

турине ийе болады. Бул  $\hat{x} = x$  операторлық теңликке сәйкес келеди. Бул теңлик координата  $x$  тың  $x \in (-\infty, +\infty)$  мәниси ушын орынланады. Тап усынданай жуўмақларды ү ҳәм  $\hat{x}$  операторлары ушын да аламыз.

2. Импульстин проекциясы болған  $\hat{p}_x$  операторының спектри де үзлиksiz спектр болып табылады. Ҳақыйқатында да бундай оператордың меншикли мәнислерин табыу мәселесин шешиү

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \Psi \quad (2.3.61)$$

бириңи тәртипли дифференциал теңлемесин шешиүге алып келинеди. Буннан  $p_x$  тың мүмкін болған мәнислерин табыу мүмкін.

$p_x$  тың барлық мәнислері ушын (2.3.61)-теңлемениң шешими

$$\Psi = C \exp \left( i \frac{p_x x}{\hbar} \right) \quad (2.3.62)$$

регулярлықтың стандарт шәртлерин қанаатландыратуғын  $\Psi$  функциясын анықлады. Соныңтан  $\hat{p}_x$  операторының меншикли мәнислери  $-\infty$  тен  $+\infty$  ке шекемгі үзлиksiz спектрди пайда етеди. Тап усындај жуўмақларды  $\hat{p}_y$  ҳәм  $\hat{p}_z$  операторлары ушын да аламыз.

3. Дискрет спектрге мысал ретинде  $\hat{L}_z$  импульс моментиниң проекциясы операторының меншикли мәнислериниң спектрин көрсетиү мүмкин. Бул спектрди анықлау ушын сфералық координаталар системасының поляр координатасын  $z$  көшери бағытында жайластырамыз. Бундай жағдайда (3.36)-аңлатпа тийкарында  $\hat{L}_z$  операторының меншикли мәнислерин табыу ушын

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = L_z \Psi \quad (2.3.63)$$

бириңи тәртипли дифференциал теңлемесин жазамыз. Бул теңлемениң улыўмалық шешими былайынша жазылады

$$\Psi = C \exp\left(i \frac{L_z \varphi}{\hbar}\right). \quad (2.3.64)$$

$\hat{L}_z$  операторының меншикли функциялары бир мәнисли функциялар болып табылады. Ал мүйешлик координата  $\varphi$  цикллық өзгериүши болғанлықтан, онда бир мәнислик шәрти оның дәүирлилик шәртине алып келинеди:  $\Psi(\varphi + 2\pi) = \Psi(\varphi)$ . (2.3.64)-функция ушын бул шәртті орынладап

$$\exp\left[i \frac{L_z(\varphi + 2\pi)}{\hbar}\right] = \exp\left(i \frac{L_z \varphi}{\hbar}\right)$$

теңлигин аламыз ямаса

$$\exp\left(i \frac{L_z 2\pi}{\hbar}\right) = 1.$$

Бул теңликтен

$$\frac{L_z 2\pi}{\hbar} = 2\pi m$$

екенлиги келип шығады. Бул аңлатпада  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Солай етип  $\hat{L}_z$  операторы ушын меншикли мәнислердин дискрет спектрин аламыз:

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.3.65)$$

Бул меншикли мәнислер  $\hat{L}_z$  операторының

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi) \quad (2.3.66)$$

меншикли функцияларының бар екенлигин көрсетеди. Бул аңлатпадағы константының мәниси  $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^* \psi dV = 1$$

нормировка шәртинен сыйлап алынған.

4. Импульс моментиниң квадраты операторының ( $\hat{L}^2$  операторының) меншикли функциялары менен меншикли мәнислерин табыў ушын

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

төлемесин (3.36)-формулалы есапқа алған ҳалда сфералық координаталар системасында жазыўымыз керек. Бундай жағдайды алынған төлеме

$$-\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] = L^2 \Psi \quad (2.3.67)$$

түрине ийе болады. Бул төлемени шешиў ушын ҳәзири заман программалаў тиллерин (мысалы Mathematica 8.0 тилин) ямаса арнаўлы функцияларды пайдаланыў менен әмелге асырылады. Мәселени аналитикалық шешиўдин жоллары теориялық ямаса математикалық физика курсларында келтириледи. Биз ҳәзир бул шешимниң қәсийетлериниң қысқа дизимин келтириў менен шекленемиз.

Ең дәслеп  $\hat{L}^2$  операторының меншикли мәнислериниң спектриниң дискрет спектр екенлигин атап өтемиз. Басқа сөз бенен айтқанда (2.3.67)-төлеме тек

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad (2.3.68)$$

мәнислери ушын шешимлерге ийе болады. Бул формулада  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

(2.3.68)-аңлатпада ҳәр бир меншикли мәниске ҳәр қыйлы болған  $2l+1$  дана меншикли функциялар сәйкес келеди. Ол функциялар мәниси  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  болған пүтін санларға төң параметрди бериў менен айырылып алынады. Яғни  $\hat{L}^2$  операторының ҳәр бир меншикли мәниси  $2l+1$  айныў санына төң деген сөз.

(2.3.67)-төлемени шешиўден алынған  $\hat{L}^2$  операторының меншикли функциялары

$$\Psi_{l,m} = Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (2.3.69)$$

түрине ийе болады.  $Y_{l,m}$  функциялары арнаўлы функциялар класына киреби ҳәм сфералық ямаса шарлық функциялар деп аталады. Егер сол сфералық функцияларды

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l,m}^* Y_{l,m} \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

шәрти менен нормировкаласақ, онда анық түрде биринши бир неше нормировкаланған функцияларды жазыўымызға болады

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(\pm i\varphi);$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta \exp(\pm i\varphi); \quad (2.3.70)$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{5}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm i2\varphi).$$

5. Толық энергия операторы  $\hat{H}$  операторының меншикли мәнислериниң спектрин табыў ҳаққындағы мәселе бөлекше қозғалатуғын потенциаллық күш майданының айқын түрін бериў менен әмелге асырылады. Бул мәселелердиң бир нешеи 4-бапта стационар квантлық ҳалларды таллаудың барысында шешиледи. Бул мәселелерде Шредингер теңлемесиниң шешими  $\hat{H}$  гамильтонианың меншикли функциялары менен меншикли мәнислерин табыўға алып келинеди.

## 2-3-6. Квантлық механикандағы өлшеўлер проблемасы

Квантлық системадағы бөлекшениң ҳалын тәрийиплейтуғын толқын функциясы белгили болсын. Бул системадағы  $f$  физикалық шамасын өлшеўдин нәтийжеси қандай болады? Бул физикалық шаманы анықлаў ушын орынланған эксперименттиң нәтийжелерин қалайынша есаплаў ҳәм болжаў керек?

Физикалық шамаларды өлшеўлердиң нәтийжелери ҳаққындағы бул сораўға квантлық механиканың үшинши постулаты жуўап береди. Бул постулат қәлеген квантлық системада  $f$  физикалық шаманы өлшеўлерде сәйкес оператор  $\hat{F}$  тың тек меншикли мәнислери ғана алынады деп тастыйықлады.

Квантлық механиканың бул әхмийетли нәтийжеси теория менен усы теорияны эксперименталлық тексерип көриўдиң мүмкиншиліктери ҳаққындағы байланысты орнатады. Теорияның математикалық аппараты физикалық шамалар ушын операторларды пайдаланып ҳәр қыйлы квантлық системалардағы физикалық шамаларды өлшеўлердиң нәтийжелерин болжаўға мүмкиншилік береди. Теорияның бул жуўмақтарын экспериментте тексерип көриў мүмкін.

Мысалы, жоқарыдағы параграфта табылған  $\hat{L}^2$  ҳәм  $\hat{L}_z$  операторларының меншикли мәнислериниң спектрин пайдаланып атомлардың орбиталық импульс моментин өлшегенде

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad l = 1, 2, 3, \dots$$

жыйинағының ишинен  $L = \sqrt{l^2}$  мәниси алынады деп тастыйықлаўға болады. Ал магнит майданының жәрдеминде белгиленген  $z$  бағытындағы импульс моментлериниң проекцияларының мәнислерин өлшегенде

$$L_z = m\hbar, \quad m = 1, 2, \dots$$

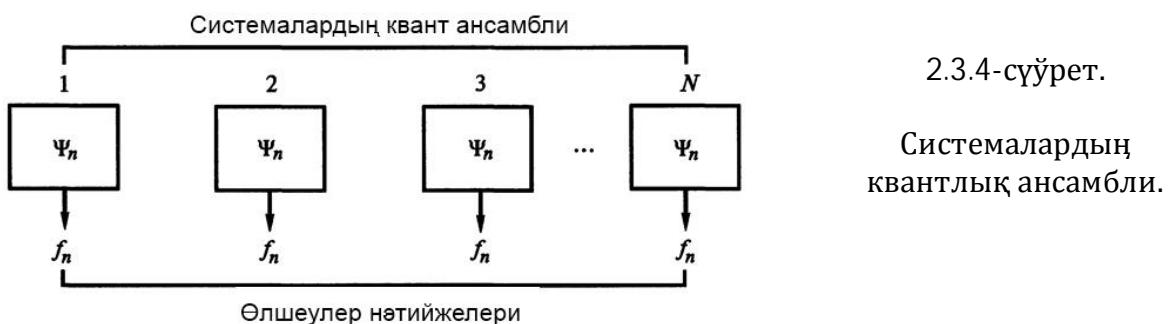
шамаларына тең мәнислер алынады.

Водород атомы ҳаққындағы квантлық механиканың мәселелерин дәл шешкенде (бул мәселе 5-бапта қарап өтиледи) тап усындај җуўмақтарға алып келинеди. Бундай жағдайдағы атомдағы  $l$  ҳәм  $m$  пүтин мәнислерине ийе параметрлер атомдағы электронның ҳалын характерлейтуғын квантлық санлар деп аталауды.

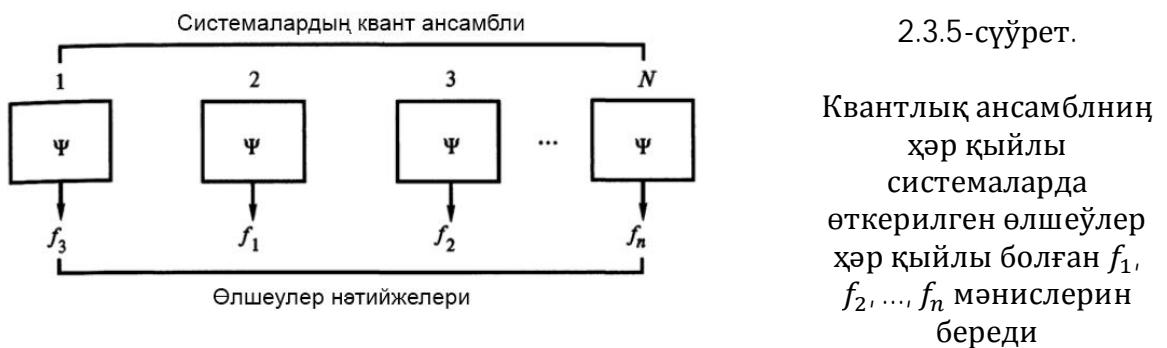
$\Psi$  толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын квантлық ҳалда сәйкес келетуғын  $f$  физикалық шамасы өлшенетуғын болсын. Ондай жағдайда  $\hat{F}$  операторының қайсы  $f_n$  мәниси өлшеўдин нәтийжесинде алынады деген сораў

бериледи. Бул сораўға берилетуғын жуўап барлық квантлық механиканың тийкарында итималлық интерпретациясының жататуғынлығын тастыйықлады

Егер квантлық системадағы бөлекшениң ҳалы  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли функциясы болған  $\Psi_n$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын болса, онда бул квантлық ҳалда  $f$  физикалық шамасы  $f_n$  шамасына тең белгили мәниске ийе болады. Бул жағдай мынаны аңлатады: Егер бирдей болған көп санды квантлық системалар берилген болса (2.3.4-сүйрет) ҳәм бул системаларда бир бириңен парқы жоқ белекшелер бирдей квантлық ҳалларда туратуғын болса (системалардың усындағы жыйнағын квантлық ансамбл деп атайды), онда бул ансамблдиң ҳәр қыйлы системаларында  $f$  физикалық шамасын өлшегендеге биз барлық ўақытта да  $f_n$  шамасын аламыз.



Бирақ толқын функциясы  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли функциясы емес жағдайдың да орын алыўы мүмкін. Бундай квантлық ҳалда  $f$  физикалық шамасы белгили бир физикалық мәниске ийе бола алмайды. Бул жағдай квантлық механиканың үшинши постулатына сәйкес квантлық ансамбли системасында  $f$  шамасының өлшеў тек  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли мәнислерин береди дегенди аңлатады. Бирақ квантлық ансамблиниң ҳәр қыйлы системаларда өткерилген өлшеўлер ҳәр қыйлы болған  $f_1, f_2, \dots, f_n$  мәнислерин береди (2.3.5-сүйрет). Бундай жағдайда  $f_n$  шамасының ҳәр бир мәниси белгили бир  $P_n$  итималлығы менен табылады.



$f$  шамасы анық мәниске ийе болмайтуғын системаларда оның орташа мәнисин табыў ақылға муýапық келеди. Бул шаманың орташа мәниси көп сандағы өлшеўлер өткергендеги өлшеўлер нәтийжелериниң математикалық күтилиўи (математическое ожидание) болып табылады

$$\langle f \rangle = \sum_n P_n f_n. \quad (2.3.71)$$

(2.3.71)-аңлатпадағы  $P_n$  итималлығын есаплау ушын  $\Psi$  толқын функциясын  $\widehat{\Phi}$  операторының меншикли мәнислери болған  $\Psi_n$  толық системасы бойынша қатарға жайыў керек болады, яғни ылайынша көрсетиледи

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n. \quad (2.3.72)$$

Усындағанда қатарға жайыўдың барлық үақытта да мүмкін екенлигин ҳәм бул қатардағы коэффициентлердин тәмендеги формулалар бойынша есапланатуғының еске саламыз:

$$C_n = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi dV. \quad (2.3.73)$$

(2.3.72)-қатар ықтыярлы квантлық ҳалдың  $f$  физикалық шамасының белгилі бир мәнисине ийе квантлық ҳаллардың туратуғының көрсетеди. Соныңтан биз излеп атырған итималлық  $P_n$  нин мәниси (2.3.72)-қатардағы коэффициентлерге сәйкес келиўши модульдиң квадраты  $|C_n|^2$  шамасына тең болады.

$$\langle f \rangle = \sum_n P_n f_n = \sum_n |C_n|^2 f_n. \quad (2.3.74)$$

(2.3.73)-аңлатпаны есапқа алған ҳалда (2.3.74)-аңлатпаны есаплаулар жүргизиў ушын қолайлыш болған түрге алып келемиз. Бундай жағдайды

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n C_n^* f_n = \sum_n C_n f_n \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi dV = \sum_n C_n \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* f_n \Psi_n dV.$$

$\widehat{\Phi}$  операторының меншикли функциялары менен меншикли мәнислеринин қәсийеттери бойынша

$$f_n \Psi_n = \widehat{\Phi} \Psi_n.$$

Соныңтан

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* (\widehat{\Phi} \Psi_n) dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* \left( \sum_n C_n \widehat{\Phi} \Psi_n \right) dV.$$

$\widehat{\Phi}$  операторының сыйықлы екенлигин есапқа алсақ

$$\sum_n C_n \widehat{\Phi} \Psi_n = \widehat{\Phi} \left( \sum_n C_n \Psi_n \right) = \widehat{\Phi} \Psi$$

теңлигине ийе боламыз. Соныңтан квантлық системаның  $\Psi$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалында  $f$  физикалық шамасының орташа мәнисин есаплау ушын

$$\langle f \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*(\hat{\Phi}\Psi) dV \quad (2.3.75)$$

түриндеги формуланы аламыз.

(2.3.75)-формуланың әхмийетин есапқа алып, оны квантлық механиканың төртинши постулаты деп те атайды.

Егер  $\Psi = \Psi_n$  теңлиги орынланатуғын болса, онда (2.3.75)-формуладан

$$\langle f \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^*(\hat{\Phi}\Psi) dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* f_n \Psi_n dV = f_n \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_n dV = f_n$$

аңлатпасының келип шығатуғынлығын атап өтемиз.

Солай етип квантлық механика квантлық объекттиң анаў ямаса мынаў қәсийетиниң потенциаллық мүмкіншиліклерине санлық түрде баҳа бере алады екен. Квантлық механиканда анаў ямаса мынаў өлшеў нәтийжесиниң итималлығы тек белгили бир объектке тиисли болса да, бул итималлықтың санлық мәнисин экспериментте анықлаў ушын бирдей бөлекшелерден туратуғын колективте (ансамблде) өлшеў жумысларын көп рет қайталаў керек болады.

Физикалық құбылысларды тап усындағандағы тәрийиплеў классикалық теориядағы тәрийиплеўден принципиаллық жақтан басқаша болады. Соныңтан квантлық механика қәлиплескен дәүйирлерде бул әдеттегидей емес революциялық идеяларды көп санлы белгили физиклердин өзлери де түсінбеди. Бундай физиклердин қатарына А.Эйнштейнді де киргизиў мүмкін.

**3.5-мәселе.**  $\hat{\Phi}$  операторы ўақыттан ғәрэзсиз деп есапладап  $f$  физикалық шамасының орташа мәнисиниң ўақыттың өтиўи менен өзгериүиниң тезлигин анықлаңыз.

**Шешими:**

$$\langle f \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^*(\hat{\Phi}\Psi) dV$$

болғанлықтан

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} (\hat{\Phi}\Psi) dV + \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* \left( \hat{\Phi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dV.$$

$\Psi$  функциясының эволюциясы Шредингер теңлемесинин жәрдеминде табылатуғынлығын есапқа алып

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad \text{жәм} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H}\Psi^*$$

екенлигин табамыз. Соныңтан

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{\mathbb{R}^N} (\hat{H}\Psi^*)(\hat{\Phi}\Psi) dV - \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*(\hat{\Phi} \hat{H} \Psi) dV \right].$$

$\widehat{\Phi}$  ҳәм  $\widehat{H}$  операторлары Эрмит операторлары болғанлықтан жоқарыдағы теңликтин өндөреп интегралды

$$\int_{\mathbb{R}^N} (\widehat{H}\Psi^*)(\widehat{\Phi}\Psi) dV = \int_{\mathbb{R}^N} (\widehat{\Phi}\Psi)(\widehat{H}\Psi)^* dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*(\widehat{H}\widehat{\Phi}\Psi) dV$$

түрге түрлендириў мүмкін. Демек

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* [(\widehat{H}\widehat{\Phi} - \widehat{\Phi}\widehat{H})\Psi] dV.$$

Бул аңлатпа физикалық шаманың орташа мәнисинен алынған ўақыт бойынша тууындыны базы бир оператордың орташа мәниси сыйпатында көрсетиүдің мүмкін екенлеги көрсетеди. Бул операторды  $\widehat{\Phi}$  операторынан ўақыт бойынша алынған тууынды деп атайды. Солай етип ўақыттан айқын түрде ғәрзесли емес  $\widehat{\Phi}$  операторын ушын

$$\frac{d\widehat{\Phi}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\widehat{H}\widehat{\Phi} - \widehat{\Phi}\widehat{H}) = \frac{i}{\hbar} [\widehat{H}, \widehat{\Phi}].$$

Буннан мынадай әхмийетли жуўмақ келип шығады: Егер базы бир  $f$  физикалық шаманың операторы  $\widehat{\Phi}$  ўақыттан айқын түрде ғәрзесиз ҳәм гамильтониан  $\widehat{H}$  пенен коммутацияланатуғын болса, онда бул физикалық шаманың орташа мәниси  $\langle f \rangle$  ўақытқа байланыслы өзгөрмейди. Классикалық механикадағы сыйқылдық квантлық механиканда да бундай шамаларды ҳәр қыйлы сақланыў нызамларына сәйкес келиуші қозғалыс интеграллары деп атайды.

## 2-3-7. Ҳәр қыйлы физикалық шамаларды бир ўақытта өлшеү

Базы бир квантлық системадағы ҳәр қыйлы болған еки физикалық шаманы бир ўақытта дәл өлшеү квантлық механикандағы әхмийетли мәселелердин бири болып табылады. Усындағы бақланатуғын шамалар сыйпатында бөлекшениң координатасы менен импульсиниң проекциясын, бөлекшениң потенциал энергиясы менен кинетикалық энергиясын, импульс моментиниң ҳәр қыйлы болған еки қураўшысын ҳәм басқаларды көрсетиў мүмкін. Усындағы еки шаманы бир ўақытта дәл өлшеү бойынша экспериментти шөлкемлестириў мүмкін бе?

Егер эксперименттиң барысында бирдей системалардан туратуғын ансамблде базы бир физикалық шаманы ҳәр бир өлшегенде бирдей нәтийже беретуғын болса, онда усы физикалық шаманың мәниси дәл өлшенди деп айтамыз. Бундай жағдайда өлшеўлер барысында әсбаплар да, экспериментатор да ҳеш кандай қәтеге жол қоймады деп есаплаймыз

Биз жоқарыдағы параграфта әхмийетли жуўмақ шығарып едик. Оның мәнисин белгілі болып түсіндіремиз: қандай да бир  $a$  физикалық шамасының мәниси тек сондай система да дәл өлшенеди, егер бул система сәйкес  $\widehat{A}$  операторының меншикли функцияларының биреүи болған толқын функциясы менен тәрийипленетуғын болса. Бирақ соны да есапқа алышу керек, усындағы квантлық халда басқа бир  $b$  физикалық шамасының дәл өлшениўи шәрт емес. Усы  $a$  ҳәм  $b$

физикалық шамаларының мәнислерин бир ўақытта дәл өлшеў мүмкін, егер оларға сәйкес келиўши  $\hat{A}$  ҳәм  $\hat{B}$  операторлары улыўмалық меншикли функциялар системасына ииे болатуғын болса.

Егер  $\hat{A}$  ҳәм  $\hat{B}$  операторлары улыўмалық меншикли функциялар системасына иие болатуғын болса олар арасында базы бир коммутациялық қатнаслардың орын алатуғынлығын ҳәм операторлардың толқын функциясына избе-из тәсир етийиниң нәтийжесиниң оларды пайдаланыўдың избе-излигинен ғәрзесиз екенлигин көрсетемиз. Мейли  $\Psi_n$  функциялары ( $n = 1, 2, \dots$ )  $\hat{A}$  операторының да,  $\hat{B}$  операторының да меншикли функциялары болсын. Бундай жағдайда төмендегидей қатнаслар орынланады:

$$\begin{aligned}\hat{A}(\hat{B}\Psi_n) &= \hat{A}(b_n\Psi_n) = b_n(\hat{A}\Psi_n) = b_n a_n \Psi_n, \\ \hat{B}(\hat{A}\Psi_n) &= \hat{B}(a_n\Psi_n) = a_n(\hat{B}\Psi_n) = a_n b_n \Psi_n.\end{aligned}$$

Бул аңлатпаларда  $a_n$  ҳәм  $b_n$  арқалы  $\hat{A}$  ҳәм  $\hat{B}$  операторларының улыўмалық болған  $\Psi_n$  меншикли функциясына сәйкес келиўши меншикли мәнислері белгиленген. Буннан

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi_n) = \hat{B}(\hat{A}\Psi_n)$$

екенлигине иие боламыз. Қәлеген  $\Psi$  толқын функциясын оның меншикли функцияларының сзықты комбинациясы  $\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$  түринде көрсетій мүмкін болғанлықтан квантлық механикандағы операторлардың сзықтылығынан қәлеген толқын функциясы ушын

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi) = \hat{B}(\hat{A}\Psi) \quad (2.3.76)$$

коммутациялық қатнасының орынланатуғынлығы келип шығады. Бул коммутациялық қатнасты операторлық формада былайынша жазамыз:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \text{ ямаса } \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \quad (2.3.77)$$

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  айырмасын  $\hat{A}$  ҳәм  $\hat{B}$  операторларының коммутаторы деп атайды ҳәм әдетте

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.3.78)$$

символы жәрдемінде белгилейді. Коммутаторы нолге тең еки операторды коммутацияланыўшы операторлар деп атайды.

Солай етип биз квантлық механиканың әхмийетли жуўмағына келемиз:

Егер  $\hat{A}$  ҳәм  $\hat{B}$  операторлары коммутацияланыўшы операторлар болып табылатуғын болса, онда оларға сәйкес келетуғын ҳәр қыйлы болған еки  $a$  ҳәм  $b$  физикалық шамалары бир ўақытта дәл өлшенеди [яғни олар ушын (2.3.77)-қатнасының орынланыўы керек].

Демек операторлардың коммутацияланыўшылығы оларға сәйкес келиўши физикалық шамаларды бир ўақытта дәл өлшеудің мүмкін екенлигинин белгиси болып табылады екен. Ал керисинше, еки оператордың коммутацияланбауы оларға сәйкес келетуғын еки физикалық шаманы бир ўақытта дәл өлшеудің мүмкін емес екенлигин аңғартады.

Усы қағыйда жәрдеминде бөлекшениң координатасы  $x$  пенен импульсинаң проекциясы болған  $p_x$  шамаларын бир үақытта дәл өлшеўге болатуғының ямаса болмайтуғының тексерип көремиз. Буның ушын  $\hat{x}$  ҳәм  $\hat{p}_x$  операторларының коммутаторын табамыз:

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

Бул

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0 \quad (2.3.79)$$

екенлигин көрсетеди. Соныңтан бөлекшениң координатасы  $x$  пенен импульсинаң проекциясы болған  $p_x$  шамаларын бир үақытта дәл өлшеўге болмайды. Бул жуўмақ Гейзенбергтиң анықсызлық принципи тийкарында исленген жуўмақ пенен тәр сәйкес келеди (2.3-параграф).

Кинетикалық энергия менен потенциал энергия операторларының коммутацияланбайтуғынына аңсат көз жеткериўге болады. Толық энергия операторы болған  $\hat{H}$  операторын

$$\hat{H} = \hat{E}_K + \hat{U}$$

кинетикалық  $\hat{E}_K$  ҳәм потенциал  $\hat{U}$  энергияларының қосындысынан туратуғын болса да квантлық системада системаның толық энергиясы кинетикалық ҳәм потенциал энергиялардың қосындысынан турады деп айтыўға болмайды. Бул жағдай қозғалыўши бөлекшениң кинетикалық энергиясы менен потенциал энергиясын бир үақытта дәл өлшеўге болмайды дегенді аңғартады. Соныңтан бир үақытта кинетикалық ҳәм потенциал энергияларын өлшеў жолы менен бөлекшениң толық энергиясын анықлау мүмкін емес.

Квантлық механиканда математикалық объектлерге ҳәм сол объектлер үстинен исленетуғын операцияларға физикалық объектлердин ҳәм олардың қозғалысларын басқаратуғын физикалық нызамлардың сәйкес келетуғының және бир рет атап өтемиз. Белгилі физик-теоретик А.В.Фок өзиниң "Квантлық механиканың басламалары" китабында квантлық механиканың математикалық тилин физика тилине айдарыўдың сөзлигин көлтирди. Мысал ретинде сол сөзликten төмендегидей үзинди келтиремиз:

Математика	Физика
$\Psi$ толқын функциясы	Квантлық бөлекшениң ҳалы.
$ \Psi ^2 = \Psi^* \Psi$ модулинин қвадраты	Бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы.
$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* \Psi dV = 1$ нормировка шәрти	Бөлекшениң хақыйқатында да бар екенлиги.
Сызықты эрмит операторы $\hat{\Phi}$	$f$ физикалық шамасы.
$f_n$ меншикли мәнисине сәйкес келетуғын $\hat{\Phi}$ операторының меншикли функциясы $\Psi_n$	$f$ физикалық шамасының мәниси $f_n$ ге тең болатуғын квантлық бөлекшениң ҳалы.
$\hat{\Phi}$ операторының меншикли функциялары болған $\Psi_n$ толқын функциялары бойынша қатарға	$f$ шамасын өлшегендеге $f_n$ мәнисиниң алыныў итималлығы.

жайғандағы коэффициенттиң модулиниң квадраты	
$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* \hat{\Phi} \Psi dV$ интегралы	Берилген квантлық ҳалдағы $f$ физикалық шамасының орташа мәниси (математикалық күтилийи).
$\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының коммутацияланыўы: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ .	$a$ ҳәм $b$ физикалық шамаларын бир ўақытта бақлаудың ҳәм дәл өлшеудин принципиаллық жақтан мүмкін екенлиги.

Бул сөзликти еле де даўам ете беріўге болады.

**3.6-мәселе.**  $\vec{F} = -gradU$  потенциал майданында қозғалатуғын массасы  $m$  болған бөлекше ушын тезлениў операторын анықлаңыз.

**Шешими:** Тезликтиң векторлық операторы болған  $\hat{\vec{v}}$  операторын импульс операторы арқалы аңлатыўға болады

$$\hat{\vec{v}} = \frac{\hat{\vec{p}}}{m} = -\frac{i\hbar}{m} \nabla.$$

Сонлықтан 3.5-мәселени шешкенде табылған қағыйда бойынша бул оператордан ўақыт бойынша тууынды алыш тезлениўдин векторлық операторын

$$\hat{\vec{a}} = \frac{d\hat{\vec{v}}}{dt} = \frac{1}{m} \frac{d\hat{\vec{p}}}{dt} = \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}\hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}}\hat{H}] = \frac{1}{m} [\hat{H}\nabla - \nabla\hat{H}]$$

түринде анықлаймыз. Гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}$$

түринде жазылатуғын болғанлықтан, ал  $\Delta = \nabla^2$  ҳәм  $\nabla$  операторлары коммутацияланыўши операторлар болғанлықтан

$$\hat{\vec{a}} = \frac{1}{m} [\hat{U}\nabla - \nabla\hat{U}]$$

теңлигине ийе боламыз. Алынған коммутатордың мәнисин түсіндіриў ушын олардың толқын функциясы  $\Psi$  ге тәсірин көремиз. Бундай жағдайда

$$\hat{U}(\nabla\Psi) - \nabla(\hat{U}\Psi) = U(\nabla\Psi) - \nabla(U\Psi) = -(\nabla U)\Psi$$

аңлатпаларын аламыз. Бирақ потенциал майданда  $\hat{\vec{F}} = \{\hat{F}_x, \hat{F}_y, \hat{F}_z\}$  күшинин векторлық операторы  $-\nabla U$  операторы болып табылады

$$\hat{\vec{F}}\Psi = -(\nabla U)\Psi.$$

Сонлықтан, ең ақырғы формуланы аламыз

$$\hat{\vec{a}} = \frac{\hat{\vec{F}}}{m} \text{ ямаса } m\hat{\vec{a}} = \hat{\vec{F}}$$

Бул операторлық теңлеме классикалық механикадағы Ньютонның теңлемеси түрине ийе ҳәм бул жағдай квантлық механикандағы операторлар арасындағы қатнастың классикалық механикадағы сәйкес физикалық шамалар арасындағы қатнастай болатуғының тастыйықлады.

**3.7-мәселе.** Импульс моментиниң операторлары  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  ҳәм  $\hat{L}_z$  арасында қандай коммутациялық қатнаслардың бар екенлигин анықлаңыз.

**Шешими:**  $\hat{L}_x$  ҳәм  $\hat{L}_y$  операторларының коммутаторын қараймыз

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x.$$

$\hat{L}_x$  ҳәм  $\hat{L}_y$  операторларының анық түрин есапқа алып декарт координаталар системасында усы операторлардың коммутаторының толқын функциясына тәсирин анықлаймыз:

$$\begin{aligned} & \hat{L}_x(\hat{L}_y \Psi) - \hat{L}_y(\hat{L}_x \Psi) = \\ & -\hbar^2 \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( z \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) - \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( y \frac{\partial \Psi}{\partial z} - z \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) \right\} = \\ & -\hbar^2 \left\{ y \frac{\partial \Psi}{\partial x} + yz \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial x} - yx \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial x} + zx \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial z} - zy \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial z} + \right. \\ & \left. + z^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} + xy \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - xz \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial y} \right\} = -\hbar^2 \left( y \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = i\hbar \hat{L}_z \Psi. \end{aligned}$$

Солай етип биз

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z \neq 0$$

теңлигиниң орынланатуғының дәлилледик.

Импульс моментиниң проекциялары операторларының басқа жуплары ушын да коммутациялық қатнасларды алыў мүмкін:

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar \hat{L}_x$$

хәм

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

Бул қатнаслардың барлығы да импульс моментиниң барлық үш проекцияларының бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алмайтуғының көрсетеди. Бул жағдай тек ғана үш проекциялардың барлығы да бир ўақытта нолге тең болғанда орынланбайды.

Импульс моментиниң квадраты операторы  $\hat{L}^2$  шамасының  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  ҳәм  $\hat{L}_z$  операторлары менен коммутацияланатуғының көрсетиүгө болады. Демек импульс моментиниң квадраты (яmasa импульс моментиниң модули) өзиниң бир проекциясы менен ғана бир ўақытта өлшенийи мүмкін.

Бул нәтийжелер квантлық механиканда импульс моментиниң вектор түриндеги сүйретиниң жеткиликли дәрежеде шәртли характеристерге ийе екенлигин көрсетеди. Сонықтан импульс мометлерин қосыўды (мысалы орбиталық ҳәм спинлик моментлерди қосыў) векторларды қосыў түринде әмелге асырыўға болмайды.

## 2-3-8. Квантлық механиканың матрицалық формасы

Физикалық шамаларды толқын функциясына тәсир ететуғын Эрмит операторлары түринде көрсетиў квантлық механиканың бирден бир математикалық аппараты емес. 1925-жылы В.Гейзенберг квантлық механиканда ҳәр бир физикалық шама ушын базы бир матрицаны алдырып усынды (Э.Шредингердин квантлық механиканың тийкарғы теңлемесин 1926-жылы дүзгенлигин еске салып өтеп). В.Гейзенберг усынған матрица шексиз көп қатарлардан ҳәм шексиз көп бағаналардан турады.

Квантлық механиканың усындағы "матрицалық формасы" В.Гейзенбергтиң, М.Борнның, П.Иорданның ҳәм басқа да физиклердин жұмысларында бир бириңен ғәрэзсіз түрде раўажландырылды. Дәслепки дәүйирлерде бул жұмысларда ҳәтте толқынлық теория есапқа да алынбады. Тек кейинирек Э.Шредингер физикалық шамаларды операторлар ҳәм матрикалар түринде аңлатыудың бир бириңе эквивалент екенлигин көрсетти. Соның менен бирге квантлық механиканың мәселелерин шешиүде қолланылатуғын бул еки усылдың математикалық аппаратлары пүткіллей ҳәр қылыш.

Биз енди физикалық шамалардың операторлары менен матрикалары арасындағы байланысты салыстырмалы әпиүайы жағдайлар ушын табамыз. Биз қарап атырған квантлық механика операторларының спектри дискрет деп есаптаймыз. Төменде талланатуғын барлық қатнаслар кейинирек П.Дирак тәрепинен үзликсиз спектрге ииे операторлар ушын да улыўмаластырылды.

Мейли квантлық механикандағы  $\hat{A}$  операторының  $\Psi_n$  меншикли функцияларының жыйнағы болсын ( $n = 1, 2, \dots$ ). Эрмит операторларының меншикли функцияларының қәсийетлеринен қәллеген  $\varphi$  регулярлық функциясын оператордың меншикли функциялары бойынша қатарға жайыў мүмкін:

$$\varphi = \sum_n c_n \Psi_n. \quad (2.3.85)$$

Бул қатардың коэффициентлери төмендеги формула былайынша анықланады

$$c_n = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \varphi dV. \quad (2.3.86)$$

Егер енди  $\varphi$  функциясы сыпатында  $f$  физикалық шамасының  $\hat{\Phi}$  операторының  $\Psi_m$  функциясына тәсириниң нәтийжеси болған  $\hat{\Phi}\Psi_m$  функциясы алынатуғын болса, онда (2.3.85)- ҳәм (2.3.86)-аңлатпалардан

$$\hat{\Phi}\Psi_m = \sum_n \Phi_{nm} \Psi_n \quad (2.3.87)$$

аңлатпасы келип шығады. Бул жерде

$$\Phi_{nm} = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* (\hat{\Phi}\Psi_m) dV. \quad (2.3.88)$$

$\Phi_{nm}$  шамаларын базы бир шексиз матрицаның элементлери сыйратында қараўымызға болады

$$\Phi = \begin{vmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} & \Phi_{13} & \dots & \Phi_{1m} & \dots \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} & \Phi_{23} & \dots & \Phi_{2m} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Phi_{n1} & \Phi_{n2} & \Phi_{n3} & \dots & \Phi_{nm} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

Бул матрицаны  $\hat{A}$  операторының меншикли функциялары системасындағы (ямаса  $A$  түріндеги көрсетиүдеги)  $\hat{\Phi}$  операторының (ямаса  $f$  физикалық шамасының) матрицасы деп атайды. Квантлық механиканда координаталық, импульслик, энергиялық ҳәм басқа да көринислер (түрлери) қолланылады.

Хәр бир  $\Phi_{nm}$  шамасын  $m$  ҳалынан  $n$  ҳалына өтийге сәйкес келетуғын матрицалық элемент деп атайды. Матрицалық элемент еки индекске ийе. Бириňшиси  $n$  матрицаның қатарларының қатар саны, ал екинишиси  $m$  матрицаның бағаналарының қатар саны.

$\Phi_{nm}$  матрицалық элементлер ушын П.Дирак тәрепинен усынылған белгилеўлер де қолланылады

$$\langle n | \hat{\Phi} | m \rangle \text{ ямаса } \langle n | f | m \rangle \quad (2.3.89)$$

Бундай символды физикалық шама  $f$  тиң белгисинен (ямаса оған сәйкес келиүши  $\hat{\Phi}$  операторының белгисинен) ҳәм  $|m\rangle$  және  $\langle n|$  символларынан конструкцияланған символ деп қараўға болады. Хәр бир  $\Psi_m$  меншикли функциясын (басланғыш ҳалды) шексиз көп өлшемли кеңисликтиң базы бир  $|m\rangle$  базислик векторы елеслетеди. Бул векторды кет-вектор деп атайды.  $\Psi_n$  меншикли функциясын (ақырғы ҳал)  $\langle n|$  векторы елеслетеди ҳәм оны бра-вектор деп атайды. Бундай атамалар инглиз тилиндеги bracket (қаўсырма) сөзин пайда етиўши ғас ҳәм кет сөзлеринен келип шыққан.

$\langle n | m \rangle$  белгилеўинин  $\langle n | \hat{l} | m \rangle$  белгилеўинин әпиўайыластырылған жазылышы деп қараўға болады. Бул аңлатпада  $\hat{l}$  арқалы бирлик вектор белгиленген. Оның ушын  $\hat{l}\Psi_n = \Psi_n$ . Соныңтан

$$\langle n | m \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & \text{егер } n = m \text{ болса} \\ 0, & \text{егер } n \neq m \text{ болса.} \end{cases}$$

Солай етип А-елеслетиүде  $f$  физикалық шамасының  $\hat{\Phi}$  операторы  $\Phi$  матрицасының жәрдеминде анықланады екен. Бул матрицаның элементлери  $\Phi_{nm}$  (2.3.88)-аңлатпаның жәрдеминде анықланады. Усының менен бирге ҳәр бир Эрмит операторы ушын Эрмит матрицасы сәйкес келеди. Бундай матрицаның элементлери ушын  $\Phi_{nm} = \Phi_{nm}^*$  теңлиги орынлы болады.

Гейзенберг матрицасы үстинен исленетуғын базы бир алгебралық операцияларды анықтаймыз:

1. Матрикаларды қосыў. Егер  $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$  болса, онда  $C = A + B$  матрицасының матрицалық элементлери ушын

$$C_{nm} = A_{nm} + B_{nm}$$

теңлиги орынланады.

2. Матрикаларды көбейтиү. Егер  $\hat{C} = \hat{A} \cdot \hat{B}$  болса, онда  $C = A \cdot B$  матрикаларың элементлерин матрикаларды көбейтиү қафыйдасы

$$C_{nm} = \sum_k A_{nk} B_{km}$$

тийкарында есапланады. Бундай жағдайда матрикаларды көбейтиү де, операторларды көбейтиү сыйкы коммутативлик емес, яғни  $A \cdot B \neq B \cdot A$ .

3. Матрикаларды қосыў ҳәм көбейтиү қафыйдалары анықланғаннан кейин матрикалардың ең әпиүайы функцияларын да анықлау мүмкін. Мысалы,  $\exp \Phi$  функциясы сыпатында матрикалардан туратуғын

$$\exp \Phi = 1 + \Phi + \frac{1}{2} \Phi^2 + \dots + \frac{1}{n!} \Phi^n + \dots$$

қатарын түснүү керек.

Квантлық механикандағы физикалық шамалардың Гейзенберг матрицасының бир әхмийетли қәсийетин атап өтемиз. Егер  $\hat{\Phi}$  матрицасының  $\Phi_{nm}$  матрикаларың элементлерин өзиниң меншикли  $\Phi$ -елеслетиүинде анықлайтуғын болсақ, онда  $\hat{\Phi}\Psi_m = f_m\Psi_m$  ҳәм (1.38)-аңлатпадан

$$\Phi_{nm} = \langle n | \hat{\Phi} | m \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \hat{\Phi} \Psi_m dV = f_m \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = f_m \delta_{nm}$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпа  $\hat{\Phi}$  операторының матрицасының өзиниң меншикли елеслетиүинде диагоналлық матрица болып табылатуғының аңғартады. Демек бул матрицаның  $n = m$  элементлеринен басқа элементлериниң барлығының да нолге тең екенлигин аңғартады. Соның менен бирге бул диагоналлық элементлер  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли мәнислери болып табылады.

Солай етип квантлық механиканың  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли мәнислерин анықлау ҳақындағы әхмийетли мәселеси матрикалар формулорвакда диагоналлық түрге алып келетуғын матрицаның түрлендирилиүин табыў болып табылады екен.

Квантлық механикан матрикалар формада елеслеткенде (матрикалар формада жазғанда) толқын функциялары қатнаспайды. Ал теңлемелер болса формалары бойынша классикалық механикасының теңлемелериниң формасындай болады. Бирақ квантлық механикандағы жағдай менен классикалық механикадағы жағдайдың принципиаллық айырмашылыққа ийе екенлигин умытпау керек. Квантлық механиканың бул теңлемелеринде физикалық шамалар сәйкес матрикалар менен алмастырылған.

Базы бир жағдайларда квантлық механиканың мәселелерин матрикалар үсүлдә шешиў операторлық үсүлда шешкенге салыстырғанда қолайлырақ болады. Бирақ биз курсымызда квантлық механиканың мәселелерин шешкенимизде квантлық механиканың тек операторлық формасынан, яғни толқын функциясын ҳәм Шредингердин толқынлық теңлемесин пайдаланамыз. Квантлық механиканың бир қатар мәселелерин матрикалар формада шешиўге мысалларды теориялық физика ямаса квантлық механика бойынша оқыў қолланбаларында табыўға болады.

## 2-4-1. Стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси

Үақытқа ийе

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \quad (2.4.1)$$

Шредингер теңлемеси релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарғы теңлемеси болып табылады. Бул аңлатпада  $\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z, t)$  арқалы бөлекшениң толық энергиясының операторы болған Гамильтон операторы белгиленген. Бул теңлеме координаталар менен үақыттың функциясы болған  $\Psi(x, y, z, t)$  функциясын табыўға мүмкіншиликтен болады. Нәтийжеде бөлекшениң кеңисликтиң қәлеген ноқатында қәлеген үақыт моментинде табыўдың итималлығының тығызлығы есапланады. Нәтийжеде күш майданында қозғалышы бөлекшениң квантлық ҳалды тәрийиплеў мүмкіншилиги туýылады.

Квантлық механикада күш майданындағы қозғалыс ҳаққындағы мәселелердин пүтиң классы бар болып, бундай мәселелерде  $\Psi(x, y, z, t)$  толқын функциясы үақыттан ғәрэзли емес болады. Соныңтан  $\Psi(x, y, z, t) \equiv \Psi(x, y, z)$  теңлигі орынланады. Бундай күш майданларын стационар күш майданлары деп атайды. Стационар майданларда квантлық система энергия  $E$  ниң белгили бир мәнисине ийе ҳалларда тұра алады. Бундай ҳалларды стационар ҳаллар деп атайды. Ал усындағы ҳалларда туратуғын бөлекшелердин қозғалысы ҳаққындағы мәселелерди квантлық механиканың стационар мәселелери деп атайды. Квантлық системалардың стационар ҳалларын таллаўға усы бап арналған.

Стационар ҳалға сәйкес келиўши толқын функциясының улыўмалық түрін табамыз. (2.4.1)-теңлемедеги  $\hat{H}$  операторы анық үақыттан ғәрэзсиз болғанлықтан  $\Psi(x, y, z, t)$  толқын функциясын еки функцияның көбеймеси түринде жазыўға болады

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)\varphi(t). \quad (2.4.2)$$

Бул функциялардың бири  $\psi(x, y, z)$  тек координатадан, ал екиншиси  $\varphi(t)$  тек үақыттан ғәрэзли. (2.4.2) функциясын (2.4.1)-теңлемеге қойып ҳәм буннан кейин теңлемениң еки бөлімін де  $\psi(x, y, z)\varphi(t)$  көбеймесине бөлсек

$$\frac{i\hbar}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\psi} \hat{H}\psi \quad (2.4.3)$$

теңлемесин аламыз. (2.4.3)-теңлемениң шеп тәрепи тек үақыттан, ал оң тәрепи тек координаталардан ғәрэзли. Егер теңлемениң оң ҳәм шеп тәреплері турақлы шамаға тең болса бундай теңликтиң орынланыўы мүмкін. Бул турақлы шаманы  $E$  арқалы белгилеймиз. Усындағы жоллар менен (2.4.3)-теңлемеден еки теңлеме аламыз. Олардың биреүи  $\psi(x, y, z)$  функциясы, ал екиншиси тек  $\varphi(t)$  функциясы ушын. Олардыбылайынша жазамыз:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (2.4.4a)$$

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = E\psi. \quad (2.4.4b)$$

(2.4.4a) теңлемеси толық энергия операторының (яғни  $\hat{H}$  гамильтонианың) меншикли функцияларын ҳәм меншикли мәнислерин анықлады. Соныңтан  $E$  шамасы квантлық механикалық системаның толық энергиясы болып табылады. (2.4.4a) теңлемесин  $\hat{H}$  операторының түрин есапқа алған ҳалда көширип жазамыз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U\psi = E\psi. \quad (2.4.5)$$

Бул теңлемеде  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  арқалы Лаплас операторы белгиленген. (2.4.5)-теңлемеси стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси деп аталады. Оның шешимлери болған  $\psi(x, y, z)$  функциялары ҳәм энергия  $E$  ниң сәйкес мәнислері бөлекшениң потенциал энергиясы болған  $U(x, y, z)$  функциясының айқын түринен ғәрэзли. Стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемесин

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0 \quad (2.4.6)$$

формада жийи жазады.

Енди ўақытлық функция  $\varphi(t)$  ны таллауға өтемиз. (2.4.4b) функциясының шешими

$$\varphi(t) = \varphi_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (2.4.7)$$

түрине ийе болады. Бул жерде  $\varphi_0$  арқалы базы бир константа белгиленген. Улыўмалықты жойтпастан  $\varphi_0 = 1$  деп есаплау мүмкін. Себеби  $\varphi(t)$  функциясы барлық аңлатпаларға тек  $\psi(x, y, z)$  функциясы менен көбейме түріндегі қатнасады. Соның менен бирге  $\psi(x, y, z)$  функциясының өзи турақлы көбейтиші дәллигинде анықланады. Соның ушын  $\varphi(t)$  функциясы ушын және де бир ықтыйрылған турақлыны киргизип отырыудың зәрүрлиги жоқ.

Солай етип стационар квантлық ҳалда турған бөлекше ушын толқын функциясы төмендегидей түрге ийе болады

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x, y, z) e^{-i\omega t} \quad (2.4.8)$$

(2.4.8)-аңлатпадан стационар ҳалдың толқын функциясының жийилик пенен ўақыттан ғәрэзли екенлеги көринип тур

$$\omega = \frac{E}{t}.$$

Бул нәтийже дәслеп еркин бөлекше ушын қолланылған де Бройлдин  $E = \omega\hbar$  формуласының бөлекше стационар күш майданында қозғалғанында да дұрыс екенligин көрсетеди.

Стационар ҳаллар ушын бөлекшениң турған орнын табыудың итималлығының тығыздығының ўақыттан ғәрэзсиз екенлигин атап өтемиз. Ҳақыйқатында да

$$\begin{aligned}\omega &= |\Psi(x, y, z, t)|^2 = |\psi(x, y, z)|^2 \left| e^{-\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = \\ &= |\psi(x, y, z)|^2 e^{-\frac{E}{\hbar}t} e^{i\frac{E}{\hbar}t} = |\psi(x, y, z)|^2.\end{aligned}\tag{2.4.9}$$

Стационар ҳалларда итималлықтар ағысының тығызлығы векторының да, физикалық шамалардың орташа мәнислериниң де ўақыттан ғәрэзсиз екенлигин көрсетиүгө болады.

(2.4.9)-формуланы есапқа алғанда толқын функциясының нормировка шәрти

$$\int_{\mathbb{R}^N} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1$$

мынадай түрге енеди

$$\int_{\mathbb{R}^N} |\psi(x, y, z)|^2 dV = 1.\tag{2.4.10}$$

Стационар мәселелердеги толқын функцияларының координаталық бөлими болған  $\psi(x, y, z)$  функциясын әдетте толқын функциясы деп атайды. Усының менен бирге ўақытқа байланыслылық (2.4.8)-аңлатпа менен берилетуғынлығын есапқа алыў керек.

**4.1-мәселе.** Операторы ўақыттан анық түрде ғәрэзли емес физикалық шаманың орташа мәнисиниң тұрақты шама болатуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими:** Операторы  $\hat{A}$  ўақыттан ғәрэзсиз болған  $a$  шамасын қараймыз. (3.75)-аңлатпаға сәйкес орташа мәнис  $\langle a \rangle$

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*(x, y, z, t) \hat{A} \Psi(x, y, z, t) dV$$

аңлатпасының жәрдеминде бериледи. (2.4.8)-толқын функциясының түрин есапқа алған ҳалда

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \psi(x, y, z) e^{i\frac{E}{\hbar}t} \hat{A} \psi(x, y, z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dV$$

аңлатпасын аламыз.  $\hat{A}$  операторы ўақыттан анық түрде ғәрэзсиз болғанлықтан ўақытлық көбейтиші  $e^{i\frac{E}{\hbar}t}$  шамасын қаўсырмадан сыртқа шығарыў мүмкіншилигин береди

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \psi(x, y, z) e^{i\frac{E}{\hbar}t} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \hat{A} \psi(x, y, z) dV.$$

$e^{i\frac{E}{\hbar}t} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = 1$  теңлиги орынланатуғын болғанлықтан ақыр-аяғында

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \psi(x, y, z) \hat{A} \psi(x, y, z) dV$$

аңлатпасын аламыз.

Солай етип орташа мәнис ўақыттан ғәрзесиз болып шығады екен.

**4.2-мәселе.** Егер бөлекше стационар ҳалда турса ҳәм дискрет спектрге ийе болса, онда оның импульсiniң орташа мәниси  $\langle p_x \rangle$  тың нолге тең екенлигин дәлиллеңиз. Мәселени бир өлшемли жағдай ушын шешиңиз ( $N = 1$ ).

**Шешими:** Дәслеп координата операторы  $\hat{x}$ , импульс проекциясы  $\hat{p}_x$  ҳәм гамильтониан  $\hat{H}$  операторлары арасында тәмендегидей коммутациялық байланыстың бар екенлигин көрсетип етемиз

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x.$$

$[\hat{H}, \hat{x}]$  коммутаторы менен базы бир  $\psi$  функциясына тәсир етемиз

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}] \psi &= \hat{H}(\hat{x}\psi) - \hat{x}(\hat{H}\psi) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) + Ux\psi - x \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\psi \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) + x \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}. \end{aligned}$$

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) = 2 \frac{\partial\psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$  екенлигин есапқа алып

$$[\hat{H}, \hat{x}] \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( 2 \frac{\partial\psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \psi$$

аңлатпасына, яғни  $[\hat{H}, \hat{x}] \psi = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \psi$  екенлигине ийе боламыз. Буннан

$$\hat{p}_x = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]$$

екенлиги келип шығады.

Енди импульс проекциясы  $\langle p_x \rangle$  шамасының орташа мәнисин табамыз.  $\psi$  толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын ҳалдағы физикалық шаманың орташа мәниси

$$\langle p_x \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \psi^* \hat{p}_x \psi dx$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпаға  $\hat{p}_x$  операторы ушын аңлатпаны қойсақ

$$\langle p_x \rangle = \frac{im}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} (\psi^* \hat{H} \hat{x} \psi - \psi^* \hat{x} \hat{H} \psi) dx = \frac{im}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} (\psi^* \hat{H} x \psi - \psi^* x \hat{H} \psi) dx$$

аңлатпасына ийе боламыз. Енди  $\hat{H}$  операторының эрмитли екенлигинен, яғни

$$\int_{\mathbb{R}^N} \psi_1^* \hat{H} \psi_2 dx = \int_{\mathbb{R}^N} \psi_2 (\hat{H} \psi_1)^* dx$$

екенлигинен пайдаланамыз. Бул аңлатпаларда  $\psi_1$  ҳәм  $\psi_2$  лер арқалы жүдә кең класстағы ықтаярлы функциялар белгиленген. Бул функциялардың интегралланыуы ҳәм интегралланыу шегараларында нолге тең болыуы керек.  $\hat{H}$  операторының Эрмитли екенлигин есапқа алсақ

$$\langle p_x \rangle = \frac{im}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} [x\psi(\hat{H}\psi)^* - x\psi^*\hat{H}\psi] dx$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бөлекшениң ҳалы стационар болғанлықтан

$$\hat{H}\psi = E\psi \text{ ҳәм } (\hat{H}\psi)^* = (E\psi)^* = E\psi.$$

Солай етип

$$\langle p_x \rangle = \frac{im}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} (xE\psi\psi^* - xE\psi\psi^*) dx = 0.$$

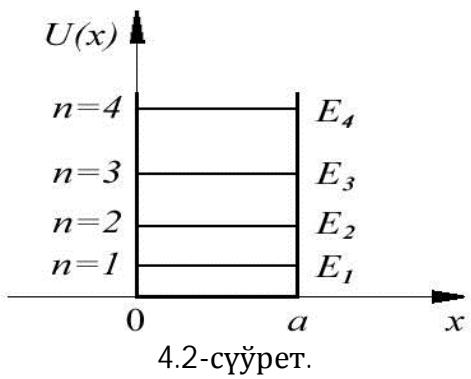
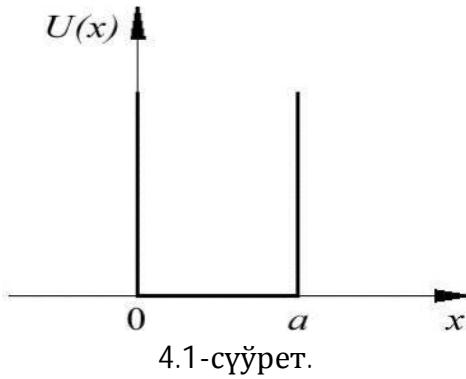
## 2-4-2. Откермейтуғын дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше

Квантлық механиканың стационар мәселелерин қарауды таллаў ушын ең әпиүайы болған мәселеден баслаймыз. Бул мәселе откермейтуғын дийўалларға ийе (яғни дийўаллары шексиз бийик болған) потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысы болып табылады. Үш өлшемли мәселелер қаралғанда бундай шуқырларды потенциал қуты деп те атайды. Бундай жағдайдағы қозғалыстың өзине тән өзгешеликleri [энергияның квантланыуы, энергия қәддилериниң азғыныуы (вырождение энергетических уровней) ҳәм басқалар)] шекли тереңликке ийе потенциал шуқыр ушын да қарап өтиледи

**Бир өлшемли потенциал шуқыр.** Бир өлшемли дийўалларының бийиклиги шексиз туұры мүйешли потенциал қутыдағы бөлекшени қараймыз. Бул жағдайда бөлекшениң энергиясы  $U(x)$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x > a \end{cases}$$

шамаларына тең болады. Шуқырдың ишинде  $U(x)$  тың шамасы турақлы ҳәм нолге тең, ал шуқырдың сыртларында шексизликке айланады. (2.4.1-сүйрет).



Бөлекшениң  $x$  көшери бағытындағы бир өлшемли қозғалысы ушын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi = 0. \quad (2.4.11)$$

Потенциал шуқырдың сыртында потенциал энергия шексизликке айланатуғын болғанлықтан (2.4.11)-теңлемениң орынланыўы ушын  $\psi(x)$  функциясының нолге айланыўы керек, яғни  $\psi(x) \equiv 0$ . Бул жағдай дийўаллары шексиз бийик болған шуқырдан бөлекшениң шыға алмайтуғынлығын аңғартады (демек бундай шуқырдың дийўаллары арқалы бөлекше өте алмайды деген сөз). Үзлиksизлик шәрти шуқырдың шегараларында толқын функциясының нолге тең болатуғынлығын аңғартады, яғни  $\psi(x)$  функциясы  $x = 0$  ҳәм  $x = a$  нөқтәларында нолге айланады.

Солай етип шуқырдағы бөлекшениң қозғалысы мәселеси

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0, \quad 0 < x < a \quad (2.4.12)$$

теңлемесин шешиўге алып келинеди. Шегаралық шәртлери

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0.$$

Жаңа белгилеў киргиземиз

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (2.4.13)$$

Бундай жағдайда (2.4.12)-теңлеме тербелислер теориясынан белгили болған теңлемеге айланады

$$\psi' + k^2 \psi = 0.$$

Бул теңлемениң шешими

$$\psi(x) = A \sin(kx + a) \quad (2.4.14)$$

түринде жазылады.

$$\psi(0) = 0 \text{ шегаралық шәртин пайдалансақ}$$

$$A \sin \alpha = 0$$

аңлатпасын аламыз. Буннан  $\alpha = \pm \pi t$  екенлиги келип шығады.  $t = 1, 2, \dots$  тиң жуп мәнислеринде  $\psi(x) = A \sin kx$ , ал тақ мәнислеринде  $\psi(x) = A \cos kx$  функцияларын алатуғынымызды атап өтемиз. Бирақ физикалық мәниске  $\psi(x)$  толқын функциясының өзи емес, ал оның модулинин квадраты  $|\psi(x)|^2$  ийе. Модульдин квадраты  $t$  шамасын сайлап алыўдан, яғни  $\psi(x)$  функциясының белгисинен ғәрэзли емес. Соныңтан  $\alpha = 0$  деп есаплауымызға болады.

$$\text{Екинши шегаралық шәрт } \psi(a) = 0$$

$$A \sin ka = 0$$

теңлигине алып келеди. Бул теңлик  $A \neq 0$  болған жағдайлар ушын

$$ka = \pm \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.15)$$

(2.4.14)-шешимге кириўши  $n = 0$  болған жағдайдың мәселениң шәртин қанаатландырмайтуғының атап өтемиз. Себеби  $n = 0$  болғанда  $\psi \equiv 0$  шәртинин орынланыўы керек, ал бул жағдай бөлекшениң шуқырда жоқ екенлигине сәйкес келеди. Соныңтан  $n$  шамасының нолге тең болыўын мәселеден шығарып таслаў керек.

(2.4.13)-аңлатпаны (2.4.15)-аңлатпаға қойып дийўаллары өткермейтуғын потенциал шуқырдың ишинде қозғалыўшы бөлекшениң  $E_n$  толық энергиясы ушын аңлатпа аламыз

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.16)$$

Алынған энергия спектри (2.4.16) ның әхмийетли өзгешелиги оның дискретлиги болып табылады. Потенциал шуқырдың ишиндеги бөлекше (2.4.16)-аңлатпа жәрдеминде анықланған энергияның тек дискрет, квантланған мәнисине ийе болады (2.4.2-сүрет). Шредингер теңлемесиниң шешиминиң өзинен өзи энергияның квантланыўына алып келмейтуғының атап өтемиз. Квантланыў толқын функциясы ушын жазылған шегаралық шәртлерден, яғни потенциал шуқырдың шегараларында толқын функциясының нолге тең екенлигинен келип шығады.

(2.4.16)-аңлатпадағы шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясын анықтайтуғын  $n$  санын квантлық сан, ал сол  $n$  ге сәйкес келиўши энергияның мәниси болған  $E_n$  шамасын энергияның қәдди деп атайды. Бөлекшениң ең киши энергияға ийе ҳалын (бундай ҳалда  $n = 1$ ) оның тийкарғы ҳалы деп атайды. Басқа барлық ҳаллар қозған ҳаллар болып табылады.  $n = 2$  шамасы биринши қозған ҳалға,  $n = 3$  шамасы екинши қозған ҳалға сәйкес келеди (хәм тағы басқалар).

Тийкарғы ҳалда турған бөлекшениң энергиясының мәниси нолден өзгеше екенлигин атап өтемиз. Бул нәтийже анықсызлық қатнасларына сәйкес келеди ҳәм квантлық механиканың барлық мәселелери ушын улыўмалық болып табылады. Классикалық физикада болса нолге тең болған минималлық энергияға шуқырдың

ишиндеғи тынышлықта турған бөлекше ийе болады. Квантлық механиканда бундай тынышлықтағы ҳал пүткіллей орын алмайды.

Энергия спектринин дискретлигин толығырақ таллаймыз.  $n$  – ҳәм ( $n + 1$ ) – қәддилер арасындағы энергия қәддилеринин айырмасы  $\Delta E_n$  шамасын табамыз

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

$\Delta E_n$  шамасының мәнисин айқын жағдайлар ушын баһалаймыз.

**1-жағдай.** Массасы  $m \approx 10^{-27}$  кг ҳәм өлшеми  $a \approx 0,1$  м болған ыдыстағы газдың молекуласын қараймыз. Бундай жағдайда

$$\Delta E_n \approx 6,8 \cdot 10^{-20} \cdot n \text{ эВ}$$

шамасына ийе боламыз. Қоңсылас энергия қәддилери арасындағы айырма молекулалардың жыллылық қозғалысларының энергиясы болған  $kT$  шамасынан жүдә киши болып шықты (өзіре температураларында  $kT \approx 2,6 \cdot 10^{-2}$  эВ). Бундай жағдайда қозғалышы молекулалардың тутас энергия спектри ҳақында айта аламыз.

**2-жағдай.** Металлдағы еркин электронды қараймыз ( $m = 0,9 \cdot 10^{-30}$  кг,  $a \approx 0,01$  м). Бул жағдайда

$$\Delta E_n \approx 7,5 \cdot 10^{-15} \cdot n \text{ эВ}$$

ҳәм бул жағдайда да қәддилер арасындағы энергияның айырмасы металдағы электронлардың энергиясына салыстырғанда (энергиясының шамасы  $\sim 1$  эВ ке тең) жүдә киши. Бирақ (бул VI бапта көрсетиледи) макроскопиялық өлшемлердеги потенциал шуқырдағы электрон ушын дискрет қәддилердин болыўы принципиаллық әхмийетке ийе.

**3-жағдай.** Атомдағы еркин электронды қараймыз ( $a \approx 10^{-10}$  м). Бундай жағдайда қоңсылас қәддилер арасындағы айырма

$$\Delta E_n \approx 0,75 \cdot 10^2 \cdot n \text{ эВ.}$$

Бул атомдағы электронның байланыс энергиясына ( $E_{байл.} \sim 10$  эВ) салыстырғанда әдеүир сезилерлік шама болып табылады. Сонықтан бул жағдайдағы энергия спектринин дискретлигин есапқа алмауға болмайды.

Потенциаллық шуқырдағы бөлекшениң энергиясының спектрин таллаұды жуўмақлау алдында оның және бир қәсийетин қараймыз.  $\Delta E_n$  шамасының  $E_n$  шамасына қатнасын есаптаймыз.

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n + 1}{n^2}.$$

$n$  квантлық санның үлкейиүи менен бул қатнастың мәниси кемейеди ( $\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n}$ ). Сонықтан энергиялық спектрдин дискретлиги  $n$  ниң өсійи менен кемейеди. Бул нәтийже сәйкЕгерк принципи деп аталатуғын әхмийетли болған физикалық принципиң көриниүи болып табылады. Бул сәйкЕгерк принципи бойынша  $n$  квантлық санның үлкен мәнислеринде, яғни  $n \rightarrow \infty$  шеклеринде квантлық механика классикалық механикаға өтеди.

**Бир өлшемли шуқырдағы бөлекшениң толқын функциялары.** Енди бир өлшемли потенциал шуқырда жайласқан бөлекшениң толқын функцияларын талқылауға өтемиз. (2.4.15)-аңлатпаны есапқа алып (2.4.14)-аңлатпадан мынаған ииे боламыз

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}.$$

$A$  көбейтиүшиси (2.4.10)-толқын функциясының нормировка шәртинен табылады

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = A^2 \frac{a}{2} = 1.$$

Солай етип  $A$  ушын

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

аңлатпасына ииे боламыз ҳәм сонлықтан дийўалларының бийиклиги шексиз болған бир өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекше ушын

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \quad (2.4.17)$$

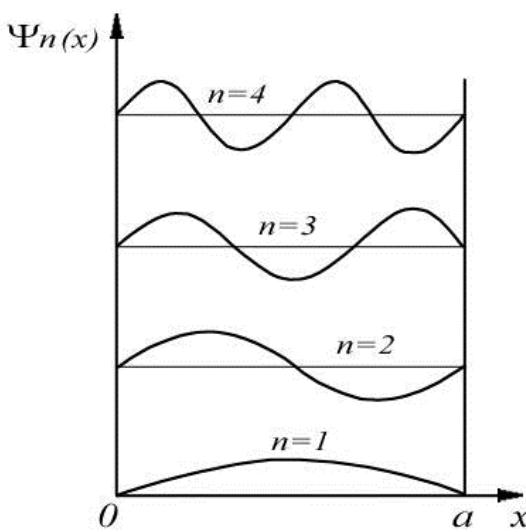
түрдеги толқын функцияларын аламыз. Бул аңлатпада  $0 < x < a$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Улыўмалық теорияға сәйкес (3.5 ти қарау керек) бул функциялар ортонормировкаланған функциялар болып табылады. Яғни

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}.$$

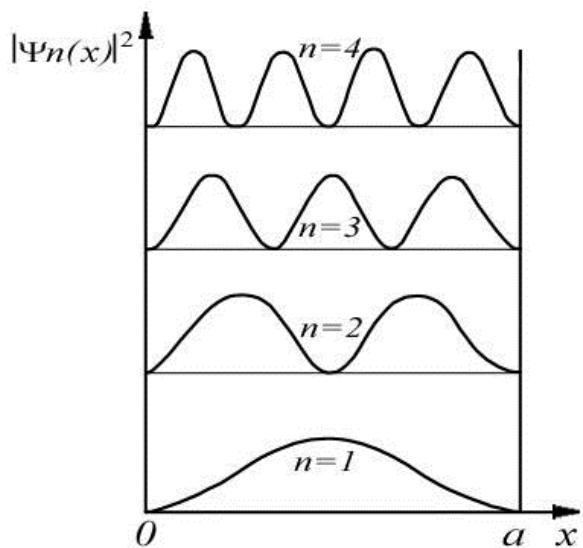
Бул аңлатпада  $\delta_{mn}$  арқалы 1 ҳәм 0 мәнислерине ииे болатуғын Кронекер символы белгиленген

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & (\text{егер } m = n \text{ болса}) \\ 0 & (\text{егер } m \neq n \text{ болса}). \end{cases} \quad (2.4.18)$$

$n$  квантлық санның төрт мәнисине сәйкес келетуғын  $\psi_n(x)$  толқын функциялары 2.4.3-сүйретте көлтирилген.  $n$  квантлық санның ҳәр қыйлы мәнислерине сәйкес келиўши толқын функциялары бир биринен үлкен айырмаға ииे болады. Егер координата басын шуқырдың ортасына көширсек  $n$  квантлық санның тақ мәнисине сәйкес келиўши толқын функцияларының координаталардың жуп функциясы, ал  $n$  квантлық санның жуп мәнисине сәйкес келиўши толқын функцияларының координаталардың тақ функциясы болатуғынлығын көремиз.  $n$  квантлық санның мәниси бир шамасына өзгерсе толқын функциясының  $x$  көшерин кесип өтетуғын ноқатларының саны да 1 ге артады.



2.4.3-сүйрет.



2.4.4-сүйрет.

Табылған толқын функцияларының өзлерине тән қәсиетлериниң бири шуқырдың шегарасындағы тууындының үзилиске түсіүинде (секириүге ушырауында) көринеди. Бул секириү бөлекшениң потенциал энергиясы болған  $U(x)$  шамасының шексизликке айланыўы менен байланыслы. Шекли тереңлікке ийе болған шуқырда (бул жағдай 2-4-4-параграфта талланады) толқын функциясының тууындысы шуқырдың шегарасында секириүге ушырамайды, яғни толқын функциясы бир қәлипте өзгереди.

2.4.4-сүйретте толқын функциясының модулинин квадратының (яғни  $|\psi_n(x)|^2$  шамасының) графиги көрсетилген.  $|\psi_n(x)|^2$  шамасының бөлекшени шуқырдың ишинде табыўдың итималлығының тығызлығын беретуғынлығын еске салып өтемиз.

Хәр қыйлы  $n$  лер ушын бөлекшелердин ҳәр қыйлы ҳаллары ушын итималлықтың тығызлықлары ҳәр қыйлы болатуғынлығы көринип тур. Мысалы тийкарғы ҳалда турған бөлекшени (яғни  $n = 1$  болған жағдайда) шуқырдың орайында табыўдың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады. Ал бириңши қозған ҳалда (яғни  $n = 2$  болғанда) бөлекшени шуқырдың орайында табыўдың итималлығы нолге тең. Соның менен бирге бөлекшени шуқырдың орайының оң ҳәм шеп тәреплеринде бирдей итималлық пenen табыў мүмкін. Бул жағдай классикалық бөлекшениң шуқырда жайласыўынан пүткиллей басқа. Классикалық бөлекшени шуқырдың қәлеген ноқатында табыўдың итималлығы бирдей.

Шуқырдың ишинде  $x_1 \leq x \leq x_2$  областта бөлекшени табыўдың итималлығы

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx \quad (2.4.19)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Математикалық көз-қарастан өткізбейтуғын дийўалларға ийе бир өлшемли потенциал қутыдағы бөлекшениң қозғалысы ҳаққындағы мәселе ушлары бекитилген тардың (струнаның) тербелиси ҳаққындағы мәселеге усайды. Еки жағдайда да шуқырдың кеңлигинде (тардың узынлығында) пүтин сан есelenген ярым толқын узынлығы жайласыўы керек ( $a = n \frac{\lambda}{2}$ ). Биз қарап атырған жағдайда  $\lambda$

жаққында гәп етилгенде шуқырдың ишиндеги бөлекшениң де Бройль толқын узынлығы болған  $\psi_{ab}$  шамасын түсінемиз.

**Еки өлшемли потенциал шуқыр.** Дийўалларының бийиклиги шексиз болған (дийўаллары шексиз бийик, сонлықтан бөлекшени өткермейтуғын) еки өлшемли түйры мүйешли потенциал шуқырды қараймыз. Бундай жағдайда бөлекшениң потенциал энергиясы  $U(x, y)$  төмендегидей түрге иье болады

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & \text{егер } (x, y) \in \Omega \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } (x, y) \notin \Omega \text{ болса.} \end{cases}$$

Бул аңлатпада  $\Omega = \{(x, y) : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2\}$  арқалы  $(x, y)$  тегислигиндеги түйры мүйешли область белгиленген (2.4.5-сүйрет). Бир өлшемли жағдайдағыдан потенциал шуқырдың сыртында  $\psi(x, y) \equiv 0$ . Шуқырдың ишинде  $x$  ҳәм  $y$  көшерлери бағытындағы қозғалыслар бир бириңен ғәрэзсиз болғанлықтан  $\psi(x, y)$  функциясын

$$\psi(x, y) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \quad (2.4.20)$$

көбеймеси түринде излеймиз. Бул аңлатпада  $\psi_1(x)$  арқалы тек  $x$  координатасына ғәрэзли болған толқын функциясы, ал  $\psi_2(y)$  арқалы тек  $y$  координатасынан ғәрэзли болған толқын функциясы белгиленген. (2.4.20) толқын функциясын (2.4.6) Шредингер теңлемесине қойсақ

$$\Delta\psi(x, y) + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x, y) = 0$$

ямаса

$$\psi_2(y) \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x) \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi_1(x)\psi_2(y)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпасын еки тәрепин де  $\psi_1(x)\psi_2(y)$  көбеймесине бөлсек

$$\frac{1}{\psi_1(x)} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{\psi_2(y)} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \quad (2.4.21)$$

аңлатпасына өтемиз. (2.4.21) дин шеп тәрепиндеги бириńши қосылыўшы тек  $x$  координатасынан, ал екинши қосылыўшы тек  $y$  координатасынан ғәрэзли. Олардың қосындысы турақлы шамаға тең болғанлықтан қосылыўшылардың өзлери де турақлы шамаға тең болады, яғни

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_1(x)} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_1, \\ \frac{1}{\psi_2(y)} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_2. \end{aligned}$$

Бул аңлатпаларда  $E_1$  ҳәм  $E_2$  арқалы бирликтери энергияның бирлигиндей болған шамалар белгиленген. Қала берсе  $E_1 + E_2 = E$ . Солай етип еки өлшемли мәселе ушын Шредингер теңлемеси еки бир өлшемли теңлемеге айрылады екен

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_1 \psi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_2 \psi_2(y) &= 0. \end{aligned} \quad (2.4.22)$$

Бундай теңлемелердин шешимлерин биз жоқарыда алған едик. Демек  $\psi_1(x)$  ҳәм  $\psi_2(y)$  функциялары

$$\begin{aligned} \psi_{1,n_1}(x) &= \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1}, \\ \psi_{1,n_2}(y) &= \sqrt{\frac{2}{a_2}} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2} \end{aligned}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпалардағы  $n_1$  ҳәм  $n_2$  квантлық санлар  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$  мәнислерин қабыл етеди. Демек еки өлшемли тууры мүйешли шексиз бийик дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекшениң толқын функциясы былайынша жазылады екен:

$$\psi_{n_1,n_2}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{a_1 a_2}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2}. \quad (2.4.23)$$

Бул аңлатпада  $0 < x < a_1$ ,  $0 < y < a_2$  ҳәм  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$   
Еки өлшемли шуқырда жайласқан бөлекшениң энергиясы

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left( \frac{n_2}{a_2} \right)^2 \right] \quad (2.4.24)$$

аңлатпасының жәрдеминде есапланады. Бул аңлатпада да  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$

Бөлекшениң энергиясының спектри (2.4.24) дискрет болып табылады ҳәм  $n_1$  және  $n_2$  квантлық санларнан ғәрзели.

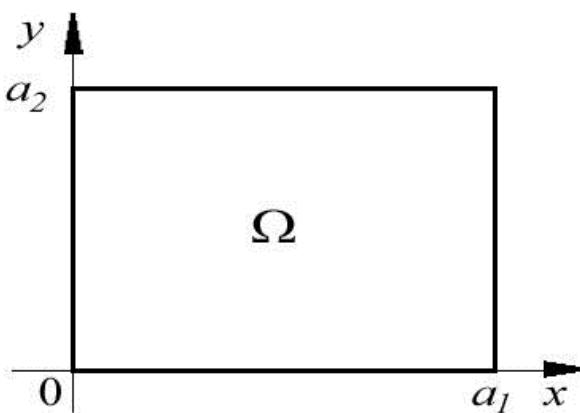
Енди квадрат потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысын қараймыз. Бул жағдайда  $a_1 = a_2 = a$ . Бундай жағдайда бөлекшениң энергия спектри

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2) \quad (2.4.25)$$

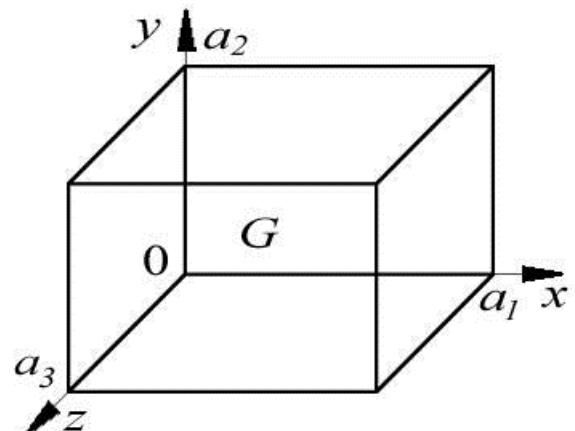
түрине ийе. Бул аңлатпада да  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$

(2.4.25)-аңлатпадан энергия қәддилериниң айныўы ҳаққындағы дәслепки түсиниклерге ийе бола аламыз. Бул аңлатпада  $n_1$  ҳәм  $n_2$  квантлық санларна байланыслы болған бир  $E_{n_1,n_2}$  энергия қәддине  $n_1 \neq n_2$  болған жағдайда бөлекшениң ҳәр қыйлы еки ҳалының (бул еки ҳал  $\psi_{n_1,n_2}$  ҳәм  $\psi_{n_2,n_1}$  толқын функциялары менен тәрийипленеди) сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Бөлекшениң бир неше ҳаллары сәйкес келетуғын энергия қәддин айныған ҳал (вырожденный уровень), ал бир қәддиге сәйкес келетуғын ҳаллардың санын айныў саны (кратность вырождения) деп атайды. Еки өлшемли квадрат потенциал шуқырда  $n_1 \neq n_2$  болған шәрти орынланатуғын энергия қәддиниң айныў саны екиге тең. Бөлекшениң тек бир ҳалы сәйкес келетуғын энергияның қәддине айнымаған

деп атайды. Еки өлшемли квадратлық потенциал шуқырда  $n_1 = n_2$  болған энергия қәддилери айнымаған қәддилер болып табылады.



2.4.5-сүйрет.



2.4.5-сүйрет.

**Үш өлшемли потенциал шуқыр.** Дийўаллары шексиз бийик болған үш өлшемли потенциал шуқырдағы (потенциал қутыдағы) бөлекшени қараймыз. Туұры мүйешли параллелопипедтиң ишкі областын  $G = \{(x, y, z) : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2, 0 < z < a_3\}$  арқалы белгилеймиз (2.4.6-сүйрет). Бул мәселеде  $U(x, y, z)$  потенциалы

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{егер } (x, y, z) \in G \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } (x, y, z) \notin G \text{ болса.} \end{cases}$$

түрине ииे болады. Потенциал шуқырдың сыртында бөлекшениң толқын функциясы  $U(x, y, z) \equiv 0$ . Еки өлшемли жағдайды қараған жағдайдада да толқын функциясын

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) + \psi_2(y) + \psi_3(z)$$

түринде излеймиз. Бул аңлатпада  $\psi_1(x)$  функциясы тек  $x$  координатасынан,  $\psi_2(y)$  функциясы тек  $y$  координатасынан, ал  $\psi_3(z)$  функциясы тек  $z$  координатасынан тәрзели.

Еки өлшемли шуқырдағы мәселени шешиўдин ұсылындағыдай үш өлшемли жағдайда үш бир өлшемли теңлеме аламыз

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_1 \psi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_2 \psi_2(y) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_3 \psi_3(z) &= 0. \end{aligned}$$

Бул аңлатпада  $E_1 + E_2 + E_3 = E$ .  $G$  областының шегараларында (ямаса потенциал ящиктиң өткермейтуғын дийўалларында) бул теңлемелердин шешимлери нолге айланады. Усы жағдайдың жәрдеминде (яғни потенциал қутының өткізбейтуғын дийўалларында) бөлекшениң толқын функциясының түри

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{a_1 a_2 a_3}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2} \sin \frac{\pi n_3 z}{a_3} \quad (2.4.26)$$

хәм оның энергиялық спектри

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left( \frac{n_2}{a_2} \right)^2 + \left( \frac{n_3}{a_3} \right)^2 \right] \quad (2.4.27)$$

анықланады. Бул аңлатпаларда  $n_1, n_2$  һәм  $n_3$  квантлық санлар  $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$  мәнислерин қабыл етеди. Үш өлшемли потенциал шуқырда бөлекшениң толқын функциясы да, энергиясы да үш квантлық саннан ғәрэзли болатуғынлығын атап етемиз.

Енди бөлекшениң кублық потенциал шуқырдың ишиндеги қозғалысын қараймыз. Бул жағдайда  $a_1 = a_2 = a_3 = a$ . Усыған сәйкес энергия спектри

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (2.4.28)$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада да  $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$

Кублық шуқырда  $n_1 = n_2 = n_3$  болған жағдайда энергия қәддилери айнымаған болады. Энергияның басқа қәддилериниң барлығы да айныған болып шығады. Кублық шуқырдағы энергия қәддилериниң айныў саны ҳақындағы мәселе 4.4-мәселеде шешиледи.

**4.3-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше шексиз терең еки өлшемли потенциал шуқырда екинши қозған ҳалда жайласқан. Усы бөлекшени  $0 < x \leq \frac{a}{3}$ ,  $0 < y \leq \frac{a}{3}$  областында табыўдың итималлығын ҳәм биринши және екинши қозған ҳаллардың энергияларының айырмасын табыңыз. Жоқарыда  $a$  арқалы шуқырдың өлшеми белгиленген.

**Шешими:** (2.4.23)-аңлатпаға сәйкес еки өлшемли квадрат потенциал шуқырдың ишиндеги бөлекшениң толқын функциясы

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y) = \sqrt{\frac{4}{a^2}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{a},$$

ал оның энергиясы спектри (2.4.25)-аңлатпаға сәйкес

$$E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2)$$

түрине ийе болады ( $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$ ). Биринши қозған ҳалға  $n_1 = 1, n_2 = 2$  (ямаса керисинше  $n_1 = 2, n_2 = 1$ ) квантлық санлар сәйкес келеди. Демек сәйкес энергияның қәдди еки рет айныған болып шығады. Екинши қозған ҳалға  $n_1 = n_2 = 2$  квантлық санлар сәйкес келеди. Оған сәйкес энергия қәдди айныған емес.

Бөлекшени  $0 < x \leq \frac{a}{3}$ ,  $0 < y \leq \frac{a}{3}$  областында табыўдың итималлығы

$$P = \int_0^{a/3} \int_0^{a/3} |\psi_{2,2}(x, y)|^2 dx dy = \frac{4}{a^2} \int_0^{a/3} \int_0^{a/3} \sin^2 \frac{2\pi x}{a} \sin^2 \frac{2\pi y}{a} dx dy = \left( \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{8\pi} \right)^2 \approx 0,07$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бөлекшениң екинши ҳәм биринши қозған ҳалларына сәйкес келетуғын энергияның айырмасы

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (8 - 5) = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

**4.4-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше дийўаллары абсолют өткізбейтуғын (яғни шексиз бийик) үш өлшемли кублық потенциал шуқырда жайласқан. Кубтың қабыргаларының узынлығы  $a$  шамасына тең.

- Табыңыз:**
- a) 6- ҳәм 5-қәдди энергияларының айырмасын;
  - b) 6-қәддиниң энергиясын;
  - c) 6-қәддиниң айныў санын.

**Шешими:** Үш өлшемли, кублық, абсолют өтиўге болмайтуғын дийўалларға ийе потенциал шуқырдың ишинде жайласқан бөлекшениң ҳалы

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{a} \sin \frac{\pi n_3 z}{a}$$

толқын функциясы менен тәрийипленеди. Ал бөлекшениң энергиясы (2.4.28)-аңлатпаға сәйкес

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

шамаларына тең болады. Бөлекшениң тийкарғы ҳалына, яғни бөлекшениң ең киши энергияға ийе ҳалына  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$  квантлық санларна жуўап беретуғын ҳал сәйкес келеди. Қозған ҳаллардың энергиялық қәддилери  $E_{n_1, n_2, n_3}$  шамасы ушын келтирилген аңлатпаның жәрдеминде анықланады. Соның менен бирге  $E_{n_1, n_2, n_3}$  энергиясы шамасының квантлық санларның квадратларының суммасының ( $\sum_{i=1}^3 n_i^2$  суммасының) артыўы менен үлкейетуғынлығын көремиз. Бул жағдай тәмендеги кестеде келтирилген:

Қәдди-лердин қатар саны	Квантлық санлар $(n_1, n_2, n_3)$	$\sum_{i=1}^3 n_i^2$
1	(1,1,1)	3
2	(1,1,2), (1,2,1), (2,1,1)	6
3	(1,2,2), (2,1,2), (2,2,1)	9
4	(1,1,3), (1,3,1), (3,1,1)	11
5	(2,2,2)	12
6	(1,2,3), (1,3,2), (2,1,3), (2,3,1), (3,1,2), (3,2,1)	14

Кестеден көринип турғанында, энергияның алтыншы қәддине квантлық санларның квадратларының қосындысы 14 ке тең болған сан сәйкес келеди. Ал бесинши қәдди ушын бул сүмманың мәниси 12 ге тең. Солай етип алтыншы ҳәм бесинши қәддилерге сәйкес келиўши энергиялардың айырмасы

$$\Delta E = E_6 - E_5 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (14 - 12) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$$

шамасына тең болады. Ал алтыншы қәддиниң энергиясы ушын

$$E_6 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} 14 = 7 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

шамасын аламыз.

Енди үш өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекшениң энергиясының қәддилериниң айныұ санлары ҳаққында гәп етемиз. Егер  $n_1, n_2, n_3$  квантлық санлар бир бирине тең болса, онда сәйкес энергияның қәдди айнымаған қәдди болып табылады. Бундай қәддилерге сәйкес келетуғын квантлық санларның (1,1,1), (2,2,2) ҳәм басқа да жыйынақтарын көрсетиүге болады. Егер үш квантлық санның екеуі бир бирине тең, ал үшиншиси оларға тең болмайтуғын жағдайда энергияның қәдди ушын айныұ саны үшке тең. Мысалы үш қайтара айныған қәддилерге екинши, үшинши ҳәм төртинши энергия қәддилерин көрсетиүге болады. Егер квантлық санлар бир бирине тең болмайтуғын болса, онда айныұ санының мәнисин үш санның орынларын өзгертип қойыў операцияларының санына, яғни алтыға тең болады. Тап усындағы ситуация алтыншы қәддиде жүзеге келеди. Солай етип алтыншы қәддиниң айныұ саны  $K_6 = 6$ .

**4.5-мәселе.** Атом ядроның нуклон ядролық күшлердин тәсиринде радиусы  $a = 10^{-14}$  м болған сфералық потенциал шуқырда жайласады. Потенциаллық шуқырдың дийўаллары нуклонды өткермейди деп есаплаймыз (шексиз бийик дийўал). Ядролық күшлер майданындағы бөлекшениң тийкарғы ҳалын сфералық симметрияға ийе деп есаплап, нуклонның ядродағы ең төменги энергиялық қәддин анықлаңыз. Нуклонның массасы  $m = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг.

**Шешими:** Атомлардың ядролары протонлар менен нейтронлардан турады. Ядролық тәсирилесиүде бул бөлекшелер бирдей қәсийет көрсетеди. Соныңтан ядродағы протонлар менен нейтронларды нуклонлар деп атайды.

Жақыннан тәсир етиўши қуýатлы ядролық күшлер нуклонларды ядрода услап турады. Мәселениң шәрти бойынша ядро күшлериниң майданы болған  $U(r)$  шамасын өткермейтуғын дийўалға ийе сфералық потенциал шуқырдың жәрдеминде моделлестириў мүмкін.

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{егер } r < a \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } r > a \text{ болса.} \end{cases}$$

Бул аңлатпада  $r$  арқалы нуклон менен ядроның орайы арасындағы қашықлық, ал  $a$  арқалы потенциал шуқырдың радиусы белгиленген. Бул шаманы ядроның радиусына тең деп есаплаймыз.

Биз қарап атырған ядроның орайынан  $r = a$  қашықлығындағы потенциал шуқырдың дийўалларының бийиклиги шексиз үлкен. Бул олардың энергиясының бийиклигиниң шексиз үлкен екенлигі менен байланыслы. Соныңтан шуқырдан сыртта, яғни  $r > a$  болған областларда, нуклонның толқын функциясы нолге тең.

Бул жағдай нуклонның ядроның ишиндеgi  $0 \leq r < a$  областында жайласады дегенди аңлатады.

Сфералық потенциал шуқырдағы нуклонның энергиясын табыў ушын стационар ҳаллар ушын жазылған (2.4.6)-Шредингер теңлемесин шешиў керек. Жоқарыда қарап өтилген мәселелердегидей, шуқырдың ишинде нуклонның потенциал энергиясын нолге тең деп есаптаймыз ( $U = 0$ ). Бундай жағдай ушын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\Delta\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \quad 0 \leq r < a$$

Мәселе сфералық симметрияға ийе болғанлықтан сфералық координаталар системасына өтемиз ҳәм толқын функциясы  $\psi$  ди радиаллық координата  $r$  диң, мүйешлик өзгериүшилер  $\vartheta$  менен  $\varphi$  диң функциясы деп қараймыз, яғни  $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$ . Мәселениң шәрти бойынша сфералық шуқырдағы бөлекшениң ҳалы сфералық симметрияға ийе болғанлықтан (яғни  $\vartheta, \varphi$  координаталарынан ғәрэзсиз) бөлекшениң толқын функциясын тек радиаллық координата  $r$  дән ғәрэзли деп есаптаймыз. Бул жағдайда Лаплас операторы мынадай түрге енеди:

$$\Delta\psi(r) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{d\psi(r)}{dr} \right) = \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi(r)}{dr}.$$

Солай етип сфера тәризли ядродағы бөлекше ушын Шредингер теңлемесин

$$\frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi(r)}{dr} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0.$$

түринде жазамыз. Бул теңлемениң биз излеп атырған шешими төмендегидей еки шәртті қанаатландырады:

$$|\psi(0)| < \infty \text{ ҳәм } \psi(a) = 0.$$

Бул шәртлердин бириňши толқын функциясының кеңисликтиң қәлеген ноқатындағы шекленгенлигиниң, ал екиншиси потенциал шуқырдың шегараларының өткизбейтуынлығын есапқа алғандағы толқын функциясының үзлиksизлигиниң нәтийжеси.

$\psi(r)$  толқын функциясын  $\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$  түринде излеймиз.  $\psi(r)$  функциясының координата бойынша тууындылары

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dr} &= \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{1}{r^2} u, \\ \frac{d^2\psi}{dr^2} &= \frac{1}{r} \frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \frac{du}{dr} + \frac{2}{r^3} u. \end{aligned}$$

Бул тууындыларды Шредингер теңлемесине қойып  $u(r)$  функциясы ушын теңлеме аламыз:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u = 0, \quad 0 \leq r < a.$$

Бул теңлеме ушын шегаралық шәртлер

$$u(0) = 0 \text{ ҳәм } u(a) = 0.$$

Бул мәселе формаллық жақтан бөлекшениң кеңлиги  $a$  болған, дийўаллары өткермейтуғын, бир өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысы ҳаққындағы мәселеге уқсас (2.4.2-параграфты қараңыз). Соныңтан (2.4.16)- ҳәм (2.4.17)- аңлатпаларды есапқа алғанда оның шешимлерин былайынша жаза аламыз:

$$u_n(r) = A \sin \frac{n\pi r}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$\psi(r)$  функциясына қайтып келип нормировкаланбаған ( $A = \text{const}$ ) толқын функцияларын жазамыз

$$\psi_n(r) = A \frac{\sin \frac{n\pi r}{a}}{r}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Бул функциялар биз қарап атырған потенциал шуқырдағы бөлекшениң барлық мүмкін болған сфералық симметрияға ийе болатуғын квантлық ҳалларды тәрийиплейтуғын мәселениң шешими болып табылады. Бул квантлық ҳаллардың бөлекшениң толық энергиясының төмендегидей мәнислері сәйкес келеди

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$n = 1$  болған жағдайда биз қарап атырған ядродағы нуклонның мүмкін болған ең киши (минималлық) энергиясын аламыз.  $m = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг,  $a = 10^{-14}$  кг мәнислерин қойып, биз  $E_{min} = 3,3 \cdot 10^{-33}$  Дж =  $2,1 \cdot 10^6$  эВ =  $2,1$  МэВ шамасын аламыз.

Энергияның бул мәниси атомдағы электронның энергиясына салыстырғанда әдеүир үлкен. Усының нәтийжесинде ядролық процесслерде бөлиніп шығатуғын энергияның муғдары химиялық реакцияларда бөлиніп шығатуғын энергияның мәнисинен миллионлаған есе үлкен болады. Аүыр ядролардың бөлиниү ҳәм жеңил ядролардың синтези реакцияларының жүзеге келийи квантлық механика нызамларының нәтийжеси сыпатында алынған бул жуўмақлардың дұрыс екенлигин тастыйықлады.

## 2-4-3. Потенциал табалдырық ҳәм дийўал областындағы бөлекшениң қозғалысы

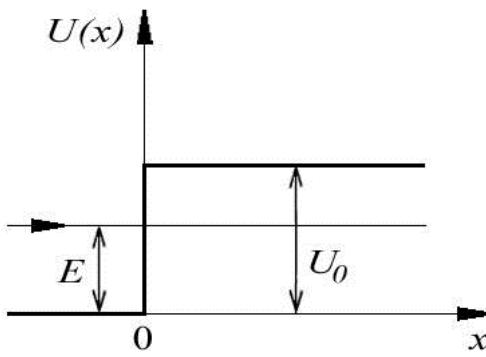
Жоқарыдағы параграфта кеңисликтиң шекленгендегі областындағы бөлекшениң қозғалысы қарап өтилди. Бундай қозғалысты финитлик қозғалыс деп атайды. Енди күш майданында жайласқан бөлекшениң шексизликке кете алатуғын қәбилетликке ийе болатуғын жағдайды қараймыз. Басқа сөз бенен айтқанда енди бөлекшениң инфинитлик қозғалысын үйренемиз.

**Потенциал табалдырық областындағы бөлекшениң қозғалысы.** Потенциал энергиясы

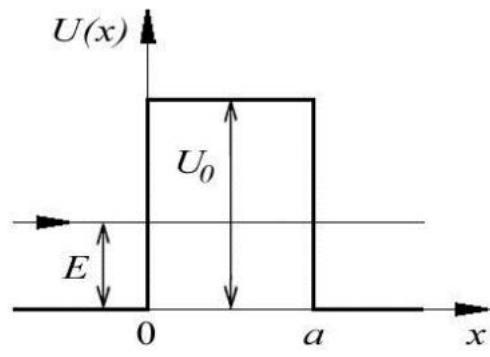
$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{егер } x < 0 \text{ болса} \\ U_0, & \text{егер } x > 0 \text{ болса.} \end{cases}$$

түрине ийе күш майданындағы бөлекшениң қозғалысын қараймыз.

Бундай жағдайда бөлекше потенциал табалдырық областында жайласқан деп атайды. Табалдырықтың шегарасында, яғни  $x = 0$  болған жағдайда, бөлекшениң потенциал энергиясын шекли болған  $U_0$  шамасына бирден өзгереди (секирмели түрде өзгереди) (2.4.7-сүйрет).



2.4.7-сүйрет.



2.4.8-сүйрет.

Табалдырықтың шеп тәрепин I саны менен белгилеймиз ( $x \leq 0$ ). Соның менен бирге усы область ушын алынған барлық шешимлерди де 1 индекси жәрдеминде айырып көрсетемиз. Табалдырықтың оң тәрепин ( $x \geq 0$ ) II саны менен, ал сәйкес шешимлерди айырып көрсетиүү ушын 2 индексин пайдаланамыз.

Бундай күш майданында Шредингер теңлемеси төмендегидей түрлерге ийе болады:

I областта

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 = 0.$$

II областта

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi_2 = 0.$$

Мейли бөлекшениң энергиясы  $E$  потенциал табалдырықтың бийиклиги  $U_0$  шамасынан киши болсын (яғни  $E < U_0$ ). Бундай жағдайда бийик потенциал табалдырық жағдайы деп атайды.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad \text{жәм} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad (2.4.29)$$

белгилеүлерин пайдаланып I ҳәм II областлары ушын Шредингер теңлемелерин аламыз

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad (2.4.30a)$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2 \psi_2 = 0. \quad (2.4.30b)$$

(2.4.30)-теңлемелердин шешимлери

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad (2.4.31a)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x} \quad (2.4.31b)$$

функциялары болып табылады.

Жоқары потенциал табалдырық бар болған жағдайда I ҳәм II областларындағы бөлекшениң ҳалларын тәрийиплеўши  $\psi_1$  ҳәм  $\psi_2$  функцияларының пүткіллей ҳәр қыйлы түрге ийе болатуғынлығын атап өтемиз.  $\psi_1$  толқын функциясындағы биринши қосылыўшыға  $x$  көшериниң бойы менен  $-\infty$  тен табалдырық областына, яғни шеп тәрептен оң тәрепке тарқалатуғын тегис де Бройль толқыны сәйкес келеди.  $\psi_1$  толқын функциясындағы екинши қосылыўшы  $x$  көшериниң бойы кери тәрепке (оң тәрептен шеп тәрепке) тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди.

Тап сол аңлатпадағы  $e^{ikx}$  аңлатпасының ҳақыйқатында да тегис толқынды тәрийиплейтуғынына исениү ушын стационар ҳалдағы (2.4.8) толқын функциясы ушын жазылған ўақытқа байланыслы болған  $e^{-i\omega t}$  көбейтиўхисин еске түсириў керек.  $e^{ikx}$  ны  $e^{-i\omega t}$  ға көбейтсек  $e^{-i(kx - \omega t)}$  аңлатпасын аламыз. Бул  $x$  көшери бойлап оң бағытта тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди. Тап сол сияқты  $e^{-ikx}$  аңлатпасы  $x$  көшери бойлап кери тәрепке қарай тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди.

Солай етип (2.4.31a) аңлатпасындағы  $\psi_1(x)$  толқын функциясы табалдырыққа келип түсиўши ҳәм табалдырықта шағылысқан тегис де Бройль толқынларының қосындысынан турады еken. Ал  $\psi_2(x)$  толқын функциясы болса (бул толқын функциясының бөлекшениң II областтағы қозғалысын тәрийиплейтуғынын еске түсиремиз) дәреже көрсеткишлери ҳақыйқый сан болған (2.4.31b) еки экспонентаның қосындысынан турады.

Енди толқын функцияларына қойылатуғын шәртлерди пайдаланамыз. Толқын функциясының мәниси шекли болыўы керек. Ал  $x$  тың мәниси шексизликке умтылғанда  $\psi_2(x)$  толқын функциясының мәниси де шексизликке умтылады. Сонықтан бул қосылыўшының алдында турған коэффициент  $A_2$  ниң мәнисинин нолге тең болыўы талап етиледи. Табалдырықтың бийиклиги  $U_0$  шекли болғанлықтан I ҳәм II областларды бөлип турған шегарада толқын функциясы тек ғана үзликсиз болып қалмастан, тегис те болыўы шәрт (яғни үзликсиз туýындыға ийе болыўы керек). Сонықтан еки областты бир биринен айырып турған шегараның еки тәрепинде толқын функцияларының ҳәр қыйлы түрлерге ийе болатуғынлығын көрдик. Ал еки орталықты бир биринен ажыратып турған шегарадағы толқын функцияларының ҳәм олардың туýындыларының мәнислерин бир бирине теңлестириў толқын функцияларын ҳәм олардың туýындыларын бир бирине жалғастырыў атамасын (сшивка волновых функций ҳәм их производных) алды. Бул жағдайда жалғастырыў шәрти

$$\begin{aligned}\psi_1(0) &= \psi_2(0), \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0)\end{aligned}$$

ямаса

$$A_1 + B_1 = B_2, \quad ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -k_2 A_2. \quad (2.4.32)$$

түрлерине ийе болады. (2.4.32)-теңлемелер системасы  $B_1$  ҳәм  $B_2$  коэффициентлерин  $A_1$  коэффициенти арқалы аңлатыўға, яғый табалдырыққа келип түсетуғын де Бройль толқынының амплитудасы арқалы аңлатыўға мүмкиншилик береди. Бундай мәселелерде физикалық мәниске ийе барлық шамалар (бундай шамалар қатарына бөлекшениң табалдырықтан шашыраў коэффициенти, өтиў коэффициенти ҳәм басқалар киребиди)  $B_1$  ҳәм  $B_2$  коэффициентлериниң  $A_1$  коэффициентине қатнасы түринде көрсетиле алады. Соңықтан улыўмалықты жоғалтпай  $A_1 = 1$  деп ала аламыз. Бундай жағдайда (2.4.32)-аңлатпадан  $B_1$  ҳәм  $B_2$  ушын

$$B_1 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}, \quad B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \quad (2.4.33)$$

аңлатпаларын аламыз.

Солай етип бийик табалдырық жағдайында бөлекшениң толқын функциялары төмендегидей түрге ийе болады екен

$$\psi_1(x) = e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \quad (2.4.34a)$$

$$\psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-ik_2 x}, \quad x > 0. \quad (2.4.34b)$$

(2.4.32)-теңлемелер системасының  $k_1$  менен  $k_2$  коэффициентлериниң қәлеген мәнисинде, яғый энергия  $E$  ниң қәлеген мәнислеринде ( $E < U_0$  екенлигин еске саламыз) шешимге ийе болатуғынлығын атап өтемиз. Бул бөлекшениң үзлиksiz энергия спектрине ийе болатуғынлығын аңғартады.

Бөлекшениң бийик табалдырықта кери қарай шағылысыўының итималлығын анықлаушы шағылысыў коэффициентин анықлаймыз. Өзиниң физикалық мәниси бойынша шағылысыў коэффициенти  $R$  былайынша есапланады:

$$R = \frac{|\vec{J}_{\text{шаг}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|}. \quad (2.4.35)$$

Бул аңлатпада  $\vec{J}_{\text{шаг}}$  (шағылысыўшы) ҳәм  $\vec{J}_{\text{к.т.}}$  (келип түсиўши) арқалы итималлық ағысы тығызлығы белгиленген. Олар сәйкес табалдырыққа түсиўши [(2.4.34a) аңлатпадағы бириňши қосылыўшы] ҳәм табалдырықта шашыраўшы [(2.4.34a) аңлатпадағы екинши қосылыўшы] толқынларға тийисли. Итималлық ағысының тығызлығы векторының толқын функциясының жәрдеминде қалай анықланатуғынлығын еске саламыз [(3.19)-аңлатпаға қараңыз]

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} [\psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi]. \quad (2.4.36)$$

(2.4.34a) ҳәм (2.4.36)-аңлатпаларды есапқа алып

$$|\vec{J}_{\text{к.т.}}| = \frac{\hbar k_1}{m},$$

$$|\vec{J}_{\text{шаг}}| = \frac{\hbar k_1}{m} \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Бул аңлатпаларды (2.4.35)-аңлатпаға қойып

$$R = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 = 1$$

формуласын аламыз.

Бөлекшениң II областқа өтийиниң итималлығын анықлаушы табалдырық арқалы өтиў коефициенті D

$$D = \frac{|\vec{J}_{\text{өтиўши}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|}$$

турине ийе болады. Бул аңлатпада  $\vec{J}_{\text{өтиўши}}$  арқалы табалдырық арқалы өтиўши (2.4.34b)  $\psi_2(x)$  толқын ушын итималлықтың ағысының тығызлығы векторы белгиленген.  $\psi_2(x)$  толқын функциясын (2.4.36)-аңлатпаға қойсак  $\vec{J}_{\text{өтиўши}} = 0$ , ҳәм усы жағдайға сәйкес  $D = 0$  болып шығады.

Солай етип бийик табалдырық ушын  $R = 1$  ҳәм  $D = 0$  ҳәм  $R + D = 1$  шәрти орынланады.

Енди бийик потенциал табалдырықтың II обласындағы бөлекшениң қәсийетлерин көремиз. Бөлекшениң толқын функциясы  $\psi_2(x)$  [(2.4.34b) аңлатпасына қараңыз] нолге тең емес ҳәм  $x$  пенен бирлікте экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди. Ал бул жағдай бөлекшениң табалдырық астында болыу (бул жағдайда бөлекшениң энергиясы  $E$  оның  $U_0$  потенциал энергиясынан кем болады) итималлығының нолге тең емес екенлигин билдиреди. Классикалық механиканың көз-қараслары бойынша бөлекше ушын бул область қадаған етилген болады. Себеби  $E < U_0$  шәрти кинетикалық энергияның мәнисиниң терис мәниске ийе болатуғынлығын аңғартады. Бирақ квантлық механиканың көз-қараслары бойынша бул жерде ҳеш қандай қарама-қарсылық жоқ. Кинетикалық энергия  $p$  импульстиң функциясы, ал потенциал энергия оның  $x$  координатасының функциясы болып табылады. Ал анықсызлық принципи бойынша координата менен импульсти бир ўақытта дәл анықлау мүмкін емес. Сонықтан квантлық механиканда бөлекшениң толық энергиясын бир ўақытта дәл анықланған кинетикалық ҳәм потенциал энергиялардың қосындысы деп қарауға болмайды (бул ҳаққында 2.3-параграфта айтылып өтилген еди).

Алынған нәтийже макроскопиялық бөлекшелер ушын өтиў қадаған етилген областларға микробөлекшелердиң өте алатуғынлығын көрсетеди. II областта бөлекшени табыудың итималлығының тығызлығы

$$w_2(x) = \frac{dP}{dx} = |\psi_2(x)|^2 = \left| \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \right|^2 e^{-2k_2 x} = \\ = \left| \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \right|^2 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0-E)}x} \quad (2.4.37)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады ҳәм оның шамасы бөлекшениң  $t$  массасынан, энергиялардың  $U_0 - E$  айырмасынан ҳәм табалдырықтың шегарасынан кашықлық  $x$  тан ғәрэзли.

(2.4.37)-аңлатпадағы экспоненциаллық көбейтиүшиниң мәнисин электрон ушын баҳалаймыз.  $U_0 - E = 1$  деп алайық,  $x = 10^{-10}$  м болғанда (яғни табалдырықтан қашықлық атомның өлшеминдей болғанда)

$$e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)x}} \approx 0,29$$

шамасына иие боламыз. Демек бул жағдайда экспоненциаллық көбейтиүши сезилерликтей мәниске иие болады екен ҳәм бул өз гезегинде II областта бийик потенциал табалдырықтан тап сондай аралықта электронды табыудың итималлығының мәнисиниң жеткиликли дәрежеде үлкен екенлигин көрсетеди.  $x = 10^{-9}$  м болғанда

$$e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)x}} \approx 4,54 \cdot 10^{-8}.$$

Бул жағдайда табалдырықтан  $x = 10^{-9}$  м қашықлықта электронның болыуының итималлығының оғада киши екенлигин билдиреди. Алынған баҳалар электронның табалдырық арқалы II областқа атомның өлшемлери менен барабар болған ( $x = 10^{-10}$  м) қашықлыққа шекем кире алатуғынлығын көрсетеди.

Солай етип бийик табалдырықтан бөлекшениң шағылысы ў коэффициенти  $R = 1$  болса да, яғни шағылысы ў толық болса да, шағылысы ўдың табалдырықтың өзинде (яғни I ҳәм II областлар арасындағы шегарада) жүзеге келийиниң шәрт емес екенлигин көрсетеди. Базы бир шамаға тең итималлық пенен бөлекше II областқа кирип, кейин қайтып шыға алады.

Биз қарап атырған қубылыстың классикалық физикада да аналогының бар екенлигин атап өтиў қызықлы. Бул толқын оптикасындағы толық ишкі шағылысы ў қубылысы болып табылады. Толық ишкі шағылысы ў қубылысы жақтылық оптикалық жақтан тығызырақ областтан оптикалық жақтан кем тығызлыққа иие орталыққа өткенде бақланады. Усы қубылыста жақтылық оптикалық тығызлығы кем орталыққа өте алады. Бирақ бундай жағдайда оның амплитудасы  $\Psi_2(x)$  сыйқылы экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди.

Енди табалдырыққа келип түсіүши бөлекшениң энергиясы  $E$  потенциал табалдырықтың бийиклиги  $U_0$  ден жоқары болған, яғни  $E > U_0$  болған жағдайды қараймыз. Бундай табалдырықты пәс потенциал табалдырық деп атайды ҳәм I менен II областлар ушын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k_1^2\Psi_1 = 0, \quad (2.4.38a)$$

$$\frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_2^2\Psi_2 = 0. \quad (2.4.38b)$$

Бул аңлатпалардағы  $k_1$  менен  $k_2$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \text{ ҳәм } k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} \quad (2.4.39)$$

формулалары менен анықланады. (2.4.38)-формулаларды шешип

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \quad (2.4.40a)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad x > 0 \quad (2.4.40b)$$

функцияларына ийе боламыз. Табалдырықта бөлекше  $x$  тың терис мәнисли тәрепинен жақынлайды деп есаптаймыз (яғни шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалады). Бундай жағдайда  $\psi_1(x)$  функциясының бириңи қосылышысы табалдырықта келип түсиўши де Бройль толқынын, ал  $\psi_2(x)$  функциясының екинши қосылышы табалдырықтан шағылышқан де Бройль толқынын береди. Тап сол сияқты  $\psi_2(x)$  функциясының бириңи қосылышысы табалдырық арқалы өткен де Бройль толқынына сәйкес келеди. II областта шағылышқан толқын болмағанлықтан (2.4.40b) аңлатпасындағы  $B_2$  коэффициентин нолге тең етип алғы керек болады, яғни  $B_2 = 0$ .

Шегарадағы толқын функцияларын ҳәм олардың туўындыларын жалғастырыў шәрти  $A_1, B_1$  ҳәм  $A_2$  коэффициентлері ушын төмендегидей теңлемелерге алғы келеди

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2, \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2. \end{aligned} \quad (2.4.41)$$

Биз жоқарыда қарап өткен жағдайдағыдан  $A_1 = 1$  деп есапласақ, онда  $B_1$  ҳәм  $A_2$  ушын

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

аңлатпаларын аламыз. Солай етип пәс потенциал табалдырық областында қозғалышы бөлекшениң толқын функциялары ушын

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{ik_1 x}, \\ \psi_2(x) &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} \end{aligned} \quad (2.4.42)$$

аңлатпаларын алады екенбиз. Бул аңлатпалардағы  $k_1$  менен  $k_2$  (2.4.39)-аңлатпаларда берилген.

Табалдырықта шағылышы (R) ҳәм табалдырықтан өтиў (D) коэффициентлерин табыў ушын келип түсиўши, шағылышқан ҳәм табалдырықтан өткен (сынған) де Бройль толқынлары ушын итималлықтың ағысының тығызлығын табамыз. Биз тапқан толқын функцияларын (2.4.36)-аңлатпаға қойсақ

$$\begin{aligned} |\vec{J}_{\text{к.т.}}| &= \frac{\hbar k_1}{m}, \\ |\vec{J}_{\text{шағылышы}}| &= \frac{\hbar k_1}{m} \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2, \\ |\vec{J}_{\text{өтиўши}}| &= \frac{\hbar k_1}{m} \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2 \end{aligned} \quad (2.4.43)$$

формулаларын аламыз. (2.4.35) пенен (2.4.43) лерди есапқа алғанда пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысың коэффициенти ушын мына формуланы аламыз:

$$R = \left| \frac{|\vec{J}_{\text{шағылысыұшы}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|} \right| = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2. \quad (2.4.44)$$

(2.4.44)-формуладан  $E > U_0$  болған жағдайда пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыұшының итималлығының нолге тең емес екенлиги көринеди. Яғнай бундай жағдайда дийўал үстиндеғи шағылысыў (надбарьерное отражение) деп аталатуғын шағылысыұдың жүзеге келийи мүмкин. Бул нәтийже кванттық механиканың нәтийжеси болып табылады ҳәм бөлекшелерде толқынлық қәсийеттиң бар екенлиги менен түсіндіриледи. Классикалық механика нызамларына бағынатуғын макроскопиялық бөлекше пәс потенциал табалдырық арқалы өткенде шағылыспайды, ал табалдырық арқалы өткенде оның кинетикалық энергиясының шамасы кемейеди.

Қызықты жағдайды атап өтемиз. Егер I областтағы потенциалды  $U(x) = U_0$ , ал II областтағы потенциалды  $U(x) = 0$  деп алсақ, онда берилген энергияға ийе бөлекше ушын шағылысыў коэффициентиниң мәниси  $R$  өзгермейди. Бундай жағдайда келип түсиўши ҳәм шағылысыұшы де Бройль толқынлары арасындағы фазалар айырмасы ғана өзгериске ушырайды. (2.4.42)-аңлатпада  $\psi_1(x)$  функциясының биринши  $e^{ik_1 x}$  ҳәм екинши  $\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{ik_1 x}$  қосылышыларының мәнислері бирдей. Сонықтан  $k_1$  менен  $k_2$  лердин орынларын алмастырған менен нәтийже өзгериске ушырамайды, яғнай шағылыстырыў коэффициенти  $R$  дин мәниси өзгермейди. Бул нәтийжени басқа сөз бенен де айтыў мүмкин: пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыў коэффициенти бөлекшениң қозғалыс бағытына ғәрэзли емес.

"Төңкерилип қойылған" табалдырықта келип түсиўши ҳәм шағылысқан толқынлардың амплитудаларының белгилери ҳәр қыйлы. Бул фазалар айырмасы π ге тең болған жағдайға сәйкес келеди. Яғнай "Төңкерилип қойылған" табалдырықта шағылысқанда толқынның фазасы секирмeli түрде π шамасына өзгереди. Оптика менен салыстырыуды даўам етип де Бройль толқыны ушын I область II областқа салысырғанда тығызырақ орталық болып табылады.

(2.4.37)- ҳәм (2.4.44)-аңлатпаларға сәйкес бөлекшениң табалдырық арқалы өтиў коэффициенти

$$D = \frac{|\vec{J}_{\text{өтиўши}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 4 \frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - U_0/E})^2} \quad (2.4.45)$$

шамасы болып табылады. Солай етип пәс потенциал табалдырық жағдайында да  $R + D = 1$ . Бундай нәтийжени итималлықтарды қосыў көз-қарасы бойынша күтиў тәбийий. Себеби келип түсиўши бөлекше табалдырықтан шашырайды ямаса II областқа өтеди.

Бөлекшениң табалдырық областында қозғалысын тәрийиплейтуғын де Бройль толқынның I ҳәм II областлар шегарасында сынатуғынлығын атап өтиў керек. Бул сыныў бөлекшениң тезлигиниң өзгериүи ҳәм де Бройль толқынның узынлығы  $\lambda_{db}$  шамасының өзгериүи менен байланыслы. Сыныў көрсеткиши  $n$  мынадай түрге ийе болады (2.1-параграфты қараңыз):

$$n = \frac{\lambda_{db}^{(1)}}{\lambda_{db}^{(2)}} = \frac{v_1}{v_2}.$$

Бул аңлатпада  $\lambda_{db}^{(1)}$  ҳәм  $\lambda_{db}^{(2)}$  арқалы I ҳәм II областлардағы де Бройль толқынларының узынлықтары, ал  $v_1$  ҳәм  $v_2$  арқалы сол областлардағы де Бройль толқынларының тезликлері белгиленген.  $v_1$  ҳәм  $v_2$  шамаларынан бөлекшелердиң кинетикалық энергияларына өтсек

$$n = \sqrt{\frac{E - U_0}{E}} = \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}$$

аңлатпасына ииे боламыз. Биз қарап атырған пәс табалдырық жағдайында ( $E > U_0$ ) сыныў көрсеткиши  $n < 1$ . Бул жағдай бөлекше ушын I областтың II областқа салыстырғанда оптикалық жақтан тығызырақ екенлигин және бир рет дәлилләйди. "Төңкерилген" табалдырық жағдайында сыныў көрсеткиши

$$n' = \frac{1}{n} = \frac{1}{\sqrt{1 - U_0/E}}$$

шамасына ҳәм бул шама бирден үлкен болады.

**Бөлекшениң потенциал барьер арқалы өтийи.** Биз бул бөлимде рус тилиндеги "потенциальный барьер" сөзин қарақалпақ тилине "потенциал дийўал" ямаса "потенциал тосқынлық" деп аўдармаймыз ҳәм "потенциал барьер" сөзин толығы менен қабыл етемиз.

Бөлекшениң потенциал энергиясын  $U$  арқалы белгилеймиз. Егер кеңисликтиң бир областында  $U$  шамасының мәниси басқа областлардағы потенциал энергияның шамасынан үлкен болса, онда сол обласстты потенциал барьер деп атайды. Потенциал барьер областындағы бөлекшениң қозғалысын изертлеуди бир бир өлшемли туұры мүйешли потенциал шуқырды қараў менен баслайды (2.4.8-сүрөт).

Мейли, бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(x) = \begin{cases} 0, & (x < 0 \text{ болғанда}), \\ U_0, & (0 < x < a \text{ болғанда}), \\ 0, & (x > a \text{ болғанда}). \end{cases}$$

I арқалы барьердин шеп тәрепиндеги обласстты II арқалы  $0 < x < a$  обласстын ҳәм III арқалы барьердиң оң тәрепин белгилейик. Бөлекше барьерге  $x$  тың терис мәнислері тәрепинен жақынлайды, яғни шептен оң тәрепке қарай қозғалады деп есаплайды. Бөлекшениң энергиясы  $E$  барьердин бийиклиги  $U_0$  шамасынан киши болған жағдайды, яғни  $E < U_0$  теңсизлиги орынланатуғын жағдайды үйренемиз. ( $E > U_0$  теңсизлиги орынланатуғын жағдай усы параграфтың 4.7-мәселесинде шешилген).

I, II ҳәм III обласстлар ушын Шредингер теңлемелери былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_3(x) &= 0. \end{aligned} \quad (2.4.47)$$

Бул аңлатпаларда  $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  ҳәм  $k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$ .

Толқын функциялары (2.4.47)-теңлемелердин шешимлери болады

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}. \end{aligned} \quad (2.4.48)$$

Әдеттегидей барьерге келип түсиўши толқынның амплитудасы  $A_1 = 1$  ҳәм  $B_3 = 0$  деп есаплаймыз. Себеби бөлекшениң қозғалысында III областта шептен оң тәрепке қарай тек өтиўши толқын тарқалады.

Барьердин шегараларында (яғни  $x = 0$  ҳәм  $x = a$  ноқатларында) толқын функцияларын ҳәм олардың тууындыларын жалғастырыў шәрти

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ ik_1 - ik_1 B_1 &= k_2 A_2 - k_2 B_2, \\ A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} &= A_3 e^{k_1 a}, \\ k_2 A_2 e^{k_2 a} + k_2 B_2 e^{-k_2 a} &= ik_1 A_3 e^{k_1 a} \end{aligned} \quad (2.4.49)$$

теңлемелери системасының пайда болыўына алыш келеди. (2.4.49)-теңлемелер системасы төрт  $B_1, A_2, B_2, A_3$  белгисизлерге ийе төрт теңлемеден туралды. Бул система  $k_1$  менен  $k_2$  шамаларының, яғни энергия  $E$  ниң қәллеген мәнислеринде шешимлөргө ийе болады. Демек энергия спектри үзлиksiz спектр болып табылады деген сөз.

Бул мәселеде тийкарғы дыққатты бөлекшениң барьер арқалы өтийине аүдарамыз. (2.4.49)-системаны барьер арқалы өткөн толқынның амплитудасы  $A_3$  ушын шешип

$$A_3 = \frac{4ik_1 k_2 e^{ik_1 a}}{(k_1 - ik_2)^2 e^{k_2 a} - (k_1 + ik_2)^2 e^{-k_2 a}}$$

аңлатпасын аламыз. Барьерге келип түсетүүшүн ҳәм барьер арқалы өтетүүшүн толқын ушын итималлықтың ағысының тығызлығын табамыз. (2.4.36)- ҳәм (2.4.48)-аңлатпаларды есапқа алған ҳалда

$$\begin{aligned} |\vec{J}_{\text{к.т.}}| &= \frac{\hbar k_1}{m}, \\ |\vec{J}_{\text{өтиўши}}| &= \frac{\hbar k_1}{m} |A_3|^2. \end{aligned}$$

формулаларына ийе болмыз.  $|\vec{J}_{\text{к.т.}}|$  ҳәм  $|\vec{J}_{\text{өтиўши}}|$  шамаларының мәнислерин (2.4.37)-аңлатпаға қойсақ барьер арқалы өтиў коэффициентин табамыз

$$D = \frac{|\vec{J}_{\text{өтиүши}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|} = |A_3|^2 = \left[ 1 + \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \right)^2 \operatorname{sh}^2 k_2 a \right]^{-1}. \quad (2.4.50)$$

Бул аңлатпадағы гиперболалық синус

$$\operatorname{sh}(k_2 a) = \frac{1}{2} (e^{k_2 a} - e^{-k_2 a}).$$

Егер барьердин кеңлиги  $a$  ушын  $k_2 a \gg 1$  шәрти орынланатуғын болса (жоқарыда келтирилген есаплаўлар бул шәрттің  $a$  ның мәниси бир неше атомлық қатламның қалыңлығындай болған жағдайларда орынланатуғының көрсетеди)  $e^{-k_2 a} \ll 1$  ҳәм сонықтан гиперболалық синусты экспонента менен алмастырыў мүмкин

$$\operatorname{sh}(k_2 a) \approx \frac{1}{2} e^{k_2 a}.$$

Бул жағдайда барьер арқалы өтиў коэффициенти төмендегише анықланады:

$$D \approx \frac{16 k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2} e^{-k_2 a}.$$

Бул аңлатпаға  $k_1$  менен  $k_2$  нин мәнислерин қойып

$$D \approx D_0 \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}$$

формуласын аламыз. Бул формуладағы

$$D_0 = 16 \frac{E}{U_0} \left( 1 - \frac{E}{U_0} \right)$$

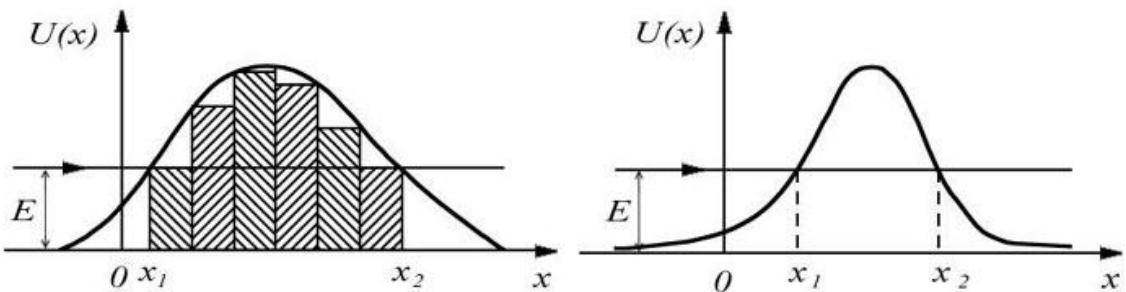
шамасы  $\frac{E}{U_0}$  ге қарата әстелик пenen өзгеретуғын функция болып табылады. Оның ( $D_0$  дин) сан мәниси 1 ге жақын.  $D$  шамасының мәселениң параметрлеринен тийкарғы ғәрәзлигин экспонента береди. Сонықтан потенциал барьер арқалы өтиў коэффициентиниң мәнисин есаплағанда  $D_0 \approx 1$  мәниси қабыл етиледи. Бундай жағдайда  $D$  ушын жазылған аңтатпа

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\} \quad (2.4.51)$$

түрине енеди. (2.4.51)-формуладан  $D$  өтиў коэффициентиниң барьердин кеңлиги  $a$  дан, бөлекшениң массасы  $m$  нен ҳәм энергиялар айырмасы ( $U_0 - E$ ) шамасынан күшли экспоненциаллық байланысқа ийе екенлигин көремиз.

Алынған нәтийжелерди ықтыярлы формаға ийе потенциал барьер ушын улыўмаластырамыз. Буның ушын потенциал барьерди биринен соң бири жайласқан көп сандағы енсиз туўры мүйешли потенциал барьерлерден туралы деп есаптаймыз (2.4.9а сүйрет). Барьердин формасы жеткиликли дәрежеде бир тегис өзгереди деп есаптаймыз (яғни барьердин бийиклиги де Бройль толқын узынлығындай қашықлықтарда көп өзгериске ушырамайды деп есаптаймыз). Бундай жағдайда

туұры мүйешли барьерлердин бийиклиги жоқарылайтығын участкалардағы толқынлардың шағылысының есапқа алмауға хәм толқынның әззилеін тек жутылыудың есабынан жүзеге келеди деп есаплауға болады.



4.9-сүрет. Ықтаярлы формадағы потенциал барьердин схемалық сүрети.

$i$ -туұры мүйешли барьер арқалы өтиүши де Бройль толқынын  $i + 1$  барьерге келип түсиүши толқын деп қараймыз. Бөлекшениң избе-из жайласқан барьерлер арқалы өтийиниң итималлығы ҳәр бир барьер арқалы өтийдің итималлықтарының көбеймесине тең. Сонықтан өтий коэффициенти  $D$  ҳәр бир барьер арқалы өтий коэффициентлері  $D_i$  шамаларының көбеймесине тең

$$\begin{aligned} D = \prod_i D_i &\approx \prod_i \exp \left\{ -\frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m[U(x_i) - E]} \right\} = \\ &= \exp \left\{ -\sum_i \left[ -\frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m[U(x_i) - E]} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.4.52)$$

Бул аңлатпада  $\Delta x_i$  ҳәм  $U(x_i)$  арқалы  $i$  – барьердин кеңлиги менен бийиклиги белгиленген. (2.4.52)-аңлатпада суммалаудан интеграллауға өтсек

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\} \quad (2.4.53)$$

формуласына иие боламыз. Бул аңлатпада  $x_1$  менен  $x_2$  арқалы  $U(x) = E$  шәрти орынланатуғын координаталардың мәнислері белгиленген (2.4.9b сүрет).

**Туннель эфекті.** Бийиклиги бөлекшениң энергиясынан үлкен болған потенциал барьер арқалы бөлекшениң өтийин туннель эфекті атамасын алды (бөлекше барьердин асты менен өтий барысында туннелде өткен сыйқылы болып қозғалады). Туннель эфектиниң таза квантлық эффект екенлигин атап өтемиз. Классикалық бөлекше өзиниң толық энергиясынан бийик болған барьерге келип, бул барьерде шағылысады. Бундай барьер арқалы классикалық бөлекше өте алмайды. Себеби оның кинетикалық энергиясының мәниси нолден киши бола алмайды. Квантлық бөлекше болса бундай барьерден өте алады. Соның менен бирге оның барьер арқалы өтий итималлығының шамасы бөлекшениң массасынан ҳәм потенциал барьердин түринен (яғни  $U(x)$  функциясынан) күшли экспоненциялық ғәррезликке иие. Бөлекше барьер арқалы өткенде оның  $E$  толық энергиясының өзгериске ушырамайтынылығын атап өтемиз.

Туннеллик эффект бир қатар әжмиетли физикалық құбылысларды аңсат түсіндире алады. Олардың қатарына металлардан электронлардың салқын

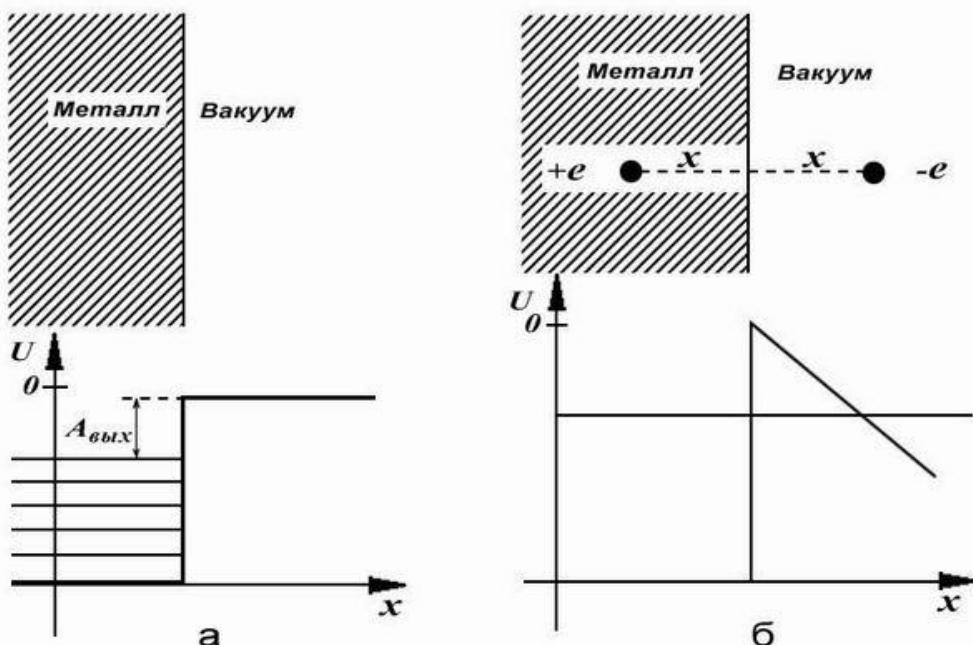
эмиссиясы, ядролардың радиоактивлик а-ыдырауы, потенциаллардың контактлық айырмасы ҳәм басқалар киреди. Соның менен бирге туннель эффекти ҳәзирги заман техникасында көп қолланылып атыр. Мысалы оның тийкарында сканнерлеўши электрон микроскопы дөретилди. Нәтийжеде беттиң физикасы менен техникасында революциялық өзгерислер жүз берди, бул нанотехнологиялардың рајажланыўы менен үлкен перспективаларға ийе бола баслады.

**Металдан электронлардың салқын эмиссиясы.** Электронды металдан сүйрып алғыў ушын оған шамасы  $A_{\text{шығыў}}$  шығыў жұмысына тең қосымша энергия бериўимиз керек. Бул өз гезегинде электронның металда тереңлиги  $U_0 = A_{\text{шығыў}}$  шамасына тең потенциал шуқырда жайласқанлығын билдиреди (2.4.10а сүйрет).

Мейли металлдың бетине жақын аралықта кернеўлиги  $\epsilon$  шамасына тең болған электр майданы пайда етилген болсын. Бул майдан электронның металдан шығыўын тәмийинлейди. Бундай жағдайда металлдың бетинин қасында электронның потенциал энергиясы

$$U(x) = U_0 - eEx = A_{\text{шығыў}} - e\epsilon x \quad (2.4.54)$$

шамасына тең болады. Басқа сөз бенен айтқанда металл-вакуум шегарасында үш мүйешли формаға ийе болған потенциал барьер пайда болады (2.4.10б сүйрет). Бул барьер арқалы электронлардың туннелленийи салқын ямаса автоэлектронлық эмиссия құбылысын түсіндіреди. Салқын ямаса автоэлектронлық эмиссия құбылысы деп металдан электронлардың жүдә төменги температураларда шығыўына айтамыз.



2.4.10-сүйрет.

Бул мәселени қатаң түрде шешиў ушын ушып шығыўшы электронға металл тәрепинен тәсир ететуғын айналық сүйрет күшин де (сила зеркального изображения) есапқа алғыўдың керек екенligин атап өтемиз. Бирақ бундай күшти есапқа алғыў ақырғы нәтийжеге тәсириң тийгизбейди ҳәм есаплаўларды күшли қурамаластырады. Соныңтан сүйрет күшинин потенциал барьердин түрине қосатуғын үлесин биз есапқа алмаймыз.

Классикалық физика шеклеринде салқын эмиссия қубылысын түсіндіриў мүмкін емес. Ҳақыйқатында да электр майданы металдың ишине кирмейди. Соныңтан бундай майдан металдың сыртындағы электронның потенциал энергиясын өзгерте алады. Ал бул жағдай потенциал барьердин пайда болыуын тәмийинләйди ҳәм бундай барьер арқалы электрон өтө алмайды.

Квантлық механиканда болса металдан электронлардың туннеллениң итималлығы үш мүйешли потенциал барьер арқалы өтиў коэффициенти  $D$  ның жәрдеминде анықланады (2.4.10б сүйрет)

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}.$$

Бундай жағдайда мәселе

$$I = \frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx$$

интегралын есаплауға алып келинеди. Бул аңлатпадағы  $U(x)$  шамасы (2.4.54)-аңлатпаның жәрдеминде анықланады, ал интеграллаудың жоқарғы шеги  $U(x_0) = E$  шәртинен анықланады. Интегралап

$$I = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar\varepsilon} (A_{\text{шығыў}} - E)^{3/2}$$

аңлатпасын аламыз.

$$\varepsilon_0 = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} (A_{\text{шығыў}} - E)^{3/2}$$

аңлатпасын киргиземиз. Бул аңлатпадағы  $\varepsilon_0$  мәниси бойынша металлдағы эффектив майданды береди. Бундай жағдайда барьер арқалы электронлардың өтиў коэффициенти

$$D \approx \exp \left( -\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon} \right)$$

түрине енеди. Салқын эмиссия тоғының тығызлығы  $j$  барьер арқалы өтиў коэффициенти  $D$  ға туұры пропорционал. Демек тоқтың тығызлығы электр майданы  $\varepsilon$  ниң функциясы сыпатында былайынша жазылады

$$j = j_0 \exp \left( -\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon} \right).$$

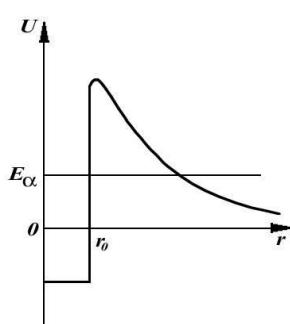
$\varepsilon_0$  шамасының мәнисин бақалаймыз.  $A_{\text{шығыў}} - E \sim 1$  эВ болған жағдай ушын

$$\varepsilon_0 \sim 10^8 \text{ В/м.}$$

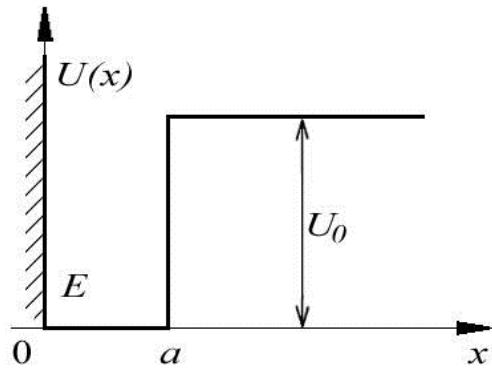
Демек салқын эмиссияның сезилерликтей тоғының металлға тек  $\varepsilon - \varepsilon_0 \sim 10^8$  В/м шамасындағы электр майданын түсиргенде ғана бақланатуғының көремиз.

Электронлардың салқын эмиссиясы металлардың бетлериниң физикалық қәсийеттерин, газлердин адсорбциясын, катализ ҳәм коррозия құбылысларын изертлегендеге кеңиен қолланылады. Салқын эмиссиялы әмиттерлер (автоэлектронлық әмиттерлер) үлкен тығызлыққа ийе  $j$  тоқларды алыў процесслеринде қолланылады. Металлдың бетине жақын орынларда жұдә үлкен болған  $\epsilon$  электр майданын пайда етиў ушын автоэлектронлық әмиттерлерди қызықтырып киши радиусқа ийе бетлер түринде соғады.

**Радиоактивли  $\alpha$ -ыдыраў.** Бөлекшелердин потенциал барьер арқалы өтийине және бир мысал радиоактивли ядролардың  $\alpha$ -ыдыраўы болып табылады. Бундай ыдырауда радиоактивли ядро өзинен  $\alpha$ -бөлекшелерин шығарады.  $\alpha$ -бөлекшеси гелий атомының ядросы болып табылады ҳәм ол еки протоннан ҳәм еки нейтроннан туралы.  $\alpha$ -бөлекшесин шығаратуғын ядроны ана ядро деп атайды.  $\alpha$ -бөлекшесин шығарған ядроның майданындағы усы  $\alpha$ -бөлекшесиниң потенциал энергиясы 4.11-сүйретте көлтирилген.



4.11-сүйрет.



4.12-сүйрет.

$\alpha$ -бөлекше менен ядро арасындағы қашықлық үлкен болғанда олар арасында Кулон ийтерисиүши қуши тәсир етеди ҳәм бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze \cdot 2e}{r}$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада  $Ze$  арқалы  $\alpha$ -бөлекше шығарған ядроның заряды,  $2e$  арқалы  $\alpha$ -бөлекшесиниң заряды белгиленген.  $\alpha$ -бөлекшеси менен оны шығарған ядро арасындағы Кулон қуши ядроның өлшемлери менен салыстырлықтай қашықлықтарға шекем тәсир етеди (яғни  $r_0 \sim 10^{-14} - 10^{-15}$  м аралыққа шекем).  $r \leq r_0$  қашықлықтарында  $\alpha$ -бөлекшелери менен ядро арасында құшлирек болған ядролық тартысыў құшлери тәсир етеди. Ядроның ишинде  $\alpha$ -бөлекшеси потенциал шуқырдың ишинде жайласқан болады ҳәм ол ядродан тек туннель эффекти есабынан шыға алады. Туннелеўдің итималлығын есаплаўлардың нәтийжелери шуқырдың формасынан құшлы ғәрлезли емес. Сонықтан шуқырды туұры мүйешли деп есаплаўға ҳәм оның кеңлиги ядроның радиусы  $r_0$  арқалы анықланады деп есаплаўға болады.

Эксперименталлық изертлеўлердин нәтийжелери  $\alpha$ -ыдыраўдағы потенциал шуқырдың бийиклиги шама менен 20-30 МэВ шамасына тең екенлигин, ал нурландырылған  $\alpha$ -бөлекшелериниң энергияларының мәнислери 5-6 МэВ шамасында екенлигин көрсетеди. Бул шама барьердин бийиклигинен әдеўир киши ҳәм сонықтан  $\alpha$ -бөлекшелери ядро тәрепинен тек туннель эффектиниң салдарынан шығарылады.

Ядро физикасында радиоактивли ыдыраў нызамы белгили. Бул нызам еле ыдырамаған ядролардың санының ўақытқа байланыслы өзгериүин сипатлайды ҳәм

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (2.4.55)$$

түринде жазылады. Бул формулада  $N_0$  арқалы дәслепки ўақыт моментиндеги (яғни  $t = 0$  ўақыт моментиндеги) еле ыдырамаған (еле  $\alpha$ -бөлекшелерин шығармаған) ядролардың саны белгиленген. Ал еле ыдырамаған ядроларды биз жоқарыда ана ядролар деп атаған едик.  $\lambda$  шамасы ыдыраў турақтысы деп аталады ҳәм ядролардың ыдыраў тезлигин сипатлайды.

Ыдыраў турақтысы  $\lambda$  менен  $\alpha$ -бөлекшесиниң потенциал барьер арқалы  $D$  өтий коэффициенти арасындағы байланысты табамыз. Мейли ядроның радиусы  $r_0$  шамасына тең, ал  $\alpha$ -бөлекшесиниң тезлиги  $v$  болсын. Бундай жағдайда  $\alpha$ -бөлекшесиниң потенциал барьердин дийўалына ўақыт бирлигиндеги соқлығысынаның саны  $\frac{v}{2r_0}$  шамасына тең болады. Ҳәр бир соққыдағы туннеллениў итималлығы  $D$  шамасына, ал ядролардың улыўмалық саны  $N(t)$  болғанлықтан,  $t$  дан  $t + dt$  ўақыт моментлерине шекемги  $\alpha$ -бөлекшелерин шығарған ядролардың саны  $dN$  шамасына тең болады ҳәм оның мәнисин

$$dN = -N(t) \frac{v}{2r_0} D dt$$

формуласының жәрдеминде анықтаймыз. Бул формуладағы  $(-)$  белгиси  $dN$  ядролар санының еле ыдырамаған ядролардың есабынан қуалатуғының менен байланыслы.

Екинши тәрептен (2.4.55)-аңлатпаны дифференциаллап

$$dN = -\lambda N(t) dt$$

аңлатпасын аламыз. Бул еки аңлатпаны бир бири менен салыстырып

$$\lambda = \frac{v}{2r_0} D$$

формуласына ийе боламыз.

Демек ыдыраў турақтысының мәниси потенциал барьер арқалы өтий коэффициентине ( $D$  шамасына) туўры пропорционал екен.

## 2-4-4. Шекли тереңликке ийе потенциал шуқырдағы бөлекше

2-4-2 параграфта биз бөлекшениң дийўалларының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырдағы қозғалысын талқыладық. Тереңлиги шекли болған потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысын таллауды биз басқышпа-басқыш алып барамыз ҳәм дәслеп тек бир дийўалының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырды қараймыз (2.4.12-сүүрет). Бундай мәселе әмелий жақтан әхмийетке ийе. Себеби арасында тартылыс күшлери тәсир ететүгін еки бөлекше (буған мысал

ретинде молекуланы пайда етиўши еки атомды қараўға болады) өзинин үлкен түри бойынша биз қарайын деп атырған моделгө жақын.

**Тек бир шексиз бийик дийўалға ийе бир өлшемли шуқыр.**

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_0, & x > a. \end{cases}$$

түриндеги бир өлшемли потенциал шуқырда қозғалыўшы бөлекшени қараймыз.

$x < 0$  болған жағдайда бөлекшениң потенциал энергиясы шексиз үлкен ҳәм сонлықтан оның толқын функциясы  $\psi(x)$  нолге айланады. Сонлықтан бул мәселени шешкенде тийкарғы дыққатты  $x > 0$  областтағы бөлекшениң қозғалысын үйренийгө қаратамыз.

$0 < x < a$  болған областты I, ал  $x > a$  болған областты II арқалы белгилеймиз. Дәслеп бөлекшениң толық энергиясы  $E < U_0$  болған жағдайды изертлеймиз (яғни үлкен бөлекшени потенциал шуқырда жайласқан деп есаптаймыз). I область ушын Шредингер теңлемеси (2.4.6)

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \psi_1(x) = 0, \quad (2.4.56)$$

ал II область ушын

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi_2(x) = 0 \quad (2.4.57)$$

түрине енеди. Белгилеўлер киргиземиз:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad \text{хәм} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}. \quad (2.4.58)$$

Усы аңлатпаларды пайдаланып (2.4.56)- һәм (2.4.57)-аңлатпаларды

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_1(x) = 0, \quad (2.4.59a)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2 \psi_2(x) = 0 \quad (2.4.59b)$$

түрине келтиримиз. (2.4.59)-теңлемелерди шешип  $\psi_1(x)$  һәм  $\psi_2(x)$  функцияларын табамыз

$$\psi_1(x) = A \sin(k_1 x + \alpha), \quad (2.4.60a)$$

$$\psi_2(x) = B e^{k_2 x} + C e^{-k_2 x}. \quad (2.4.60b)$$

Толқын функциялары ушын қойылатуғын шәртлерди пайдаланамыз. Толқын функциясы барлық ўақытта да шекли болыўы керек. Ал (2.4.60b)-аңлатпадағы биринши қосылыўшы  $x \rightarrow \infty$  шегинде шексиз өседи. Сонлықтан  $B$  коэффициентиниң нолге тең болыўын талап етиў керек болады. Буннан  $\psi_2(x) = C e^{-k_2 x}$  теңлемесине ийе боламыз.

Енди шегаралық шәртлерди таллауға өтемиз. Шуқырдың шеп шегарасындағы  $\psi_1(x)$  толқын функциясының үзлиksизлиги жоқарыда биз көрип өткендей  $\psi_1(x) = 0$  теңлигин тәмийинлейди. Буннан  $\alpha = 0$  екенлигине ийе боламыз.  $x = a$  ноқатындағы толқын функцияларын ҳәм оның туғындыларын жалғастырыў шәрти

$$\begin{aligned} A \sin k_1 a &= C e^{-k_2 a}, \\ k_1 A \cos k_1 a &= -k_2 C e^{-k_2 a} \end{aligned} \quad (2.4.61)$$

теңлемелер системасын береди. (2.4.61)-теңлемелердеги биринши теңлемени екиншисине бөлсек

$$\frac{1}{k_1} \operatorname{tg} k_1 a = -\frac{1}{k_2} \quad (2.4.62)$$

қатнасына өтемиз. Бул қатнас болса шуқырдағы бөлекшениң энергия спектрин анықлады.

(2.4.62)-теңлеме трансцендент теңлеме болып табылады. Сонықтан  $E$  энергиясының мәнисин анық түрде есаплаудың мүмкіншилиги жоқ. Усы жағдайға байланыслы (2.4.58)-аңлатпаны есапқа алған (2.4.62)-аңлатпа жәрдемінде бөлекшениң энергиясының спектриниң дискрет екенлигин, яғни шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясының квантланатуғының көрсетиўге болады.

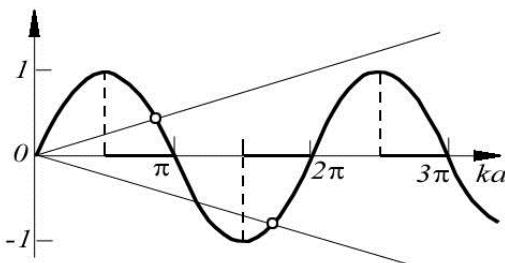
(2.4.62)-трансцендент теңлеме

$$\sin k_1 a = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} k_1 a \quad (2.4.63)$$

түрине аңсат алып келинеди. (2.4.63)-теңлемениң оң ҳәм шеп тәреплерин  $k_1 a$  көбеймесиниң функциялары деп есапладап олардың графиклерин сыйзамыз (2.4.13-сүүрет). Синусоида менен туғының кесилисіү ноқатлары биз излеп атырған толық энергия  $E$  ниң мәнислерине сәйкес келетуғын (2.4.63)-теңлемениң корендерин береди. (2.4.62)-аңлатпаға сәйкес  $\operatorname{tg} k_1 a < 0$  болғанлықтан биз  $k_1 a$  көбейтишисиниң тек

$$\frac{\pi}{2} + \pi m < k_1 a < \pi + \pi m$$

шәртин қанаатландыратуғын мәнислерин ғана есапқа аламыз.  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$  4.13-сүүретте  $k_1 a$  ның мәнислериниң сәйкес областлары абсцисса көшеринде жуўан сыйықтар менен көрсетилген.



2.4.13-сүүрет

Келтирилген графиклер бөлекшениң энергия спектриниң дискрет екенлигин көрсетеди. Потенциал шуқырдың тереңлиги  $U_0$  ҳәм кеңлиги  $a$  қаншама үлкен болса (2.4.63)-теңлемениң оң тәрепине сәйкес келиўши графиктеги туўры сыйықтың қыялышы сонша төмен ҳәм бул туўры синусоидада менен көп санлы кесилисисү ноқатларына ийе болады. Демек потенциал шуқырда соншама көп энергия қәддилери жайласады деген сөз.

Шуқырда ең кеминде энергияның бир қәдди болатуғын шәртті табамыз. Бундай жағдайда (2.4.63)-теңлемениң оң тәрепине сәйкес келиўши туўрының қыялышын анықтайтуғын

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}} < \frac{1}{\pi/2}$$

теңсизлигин қанаатландырыўы керек. Буннан  $U_0a^2$  ушын

$$U_0a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \quad (2.4.64)$$

шәртине ийе боламыз.

Бул аңлатпаны толығырақ таллаймыз. Усы шәрт орынланғанда ғана шуқыр ишиндеги бөлекше ушын Шредингер теңлемеси шешимге ийе болады, яғни шуқырдың ишинде кеминде бир қәдди болады. Бундай жағдайда шуқырдың ишиндеги бөлекшениң байланысқан ҳалы болады деп айтады. (2.4.64)-теңсизликтиң шеп тәрепине тек потенциал шуқырдың параметрлери ғана киреди (оның кеңлиги  $a$  ҳәм тереңлиги  $U_0$ ). Ал биз қарап атырған бөлекшениң типи ушын (яғни оның массасы ушын) теңлемениң оң тәрепи константаға айланады.

Егер потенциал шуқыр жеткиликли дәрежеде терең ямаса жеткиликли дәрежеде кең болмаса (2.4.64)-шәрт орынланбайды. Бундай жағдайда шуқырдағы бөлекше ушын Шредингер теңлемеси шешимге ийе бола алмайды ҳәм усыған сәйкес потенциал шуқырға бирде бир энергия қәдди орналаса алмайды. Физикада усындағы жағдайлар көп ушырасады. Мысалы еки нейтрон ҳәм еки протон арасында ядролық тартысың күшлери тәсир етеди. Бирақ тәбиятта еки протоннан ямаса еки нейтроннан туратуғын байланысқан ҳал ушыраспайды. Себеби бундай бөлекшелердин бир бири менен тәсирлесиүнне сәйкес келетуғын потенциал шуқыр жеткиликли емес тереңликке ҳәм кеңликке ийе.

Протон менен нейтрон арасындағы тәсир етисиң күшиниң шамасы еки протон ямаса еки нейтрон арасындағы тәсир етисиң күшиниң шамасынан азмаз ғана үлкен. Усы азмаз айырма протон менен нейтрон арасындағы байланысқан ҳал – дейтронның пайда болыўы ушын жеткиликли. Протон менен нейтрон арасындағы тәсирлесиүгө сәйкес келетуғын потенциал шуқырда энергияның тек бир қәдди жайласады. Демек дейтрон барлық ўақытта да тийкарғы ҳалда жайласады, оның қозған ҳаллары пүткіллей жоқ.

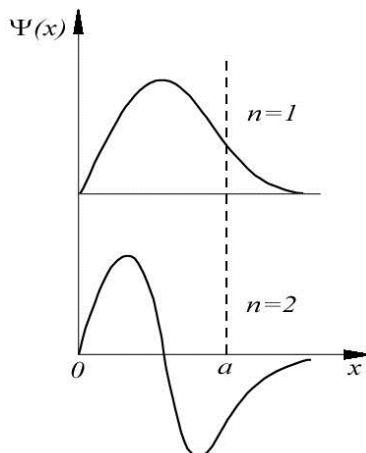
Биз қарап атырған мәселениң толқын функцияларын таллауға қайтып келемиз. Жоқарыда  $x < 0$  болғанда  $\psi(x) \equiv 0$  теңлигиниң орынланатуғыны айтып өтилген еди. И областта, яғни потенциал шуқырда толқын функциясы

$$\psi_1(x) = A \sin k_1 x$$

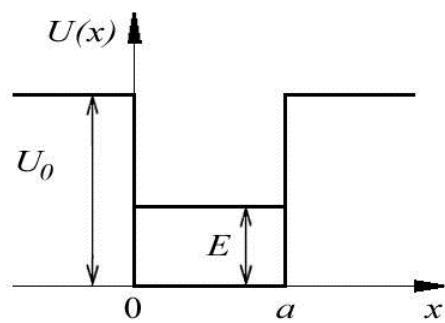
түрине ийе. Бул еки шексиз бийик дийўалға ийе шуқырда толқын функциясының осуилляцияланышы шешимге ийе болатуғынлығын көрсетеди. II областтағы толқын функциясының түри үлкен қызығыштылық пайда етеди

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2 x}.$$

$\psi_2(x)$  толқын функциясы потенциал шуқырдың сыртында нолге тең емес, ал  $x$  қашықтығына байланыслы экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Бул жағдай өз гезегинде бөлекшени табыұдың итималлығының потенциал шуқырдың сыртында да нолге тең болмайтуғынлығын аңғартады (2.4.7-мәселеге қараңыз). А ҳәм  $C$  константалары арасындағы қатнас нормировка шәртиниң жәрдеминде анықланады. Бул мәселе ушын толқын функцияларының сапалық түрлері 4.20-сүйретте келтирилген.



4.14-сүйрет. (2.4.20-



4.15-сүйрет. (2.4.21)

Енди  $E > U_0$  болған жағдайды қараймыз. I ҳәм II областлар ушын Шредингер теңлемесин сәйкес

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0 \quad (2.4.65a)$$

хәм

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2\psi_2(x) = 0 \quad (2.4.65b)$$

түринде жазамыз. Бул аңлатпаларда  $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  ҳәм  $k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$ .

Шуқырдың шегарасында  $\psi_1(0) = 0$  екенлигин есапқа алғанда (2.4.65a) теңлемесиниң шешими

$$\psi_1(x) = A' \sin k_1 x = \frac{A'}{2i} (e^{ik_1 x} - e^{-ik_1 x}) \quad (2.4.66)$$

түрине ийе. (2.4.65b) теңлемесиниң шешимин белгілайынша жазамыз:

$$\psi_2(x) = D \sin(k_2 x + \varphi) = B' e^{ik_2 x} - C' e^{-ik_2 x}. \quad (2.4.67)$$

$x = a$  ноқатында функцияларды ҳәм олардың туғындыларын жалғастырыў операциясын орынласақ төмендегидей теңлемелер системасына өтемиз:

$$\begin{aligned} \frac{A'}{2i}(e^{ik_1a} - e^{-ik_1a}) &= B'e^{ik_2a} - C'e^{-ik_2a}, \\ \frac{A'}{2i}ik_1(e^{ik_1a} - e^{-ik_1a}) &= ik_2(B'e^{ik_2a} - C'e^{-ik_2a}). \end{aligned}$$

Бул теңлемелер системасын  $B'$  ҳәм  $C'$  амплитудаларына қарата шешсек, онда олардың  $A'$  амплитуда арқалы аңлатпаларын аламыз:

$$\begin{aligned} B' &= \frac{A'}{4i}e^{-ik_2a} \left[ e^{ik_1a} \left( \frac{k_1}{k_2} + 1 \right) - e^{-ik_1a} \left( \frac{k_1}{k_2} - 1 \right) \right], \\ C' &= \frac{A'}{4i}e^{ik_2a} \left[ e^{ik_1a} \left( \frac{k_1}{k_2} - 1 \right) - e^{-ik_1a} \left( \frac{k_1}{k_2} + 1 \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.4.68)$$

(2.4.68)-аңлатпалардың  $k_1$  менен  $k_2$  ниң қәлеген мәнислериндеги (яғни үзлисиз спектрге ийе болатуғының) анықтайтуғынлығын атап өтемиз.

$E > U_0$ . Бул  $E > U_0$  шәрти орынланғанда бөлекшениң энергиясының үзлисиз спектрге ийе болатуғының көрсетеди.

(2.4.66)- ҳәм (2.4.67)-толқын функцияларын таллаймыз. Олардың ҳәр қайсысы де Бройльдин еки толқынының қосындысы болып табылады:  $e^{ikx}$  толқыны шеп тәрептен оң тәрепке қарай, ал  $e^{-ikx}$  толқыны оң тәрептен шеп тәрепке қарай.  $+\infty$  тен келген толқынның (2.4.67-аңлатпадағы екинши қосылыұшы) бир бөлеги  $x = a$  шуқырдың шегарасында шағылысады ҳәм (2.4.66-аңлатпадағы екинши қосылыұшы). Буннан кейин толқын  $x = 0$  дийүалында шағылысады (2.4.66-аңлатпадағы бириңи қосылыұшы) ҳәм шуқырдың  $x = a$  шегарасында қайтадан сыйнады. Усының нәтийжесинде (2.4.57)-аңлатпаның бириңи қосылыұшының үлес қосады ҳәм шексизликке кетеди.

**Шекли тереңликтікке ийе туұры мүйешли потенциал шуқыр.** Шекли тереңликтікке ийе туұры мүйешли потенциал шуқырдың ишинде жайласқан бөлекшени қараймыз (2.4.14-сүйрет). Бундай модель атомның әтирапындағы электронның қасындағы электронның қозғалысын сапалық түрде тәрийиплей алады. Соныңтан атом физикасы менен қатты денелер физикасында кеңнен қолланылады.

Мейли бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0, \text{ I область} \\ 0, & 0 < x < a, \text{ II область} \\ U_0, & x > a, \text{ III область.} \end{cases}$$

түрине ийе болсын.

Дәслеп  $E < U_0$  болған жағдайды қараймыз (яғни бөлекше шуқырдың ишинде жайласқан деген сөз). I ҳәм III областлар ушын (потенциал шуқырдан сыртта) Шредингер теңлемесин былайынша жазамыз

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi_{1,3} = 0$$

$k_1 = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$  белгилеүин қабыл етемиз ҳәм

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} - k_1^2 \psi_{1,3} = 0$$

теңлемесин аламыз.

Бул теңлеме

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x}, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{k_1 x} + B_3 e^{-k_1 x}\end{aligned}$$

түриндеги шешимлерге ийе болады. Толқын функциясының шекли болыўы ушын  $B_1 = 0$  ҳәм  $A_3 = 0$  болыўы шәрт.

II областта, яғни потенциал шуқырдың ишинде Шредингер теңлемеси

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_2 = 0$$

түрине ийе болады ҳәм  $\psi_2(x) = C \sin(k_2 x + \alpha)$  осцилляцияланыўшы шешимге ийе.

Бул формулада  $k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ .

Солай етип бул мәселе ушын бөлекшениң толқын функциялары төмендегидей түрлерге ийе болады:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{k_1 x}, \\ \psi_2(x) &= C \sin(k_2 x + \alpha), \\ \psi_3(x) &= B_3 e^{-k_1 x}.\end{aligned}\tag{2.4.69}$$

$x = 0$  ҳәм  $x = a$  ноқатларында толқын функцияларын ҳәм олардың тууындыларын жалғастырыў барысында

$$\begin{aligned}\operatorname{tg} \alpha &= \frac{k_2}{k_1}, \\ \operatorname{tg}(k_2 a + \alpha) &= -\frac{k_2}{k_1}\end{aligned}$$

еки аңлатпасын аламыз. Оларды

$$\begin{aligned}\sin \alpha &= \frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}}, \\ \sin(k_2 a + \alpha) &= -\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}}\end{aligned}$$

түрине алып келиў қыйын емес. Бул еки аңлатпадан  $\alpha$  ны жоғалтып

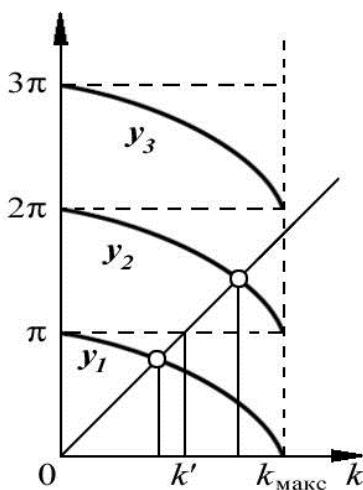
$$k_2 a = \pi n - 2 \arcsin \left( \frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.70)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпа болса шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергия спектрин анықлады.  $n$  нин терис мәнислери ямаса оның  $n = 0$  болған мәниси мәселениң шәртін қанаатландырмайды. Себеби (2.4.70)-аңлатпаның шеп тәрепи терис мәниске ийе бола алмайды.

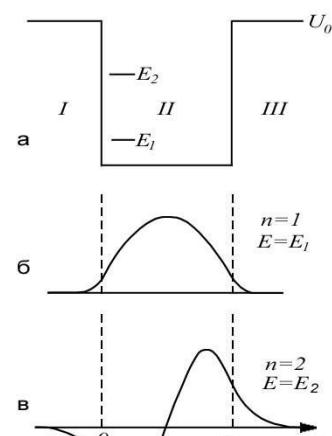
$\arcsin$  функциясының аргументиниң мәниси 1 ден үлкен бола алмайды. Соныңтан

$$\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}} \leq 1$$

Хәм  $k_2$  шамасының мәниси  $k_{2max} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0}$  шамасы менен шекленген.



2.4.16-сүйрет.



2.4.17-сүйрет.

Бул жағдайда да графикалық усыллардың жәрдеминде де шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясының квантланған, яғни (2.4.70)-аңлатпаның жәрдеминде анықланған энергия спектриниң дискрет екенligин көрсетемиз. Буның ушын (2.4.70)-теңлемениң шеп хәм оң тәреплериниң  $k_2$  шамасынан байланысының графиклерин сыйзамыз. Шеп тәрепиниң графиги  $y = k_2 a$  туұры сыйығы болып табылады. Оның қыялығы шуқырдың кеңлиги  $a$  ның өсиүи менен өседи. (2.4.70)-теңлемениң шеп тәрийипиниң  $n = 1, 2, 3$  мәнислери ушын сыйылған графиклері  $y_1, y_2$  ҳәм  $y_3$  иймекликтери менен берилген.  $y = k_2 a$  туұры сыйығы менен  $y_i$  иймеклериниң кесилисіү ноқатлары (2.4.70)-теңлемениң коренлери болып табылады. Демек  $k_2$  шамасының мәнислери, яғни оның менен байланыслы болған  $E$  энергияның мәнислериниң спектри дискрет болып шығады. Шуқырдың кеңлиги  $a$  қаншама үлкен болса, яғни  $y = k_2 a$  туұры сыйығы тик болса, онда ол  $y_i$  иймекликтери менен көп ноқатта кесилиседи. Ҳәр бир кесилисіү ноқаты энергияның белгили бир қәддіне сәйкес келеди.  $k_{2max}a < \pi n$  шәрти орынланса шуқырда  $n$  дана энергия қәдди болады. Демек бул жағдайда бөлекшениң  $n$  дана байланысқан ҳалы жүзеге келеди деген сөз.

Шуқырдың тереңлиги  $U_0$  киширейгенде  $k_{2max}$  шамасы да, усыған сәйкес шуқырдағы энергия қәддилери саны да киширейеди.  $k_{2max} < \pi/a$  шәрти орынланғанда, яғни

$$U_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

шәрти орынланғанда шуқырда тек бир энергия қәдди қалады. Тереңлиги шекли болған туұры мүйешли потенциал шуқырда ең кеминде бир энергия қәддинин, яғни бир байланысқан ҳалдың болатуғының атап өтемиз.

Шуқырдың тереңлиги шексиз үлкейгенде (яғни  $U_0 \rightarrow \infty$  шәрти орынланғанда) (2.4.70) энергия спектринин шексиз терең потенциал шуқыр ушын алынған (яғни дийўаллары шексиз бийик болған) (2.4.16)-спектрге өтетуғынына аңсат көз жеткериүге болады.

Биз қарап атырған мәселедеги (2.4.69)-толқын функцияларының сапалық түри 4.17-сүретте көлтирилген. Потенциал шуқырдың ишинде толқын функциялары синусоида түріне ийе, ал шуқырдан сыртта экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Үлкен энергияға ийе ҳаллар ушын (яғни  $U_0 - E$  айырмасы киши болғанда) толқын функциялары шуқырдың шетлеринде үлкен мәнислерге ийе болады ҳәм шуқырдан қашықласқанда әстелик пenen киширейеди.

Енди бөлекшениң энергиясы үлкен, яғни  $E > U_0$  шәрти орынланатуғын жағдайды қараймыз. (2.4.6) Шредингер теңлемеси I, II һәм III областларда тәмендегидей шешимлерге ийе болады:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{i\tilde{k}_1 x} + B_1 e^{-i\tilde{k}_1 x}, \quad x < a, \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad 0 < x < a, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{i\tilde{k}_1 x} + B_3 e^{-i\tilde{k}_1 x}, \quad x > a.\end{aligned}\tag{2.4.71}$$

Бул аңлатпада

$$\tilde{k}_1 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.\tag{2.4.72}$$

(2.4.71)-аңлатпаға сәйкес бул толқын функцияларының ҳәр қайсысы еки де Бройль толқынының қосындысынан турады: биреүи  $+x$  бағытында, ал екиншиси оған қарама-қарсы бағытта қозғалады. Анықлық ушын бөлекше шуқырға  $x$  тың терис мәнислери тәрептен жақынласады деп есаптайық (бул бөлекшениң шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалатуғының сәйкес келеди). Бундай жағдайда  $\psi_3(x)$  ушын жазылған аңлатпадағы екинши қосылыўдың болмауы керек. Себеби бул қосылыўшы бөлекшениң  $+\infty$  тен шуқырға қарай қозғалыўына, яғни оң тәрептен шеп тәрепке қарай қозғалыўына сәйкес келеди. Демек  $B_3$  коэффициентин нолге тең деп есаплаў керек.

$\psi_1(x)$  функциясындағы биринши қосылыўшы шуқырға  $-\infty$  тен келип түсетуғын толқынға, екиншии шуқырда шағылысқан толқынға сәйкес келеди.  $\psi_2(x)$  функциясындағы биринши қосылыўшы  $A_2 e^{ik_2 x}$  толқыны  $x = 0$  шегарасында шағылысқан толқынды береди.  $\psi_3(x)$  толқын функциясы болса бир қосылыўшыға ийе ҳәм ол өтиўши толқынға сәйкес келеди. Бул мәселеде де келип түсиўши толқынның амплитудасын 1 ге тең деп есаплаймыз (яғни  $A_1 = 1$ ).

$x = 0$  һәм  $x = a$  ноқатларында толқын функцияларын ҳәм олардың тууындыларын жалғастырыў шәртлери тәмендегидей теңлемелер системаларына алып келеди

$$1 + B_1 = A_2 + B_2,$$

$$\begin{aligned} i\tilde{k}_1 - i\tilde{k}_1 B_1 &= ik_2 A_2 - ik_2 B_2, \\ A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} &= A_3 e^{i\tilde{k}_1 a}, \\ ik_2 A_2 e^{ik_2 a} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 a} &= ik_1 A_3 e^{i\tilde{k}_1 a}. \end{aligned}$$

Бул алгебралық теңлемелерди шешиў жолы менен  $B_1, A_2, B_2$  ҳәм  $A_3$  коэффициентлерин табамыз. Бул теңлемелер системасы  $\tilde{k}_1$  менен  $k_2$  параметрлериниң қәлеген мәнисинде шешимге ийе болғанлықтан (яғни энергия  $E$  ниң қәлеген мәнислеринде шешимге ийе болғанлықтан) бөлекше үзлиksiz энергия спектрине ийе болады деген жуўмаққа келемиз.

Өткен толқынның амплитудасы  $A_3$  ушын төмөндегидей аңлатпа аламыз:

$$A_3 = \frac{4\tilde{k}_1 k_2 e^{i\tilde{k}_1 a}}{(\tilde{k}_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (\tilde{k}_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}}.$$

Бөлекшениң шуқырдың үсти менен өтийи итималлығын характерлейтуғын  $D$  өтийи коэффициенти (2.4.37)-аңлатпаның жәрдемінде есапланады. Келип түсиўши ҳәм өткен толқынлар ушын итималлық ағысы тығызлығы векторы (2.4.36)-, (2.4.37)- ҳәм (2.4.70)-аңлатпаларға сәйкес

$$|\vec{J}_{\text{к.т}}| = \frac{\hbar\tilde{k}_1}{m}, \quad |\vec{J}_{\text{өтийши}}| = \frac{\hbar\tilde{k}_1}{m} |A_3|^2$$

түрине ийе болады. Солай етип

$$D = |A_3|^2 = \left| \frac{4\tilde{k}_1 k_2 e^{i\tilde{k}_1 a}}{(\tilde{k}_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (\tilde{k}_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}} \right|^2 \quad (2.4.73)$$

формуласына ийе боламыз. (2.4.73)-аңлатпаға (2.4.72)-аңлатпадан  $\tilde{k}_1$  менен  $k_2$  шамаларының мәнислерин қойсақ

$$D = \left[ 1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \right]^{-1} \quad (2.4.74)$$

формуласын аламыз. (4/74)-аңлатпадан өтийи коэффициенти  $D$  ның бөлекшениң энергиясы  $E$  менен потенциал шуқырдың теренлиги  $U_0$  арасындағы айырмаға байланыслы екенлиги көринип тур.  $E - U_0$  айырмасы улыўма жағдайларда 1 ден киши. Бул жағдай ҳәтте  $E > U_0$  болған ситуацияларда да бөлекшениң потенциал шуқырдағы шағылышының итималлығының нолге тең емес екенлигин аңғартады. Классикалық физикада пүткиллей жоқ бундай құбылыс бөлекшеде толқынлық қәсийетлердин бар болыўы менен түсіндіриледи.

$\sin^2 k_2 a = 0$  болғанда өтийи коэффициенти  $D$  бирге тең болады. Бундай жағдайдада бөлекше шуқырдың шегараларында шағылышпайды. Бул шәрт  $k_2 a = \pi n$  болғанда, яғни бөлекшениң энергиясы

$$E = \frac{\pi^2 n^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.75)$$

шамаларына тең болған жағдайларда орынланады.

Жоқарыда келтирилген таллау 2-бапта келтирилген Рамзауэр тәжирийбесин квантлық механика түсіндіре алады. Бул тәжирийбеде инерт газы атомларының энергиясы белгили бир мәнислерге ийе болған электронлар ушын мөлдир екенлигин көрсетті. Рамзауэр тәжирийбесиниң нәтийжелерин үш өлшемли потенциал шуқыр областындағы электронның қозғалысын қарап болғаннан кейин толығырақ түсіндіриўге болатуғынлығы сөзсиз. Бирақ бир өлшемли мәселени шешкенде алынған нәтийжелер де Рамзауэр тәжирийбесиниң нәтийжелерин тек сапалық жақтан емес, ал санлық жақтан да түсіндіриў мүмкіншилигине ийе.

$k_2 a = \pi n$  шәртин белгилі болады

$$2a = \lambda_{db} n. \quad (2.4.75)$$

(2.4.75)-аңлатпада  $\lambda_{db}$  арқалы шуқырдың ишиндең бөлекшениң де Бройль толқын узынлығы белгиленген. Бул шәрт шуқырдың еки шегарасында шағылысқан толқынлардың интерференциясының салдарынан толқынлардың бир бириң сөндіриўине сәйкес келеди. Толқын оптикасында бақланатуғын тап усындау күбылышты оптиканы жақтыландырыў деп аталады.

**4.8-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше бир өлшемли, дийўалларының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырда жайласқан. (2.4.12-сүйрет). Шуқырдың тереңлиги  $U_0$ , ал кеңлиги  $a$  шамасына тең. Бөлекшеде тек бир  $E = \frac{U_0}{2}$  шамасына тең энергияның қәдди бар деп есаплад мыналарды табыңыз:

- а) бундай шуқырдағы  $U_0 a^2$  шамасын;
- б) бөлекшениң координатасының ең итимал болған мәнисин (оны  $x_{\text{ең итимал}}$  деп белгилеймиз);
- в)  $x > a$  обласында бөлекшени табыўдың итималлығын.

**Шешими:**  $E < U_0$  теңсизлиги орынланғанда бөлекшениң энергиясының мүмкін болған мәнислерин анықтайтуғын шәрт (2.4.63)-аңлатпа түринде болады

$$\sin k_1 a = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} k_1 a.$$

Бул аңлатпада  $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ . Бул аңлатпаға  $E = \frac{U_0}{2}$  мәнисин қойсақ

$$\sin \frac{a\sqrt{mU_0}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

аңлатпасын аламыз. Шуқырда тек бир энергия қәдди жайласатуғын болғанлықтан синустың аргументиниң мәниси  $\pi/2$ ден  $\pi$  ге шекемги шеклер ишинде жайласқан болыўы керек. (2.4.63-формуладан кейинги таллауды қараңыз). Демек теңлемениң шешими

$$\frac{a\sqrt{mU_0}}{\hbar} = \frac{3\pi}{4}$$

түринде болады. Буннан шуқырдың тереңлиги менен кеңлигиниң

$$a^2 U_0 = \frac{9}{16} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m}$$

шәртин қанаатландырыуының керек екенлигин көремиз. Енди бөлекшениң координатасының ең итимал болған  $x_{\text{ең итимал}}$  мәнисин табамыз.

Бөлекшени шуқырдың ишинде табыudyның итималлығының тығыздығы толқын функциясының модулинин квадратының жәрдеминде анықланатуғынлығын билемиз. Бул шаманы  $|\psi(x)|^2$  арқалы белгилеймиз. Шуқырдың ишинде (2.4.60а аңлатпаға қараңыз)  $|\psi(x)|^2 \sim \sin^2 k_1 x$  болғанлықтан, экстремум мәселесин шешиү арқалы

$$\frac{d|\psi(x)|^2}{dx} \sim \sin 2k_1 x = 0$$

теңлемесин аламыз. Буннан  $2k_1 x_{\text{ең итимал}} = \pi m$  теңлигине ийе боламыз (бул аңлатпада  $m = 1, 2, 3, \dots$ ).  $k_1 a < \pi$  теңсизлигинен алынған шешимде тек  $m = 1$  мәнисин ғана қалдырыуымыз керек болады. Солай етип

$$x_{\text{ең итимал}} = \frac{\pi}{2k_1} = \frac{\pi \hbar}{2\sqrt{mU_0}}.$$

$a^2$  пенен  $U_0$  арасындағы байланысты есапқа алсақ

$$x_{\text{ең итимал}} = \frac{\pi \hbar}{2\sqrt{m \frac{9}{16} \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}}} = \frac{2}{3} a$$

түриндеги ең ақырғы аңлатпаны аламыз.

Енди бөлекшени  $x > a$  областында табыудың итималлығын табамыз.  $P_1$  ҳәм  $P_2$  арқалы бөлекшени сәйкес шуқырдың ишинде ҳәм сыртында табыудың итималлығын белгилейик. (2.4.60а) ҳәм (2.4.60б) толқын функцияларының түрлерин есапқа алсақ

$$P_1 = \int_0^a A^2 \sin^2 k_1 x \, dx, \quad P_2 = \int_a^\infty C^2 e^{-2k_2 x} \, dx$$

формулаларын аламыз. Бул жерде  $k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} = k_1 = \frac{3\pi}{4a}$ .

$A$  ҳәм  $C$  амплитудалары арасындағы байланысты  $x = a$  ноқатында толқын функцияларын жалғастырыу шәртинен аламыз

$$A \sin k_1 a = C e^{-k_2 a}.$$

$k_1 = \frac{3\pi}{4a} = k_2$  екенлигин ҳәм  $\sin k_1 a = \frac{\sqrt{2}}{2}$  екенлигин есапқа алсақ, онда

$$\frac{A}{C} = \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}}}{\frac{\sqrt{2}}{2}} = \sqrt{2} e^{-\frac{3\pi}{4}}$$

аңлатпасына ийе боламыз.  $P_1$  ҳәм  $P_2$  итималлықларының қатнасы

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{A^2}{C^2} \cdot \frac{\int_0^a \sin^2 \frac{3\pi}{4a} x dx}{\int_a^\infty e^{-\frac{3\pi}{2a}x} dx} = 2e^{-\frac{3\pi}{2}} \frac{a(3\pi + 2)}{6\pi \frac{2a}{3\pi} e^{-\frac{3\pi}{2}}} = \frac{3\pi + 2}{2}$$

шамасына тең болып шығады.  $P_1 + P_2 = 1$  екенлигин есапқа алсақ, онда  $P_2$  ушын

$$P_2 = \frac{2}{3\pi + 4} = 0,149$$

шамасына ийе боламыз. Бул алынған нәтийіже  $\sim 15\%$  шамасына тең жеткилики дәрежедеги итималлық пенен бөлекше потенциал шуқырдың сыртында бола алады деген жүймекта аңғартады.

**4.9-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше тереңлиги  $U_0$  болған туұры мүйешли потенциал шуқырға шептен оң тәрепке қарай келип түседи (2.4.15-сүйрет). Бөлекшениң толық энергиясы  $E > U_0$  белгили деп есаплада бөлекшениң шуқырдан шағылысың коэффициенти максималлық мәниске ийе болатуғында шуқырдың кеңлиги  $a$  ның мәнисин есаплаңыз.

Шешими: Потенциал шуқырдағы бөлекшениң шағылысының квантлық эффект болып табылады. Классикалық бөлекше шуқырда шағылыспайды. Шуқыр областында оның кинетикалық энергиясы менен тезлиги өседи. Толқынның қәлелеген тосқынлықтан шағылысатуғынлығы сыйқылдық квантлық бөлекше толқынлық қәсийетке ийе болғанлықтан шуқырда шағылысады.

$R$  шағылысың коэффициенти менен  $D$  өтиў коэффициенти бир бири менен  $R = 1 - D$  қатнасы менен байланысқан болғанлықтан шағылысыңдың максимумы өтиў коэффициенти  $D$  минималлық мәниске ийе болғанда бақланады. (2.4.74)-аңлатпаға сәйкес өтиў коэффициенти  $D$  мынадай түрге ийе болады

$$D = \left[ 1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \right]^{-1}$$

Бул аңлатпада  $k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ . Шуқырдың кеңлиги  $a$  шамасының ҳәр қандай мәнислеридеги  $D$  ның мимимумы  $|\sin^2 k_2 a| = 1$  болған жағдайда орын алады. Буны былайынша жазамыз

$$k_2 a = (2m + 1) \frac{\pi}{2}, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Буннан бөлекшениң шағылысының максималлық болатуғын шуқырдың кеңлиги  $a$  ны табамыз

$$a = \frac{(2m + 1)\pi\hbar}{\sqrt{8mE}}.$$

Бул шәртти былайынша көширип жазыўға болатуғынлығын атап өтемиз

$$a = \frac{2m + 1}{4} \lambda_{db}.$$

Бул аңлатпада  $\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}$  арқалы шуқырдағы бөлекшениң де Бройль толқыны узынлығы белгиленген.

## 2-4-5. Квантлық гармоникалық осциллятор

Гармоникалық осциллятор деп гармоникалық тербеле алатуғын системаға айтады. Физикада гармоникалық осциллятор модели әсиресе системалардың орнықлы орны әтирапындағы киши тербелислерин изертлегендегі әхмийетли орынды ийелейді. Бундай тербелислерге мысал ретинде қатты денелердеги, молекулалардағы атомлардың тербелислерин көлтириў мүмкін.

$x$  көшери бойлап квазисерпимли  $F = -kx$  қүшиниң тәсиринде жүзеге келетуғын бир өлшемли гармоникалық осцилляторды қараймыз. Бундай осциллятордың потенциал энергиясы

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \quad (2.4.77)$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  арқалы классикалық гармоникалық осциллятордың меншикли тербелис жийилиги белгиленген.

Солай етип гармоникалық осциллятордың квантлық механикалық мәселеси бөлекшениң (2.4.77)-параболалық потенциал шуқырдағы қозғалысы мәселесине алыш келинеди.

Дәслеп классикалық гармоникалық осциллятордың қәсийетлерин қарап өтемиз. Мейли толық энергиясы  $E$  болған бөлекше (2.4.77) күш майданында тербелсін (2.4.18-сүйрет). 2.4.18-сүйреттеги  $a_0$  ҳәм  $-a_0$  ноқаттарында бөлекшениң толық энергиясы потенциал энергияға ийе болады [ $\text{яғни } E = U(x)$ ] ҳәм сонлықтан бул ноқаттар бурылыштың ноқаттары да болып табылады. Бөлекше потенциал шуқырдың ишинде оның дийүаллары арасындағы  $[-a_0, a_0]$  кесіндисінде тербелмелі түрде қозғалады. Оның шеклеринен бөлекше шығып кете алмайды. Тербелис амплитудасы  $a_0$  ның мәниси  $a_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}$  формуласының жәрдемінде анықланады.

Квантлық механиканда гармоникалық осциллятор ҳаққындағы мәселени шешкенде (2.4.77)-потенциал энергиясы қойылған (2.4.6)-Шредингер теңлемесин шешишіү керек болады

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right] \psi = 0, \quad -\infty < x < +\infty. \quad (2.4.78)$$

Төмендегидей шамаларды киргиземиз

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega_0} \text{ ҳәм } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \quad (2.4.79)$$

және  $\xi = \frac{x}{x_0}$  бирликлери жоқ жаңа өзгериўшиге өтсек (2.4.78)-аңлатпаны

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [\eta - \xi^2] \psi = 0 \quad (2.4.80)$$

түрине алып келемиз. Таллаўлар (2.4.80)-теңлемениң шешимлериниң  $\eta$  шамасының барлық мәнислеринде емес, ал

$$\eta = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

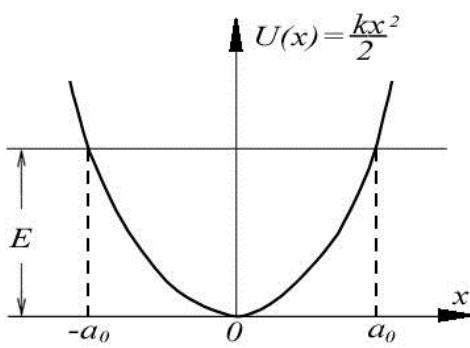
мәнислеринде ғана ұзлиksiz ҳәм шекли болатуғынлығын көрсетеди.

(2.4.79)-аңлатпаға сәйкес осциллятордың энергиясы болған  $E$  шамасын  $\eta$  арқалы аңғартсақ, онда

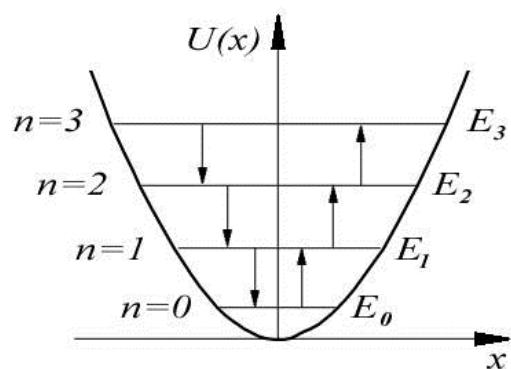
$$E_n = \frac{\hbar\omega_0}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.81)$$

аңлатпасына ииे боламыз. Бул формула гармоникалық осциллятордың энергиясының квантланыў нызамын анықтайты. Биз бул жерде гармоникалық осциллятордың энергиясының қәддилериниң эквидистанттық екенлигин көремиз (яғни бир бириңен бирдей  $\Delta E = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$  қашықтықтарында жайласады). Туұры мүйешли потенциал шуқырда жайласқан бөлекше ушын биз басқаша нәтийже алғанлығымызды атап өтемиз (2.4.19-сүйрет).

(2.4.81)-спектрдиң және бир әхмийетли өзгешелиги ноллик тербелислер деп аталатуғын тербелислердин бар екенлигинде. Оның энергиясы  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$  шамасына тең ҳәм  $n = 0$  болған ҳал ушын алынады. Гармоникалық осциллятордың нолге тең емес минималлық энергиясының болыуы барлық кванттық системалар ушын тән ҳәм анықсызлық қатнасларының нәтийжеси болып табылады. Ҳақыйқый кванттық системаларнда, мысалы кристалларда бундай тербелислердин абсолют нол температурасына жүдә жақын температурауда да сақланатуғынлығын көп санлы тәжирийбелер көрсетеди. Абсолют нол температурада жыллылық тербелислериниң толық сөниүі керек.



2.4.18-сүйрет.



2.4.19-сүйрет.

Ноллик тербелислер физикада оғада ұлken орын ийелейди. Мысалы нормал басымларда сүйық гелий абсолют нол температурада да кристалланбайды. Ноллик тербелислердин бар екенлигин көп санлы тәжирийбелер дәлиллейді.

Ноллик тербелислериниң энергиясы  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$  шамасының мәнисиниң қандай болатуғынлығын анықсызлық қатнаслары тийкарында бағалайтық (басқа сөз бенен айтқанда анықсызлық қатнасларының талаплары бойынша ноллик энергияның мәнисиниң қандай болатуғынлығын көрейик).

Гармоникалық осциллятор  $x = x_0 \cos \omega_0 t$  нызамы бойынша тербелетуғын болсын. Координата басын гармоникалық осциллятордың тең салмақтық аўжалы

орынланатуғын ноқатта жайластырамыз. Бундай жағдайда координатаның анықсызлығы  $\Delta x$

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2}} = \sqrt{a_0^2 \overline{\cos^2 \omega_0 t}} = \sqrt{\frac{1}{2} a_0^2}$$

шамасына тең болады. Тербелислер амплитудасы  $a_0$  энергия  $E$  менен  $E = \frac{1}{2} m a_0^2 \omega_0^2$  аңлатпасы арқалы байланысқан. Соныңтан

$$\Delta x = \sqrt{\frac{E}{m \omega_0^2}}.$$

Тап сол сыйқы импульстиң анықсызлығы ушын төмендеги аңлатпаға ийе боламыз

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2}} = \sqrt{m^2 a_0^2 \omega_0^2 \overline{\sin^2 \omega_0 t}} = \sqrt{\frac{1}{2} m^2 a_0^2 \omega_0^2} = \sqrt{m E}.$$

$\Delta x$  пенен  $\Delta p$  шамаларын  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  анықсызлық қатнасына қойсақ, онда

$$E \geq \frac{\hbar \omega_0}{2}$$

шәрттин аламыз. Соның менен бирге биз жоқарыда алған гармоникалық осциллятордың минималлық энергиясы  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$  шамасына тең еди.

Гармоникалық осциллятордың энергия қәддилериниң эквидистантлығы (2.4.83) биринши рет қарағанда осциллятордың  $\omega = \Delta n \cdot \omega_0$  жийилигиндеги нурларды шығаратуғынлығын ҳәм жутатуғынлығын көрсетеди. Бул аңлатпада  $\Delta n$  арқалы осциллятордың дәслепки ҳәм соңғы қәддилери арасындағы айырма белгиленген. Бирақ бул дұрыс емес. Бул курстың шеклеринен шығып кететуғын дәл есаплаўлар гармоникалық осциллятор тәрепинен электромагнит нурларды жутыў менен шығарыўда тек қоңылас қәддилер арасындағы өтиўлердин мүмкін екенлигин көрсетеди, яғни

$$\Delta n = \pm 1. \quad (2.4.82)$$

Системаның бир ҳалдан екинши ҳалға өткендеги квантлық санларның өзгериүйн анықлайтуғын шәртлерди таңлау қағыйдалары деп атайды. Солай етип гармоникалық осциллятор тәрепинен электромагнит нурларын шығарыў ҳәм жутыўды характерлейтуғын таңлау қағыйдасы (2.4.82)-аңлатпа болып табылады.

Енди гармоникалық осциллятордың толқын функцияларын таллауға өтемиз. Өзгериүши коэффициентлерге ийе дифференциаллық теңлемелер теориясында (2.4.80) теңлемениң шешимлериниң мына түрге ийе болатуғынлығы көрсетиледи:

$$\psi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.83)$$

Бул аңлатпада  $H_n(\xi)$  арқалы  $n$ -тәртипли Чебышев-Эрмит полиномы белгиленген. Ол төмөндеги формула бойынша есапланады:

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (2.4.84)$$

Бундай полиномлар ушын

$$H_{n+1}(\xi) + 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) = 0$$

рекуррентли аңлатпаның дурыс екенлигин атап өтөмиз. Бул рекуррентли аңлатпа  $H_0(\xi) \equiv 1$  екенлиги тийкарында барлық  $n$  лер ушын  $H_n(\xi)$  шамаларының мәнислерин анықлауға мүмкіншилик береди. Мысалы

$$\begin{aligned} H_2(\xi) &= 2\xi H_1(\xi) - 2H_0(\xi) = 4\xi^2 - 2. \\ H_3(\xi) &= 2\xi H_2(\xi) - 4H_1(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \end{aligned}$$

хәм тағы басқалар. (2.4.83) тиң толқын функциялары ортонормировкаланған, яғни

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{mn}$$

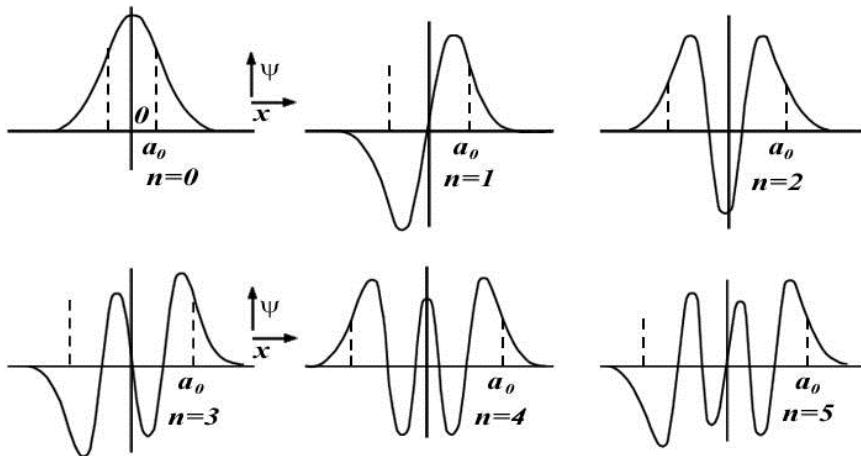
шәртин қанаатландырады. Бул аңлатпада  $\delta_{mn}$  арқалы (2.4.18) Кронекер символы белгиленген.

Гармоникалық осциллятордың биринши үш энергия қәдди ушын толқын функцияларын келтиремиз

$$\begin{aligned} n = 0, \quad \psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \\ n = 1, \quad \psi_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{2x_0 \sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \\ n = 2, \quad \psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{8x_0 \sqrt{\pi}}} \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right). \end{aligned} \quad (2.4.85)$$

$n$  квантлық санның 0 ден 5 ке шекемги мәнислеридеги толқын функцияларының графилери 2.4.20-сүйретте келтирилген.  $[-a_0, a_0]$  кесиндиши классикалық осциллятор тербелетуғын областты анықтайты. Бул областтың кеңлиги  $n$  квантлық санның ҳәр бир мәниси ушын ҳәр қыйлы болып шығады. Себеби осциллятордың энергиясы да ҳәм оның тербелисиниң амплитудасы да  $n$  нен ғәрзели болады.

## 2.4.20-сүйрет.



(2.4.83) – (2.4.85) аңлатпалардан гармоникалық осциллятордың толқын функцияларының белгили бир жуплыққа ийе екенлиги келип шығады. Бул толқын функциялары  $n$  квантлық саның мәниси жуп ҳәм  $n = 0$  болғанда  $x$  координатасының жуп функциялары болып табылады. Квантлық сан  $n$  нин мәниси толқын функциясының  $x$  көшерин кесип өтиў ноқатларының санын да анықлады. Тийкарғы ҳалда, яғни  $n = 0$  болғанда параболалық шуқырдың ишинде бир де кесилисиў ноқаты болмайды,  $n = 1$  болғанда бир кесилисиў ноқаты, ал  $n = 2$  теңлиги орынланғанда еки кесилисиў ноқаты бар болады. Солай етип квантлық сан  $n$  нин мәниси бир бирликке артқанда гармоникалық осциллятордың толқын функциясы жуплығын өзгертерди ҳәм  $x$  көшери менен кесилисиў ноқатын 1 ге арттырады.

Классикалық  $[-a_0, a_0]$  областынан сыртта  $\psi_n$  толқын функциялары нолге тең емес екенлигин атап өтемиз. Бул квантлық гармоникалық осциллятордың белгили бир итималлық пенен параболалық потенциал областының сыртында да тұра алатуғынлығын билдиреди. 4.10-мәселеде тийкарғы ҳалда турған гармоникалық осциллятордың классикалық областының сыртында тұра алыў итималлығы есапланған.

$n$  квантлық санының киши мәнислеринде толқын функциясының модулинин квадраты  $|\psi_n(x)|^2$  арқалы анықланатуғын бөлекшени табыўдың итималлығы 2.4.21-сүйретте пункттир сзығ пенен көрсетилген классикалық осцилляторды табыўдың итималлығының тығызлығы болған

$$\frac{dP}{dx} = \frac{1}{\pi\sqrt{a_0^2 - x^2}} \quad (2.4.86)$$

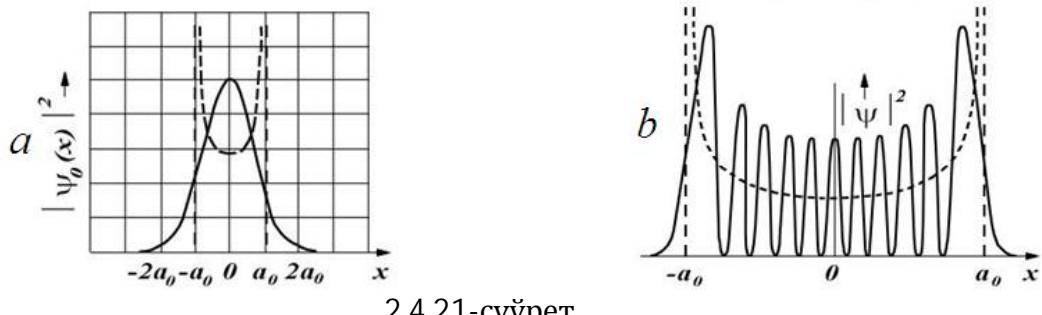
шамасына тең болады.

Классикалық осциллятордың итималлығының тығызлығы болған (2.4.86)-аңлатпаны былайынша алыў мүмкін. Мейли  $dt$  ўақыты ишинде бөлекше координатасы  $x$  болған ноқаттан координатасы  $x+dx$  болған ноқатқа өтетуғын болсын. Яғни оның координатасы кеңлиги  $dx$  болған щамаларға өзгеретуғын болсын. Гармоникалық тербелислер ушын  $x = a_0 \sin \frac{2\pi}{T} t$  болғанлықтан  $dx = a_0 \frac{2\pi}{T} \cos \frac{2\pi}{T} t dt$ . Сонықтан бөлекше бир тәрепке қарай қозғалғанда кеңлиги  $dx$  болған интервалда болыўының итималлығы  $dP = \frac{dt}{T/2} = \frac{dx}{a_0 \pi \cos \frac{2\pi}{T} t} = \frac{dx}{\pi \sqrt{a_0^2 - x^2}}$  болып шығады ҳәм буннан (2.4.86)-формула келип шығады.

$n = 0$  болған жағдайда квантлық осцилляторды табыудың итималлығы  $|\psi_n(x)|^2$  максимумы  $x = 0$  ноқатында жайласқан Гаусс иймеклигинин формасында формаға ие болады (2.4.21-сүрреттеги тутас сызық). Ал классикалық осцилляторды табыудың итималлығының тығызлығы  $x = 0$  ноқатында минималлық мәниске ие ҳәм бурылыў ноқатларында (бундай ноқатларда бөлекшелердин тезлиги нолгө тең болады, 2.4.21а сүрреттеги пункттир сызық) шексизликке умтылады.

$n$  санының жеткиликли дәрежедеги үлкен мәнислеринде (мысалы  $n = 10$  болғанда)  $|\psi_n(x)|^2$  функциясы классикалық тарқалыў иймеклигине жақынласады. Бул функция бурылыў ноқаты қасында максимумға жетеди ҳәм классикалық областтан сыртта кескин түрде төменлейди (2.4.21б сүррет).  $n \rightarrow \infty$  шегинде  $|\psi_n(x)|^2$  иймеклиги итималлықтың классикалық тарқалыў функциясына өтеди.

Биз қарап өткен гармоникалық осциллятор модели ҳәм усы модель менен байланыслы болған бөлекшениң параболалық потенциал шуқырдағы қозғалысы ҳақындағы мәселе идеалластырыў болып табылады. Бундай мәселени шешиў тербелийши бөлекшениң тең салмақлық аұхалы әтирапындағы киши тербелислеринде ғана ҳақыйқатлықта жақын нәтийжелерди береди. Барлық ҳақыйқый ситуацияларда өзиниң тең салмақлық аұхалы әтирапында тербелийши бөлекшениң  $U(x)$  потенциал энергиясы (2.4.79) ға салыстырғанда әдеўир қурамалы түрге ийе болады. Соныңтан амплитуда үлкейген жағдайда амплитуданың базы бир шамасынан баслап бөлекшениң қозғалысы гармоникалық тербелислерден көбірек айырмаға ийе бола баслайды. Бундай қозғалысты ангармоникалық қозғалыс, ал сәйкес осцилляторды ангармоникалық осциллятор деп атайды. Бирақ киши тербелислерде ангармонизмниң тәсіри жүдә киши. Соныңтан бундай жағдайда квантлық механикалық системалардың тербелмелі қозғалысын тәрийиплеў ушын гармоникалық осциллятор моделинен пайдаланыў имканиятын береди.



2.4.21-сүррет

Бул бапта туýры мүйешли ҳәм парабола тәризли потенциал шуқырлардағы бөлекшениң қозғалысларын талладық ҳәм шуқырдың формаларының ҳәр қыйлы болыўына қарамастан шуқырлардағы бөлекшениң қәсийетлеринде көп улыўмалықлардың бар екенligин көрдик:

1. Шуқырдың ишинде қозғалыўшы бөлекшениң энергия спектри дискрет спектр болып табылады, яғнайын энергия квантланады.
2. Тийкарғы ҳалда турған бөлекшениң, яғнайын ең төменги энергия қәддинде турған бөлекшениң энергиясы нолгө тең емес.
3. Бөлекшени табыудың итималлығының тығызлығы  $|\psi(x)|^2$  классикалық бурылыў ноқатлары арасында максимумге ийе ҳәм классикалық областтың сыртында экспоненциал нызам бойынша киширейеди. Бул жағдай бөлекшениң белгили бир итималлық пенен шуқырдың сыртында да жасай алатуғынлығын көрсетеди (дийўалларының бийиклиги шексиз болған, яғнайын өткермейтуғын дийўаллары бар потенциал шуқырда бул жағдай орын алмайды).

4. Квантлық сан  $n$  ниң мәниси бирге өзгергенде шуқырдағы бөлекшени тәрийиплейтуғын толқын функциясының  $x$  көшери менен кесилисій ноқатларының саны 1 ге артады..

Жоқарыда келтирилген қәсийетлердиң барлығының потенциал шуқырдың қәсийетлеринен ғәрзесиз, яғни  $U(x)$  потенциал энергияның түринен байланыссыз екенлигин атап өтемиз.

Және бир аўжалды атап өтемиз: бөлекше тек потенциал шуқырдың ишинде турған жағдайда ғана оның энергиясының спектри дискрет болады (энергия квантланады). Егер бөлекше потенциал табалдырық, барьер ямаса потенциал шуқырдың ұстинен қозғалатуғын болса ( $E > U_0$  болған жағдайда) оның энергия спектри үзлиksiz спектрге айланады (энергияның квантланыўы орын алмайды). Бул нәтийже квантлық механиканың улыўмалық теориясына сәйкес келеди: бул теорема бойынша энергия шексизликке шекем кете алмайтуғын системаларда квантланады, ал шексизликке шекем кете алатуғын системаларда энергияның квантланыўы бақланбайды.

**4.10-мәселе.** Гармоникалық осциллятор тийкарғы ҳалда тур. Классикалық областтың сыртында (яғни  $-a_0 \leq x \leq a_0$  областтың сыртында,  $a_0$  арқалы классикалық тербелислердин амплитудасы белгиленген) бөлекшени табыўдың итималлығын табыңыз.

**Шешими:** Осциллятор тийкарғы ҳалда турғанлықтан (2.4.81)- ҳәм (2.4.83)-аңлатпаларға сәйкес оның энергиясы  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ , ал бөлекшениң ҳалын тәрпилейтуғын толқын функциясы  $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$  түрине ийе болады.

$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  арқалы классикалық осциллятордың жийилиги белгиленген. Ал  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$  аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Классикалық осциллятор өзиниң тең салмақлық орнынан максимал аўысқанда оның толық энергиясының шамасы потенциал энергияның шамасына тең болады, яғни

$$\frac{ka_0^2}{2} = \frac{\hbar\omega_0}{2}.$$

Буннан классикалық тербелислердин амплитудасының мәнисин ала аламыз

$$a_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_0 m}} = x_0.$$

Бөлекшени классикалық областта табыўдың итималлығын табамыз

$$P_{\text{Кл}} = \int_{-a_0}^{a_0} |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \int_{-a_0}^{a_0} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^1 e^{-y^2} dy = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy.$$

Бул аңлатпада  $y = \frac{x}{x_0}$ . Интеграл астында  $y$  өзгериүшисиниң жуп функциясы турғанлықтан

$$P_{\text{кл}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy$$

аңлатпасына ийе боламыз.

$$I(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-y^2} dy$$

интегралын итималлықлар интегралы деп атайды. Бул интеграл итималлықлар теориясында, теориялық ҳәм математикалық физикада кеңен қолланылады. Ҳәзирги заман универсаллық программалау пакетлери бул интегралдың мәнисин аңсат есапладап бере алады. Мысалы Mathematica 8.0 тилинде  $N[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy]$  командасты менен есаплау жүргизгенде 0.8427007929497149 нәтийжесин береди. Демек

$$P_{\text{кл}} = 0,8427 \approx 0,84.$$

Демек бөлекшениң классикалық областының сыртында табыудың итималлығы

$$P = 1 - P_{\text{кл}} \approx 0,16$$

шамасына тең екен.

Солай етип тийкарғы ҳалдағы гармоникалық осциллятордың классикалық областтан сыртта табылығының итималлығы 16 процентке тең, яғни әдеүир үлкен шаманы қурайды.

**4.11-мәселе.** Жийилиги  $\omega_0$  болған квантлық гармоникалық осциллятор биринши қозған ҳалда тур. Осциллятордың кинетикалық энергиясының орташа мәниси  $\langle E_k \rangle$  менен потенциал энергиясының орташа мәниси  $\langle U \rangle$  шамасының мәнисин анықлаңыз.

**Шешими:** Осциллятор биринши қозған ҳалда турғанлықтан оның энергиясы (2.4.81)-аңлатпа бойынша  $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$  шамасына тең, ал сәйкес толқын функциясы болса (2.4.85)-аңлатпаларға сәйкес  $\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$  түринде жазылады.

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}.$$

Биз қарап атырған мәселедеги потенциал ҳәм кинетикалық энергия операторлары былайынша жазылады:

$$\hat{U} = \frac{m_0\omega_0^2 x^2}{2} \quad \text{хәм} \quad \hat{E}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}.$$

(3.62)-аңлатпаға сәйкес кинетикалық энергиясының орташа мәниси  $\langle E_k \rangle$  менен потенциал энергиясының орташа мәниси  $\langle U \rangle$  былайынша анықланады

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{U} \psi_1(x) dx, \quad \langle E_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{E}_k \psi_1(x) dx$$

Гармоникалық осциллятордың потенциал энергиясының орташа мәнисин табамыз

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \frac{m_0 \omega_0^2 x^2}{2} \psi_1(x) dx = \frac{m_0 \omega_0^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi_1(x)|^2 dx.$$

$\psi_1(x)$  функциясының анық түрин есапқа алсақ

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \frac{m_0 \omega_0^2 x_0^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{x}{x_0}\right)^4 e^{\frac{x^2}{x_0^2}} d\left(\frac{x}{x_0}\right) = \frac{m_0 \omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \\ &= \frac{2m_0 \omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \frac{2m_0 \omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}} I_1 \end{aligned}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада  $y = \frac{x}{x_0}$ .  $I_1 = \int_0^{+\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \frac{3}{8} \sqrt{\pi}$ .

Солай етип, биринши қозған ҳалда турған гармоникалық осциллятордың потенциал энергиясының орташа мәниси

$$\langle U \rangle = \frac{2m_0 \omega_0^2}{\sqrt{\pi}} \frac{\hbar}{m \omega_0} \frac{3}{8} \sqrt{\pi} = \frac{3}{4} \hbar \omega_0$$

шамасына тең екен. Енди кинетикалық энергиясының орташа мәнисин табамыз.

$$\langle E_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{E} \psi_1(x) dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} dx.$$

$\psi_1(x)$  функциясының координата  $x$  бойынша екинши тууындысы

$$\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2x_0 \sqrt{\pi}}} \frac{2}{x_0} \left( -\frac{3x}{x_0^2} + \frac{x^3}{x_0^4} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

түрине ийе болады.  $\psi_1^*(x)$  ҳәм  $\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2}$  шамаларын  $\langle E_k \rangle$  ушын алынған аңлатпаға қойсақ

$$\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2x_0 \sqrt{\pi}} \frac{4}{x_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left( -\frac{3x^2}{x_0^2} + \frac{x^4}{x_0^4} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} dx = \frac{2\hbar\omega_0}{\sqrt{\pi}} (3I_2 - I_1)$$

аңлатпасын аламыз.  $I_2 = \int_0^{+\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \frac{1}{4} \sqrt{\pi}$ .  $I_1$  менен  $I_2$  шамаларын  $\langle E_k \rangle$  ушын жазылған аңлатпаға қойсақ

$$\langle E_k \rangle = \frac{2\hbar\omega_0}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{3}{4} \sqrt{\pi} - \frac{3}{8} \sqrt{\pi} \right) = \frac{3}{4} \hbar \omega_0$$

формуласын аламыз.

Солай етип гармоникалық осциллятордың биринши қозған ҳалы ушын кинетикалық энергиясының орташа мәниси  $\langle E_k \rangle$  менен потенциал энергиясының орташа мәниси  $\langle U \rangle$  бир бирине ҳәм гармоникалық осциллятордың толық энергиясы

$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_0$  шамасының ярымына тең екенлигин көрдик. Тап усындағ тастыйықлаудың гармоникалық осциллятордың басқа да қәлеген ҳалы ушын да дурыс екенлигин көрсетиүге болады. Биз 2.3-параграфта квантлық механиканда бөлекшениң толық энергиясының кинетикалық ҳәм потенциал энергиялардың қосындысынан туратуғынлығы ҳаққында гәп еткенде тек ғана энергияның орташа мәнислері нәзерде тұтылатуғынлығын атап өткен едик. Ҳәзир алынған нәтийжелер де бундай тастыйықлаудың дурыс екенлигин және бир рет дәлиллейді.

**4.12-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше

$$U(x, y, z) = \frac{k}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$$

үш өлшемли потенциал шуқырда қозғалатуғын болсын. Бул аңлатпада  $k$  арқалы тұрақлы шама белгиленген. Бөлекшениң энергиясының меншикли мәнислерин ҳәм  $n$  –қәддиниң айның санын табыңыз.

**Шешими:**  $x, y$  ҳәм  $z$  көшерлери бойындағы қозғалыслар бир бириңен ғәрэзсиз болғанлықтан толқын функциясын

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$$

түриндеги көбейме түринде излеймиз. Бул аңлатпада  $\psi_1(x)$  тек  $x$  тан ғәрэзли,  $\psi_2(y)$  тек  $y$  тен ғәрэзли, ал  $\psi_3(z)$  тек  $z$  координатасынан ғәрэзли толқын функциялары.  $\psi(x, y, z)$  толқын функциясын (2.4.6)-Шредингер теңлемесине қойып

$$\begin{aligned} & \psi_2(y)\psi_3(z) \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x)\psi_3(z) \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \psi_1(x)\psi_2(y) \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \\ & + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x, y, z)] \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) = 0 \end{aligned}$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемени  $\psi(x, y, z)$  қа бөлип ҳәм мәселениң шәртинде берилген  $U(x, y, z)$  функциясының түрин пайдаланып

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{1}{\psi_1(x)} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m kx^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \right] + \left[ \frac{1}{\psi_2(y)} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m ky^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \right] + \\ & + \left[ \frac{1}{\psi_3(z)} \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m kz^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \right] = -\frac{2m}{\hbar^2} E \end{aligned}$$

аңлатпасына келемиз. Бул теңликтиң шеп тәрепиндеги квадрат қаұсырманың ишиндеги бириңи аңлатпа тек  $x$  координатасының функциясы, квадрат қаұсырма ишиндеги екинши аңлатпа тек  $y$  координатасының функциясы, ал үшиншии тек  $z$  координатасының функциясы болып табылады. Олардың қосындысы тұрақлы шамаға тең болғанлықтан олардың ҳәр бири де тұрақлы шамаға тең болыўы керек

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\psi_1(x)} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m kx^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_1, \\ & \frac{1}{\psi_2(y)} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m ky^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_2, \\ & \frac{1}{\psi_3(z)} \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m kz^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_3. \end{aligned}$$

Бул аңлатпалардағы  $E_1$ ,  $E_2$  ҳәм  $E_3$  константалары энергияның бирлигине ийе ҳәм  $E_1 + E_2 + E_3 = E$  шәртин қанаатландырады. Солай етип бир өлшемли гармоникалық осциллятор ушын жазылған үш теңлемени алдық. Олардың шешимлери бизге (2.4.81)- ҳәм (2.4.83)-аңлатпалардан белгили.

Үш өлшемли гармоникалық осциллятордың толқын функциясы бир өлшемли гармоникалық осциллятор ушын үш толқын функцияларының көбеймесинен турады ҳәм  $n_1, n_2$  ҳәм  $n_3$  квантлық санларнан ғәрэзли екен.

$$\psi_{n_1, n_2, n_3} = \psi_{n_1}(x) \cdot \psi_{n_2}(y) \cdot \psi_{n_3}(z), \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Үш өлшемли гармоникалық осциллятордың энергиясы ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{3}{2} \right).$$

бул аңлатпада  $n = n_1 + n_2 + n_3$ ,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Үш өлшемли гармоникалық осциллятордың  $n$  – қәдди ушын айныў санын табамыз.  $n$  ниң берилген мәниси ушын айныў саны қосындысы  $n$  ге тең болған  $n_1, n_2, n_3$  санларын қойып шығыўлардың мүмкин болған санына тең. Дәслеп берилген  $n_1$  саны ушын қойып шығыў санын табамыз. Оның мәниси  $n_2$  квантлық санның мүмкин болған мәнислерине тең ( $n_3$  саны ушын да тап сондай мәнис алынады). Берилген  $n_1$  дин мәнисинде  $n_2$  саны 0ден ( $n - n_1$ ) ге шекем өзгереди, яғни  $n - n_1 + 1$  дана мәниске ийе болады. Демек берилген  $n_1$  ушын мүмкин болған қайта қойып шығыўлар саны  $n - n_1 + 1$  ге тең болады. Бул аңлатпаны  $n_1$  бойынша суммалап  $n$  – қәддиниң айныў саны  $K_n$  ди аламыз

$$K_n = \sum_{n_1=0}^n (n - n_1 + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

Үш өлшемли гармоникалық осциллятордың тийкарғы ҳалы ( $n = 0$ ) айнымаған болып шығады, яғни  $K_1 = 1$ . Бириңши қозған ҳал ( $n = 1$ ) ушын айныў саны  $K_1 = 3$ . Бул ҳалға квантлық санларның (100), (010), (001) мәнислері сәйкес келеди.

## 2-5-1. Атомлардың квантлық қәсийеттери

**Атомлардың нурланыўы.** Атомлар ҳаққындағы оғада әхмийетли болған информацияларды физиклер олардың электромагнит нурланыўын изертлеўлердиң барысында алады. Тәжирийбелер атомлардың оптикалық спектрлериниң сызықлы спектрлер екенligин көрсетеди. Бул атомлардың нурланыў спектриниң айырым спектраллық сызықтардан туратуғынлығын аңғартады. Ҳәр бир атом өзине тән болған сызықлы оптикалық спектрге ийе болады.

Атомлардың ишиндеги ең әпиўайысы болған водородтың нурланыўы ушын 1885-жылы Бальмердин үлүймаласқан формуласы деп аталауғын эмперикалық формула келтирилип шығарылды. Водород атомының барлық спектраллық сызықтары ушын толқын узынлықтарының мәниси үлкен дәллик пенен төмендеги формуланың жәрдеминде анықланады екен

$$\frac{1}{\lambda_{nk}} = \tilde{R} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right), \quad k > n. \quad (2.5.1)$$

Сәйкес жийиликтер

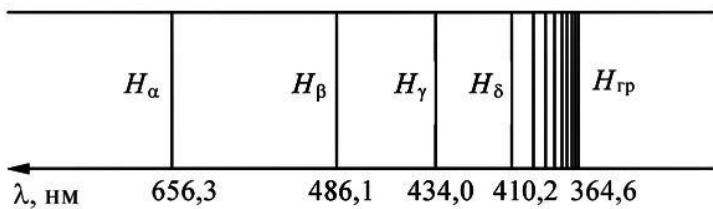
$$\omega_{nk} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right), \quad k > n \quad (2.5.1a)$$

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул формулаларда  $R = 2,067 \cdot 10^{16}$  сек<sup>-1</sup> арқалы Ридберг турақтысы белгиленген.  $\tilde{R} = \frac{R}{2\pi c} = 109678$  см<sup>-1</sup>,  $n$  менен  $k$  лар турақты шамалар

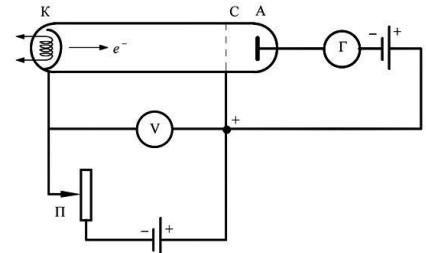
Водород атомларының нурланыұының төмендегидей спектраллық сериялары белгили (бул сериялардың атамалары оларды бириңиши ашқан физикердин аттары менен аталған):

- $n = 1$  – Лайман сериясы (ультрафиолет нурланыұы),
- $n = 2$  – Бальмер сериясы (көзге көринетуғын жақтылық),
- $n = 3$  – Пашен сериясы (инфрақызыл нурланыұы),
- $n = 4$  – Брэкетт сериясы (инфрақызыл нурланыұы),
- $n = 5$  – Пфунд сериясы (инфрақызыл нурланыұы) ҳәм басқалар.

Водород атомының спектриниң көзге көринетуғын бөліміндеги Бальмер сериясы сызықларының схемасы 5.1-сүйретте берилген. Сүйретте  $H_\alpha$ ,  $H_\beta$ ,  $H_\gamma$ ,  $H_\delta$  ҳәм  $H_{\text{тр}}$  арқалы нурланыұы спектриниң характерлы сызықлары көрсетілген. Ал  $H_{\text{шег.}}$  сызығы болса (2.5.1)-формуладағы  $n = 2$  ҳәм  $k = \infty$  шамаларына сәйкес келиүши серияның қысқа толқынлы шегарасына сәйкес келеди.



2.5.1-сүйрет.



2.5.2-сүйрет.

(2.5.1a) формуласында водород атомының нурланыұы спектриниң қәлеген сызығының жийилигин бир типтеги еки аңлатпаның айырмасы сыпатында көрсетиўдің мүмкін екенлигін атап өтемиз. Бул бир типтеги аңлатпалар пүтин санларға ғәррезли ҳәм оларды спектраллық термлер деп атайды. Ҳақыйқатында да (2.5.1a) аңлатпасын былайынша жаза аламыз

$$\omega_{nk} = T(n) - T(k). \quad (2.5.2)$$

Бул аңлатпа ушын терм

$$T(n) = \frac{R}{n^2}$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

Басқа қурамалырақ атомлардың нурланыўының оптикалық спектрин изертлеўлер (2.5.2)-формуланы олардың нурланыўының жийиликлерин есаплай ушын пайдаланыўға болатуғынлығын көрсетеди. Бирақ ондай атомлар ушын термлер водород атомларының термлерине салыстырғанда әдеўир қурамалы.

(2.5.1) менен (2.5.2) қатнаслары атомларға тән болған квантлық тәбиятты сәүлелендирдеди. Ҳақыйқатында да Планктиң формуласы бойынша атомның нурланыўы жийилигин оның энергиясы менен байланыстырамыз. Спектрдин сыйықтылығынан болса биз атомның энергиясының дискретлиги, яғни атомның энергиясының квантланғанлығы ҳақындағы жуўмақта келемиз.

**Франк ҳәм Герц тәжирийбеси.** Атомлардың энергиясының дискретлиги менен байланыслы болған атомлардың квантлық қәсийетин тастыйықлаушы ең әпиўайы тәжирийбелердин бириң 1913-жылы Дж.Франк ҳәм Г.Герц тәрепинен орынланды. Бул тәжирийбениң схемасы 5.2-сүүретте көлтирилген. Экспериметаллық дүзилистиң тийкарғы элементи хызметин газ бенен толтырылған үш электродлы электрон лампа атқарады. Газ сыпатында басымы шама менен 1 мм сынап бағанасты басымындағы сынаптың пуўларын пайдаланыў мүмкін. Франк ҳәм Герц тәжирийбесинде С торға катод К ға салыстырғанда шамасы оң болған V потенциалы бериледи. Соныңтан С торы тезлетиўши потенциалдың орнын ийелейди.

Термоэлектронлық эмиссияның есабынан катодтан ушып шығатуғын электронлар V тезлетиўши потенциаллар айырмасында тезленеди, бул тезленийдің шамасын П патенциометри менен өзгертиледи ҳәм V вольтметри менен өлшенеди.

Тор ҳәм А анод арасына шама менен 1 в кернеў түсириледи. Бул кернеў тормозлаушы майданды пайда етиў ушын керек. Тор арқалы ушып өткен ҳәм тормозлаушы майдан арқалы өте алатуғын электронлардың бир бөлими коллекторға келип түседи ҳәм Г гальванометри менен өлшенетуғын базы бир тоқты пайда етеди.

Катодтан торға қозғалыў барысында электронлар тийкарғы энергетикалық ҳалда турған сынап атомлары менен соқлығысады. Егер атомның энергиясы тек белгилі бир дискрет мәнислерге ийе бола алатуғын, усының менен бир қатарда атомның тийкарғы ҳәм бириңи қозған ҳалы арасындағы энергияның мәниси бойынша қашықтық  $\Delta E$  шамасына тең болса, онда электронлардың атомлар менен соқлығысыўларының характеристи электронның кинетикалық энергиясының мәниси  $W_k = eV$  менен тиккелей байланыслы болады. Бул жерде V арқалы катод менен тор арасындағы тезлетиўши потенциаллар айырмасы белгиленген.

Егер  $W_k < eV$ , яғни  $V < V_1 = \Delta E/e$  болса, онда электрон атом менен соқлығысқанда атомға өзиниң энергиясының көп бөлегин бере алмайды. Бундай жағдайда электронның атом менен соқлығысыў серпимли соқлығысыў болып табылады. Бундай соқлығысыўды электронның кинетикалық энергиясы атомның ишкі энергиясына айлана алмайды ҳәм нәтийжеде электрон катод пенен тор арасындағы газ арқалы энергиясын жоғалтпай қозғалады. Бундай электронлар үш электродлы лампаның торы арқалы өтип анод-коллектор арасындағы әззи тормозлаушы майдан арқалы өте алады ҳәм коллектор шынжырындағы тоқты пайда етиўге қатнасады. Әдеттеги вакуумлы лампадағыдей V артқанда коллектор шынжырындағы тоқтың мәниси монотонлы түрде артады.

Бирақ тезлетиўши майданда қозғалыўдың барысында электрон атомды қоздырыў ушын жететуғындай кинетикалық энергияға ийе бола алатуғын болса, онда бундай электронның атом менен соқлығысыў серпимли емес соқлығысыўға айланады. Енди электронның кинетикалық энергиясының көпшилик бөлеги атомның ишкі энергиясына айланады, яғни атомды қоздырыў ушын жумсалады.

Электронлардың атомлар менен серпимли емес соқлығысыўлары электронлар торға жақынлағанда жүзеге келеди. Соқлығысқаннан кейин энергиясын жоғалтқан

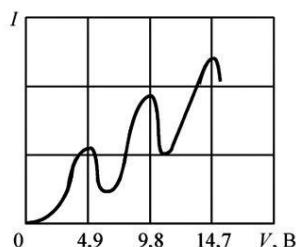
электронлар тормозлаұшы майдан арқалы өте алмайды. Нәтийжеде ол анод-коллекторға жетип келе алмайды. Нәтийжеде тордағы тезлетиүши кернеўдің мәниси  $V_1$  ге тең болғанда коллектор шынжырындағы  $I$  тоқтың күши кескин түрде киширейиүи керек..

Тезлетиүши потенциалдың шамасы буннан былай артқанда гальванометр жәрдемінде өлшенетуғын тоқтың шамасы және де артады. Бирақ кернеўдің мәниси  $V_2 = 2V_1$  болғанда коллектор шынжырындағы тоқтың шамасы және кескин түрде кемейеди. Себеби бундай жағдайда газ орталық арқалы өткенде электрон атомлар менен еки рет серпимли емес соқлығысыўға ушырай алады. Тап сол сыйқлы  $V_3 = 3V_1$  үш, төрт ҳәм басқа да серпимли емес соқлығысыў режиминиң де орын алыўы мүмкін.

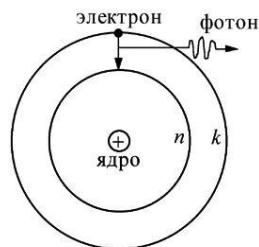
Солай етип атомның энергиясы квантланатуғын болса, онда тезлетиүши потенциал  $V$  шамасының пүтин сан еселенген  $V_1$  мәнислерінде коллектор шынжырындағы  $I$  тоғының иймеклигинде анық көринетуғын кемейиўлердин орын алыўы керек. Бундай жағдайда бундай кемейиўлердин тезлетиүши кернеў шкаласындағы басланған участкалары арасындағы қашықлық  $\Delta V$  шамасы атомның қозыў энергиясы  $\Delta E$  менен  $\Delta E = e\Delta V$  аңлатпасы арқалы байланысқан.

Франк ҳәм Герцтің тәжирийбелерінде алынған  $I = I(V)$  ғәрэзлиги бул жуўмақты жүдә жақсы тастыйықлады (2.5.3-сүүрет). Бундай ғәрэзлик атомлардың энергиялық ҳалларының дискретлигинин айқын эксперименталлық дәлили болып табылады. Мысалы 5.3-графикте сынап атомның биринши қозған ҳалы оның тийкарғы ҳалынан 4,9 әВ қашықлықта турғанлығы көринип тур.

Лампаны басқа да газлер менен толтырғанда да (мысалы гелий ямаса неон менен толтырғанда) жоқарыда сынап атомлары ушын келтирилген нызамлықтардай нызамлықтар бақланады. Егер тәжирийбелер жүдә пукталық пенен өткерилсе, онда  $I = I(V)$  ғәрэзлигинде атомның басқа да қозған ҳалларына, ҳәтте атомлардың ионларға айланыўына сәйкес келиўши де тоқтың кемейиўлерин бақлауға болады.



2.5.3-сүүрет.



2.5.4-сүүрет.

Франк ҳәм Герц тәжирийбесиниң екинши әхмийетли нәтийжеси лампаның  $\lambda = 253$  нм узынлықтағы ультрафиолет жақтылықты шығарыўында. Бундай нур шығарыў катод пенен тор арасындағы кернеўдің мәниси 4,9 В шамасына жеткен моментте басланады. Егер лампаның колбасын кварцтан ямаса ультрафиолет нурларды өткеретуғын шийшеден таярлаған жағдайларда бундай нурланыўды айқын түрде сезиўге болады.

Бундай нурланыўдың пайда болыўын аңсат түсіндіриўге болады. Электронлар менен соқлығысыўдың нәтийжесінде қозған сынап атомлары тийкарғы ҳалға нурланыў менен қайтады. (1.41)-аңлатпаға сәйкес бундай нурланыў ушын толқын узынлығының мәнисин есаптай аламыз. Ҳақыйқатында да  $\varepsilon = \Delta E = 4,9$  әВ =  $7,84 \cdot 10^{-19}$  Дж. Демек  $\lambda = \frac{hc}{\varepsilon} - \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{7,84 \cdot 10^{-19}}$  м =  $2,53 \cdot 10^{-7}$  м = 253 нм.

## 2-5-2. Водород атомының Бор теориясы

**Бор постулатлары.** 1911-жылы атомлардағы α-бөлекшелериниң шашырауын изертлеү бойынша өткерилиген тәжирийбелеринде алынған нәтийжелер тийкарында Дж.Резерфорд атомның планетарлық моделин усынды. Бул модель бойынша атом оң зарядланған, аўыр ҳәм жүдә киши болған өлшемлерге ийе ( $\sim 10^{-14}$  м) ядроның дөгерегинде базы бир орбиталар бойынша электронлар қозғалып жүреди. Бул орбиталардың радиусы шама менен  $10^{-9}$  м ге тен. "Планетарлық" сөзи атомның Қуяш системасына уқсаслығынан алынған. Қуяш системасында планеталар базы бир орбиталар бойлап үлкен массаға ийе орайлық дәне болған Қуяштың дөгерегинде айланады. Тап сол сыйқылды атомларда электронлар үлкен массаға ийе оң зарядланған ядроның дөгерегинде белгили орбиталар бойынша айланады.

Бирақ классикалық физиканың көз-қараслары менен қарағанда атомның модели ишки қарама-қарсылықтарға ийе болып шығады. Бул жағдай бириңи гезекте электронда зарядтың бар екенлеги менен байланыслы.

Классикалық электродинамиканың нызамлары бойынша ядроның дөгерегинде айланышты электрон қәлелеген басқа тезлениң менен қозғалышты зарядланған бөлекше сыйқылды электромагнит толқынларын нурландырыуы керек. Бундай нурланыштың спектри үзлиksiz болады, яғни нурланыштың қәлелеген толқын узынлығындағы электромагнит толқынлардан турыуы керек. Бул тәжирийбеде бақланатуғын атомлардың спектриниң сыйқылды екенлегине қайшы келеди.

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда үзлиksiz нурланышты электронның энергиясын кемейтеди. Соңықтан нурланыштың есабынан қозғалышты электронның орбитасының радиусының киширейиүү керек. Нәтийжеде ақыр-аяғында электронның ядроға қулап түсүү талап етиледи. Басқа сөз бенен айтқанда классикалық физикада атомның планетарлық модели орнықлы емес.

1913-жылы Н.Бор атомның планетарлық моделин қорғап қалып ушын квантланышты идеясын қолланыштың кереклигин, бириңи гезекте электронлардың қозғалышты ушын руқсат етилген базы бир орбиталарды айырып алыштың зәрүүрлигин көрсетти. Әлбетте, квантланыштың қағыйдаларында Планктың квантлық тұрақтылығының қатнасыштың керек. Тәсир кванттың  $\hbar$  импульс моментиниң бирлигине ийе болғанлықтан Бор теорияға ядроның этирапында қозғалышты электронның импульс моментиниң квантланыштың қосты.

Водород атомы ең әпиүайы атом болып табылады. Бундай атомда бир электрон ядроның Кулон майданында түйік орбита бойынша қозғалады. Бириңи жақынласында ядроны тынышлықта турады, ал электронлардың орбитасын шеңбер тәризли орбиталар деп есаплауға болады.

Усындаған болжайлар тийкарында Н.Бор водород атомының теориясын үш постулат түріндегі дөретті.

1. Атомдағы электрон тек базы бир стационар орбиталар бойынша қозғалады. Сол орбиталардың ҳәр бири ушын  $n = 1, 2, 3, \dots$  түріндеги қатар санын жазып мүмкин. Бундай қозғалыс атомның стационар ҳалына сәйкес келеди. Ҳәр бир стационар ҳалға өзгермейтуғын  $E_n$  толық энергиясы сәйкес келеди. Бул айтылғанлар стационар түйік орбита бойынша қозғалатуғын электронлардың энергияны нурландырмайтуғынлығын билдиреди.

2. Руқсат етилген стационар орбиталардағы электронның импульс моментиниң мәниси  $L$  пүтиң сан есептегендеги Планк тұрақтылығы  $\hbar$  қа тең болыуы керек. Соңықтан - стационар орбита ушын

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5.3)$$

квантланыў шәртинин орынланыўы керек.

3. Нурланыў кванттының нурланыўы (шығарылыўы) ямаса жутылыўы атом бир стационар ҳалдан екинши стационар ҳалға өткенде жүзеге келеди (2.5.4-сүйрет). Атомның нурланыўының жийилиги  $\omega$  атомның еки стационар ҳалына сәйкес келетуғын энергиялардың айырмасының жәрдеминде анықланады. Сонықтан

$$\hbar\omega_{nk} = E_k - E_n, \quad k > n. \quad (2.5.4)$$

**Атомның энергиясының квантланыўы.** Электронның массасын  $m$  арқалы белгилеймиз. Биз дәслеп усындай массаға ийе электронның ядро дәгерегинде Кулон күшинин тәсиринде радиусы  $r$  болған шенбер тәризли орбита бойынша айланыў шәрти менен Бордың электрон ушын импульс моментинин квантланыў формуласын жазамыз

$$\begin{cases} \frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}, \\ mvr = n\hbar. \end{cases} \quad (2.5.5)$$

Бул теңлемелер системасын шешип водород атомындағы стационар орбиталардың радиуслары ушын тәмендегидей аңлатпаны аламыз

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2 n^2}{me^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5.6)$$

Теорияның универсаллық константасы сыпатында Бор радиусын ала аламыз

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м.} \quad (2.5.7)$$

Бул радиус водород атомындағы биринши стационар орбитаның радиусы болып табылады. Усы тиімдегі (2.5.6)-формуланы

$$r_n = an^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5.8)$$

туринде жазамыз.

(2.5.7)- ҳәм (2.5.8)-формулалар тиімдегі (2.5.6)-формуланың өлшемлери ( $\sim 10^{-10}$  м) газлердин кинетикалық теориясында алғынған нәтийжелерге сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз.

$n$  – стационар орбитадағы электронның тезлиги ушын (2.5.5)-аңлатпадан

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar n} \quad (2.5.9)$$

формуласын аламыз. Буннан биринши стационар орбитада қозғалыўшы электронның тезлигинин  $2,2 \cdot 10^6$  м/сек екенлигине ийе боламыз. Демек бул

электрон  $T_1 = 1,5 \cdot 10^{-16}$  сек ишинде ядроның дөгерегин бир рет айланып шығады екен.

$n$  – стационар орбитада қозғалышты электронның толық энергиясы оның кинетикалық ҳәм потенциал энергияларының қосындысынан турады. Электронның кинетикалық энергиясы

$$E_K = \frac{mv^2}{2} = \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2n^2}. \quad (2.5.10)$$

Электронның ядро менен кулон тәсир етисиүине сәйкес келиүши потенциал энергиясы

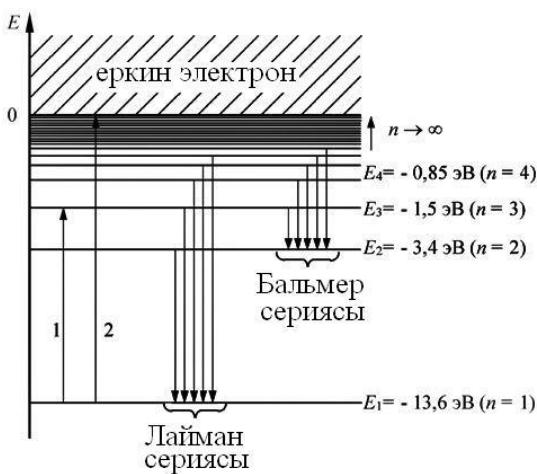
$$U = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} = -\frac{me^2}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2n^2}. \quad (2.5.11)$$

(2.5.10)- ҳәм (2.5.11)-формулаларды есапқа алған ҳалда Бор теориясының оғада әхмийетли болған формуласын – водород атомындағы электронның энергиясының квантланыў формуласын аламыз

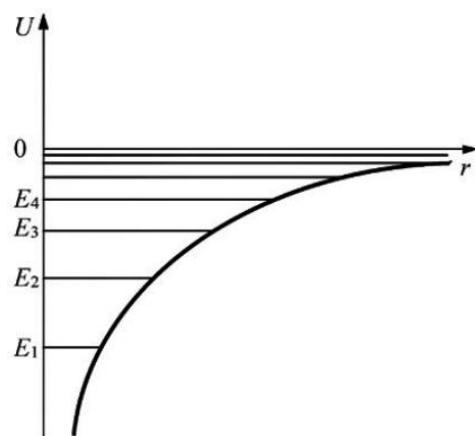
$$E = E_K + U = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2} \text{ эВ.} \quad (2.5.12)$$

Атомдағы электронның толық энергиясы терис мәниске ийе болып шықты. Себеби анықламасы бойынша электронның ядро менен тәсирлесиүиниң электростатикалық энергиясының мәниси нолден киши. Орбитаның қатар санының (номериниң) үлкейиўи менен атомдағы электронның толық энергиясының мәниси еседи. Соның менен бирге орбитаның қатар саны бул теорияда квантлық сан болып табылады.

5.5-сүйретте (2.5.12)-формулаға сәйкес водород атомындағы электронның энергиясының спектри келтирилген. Оң мәнисли энергиялар обласында еркин электронның энергия спектри тутас спектр болып табылады. Толық энергияның мәниси терис болған жағдайларда атом менен байланысқан электронның энергия спектри дискрет характерге ийе. Көрсетпелик ретинде 5.5-сүйретте энергияның мүмкін болған ҳәр бир мәнисине энергия қәдди сәйкес келетуғынлығын сәүлелендірилген. Стационар ҳалда электрон сол дискрет энергия қәддилериниң биринде тұра алады. Электронның бир қәддиден екинши қәддиге өтиўи бул сүйретте стрелканың жәрдеминде көрсетилген. Бул стрелканың басы менен ушы электронның өтиўи жүзеге келетуғын энергияның қәддилерине сәйкес келеди.



2.5.5-сүйрет.



2.5.6-сүйрет

Атом әдетте энергиясының мәниси ең киши  $E_1$  болған тийкарғы ҳалда турады. Атомның бундай ҳалында электрон биринши стационар орбитада қозғалады. Бул орбитаның радиусы болса ең минималлық радиус болып табылады ҳәм оны биз жоқарыда  $a$  арқалы белгиледік.

Егер атомға қосымша энергия берилетуғын болса, онда ол биринши қозған ҳалға өте алады (2.5.4-сүйреттеги 1 өтий). Бундай жағдайда электрон үлкенирек радиусқа ийе болған орбитаға өтеди. Атомды қоздырыудың ҳәр қыйлы усыллары бар (газ атомының хаотик жыллылық тербелислериндеги соқырылыштары, газ арқалы жоқары энергияға ийе бөлекшелерди жиберіү (электронларды, альфа-бөлекшелерин ҳәм тағы басқалар), атомларды ультрафиолет нурлар менен нурланырыү).

Егер электронға берилген энергияның муғдары жеткилиken дәрежеде үлкен болса, онда электронды атомнан айырып алыўға да болады. Бундай процессті атомның ионизациясы деп атайды. 5.4-сүйретте водород атомының ионизациясы ушын зәрүрли болған энергияның ең киши мәниси (2 өтий)

$$E_i = |E_1| = 13.6 \text{ eV} \quad (2.5.13)$$

шамасына тең. Бул шама водород атомының ионизациясы бойынша өткериленген тәжирийбелердин нәтийжелерине толық сәйкес келеди.

Қозған ҳалда атом көп ўақыт жасай алмайды (тура алмайды). Қәлелеген система сияқты атом да ең киши энергияға ийе ҳалды ийелеўге умтылады. Соңықтан  $10^{-8}$  сек ўақыттан кейин қозған атом өзи-өзинен (спонтан түрде) киши энергияға ийе ҳалға өтеди. Бул өтий нурланыў менен бирге жүреди. Атом тийкарғы ҳалға өткенше бундай процесс даўам етеди.

Энергия қәддилериниң структурасы анықланған болса, онда водород атомының нурланыў спекриниң структурасын да есаплаўға болады. Ҳақыйқатында да электрон ядродан үлкенирек қашықтыққа ийе  $k$  – орбитадан  $n$  – орбитаға өтетуғын болса ( $k > n$ ), онда Бордың үшинши постулатын пайдаланып нурланырылған электромагнит толқынының жийилигин аңсат есаплаў мүмкін. (2.5.4)- ҳәм энергияның квантланыў формуласы (2.5.12) ни пайдаланып водород атомындағы  $k \rightarrow n$  өтийндеги нурланыұдың жийилигин

$$\omega_{nk} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (2.5.14)$$

формуласының жәрдемінде есаплай аламыз. Бул формуладағы

$$R = \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ 1/сек} \quad (2.5.15)$$

шамасы оптикалық экспериментлерде алынған Ридберг тұрақтысының мәнисине дәл сәйкес келеди.

Водородтың нурланыўының жийиликлери ушын алынған формула Бальмердин ulyýmalasçan формуласы менен бирдей (2.5.1а формуласы). Соныңтан тийкарында (2.5.3) квантланыў постулаты жатырған водород атомының Бор теориясының 1922-жылды физика бойынша халық аралық Нобель сыйлығын алыўға миясар болғаны таң қаларлық емес.

Жоқарыда баянланған теорияны эллипс тәризли орбиталар 1915-жылды дөретилген Бор-Зоммерфельд теориясы ушын ulyýmalastyrlyғa ҳәм қәлеген "водород тәризли" атомлардың қәсийетлерин сипатлау ушын қолланыўға болады. Водород тәризли атомлар деп заряды  $+Ze$  болған ядроның әтирапында тек бир электрон қозғалатуғын атомлық системаларға айтады. Бундай атомлар қатарына бир рет ионластырылған гелий  $He^+$  ( $Z = 2$ ), еки рет ионластырылған литий  $Li^{++}$  ( $Z = 3$ ), үш рет ионластырылған бериллий  $Be^{+++}$  ( $Z = 4$ ) ҳәм тағы басқалар киреди. Эпиўайы есаплаўлар водород тәризли атомлардың энергия спектри (2.5.12)-аңлатпасын  $Z^2$  қа көбейтиў менен алынатуғынлығын көрсетеди. Ал бундай атомлардағы электронның орбиталарының радиусы водород атомындағы электронның сәйкес орбиталарының радиусларынан  $Z$  есе киши болып шығады.

Н.Бор өз теориясында бириңи рет күш майданында қозғалыўшы бөлекшениң энергиясының квантланыўын жүзеге келтирди. Бирақ бул теория атомлық кубылыслардың ақырына жеткерилген теориясы бола алмайды. Бор атомды классикалық физиканың нызамлары менен тәрийиплек стационар орбита бойынша қозғалатуғын электронның электромагнит нурларын нурландырыўын "қадаған етти". Электронның импульс моментиниң квантланыўы болған (2.5.3) шәрти физикалық тийкарға ийе емес, ал водород атомы ушын ойлап табылды (кейинирем бул ойлап табыўдың толық дурыс емес екенligи көрсетиледи). Бордың бул теорияны қурамалы атомлар ушын ulyýmalastyrlyў ҳәм усындей қурамалы атомлар ушын квантланыў постулатларын табыўға болған тырысыўлары сәтсизлик пenen питти.

Хәзирги заман физикасының көз-қараслары бойынша атом электронның толқынлық қәсийетлерин есапқа алмайтуғын классикалық физика нызамларының жәрдемінде тәрийипленийи мүмкін емес физикалық система болып табылады.

Бул баптың буннан кейинги параграфларында хәзирги заман квантлық механиканың атомлық системаларды қалай тәрийиплейтуғыны көрсетиледи.

**5.1-мәселе.** Бор теориясында электронның импульс моментиниң квантланыўы шәртин электронда толқынлық қәсийетлердин бар екенligи ҳақындағы де Бройль гипотезасын есапқа алып келтирип шығарыўға болатуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими:** Радиусы  $r$  болған шеңбер тәризли орбитада қозғалыўшы электрон ушын импульс моменти  $L$  импульс  $p$  менен  $L = pr$  формуласы бойынша байланысқан. Соныңтан (2.5.3) квантланыў шәртин

$$2\pi r = n \frac{2\pi\hbar}{p}$$

түрине алып келиў мүмкин. Де Бройль гипотезасы бойынша электронның қозғалысын толқынлық процесс менен байланыстырыў мүмкин. Оның толқын узынлығы

$$\lambda_{db} = \frac{\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Сонлықтан Бордың квантланыў шәртин былайынша жазыўға болады

$$2\pi r = n\lambda_{db}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Бул аңлатпада әжмийетли жағдайды көремиз: узынлығына пүтин сан есelenген де Бройль толқыны узынлығы жайласатуғын орбиталар стационар орбиталар болып табылады.

**5.2-мәселе.** Водород атомының нурланыўының жийилигиниң ядроның массасының шекли екенлигине байланыслы қалай өзгеретуғынлығын анықлаңыз.

**Шешими:** Мәселе тап усындай етип қойылғанда электрон ядроның дөгерегинде емес, ал электрон менен ядро қозғалмайтуғын массалар орайы дөгерегинде айланады. Егер  $r_e$  ҳәм  $r_{yadro}$  арқалы электрон менен ядроның шеңбер тәризли орбиталарының радиусларын белгилесек, онда масса орайының анықламасы бойынша  $m r_e = M r_{yadro}$  формуласына ийе боламыз. Бул аңлатпада  $m$  ҳәм  $M$  арқалы сәйкес электрон менен ядроның массалары белгиленген.

Электрон менен ядроның тезлениўлериниң теңлиги шәртинен олардың айланбалы қозғалысының мүйешлик тезликлериниң бир бири менен тең екенлиги келип шығады

$$\frac{v_e}{r_e} = \frac{v_{yadro}}{r_{yadro}} = \omega.$$

Бул аңлатпада  $v_e$  ҳәм  $v_{yadro}$  арқалы сәйкес электронның ҳәм ядроның тезликleri белгиленген

Ядроның қозғалысын есапқа алсақ, атомның импульсиниң моменти ушын

$$L = m v_e r_e + M v_{yadro} r_{yadro} = m \omega r_e^2 + M \omega r_{yadro}^2$$

аңлатпасын аламыз. Теорияның тийкарғы теңлемелери сыпатында электронның шеңбер тәризли орбита бойынша қозғалыў ҳәм Бордың атомның импульсининиң моментиниң квантланыўы шәртин аламыз

$$\begin{cases} m \omega r_e^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r_e + r_{yadro})^2}, \\ m \omega r_e^2 + M \omega r_{yadro}^2 = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Егер ядро менен электрон арасындағы қашықлықты  $r = r_e + r_{yadro} = r_e \left(1 + \frac{m}{M}\right)$  арқалы белгилесек, онда  $\mu = \frac{mM}{m+M}$  белгилеўин қабыл еткеннен ҳәм базы бир түрлендириўлерден кейин бул қатнас былайынша жазылады

$$\begin{cases} \mu\omega^2r = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}, \\ \mu\omega r^2 = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Бул аңлатпада  $\mu$  арқалы "электрон-ядро" системасының келтирилген массасы белгиленген.

Биз келтирип шығарған теңлемелер системасын шешип атомның стационар ҳаллары ушын төмендегидей формулаларды аламыз:

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 n^2}{\mu e^2},$$

$$\omega_n = \frac{\mu e^4}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3 n^3},$$

Атомның толық энергиясы

$$E = \frac{mv_e^2}{2} + \frac{Mv_{yadro}^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0(r_e + r_{yadro})} = \frac{\mu\omega^2 r}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул аңлатпаға  $r_n$  менен  $\omega_n$  шамаларының мәнислерин қойсақ биз излеп атырған водород атомының энергиясының квантланыў формуласын аламыз

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Бул формуладан водород атомының спектраллық сыйықтарының жийиликлерин табамыз:

$$\omega_{nk} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} = R_m \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right).$$

Бул аңлатпада  $R_m$  арқалы Ридбергтин модификацияланған турақтысы белгиленген.

$$R_m = \frac{\mu e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3} = \frac{R}{1 + \frac{m}{M}}.$$

Есаплаўлар ядроның қозғалысын есапқа алғандағы жийилик (ямаса толқын узынлығы) ушын киргизилген дүзетиў проценттен әдеүир кем екенлигин көрсетеди. Бирақ спектроскопиялық усыллардың оғада жоқары дәллигинен водородтың изотопларының (бир элементтиң массасы ҳәр қыйлы болған атомлары) спектриндеги айырманы экспериментте табыўға мүмкіншилик береди. Тап усындај жоллар менен аўыр водородтың изотопы дейтерий  $D$  ашылған еди. Дейтерий ушын  $M_D = 2M_H$ . Бул жерде  $M_H$  арқалы биз водород атомының массасын белгиледик.

### 2-5-3. Водород тәризли атомлардың квантлық механикандағы тәрийиплениүи

5.1-мәселени шешкенде биз атомда қозғалышты электронлардың де Б्रойль толқын узынлығы атомның өзиниң өлшемлери менен салыстырлықтай екенлигин көрдик. Бундай жағдайларда электронлардың толқынлық қәсийетлериниң бар екенлигин есапқа алмауға болмайтуғындың биз жақсы билемиз. Себеби бундай электронлардың атомлардағы қозғалысын классикалық физиканың нызамлары тийкарында тәрийиплеүге болмайды. Сонықтан атомлық системалар квантлық механиканың нызамларын пайдаланыў керек болған физика илиминиң әхмийетли объектлериниң бири болып табылады. Атомларды тәрийиплеў ушын квантлық механиканың қандай да бир қосымша болжауларды ямаса Бор теориясының постулатлары сыйқы постулатларды талап етпейтуғындың атап етемиз

Водород сыйқы атомлар ушын квантлық механиканың мәселесин келтирип шығарамыз. Электрон заряды  $Z e$  болған қозғалмайтуғын ядроның дөгерегинде қозғалады деп есаптаймыз. Водород атомы ушын  $Z = 1$ . Басқа водород тәризли атомлар (ионлар) ушын  $Z = 2, 3, 4, \dots$ . Бундай модель атом физикасының әхмийетли моделлериниң бири болып табылады. Бундай модель ушын электрон қозғалатуғын электростатикалық майданның потенциалын дәл жаза аламыз. Сонықтан водород тәризли атомлардың квантлық теорияның барлық жуўмақтарын экспериментте тексерип көриў мүмкін.

Ядроның электр майданындағы электронның потенциал энергиясы

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad (2.5.16)$$

аңлатпасының жәрдеминде есапланады. Бундай майдандағы электронның қозғалысын базы бир сфералық потенциал майдандағы қозғалыс сыпатында қарай аламыз. Оның формасы 5.6-сүретте көрсетилген.

4.2-параграфта әпиүайы формаға ииे потенциал шуқырда қозғалатуғын бөлекшениң энергиясының спектриниң дискрет екенлигин көрген едик. Тап сол сыйқы атомдағы электронның энергиясы да дискрет спектрге (яғни әлектронның толық энергиясының қәддилери  $E_1, E_2, E_3$  ҳәм басқа да шамаларға тең) ииे болады деп болжауға болады. Водород атомы ушын алынған спектр дұрыслығы оптикалық тәжирийбелерде тастыйықланатуғын Бор теориясында алынған энергиялар спектри менен бирдей болыўы керек.

Солай етип водород тәризли атомлардағы электронның квантлық ҳалларды ҳәм усы ҳаллардағы электронның толық энергиясының спектрин табыў ушын

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.5.17)$$

Шредингер теңлемесиниң шешимлерин табыўымыз керек болады. Бул теңлемедеги гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U} \quad (2.5.17a)$$

түринде жазылады. Бул аңлатпадағы тә электронның массасы,  $E$  арқалы  $\psi$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын оның ҳалындағы толық энергиясы белгиленген. Потенциал энергияның операторы  $\hat{U}$  болса (2.5.16)-аңлатпада берилген  $U(r)$  функциясына көбейтиў болып табылады.

Шредингер теңлемесиниң биз излеп атырған шешимлері  $\hat{H}$  толық энергия операторының меншикли функциялары болып табылады. Бундай шешимлерди табыў жеткилики дәрежеде қурамалы болған дифференциал теңлемени шешиў менен байланыслы. Бул мәселениң квантлық механикандағы ең әхмийетли мәселелердин бири екенлиги есапқа алып бундай шешимлерди табыў схемасын толық баянлаймыз. Бул схеманы баянлаудың барысында математикалық физиканың арнаұлы функцияларының бири болған сфералық функциялардан пайдаланыўға туұры келеди. Базы бир айқын квантлық ҳаллар ушын сфералық функциялар белгили элементар функциялардың комбинациясы түринде анық аналитикалық формада жазылады. Сфералық функциялардың қәсийеттери ҳақында толығырақ мағлыўматларды математика бойынша справочниклерде табыў мүмкін.

Атомдағы электронның қозғалысын тәрийиплеў ушын координаталардың сфералық системасын пайдаланған қолайлы. Бундай координаталардың басы сыпатында атом ядроның орайы қабыл етиледи. Бундай координаталар системасында электронның толқын функциясы  $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ , ал Лаплас операторы

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}$$

түрине ийе болады.  $\Delta_r$  арқалы толқын функциясының радиал бөлегинен ибарат

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad (2.5.18)$$

ал мүйешлик бөлеги болған

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (2.5.19)$$

оператор белгиленген. (3.32)-формулаға сәйкес сфералық координаталар системасындағы импульс моменти квадраты операторы  $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi}$  түринде жазылады. Сонықтан (2.5.17)-Шредингер теңлемеси

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi \quad (2.5.20)$$

түрине енеди. Бул теңлемениң шешимин ажыратылыўшы өзгериўшилери бар еки функцияның көбеймеси түринде излеймиз

$$\psi = X(r) \cdot Y(\theta, \varphi). \quad (2.5.21)$$

$\hat{L}^2$  операторы гамильтониан  $\hat{H}$  пенен коммутацияланады. Сонықтан 3-бапта баянланған квантлық механиканың улыўмалық қағыйдалары бойынша атом қәлекен квантлық ҳалда импульс моментиниң модулиниң белгили бир мәнисине

ийе бола алады. Ал  $Y(\theta, \varphi)$  функциясы  $\hat{L}^2$  операторының меншикли функциясы болып табылады. Бул шәрт тәмендеги теңлемени қанаатландырады:

$$\hat{L}^2 Y_{l,m} = l(l+1) Y_{l,m}. \quad (2.5.22)$$

$Y_{l,m} = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  функциялары сфералық ямаса шар функциялар деп аталады. Бул функциялар  $l$  ҳәм  $m$  пүтин мәниске ийе параметрлеринің жәрдеминде анықланады. Бул пүтин санларды квантлық санлар деп атайды.

$l$  орбиталық (азимуталлық) квантлық сан  $l = 0, 1, 2, \dots$  мәнислерин қабыл етеди.  $m$  квантлық санн магнит квантлық сан деп атайды ҳәм ол  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  мәнислерине ийе бола алады. Бул квантлық санларның физикалық мәнислерин биз тәменде талқылаймыз.

Базы бир нормировкаланған сфералық функциялар ушын анық формулаларды келтиремиз:

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \varphi, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(\pm i\varphi); \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta \exp(\pm i\varphi); \\ Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{5}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm i2\varphi), \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} \cos \theta (5 \cos^2 \theta - 3). \end{aligned}$$

(5/20)-аңлатпаға (2.5.21)-формадағы толқын функциясын қойсақ [бул аңлатпада  $Y(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ ] ҳәм бул мүйешлик көбейтиўшиге бөлсек радиал функция  $X(r)$  ушын:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dX}{dr} \right) + \left[ \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right] \cdot X = Ex \quad (2.5.23)$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемениң шешимин

$$X(r) = \frac{R(r)}{r} \quad (2.5.24)$$

туринде излеймиз. Бундай жағдайда усындағы түрге ийе болған биз излеп атырған  $X(r)$  функциясын (2.5.23)-теңлемеге қойсақ  $R(r)$  функциясы ушын әпиүайырақ теңлемеге ийе боламыз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} + \left[ \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \right] \cdot R = ER. \quad (2.5.25)$$

Бул теңлемеде узынлықтың характерли өлшеми ретинде  $a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$  Бор радиусын, ал характерли энергия ретинде водород атомының ионизация энергиясы болған  $W = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}$  шамасын қабыл етип бирлиги жоқ шамаларға өтемиз

$$\rho = Z \frac{r}{a} \quad \text{хәм} \quad \varepsilon = -\frac{1}{Z^2 W} E \quad (\varepsilon > 0) \quad (2.5.26)$$

Бундай жағдайда (2.5.25)-теңлеме

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \varepsilon \right) \cdot R = 0 \quad (2.5.27)$$

түрине ийе болады. Өзгөрмели коэффициентлерге ийе бул теңлемениң дәл шешимин еки функцияның көбеймеси түринде излеў керек болады:

$$R(\rho) = v(\rho) \cdot \exp(-\alpha\rho), \quad \alpha = \sqrt{\varepsilon}. \quad (2.5.28)$$

(2.5.28)-аңлатпаны (2.5.27)-аңлатпаға қойсақ изленип атырған жаңа  $v(\rho)$  функциясы ушын теңлемени табамыз. Қурамалы емес есаплаўлардан кейин

$$\frac{d^2v}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{dv}{d\rho} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) v = 0 \quad (2.5.29)$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемениң шешими болған  $v(\rho)$  функциясын дәрежели қатар түринде излеймиз

$$v(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^{k+l+1}. \quad (2.5.30)$$

Бул қатардың  $a_k$  коэффициентлерин табыў ушын (2.5.30) ды (2.5.29) ға қоямыз ҳәм  $\rho$  шамасының бирдей дәрежеге ийе ағзаларын жыйнаймыз. Бундай әмеллер

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\infty} a_k [(k+l+1)(k+l) - l(l+1)] \rho^{k+l+1} + \\ & + \sum_{k=0}^{\infty} [2 - 2\alpha(k+l+1)] \rho^{k+l} = 0 \end{aligned} \quad (2.5.31)$$

түриндеги теңлемениң пайда болыўына алып келеди. Бириңи қосылыўшыда  $k = 0$  теңлиги орынланғанда квадрат қаұсырмадағы аңлатпа нолге айланады. Соныңтан суммалаў  $k = 1$  мәнисинен басланады. Демек бириңи суммадағы суммалаў индексин бирге жылыстырып (2.5.31)-формуланы

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{a_{k+1}[(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1)] + a_k[2 - 2\alpha(k+l+1)]\} \rho^{k+l} = 0$$

түрине шекем түрлендириў мүмкін. Бул теңликтин барлық  $\rho$  лар ушын орынланыўы ушын оның ҳәр бир дәрежесиниң алдындағы коэффициенттиң нолге тең болыўы керек. Соныңтан (2.5.30)-аңлатпадағы қатар (2.5.29)-теңлемениң шешими бола алады, егер оның коэффициенттери ушын төмендегидей рекуррентли қатнас орынланатуғын болса:

$$a_{k+1} = a_k \frac{2\alpha(k+l+1) - 2}{(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1)}. \quad (2.5.32)$$

(2.5.29)-теңлемесиниң бир теклилиги (2.5.32)-теңлемедеги  $a_0$  коэффициентин салап алғыдан кейин дәслеп  $a_1$  ди, кейин  $a_2$  ни, буннан кейин басқа да коэффициентлерди анықлауға мүмкіншилик береди. Усындај жоллар менен барлық  $a_k$  коэффициентлерин есаплат болғаннан кейин (2.5.29)-теңлемениң биз излеп атырған шешимлерин  $\rho$  ның дәрежелери бойынша белгили коэффициентлері бар (2.5.30)-қатар түринде табамыз.

(2.5.32)-аңлатпадан  $k$  ның жеткиликли дәрежедеги үлкен мәнислери ушын (2.5.30)-қатардың коэффициентлери арасындағы қатнастың  $a_{k+1} \approx \frac{2\alpha}{k} a_k$  түрине ийе болатуғынлығы келип шығады. Бирақ тап усындај байланыс

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\alpha)^k}{k!} \rho^k = \exp(2\alpha\rho)$$

қатарының коэффициентлери арасында да орын алады. Бул қатар экспонентаның  $2\alpha\rho$  дәрежеси бойынша жайыўды көрсетеди.

Демек (2.5.30)-аңлатпадағы қатар шексиз көп қосылыўшылардан тұрса, онда  $\rho$  ның жеткиликли дәрежедеги үлкен мәнислери ушын  $v(\rho)$  функциясы төмендегидей асимптотикаға ийе болады

$$v(\rho) \approx \rho^{l+1} \cdot \exp(2\alpha\rho).$$

Бирақ (2.5.28)-аңлатпадан ҳәтте  $\exp(2\alpha\rho)$  көбейтиўши sine көбейткеннен кейин де  $\rho \rightarrow \infty$  шегинде  $R(\rho)$  радиаллық қураўшының шексиз өсетуғынлығы келип шығады. (2.5.21) менен (2.5.24)-аңлатпаларды есапқа алғанда да усындај шексиз өсиў биз излеп атырған Шредингер теңлемесиниң шешиминде де бақланады. Бундай функция нормировка шәртин қанаатландырмайды ҳәм сонлықтан оны электронның толқын функциясы сыпатында қарай алмаймыз.

Бирақ егер (2.5.39)-аңлатпадағы қатар қандай да бир ағзада үзилип (бөлиннип) қалса, яғни шекли дәрежели көп ағзалы болса, онда биз дүзген Шредингер теңлемесиниң шешими  $\rho \rightarrow \infty$  шегинде кемейеди ҳәм регулярлықтың барлық шәртлерин қанаатландырады. Тек усындај жағдайда ғана (2.5.28)-аңлатпадағы экспоненциаллық көбейтиўши шексизликтे толқын функциясының модулиниң квадратының киширейиүйн тәмийинләйdi.

(2.5.32)-аңлатпадан (2.5.30)-аңлатпадағы қатардың  $k = n_r$  ағзасындағы үзилип қалыуы

$$2\alpha(n_r + l + 1) = 2 \quad (2.5.33)$$

шәрти орынланғанда орын алады.  $n_r + l + 1$  пүтиң санын  $n$  арқалы белгилеймиз (яғни  $n = n_r + l + 1$ ). Бундай жағдайда  $n_r$  ди радиаллық квантлық сан, ал  $n$  ди бас квантлық сан деп атайды.  $n \geq l + 1$ , яғни  $l \leq n - 1$  екенлиги көринип түр.

Бундай жағдайда (2.5.33) шәрти  $\alpha n = 1$  ямаса  $\epsilon = 1/n^2$  түрине енеди. (2.5.26)-шәртти есапқа алғанда бул шәртти атомдағы электронның толық энергиясын квантлаудың шәрти сыпатында қабыл етиўге болады

$$E_n = -\frac{Z^2 me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5.34)$$

Солай етип толқын функциясының регулярлығы шәрти атомның энергиясының квантланыў шәртине алып келди. Бул шәрт  $Z = 1$  болған жағдайда Бор теориясындағы водород атомындағы энергияның квантланыўына дәл сәйкес келеди. Соныңтан (2.5.34)-формуладан экспериментлерде тексерилип көрилген (2.5.14) Бальмер формуласы келип шығады.

Солай етип электронның водород тәризли атомлардағы толқын функциясы н ұм к квантлық санларнан ғәрзели болады еken ұм былайынша жазылады

$$X_{nl}(\rho) = \rho^l \cdot \exp\left(-\frac{\rho}{n}\right) \cdot \sum_{k=0}^{n_r} \alpha_k \rho^k. \quad (2.5.35)$$

Бул аңлатпада  $\rho = Z \cdot r/a$ ,  $n_r = n - (l + 1)$ ,  $l \leq n - 1$ , ал  $\alpha_k$  коэффициентлери болса  $k > 0$  болған жағдайларда (2.5.12)-аңлатпаның жәрдеминде анықланады.  $a_0$  коэффициентиниң мәниси ең ақырында толқын функциясының нормировка шәртинен анықланады. Бул шәрти сфералық координаталар системасында былайынша жазамыз

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi = 1. \quad (2.5.36)$$

Бул формулада  $dV = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$  арқалы сфералық координаталардағы көлемниң элементи белгиленген.

Солай етип атомдағы электронның квантлық ҳалды анықтайтуғын толқын функциясы табылды. Ол мынадай түрге ийе:

$$\psi_{nlm}(\rho, \theta, \varphi) = X_{nl}(\rho) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

ұм ол  $n, m$  және  $l$  санларынан ғәрзели.

Орбиталық квантлық сан болған  $l$  санының берилген мәнисине сәйкес келиүши квантлық ҳалларды белгилеў ушын төмендегидей спектроскопиялық символлар қолланылады:

$l$ дин мәниси	0	1	2	3	4	5	6	...
Ҳалдың белгиси	s	p	d	f	g	h		

$l = 0$  болған ҳалды s-ҳал, ал усындағы ҳалдағы электронды s-электрон деп атайды.  $l = 1$  болған ҳалды p-ҳал деп атайды.

Электронның уывыт ҳалын толығырақ белгилеў ушын  $n$  бас квантлық санының мәнисин де бериў керек. Бул квантлық сан ҳалдың белгисиниң алдында жазылады. Мысалы  $n = 2$  ұм  $l = 0$  болған квантлық ҳалдағы электронды 2s белгиси менен белгилеймиз, ал  $n = 4$  ұм  $l = 2$  болған квантлық ҳалдағы электронды 4d арқалы белгилеймиз. Бундай мысалларды көплеп келтириў мүмкин.

Барлық үақытта  $l \leq n - 1$  теңсизлиги орынланатуғын болғанлықтан

$$\begin{aligned} n &= 1 \rightarrow 1s, \\ n &= 2 \rightarrow 2s, 2p, \\ n &= 3 \rightarrow 3s, 3p, 3d \\ n &= 4 \rightarrow 4s, 4p, 4d, 4f \end{aligned}$$

ұм тағы басқаларды жазыўымыз мүмкин.

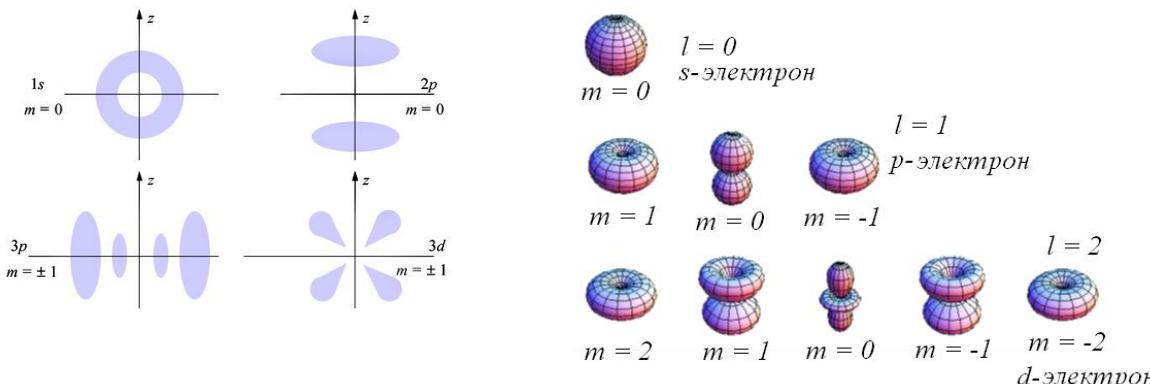
$Y_{lm}(\theta, \varphi)$  сфералық функцияларының қәсийетлерин таллау барлық с-электронлардың, яғни  $l = 0$  ҳәм  $m = 0$  ҳаллардың сфералық симметрияға ийе ҳаллар екенлигин көрсетеди. Бул ҳаллардағы толқын функциясының мәниси  $\theta$  ҳәм  $\varphi$  мүйешлик өзгериүшилеринин мәнислеринен ғәрэзли емес.

Параграфтың ақырында водород тәризли бир қатар атомлардағы нормировкаланған толқын функцияларын жазамыз.

$n$	$l$	$m$	$\psi_{nlm}$	Ҳал
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \exp(-\rho)$	1s
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} (2 - \rho) \exp(-\frac{\rho}{2})$	2s
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \cos \theta$	2p
2	1	+1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \sin \theta \exp(-i\pi)$	2p
2	1	-1	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \sin \theta \exp(i\pi)$	2p

2.5.7a-сүйретте водород атомындағы бир қатар квантлық ҳаллар ушын биз жоқарыда тапқан толқын функцияларының жәрдеминде итималлықтың радиаллық электронлық тығызлығы "думан" түриндеги көрсетилген. Бул "думан"ның тығызлығы кеңисликтиң хәр қыйлы ноқатларында усы итималлықтың тығызлығына туýры пропорционал. Квантлық теорияда тап усындай итималлықтың тығызлығының тығызлығы думаны түринде атомның образы тап усындай усылда бериледи.

2.5.7b сүйретте болса Mathematica 8.0 универсаллық программа аудио тилинде алынған сәйкес сүйретлер берилген.



2.5.7a сүйрет. Водород атомындағы бир қатар квантлық ҳаллар ушын толқын функцияларының жәрдеминде итималлықтың радиаллық электронлық тығызлығы "думан" түриндеги көриниси.

2.5.7b сүйрет. Mathematica 8.0 универсаллық программа аудио тилинде есапланған водород атомындағы бир қатар квантлық ҳаллар ушын толқын функцияларының жәрдеминде итималлықтың радиаллық электронлық тығызлығы "думан" түриндеги көриниси.

**5.3-мәселе.** Водород атомындағы  $1s$  қәм  $2p$  ҳаллардағы электронды ядродан қандай қашықлықтарда ең үлкенирек итималлық пенен табыудың мүмкін екенлигин анықлаңыз.

**Шешими:** Мәселениң шәртинде берилген ҳаллардағы электронды ядродан ҳәр қыйлы қашықлықтарда табыу мүмкін. Бундай жағдайда электронды ядродан  $r$  қашықлығында табыудың итималлығы радиуслары  $r + dr$  шамасынан  $r + dr$  шамасына шекемги жуқа шар қатlamында табыудың итималлығына тең. Бул итималлық былайынша анықланады

$$dP = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\theta d\varphi.$$

Бул итималлық қатlamындағы қалыңлығы  $dr$  ге пропорционал, яғни

$$dP = \omega(r) dr.$$

Ядродан ең итимал қашықлықты  $r^{(итимал)}$  арқалы белгилейик. Бундай қашықлық ушын итималлықтың радианлық тығыздығы  $\omega(r)$  шамасы максималлық мәниске ийе болыуы шәрт.

Жоқарыда келтирилген кестеден водород атомының электронының толқын функцияларын алып,  $1s$  ҳал ушын

$$\omega_1(r) = A r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right), \quad A = const$$

екенлигине ал  $2p$  ҳалы ушын

$$\omega_2(r) = B r^4 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right), \quad B = const$$

екенлигине ийе боламыз. Бул функциялардың тууындыларын нолге теңеп  $1s$  ҳалы ушын  $r_1^{(итимал)} = a$  мәнисин аламыз. Демек бул ҳалдағы электронды ядродан биринши Бор орбитасының радиусына теңдей қашықлықтарда табыудың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады деген сөз.

$2p$  ҳаллары ушын  $r_2^{(итимал)} = 4a$  шамасына ийе боламыз. Демек  $2p$  ҳалда турған электронды табыудың итималлығы ядродан  $4a$  шамасына тең қашықлықта, яғни ядродан екинши Бор орбитасының радиусына тең қашықлықта табыудың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады.

Солай етип квантлық механиканда электронның белгили бир орбита бойынша қозғалыуы ҳаққындағы көз-қарас пайдаланылмайтуғын болса да бул теорияда Бор орбитасының радиуслары белгили бир физикалық мәниске ийе болады екен.

**5.4-мәселе.** Тийкарғы ҳалда турған водород атомы ушын ядродан ҳәр қыйлы қашықлықтардағы электр майданының потенциалын анықлаңыз.

**Шешими:** Биз излеп атырған потенциал ядроның майданының потенциалынан қәм электронның ядроның дөгерегинде айланыуы менен байланыслы болған электронлық "думанның" потенциалының қосындысынан турады:  $\varphi = \varphi_n + \varphi_e$ . Бул аңлатпада  $\varphi_n$  арқалы ядро майданының потенциалы белгиленген.

Толқын функциясының итималлықлық мәниси бойынша электрон "бултындағы" электр зарядының көлемлик тығыздығы  $\rho_e = -e|\psi_{100}|^2$  шамасына

тең. Кеңисликте тап усындағы болып тарқалған зарядтың майданының потенциалын потенциал ушын жазылған Пуассон теңлемесин шешій жолы менен анықланады:

$$\Delta\varphi_e = -\frac{\rho_e}{\epsilon_0}.$$

Егер водород атомында қашықлықтың масштабы ҳәм характерли потенциал ушын Бор радиусы  $a$  ны ҳәм усындағы қашықлықтағы ядроның потенциалы  $\varphi_0 = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a}$  шамасын қабыл етсек, онда бирликлери жоқ түрде Пуассон теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\varphi_e}{dr} \right) = 4 \exp(-2r).$$

Бул теңлемени

$$\frac{1}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} (r \varphi_e) = 4 \exp(-2r).$$

турине алып келиў мүмкін. Бул бир текли емес дифференциал теңлемениң шешиминиң

$$\varphi_e = \left( \frac{1}{r} + 1 \right) \exp(-2r) - \frac{1}{r}$$

функциясы екенлигине аңсат көз жеткериўге болады. Биз пайдаланып атырған бирлиги жоқ өзгериўшилердеги ядроның майданының потенциалы  $\varphi_n = \frac{1}{r}$  болғанлықтан атомдағы электр майданының потенциалы ушын

$$\varphi = \varphi_n + \varphi_e = \left( \frac{1}{r} + 1 \right) \exp(-2r)$$

аңлатпасын аламыз. Өлшем бирлиги бар шамаларға қайтып келип водород атомының тийкарғы ҳалы ушын электр майданының потенциалының кеңисликтеги тарқалыўы ушын

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a} \left( \frac{a}{r} + 1 \right) \exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$$

формуласын аламыз. Бул аңлатпаны талласақ, онда ядроның қасында (бундай жағдайда  $r \ll a$ ) потенциалдың

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r}$$

шамасына тең болатуғынлығын көремиз. Демек кеңисликтиң бул обласында электр потенциалы тек ядроның оң мәниске ийе заряды тәрепинен пайда етиледи екен.

Ядродан қашықласқан сайын терис зарядқа ийе электронлық "думанның" майданы ядроның майданын экранлай баслайды. Сонықтан ядродан жеткилики дәрежедеги үлкен қашықлықтарда, яғнай  $r >> a$  шәрти орынланғанда

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right),$$

яғнай қадардан қашықлаған сайын потенциал экспоненциаллық нызам менен тез кемейеди.

## 2-5-4. Квантлық санлар ҳәм олардың физикалық мәниси

Биз Шредингер теңлемеси водород атомы ушын шешкенимизде бундай атомдағы электронның квантлық ҳалының (яғнай атомның өзиниң квантлық ҳалының) үш квантлық санн берій менен толық анықланатуғының көрдик. Демек квантлық санларның мәнислери берилген болса атомның қәсийетлерин толық тәрийиплеўге болады деген сөз.

Квантлық санларның бериниң мәнислери пүтиң санға тең ҳәм олар атомның берилген квантлық ҳалдағы тийкарғы физикалық шамаларды өлшегендеп алынатуғын нәтийжелерди болжауға мүмкіншилик береди.

1. Бас квантлық сан  $n$ . Бул квантлық сан  $n = 1, 2, 3, \dots$  мәнислерине тең бола алады ҳәм қәлелеген квантлық ҳалдағы электронның толық энергиясын анықлады

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ эВ.} \quad (2.5.37)$$

Энергияның бул мәнислериниң (2.5.17a) гамильтонианың меншикли мәнислери екенлигин атап өтепиз. Соныңтан водород атомындағы байланысқан ҳалда терис мәнисли дискрет энергия спектрине ийе болады, Энергия қәддилери арасындағы айырма  $E = 0$  шамасына жақынласқанда қойыуласады ҳәм дискретлик жоғалады.

2. Орбиталық (азимуталлық) квантлық сан  $l$ . Бас квантлық санның мәниси берилген квантлық ҳаллардың азимуталлық квантлық сан

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

мәнислерине ийе болады.

Жоқарыдағы параграфта исленген жуўмақтар бойынша атомның ҳәр қыйлы квантлық ҳалларды тәрийиплейтуғын  $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$  толқын функциялары тек толық энергия операторы  $\hat{H}$  тың ғана емес, ал  $\hat{L}^2$  импульс моментиниң квадраты операторының да меншикли функциялары болып табылады. Усының менен бирге

$$\hat{L}^2\psi_{nlm} = l(l + 1)\hbar^2\psi_{nlm}.$$

Демек қәлелеген квантлық ҳалда атом белгили бир импульс моментиниң квадратының мәнисине ийе болады. Соның менен бирге атомда қозғалатуғын электронның импульсиниң орбиталық моменти азимутал квантлық санның жәрдеминде анықланады:

$$L = \hbar\sqrt{l(l + 1)}. \quad (2.5.38)$$

Импульс моментиниң квантланыуының бул формуласын таллаймыз. Бор теориясындағы қозғалышы электронның импульс моментиниң квантланыуы (2.5.3) пенен бул шәрттиң сәйкес келмейтуғынлығы айқын көринеди. Мәселе бул формулалар жәрдеминде санлық мәнислердиң ҳәр қыйлы екенлигинде емес. Принципиаллық айырма мынадан ибарат: квантлық механиканда атомның импульс моменти нолге тең болған ұалларының да бар болыуы мүмкін. Барлық с ұалларда, мысалы  $1s$  ұалда  $l = 0$  ҳәм (2.5.38)-аңлатпа бойынша  $L = 0$ .

Атомда белгили бир траектория (яғнай орбита) бойынша қозғалышы электронды классикалық физика көз-қараслары менен қарағанда импульс моментиниң нолге тең болыуы мүмкін емес.

Тәжирийбелер ноллик орбиталық моментке ийе ұаллардың бар екенлигин тастыйықлады. Демек атомдағы электронның қозғалысын тәрийиплеүдин классикалық усылынан бас тартқанда ғана атомның қәсийетлерин дурыс есаплауға ҳәм болжайға болатуғынлығын көрсетеди. Квнат механикасындағы бөлекшелердин қозғалысын тәрийиплеүдин итималлықтың усылы атомлық системаларды тәрийиплеүдин бирден бир дурыс усылы болып табылады. Ҳәзирги заман физикасының жуўмақтарының мәниси усыннан ибарат.

Ядроның әтирапында қозғалышы электрон зарядланған бөлекше болғанлықтан, бундай қозғалыс атомда базы бир түйік тоқтың болатуғынлығына сәйкес келеди. Бундай түйік тоқты орбиталық магнит моменти  $\vec{p}^m$  арқалы тәрийипленеди.

Бор теориясында электронның орбиталық механикалық моменти  $L = mvr$  шамасына тең. Егер электронның ядроның әтирапын бир рет айланып шығыуы ушын кеткен үақытты  $T$  арқалы белгилесек, онда усындағы қозғалысқа мәниси

$$i = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}$$

шамасына тең түйік тоқ сәйкес келеди. Бул тоққа

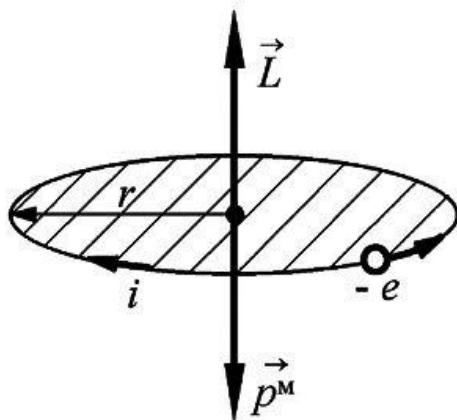
$$p^m = i\pi r^2 = \frac{2vr}{2}$$

магнит моменти сәйкес келеди. Бундай жағдайда механикалық ҳәм магнит моментлери арасындағы байланыс

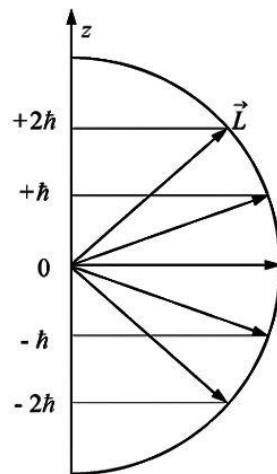
$$\Gamma_0 = \frac{p^m}{L} = \frac{e}{2m} \quad (2.5.39)$$

гиромагнитлик қатнастың жәрдеминде анықланады. Электронның заряды терис болғанлықтан магнит моменти векторы  $\vec{p}^m$  менен механикалық момент векторы  $\vec{L}$  бир бирине қарама-қарсы бағытланған (2.5.8-сүйрет).

Квантлық механиканда орбиталық магнит моментин табыу ушын электр тоғының кеңисликтери тығызлығы  $\vec{j}_e$  шамасын итималлықтардың ағысының тығызлығы  $\vec{j}$  арқалы  $\vec{j}_e = -e\vec{j}$  формуласы бойынша анықладап алғыу керек болады. Итималлықтар ағысы тығызлығын атомның берилген квантлық ұалдың сәйкес келетуғын толқын функциясын билиү арқалы (3.23)-формуланың жәрдеминде есаплады. Гиромагнит қатнастың дәл квантлық механикалық есаплаулыры да (2.5.39)-формулаға алып келеди.



2.5.8-сүйрет.



2.5.9-сүйрет.

Солай етип қәлекен квантлық ҳалда водород атомы тек механикалық моментке емес [оның шамасын (2.5.38)-формуланың жәрдеминде есаптаймыз], ал магнит моментине де ийе болады екен

$$p^m = \Gamma_0 L = \mu_b \sqrt{l(l+1)}. \quad (2.5.40)$$

Бул аңлатпадағы универсаллық турақты

$$\mu_b = \frac{e\hbar}{2m} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл}$$

шамасы атомлардың магнит моментлерин өлшеү бирлиги сыпаттында хызмет етеди ҳәм оны Бор магнетоны деп атайды.

Егер атом бир ҳалдан екинши ҳалға фотонды нурландырыў ямаса жутыў менен өтсе, онда орбиталық квантлық сан  $l$  дин тек бирге өзгеретуғын өтийлердин болыўы мүмкин, яғни  $\Delta l = \pm 1$ . Демек оптикалық өтийлер ушын айттылған  $\Delta l = \pm 1$  өтийleri таңлап алыш қағыйдасы (правило отбора) деп аталауды. Бундай таңлап алыш қағыйдасының орын алышына тикелей себеп бар. Нурландырылған электромагнит нурлары (фотон) өзи менен бирге тек энергияны ғана емес, ал белгили бир импульс моментин де алыш кетеди. Сонықтан фотон нурланғанда электронның орбиталық квантлық сан бирге өзгериүи шәрт.

3. Магнит квантлық сан  $m$ . Орбиталық квантлық сан  $l$  берилген квантлық ҳалда магнит квантлық сан  $(2l+1)$  түрли мәниске ийе бола алады. Олар мыналар

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Магнит квантлық сан  $m$  ниң физикалық мәниси төмендеги жағдайлар менен байланыслы:

Водород атомындағы электронның квантлық ҳалды сыпаттайтуғын  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  толқын функциясы импульс моментиниң проекциясы операторы  $\hat{L}_z$  тиң меншикли функциясы болып табылады. Қала берсе

$$\hat{L}_z \psi_{nlm} = m\hbar \psi_{nlm}.$$

Сонлықтан квантлық механиканың улыўмалық қағыйдаларынан (3.5-параграфты қараңыз) электронның импульсиниң моментиниң айырып алынған з көшерине түсирилген проекциясының тек белгили бир мәнислерге ийе болатуғынлығы келип шығады. Бул мәнислер мыналар:

$$L_z = m\hbar. \quad (2.5.41)$$

Кеңисликтеги з бағытын усы бағытта электр ямаса магнит майданын пайда етиў жолы менен айырып алыўға болады.

(2.5.41)-формуланы кеңисликтеги квантланыў формуласы деп атайды. Механикалық моменттиң проекциясы формуласы болған (2.5.41)-формула  $\vec{L}$  векторының кеңисликте белгили бир бағыттарға ийе болатуғынлығын көрсетеди (2.5.9-суýрет). Электронлық орбиталар ҳақындағы классикалық көз-қараслар бойынша  $\vec{L}$  векторы барлық ўақытта орбита тегислигине перпендикуляр бағытланған. Демек (2.5.41)-аңлатпа кеңисликтеги орбиталардың сырттан түсирилген майданың бағытына салыстырғанда дискрет түрде жайласатуғынлығын сәўлелендиреди екен.

Жоқарыда гәп етилген атомның магнит ҳәм механикалық моментлері арасындағы байланыс (2.5.41)-аңлатпаны есапқа алғанда атомның магнит моментиниң айырып алынған з бағытына түсирилген проекциясының мүмкін болған мәнислерин анықлауға мүмкиншилик береди екен:

$$p_z^m = \Gamma_0 L_z = m\mu_b. \quad (2.5.42)$$

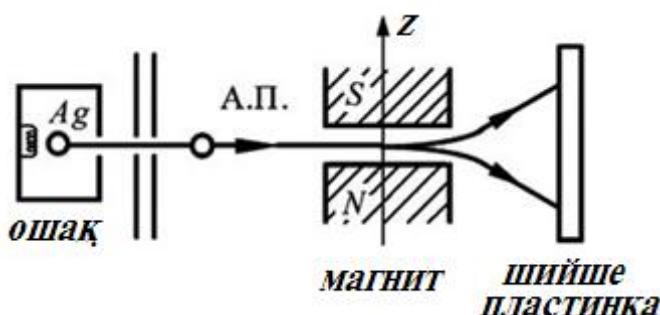
Демек атомның магнит моментиниң айырып алынған з бағытына түсирилген проекцияларының мүмкін болған мәнислері магнит квантлық санның ғәрэзли болады екен.

## 2-5-5. Штерн ҳәм Герлах тәжирийбеси. Электронның спини ҳақындағы гипотеза

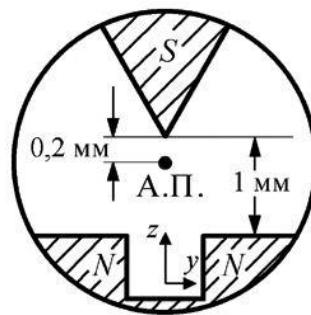
**Штерн ҳәм Герлах тәжирийбеси.** Оптикалық экспериментлер атомлардың энергиясының квантланатуғынлығы ҳақындағы жеткиликли болған мағлыўматтарды береди. Енди квантланыўдың басқа түри болған кеңисликтеги квантланыўды қараймыз. Бул квантланыў атомның магнит моментиниң сыртқы магнит майданы бағытына түсирилген проекциясының дискрет мәнислерге ийе болыуынан ибарат. Кеңисликтеги квантланыў экспериментте 1922-жылы О.Штерн ҳәм В.Герлах тәрепинен ашылды.

Водород атомы ушын орбиталық магнит моментиниң кеңисликтеги квантланыўы (2.5.42)-формуланың жәрдемінде сыпатланады. Қурамалырақ атомлар ушын бул формууланың түри өзгерислерге ушырайды (2.5.6-параграфты қараңыз). Бирақ бундай атомлар ушын да квантлық механиканың тийкары жуўмағы өз күшинде қалады: атомның магнит моментиниң сырттан түсирилген майданының бағытына түсирилген проекциясы тек дискрет квантлық мәнислерге ийе болады.

Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесинде атомлық система ушын кеңисликтеги квантланыўбы лайынша демонстрацияланады. Вакуум ошағында пүўландырыў ҳәм енсиз саңлақтар арқалы өткериў жолы менен гүмистиң ямаса басқа металдың атомларының жиңишке дәстеси алынады. (2.5.10а-сүүрет). Бул дәсте бир текли емес магнит майданы арқалы өткериленди. Бул майданда магнит индукциясының үлкен градиентиниң болыуы шәрт. Тәжирийбеде магнит майданының индукциясы  $\vec{B}$  үлкен мәниске ийе ҳәм з көшери бағытында бағытланған.



2.5.10a сүүрет.



2.5.10b сүүрет.

Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесиниң схемасы.

Бундай магнит майданын пайда етиў ушын пышақтың жүзи сыйқылдық полюске ийе магнит қолланылады (2.5.10b-сүүрет). Бул магниттен жудә жақын қашықтықтан атомлар дастеси өткериленди.

Магнит полюслери арасынан өтиўши атомларға магнит майданы бағытында

$$F_z = p_z^m \frac{\partial B}{\partial z} \quad (2.5.43)$$

куши тәсир етеди. Бул күш бир текли емес магнит майданының индукциясының градиентиниң есабынан пайда болады ҳәм атомның магнит моментиниң майданының бағытына түсирилген проекциясының шамасынан ғәрезли. Усы күштин әсеринде атомлар дастеси z көшери бағытында айысыўта ушырайды. Бул

аўысыўдың шамасы атомға тәсир етиўши (2.5.43)-күшке байланыслы. Нәтийжеде бир қанша атомлар жоқарыға, бир қанша атомлар төменге қарай аўысады.

Классикалық физика көз-қараслары бойынша тәртипсiz жыллылық қозғалыслары орын алатуғын болғанлықтан магнит майданына кирип келгенде атомлардың магнит моментлери қәлеген бағытқа қарай бағытланған болады. Усындај җәдай ҳәр қандай атомлар ушын  $F_z$  күшиниң үзликсиз тарқалыўына, яғни атомлар дәстесиниң кеңисликтеги үзликсиз аўысыўына сәйкес келеди. Нәтийжеде магнит арқалы ушып өткен гүмис атомлары шийше пластинкада тутас дақты пайда етиўи керек (гүмис атомлары шийше пластинкаға келип түсип оған қатады, бундай процессти "напыление" – шаңландырыў деп атайды).

Егер квантлық механиканың көрсеткениндей кеңисликтеги квантланыў орын алатуғын болса атомның магнит моментиниң проекциясы  $p_z^m$  тек дискрет мәнислерге ийе болады ҳәм (2.5.43)-күштин тәсиринде атомлар дәстеси дәстелердин дискрет санына бөлинүү керек. Нәтийжеде шийше пластинкада атомлардың айналық дискрет жолақлары пайда болады. Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесинде тап усындај нәтийже бақланды.

Солай етил Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесинде атомлардың магнит моментлериниң кеңисликлик квантланыўы ҳақындағы квантлық механиканың жуўмақлары тастыыйықланды.

**Электронның спини.** Квантлық механиканан электронлық "думанның" симметриясының бар екенligиниң нәтийжесинде тийкарғы қозбаған ҳалда турған атомның механикалық ҳәм магнитлик моментлери нолге тең болатуғынылығы келип шығады. Демек, егер Штерн ҳәм Герлах тәжирийбелеринде атомлар дәстесинде қозбаған атомлар қозғалатуғын болса, онда бундай атомлар дәстеси магнит майданында бағытын өзгертпеўи керек. Бундай жағдайда шийше экранда тек бир енсиз айналық жолақты бақлаған болар едик.

Бирақ эксперимент квантлық механиканың бундай жуўмағын тастыыйықламады. Тәжирийбелер қозбаған атомлар дәстесиниң тек еки дәстеге ажыратуғынылығын көрсетти. Шийше пластинкада болса жоқарыға ҳәм төменге қарай симметриялы жайласқан енсиз еки жолақ пайда болды. Бул аўысыўларды өлшеў қозбаған гүмис атомларының магнит моментин анықлауға мүмкіншилик берди. Магнит майданының бағытында түсирилген оның проекциясы  $+\mu_B$  ҳәм  $-\mu_B$  шамаларына тең болып шықты.

Квантлық механика менен тәжирийбе арасындағы бул қарама-қарсылық бириńши қарама-қарсылық емес еди. Тап сондай айырма силтили металлардың оптикалық спектриниң жүдә жуқа спектрин үйренгенде де бақланған еди. Ферромагнетиклер менен өткерилген тәжирийбелерде гиромагнитлик қатнастың аномаллық мәниси анықланды. Бул мәниси күтилген мәнистен еки есе артық болып шықты.

Квантлық механиканың бул қыйыншылықтары 1925-жылы сапластырылды. Усы жылы С.Гаудсmit ҳәм Дж.Уленбек электронның өзи "меншикли" механикалық ҳәм магнит моментлерине ийе болады, бул моментлер электронның кеңисликтеги қозғалысы менен байланыслы емес деген батыл теорияны усынды. Бул гипотеза электронның спин ҳақындағы гипотеза атамасын алды. Бундай атама инглиз тилиндеги spin сөзи менен байланыслы. Бул сөзди қарақалпақшаға аўдарғанда "айланыў" деген мәнисти береди.

Дәслеп спин электронның өзиниң көшери дөгерегинде айланыўы менен байланыслы деген болжаў қабыл етилди. Бирақ айланыўшы зарядланған шарик модели дурыс болмай шықты. Есаплаўлар бириńши гезекте электрон қандай тезлик пенен айланса да (яғни жақтылықтың тезлигинен киши тезлик нәзерде тутылады) Бор магнетонына тең магнит моментин пайда етиў мүмкін емес

екенлигин көрсетти. Усының менен бир қатарда айланышы электрон модели менен есапланған меншикли магнит ҳәм механикалық моментлердің гиромагнитлик қатнасының мәниси тәжирийбеде алынған шамадан еки есе киши болып шықты.

Солай етип Жер сияқты өз көшери дөгөрегинде айланышы электрон модели дұрыс болмай шықты. Бирақ "спин" термини сақланып қалды ҳәм ҳәзирги заман квантлық механиканың тийкарғы терминлериниң бирине айланды.

Электронның спини классикалық аналогына ийе емес. Спин квантлық бөлекшениң ишкі квантлық қәсийети болып табылады ҳәм ол бөлекшеде қосымша еркинлик дәрежесиниң бар екенлиги менен байланыслы. Бул еркинлик дәрежесиниң санлық характеристикасы спин  $s = \frac{1}{2}$  электрон ушын тән болған масса, заряд сияқты физикалық шама болып табылады.

Теория менен эксперимент жуўмақтарын бир бири менен сәйкеслендириуде Гаудсмит ҳәм Уленбеклер орбиталық моментлерге сәйкес электронның меншикли механикалық ҳәм магнит моментлериниң шамалары

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \text{ ҳәм} \quad (2.5.44)$$

$$p_s^m = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}\mu_B \quad (2.5.45)$$

формуласы менен анықланады деп болжады. Бундай моментлер ушын гиромагнитлик қатнас

$$\Gamma_s = \frac{p_s^m}{L_s} = \frac{2\mu_B}{\hbar} = \frac{e}{m} \quad (2.5.46)$$

шамасына тең ҳәм орбиталық қозғалыс ушын келтирилип шығарылған (2.5.39)-гиромагнитлик қатнастан еки есе үлкен болып шығады.

Бул теорияда меншикли моментлердің берилген z бағытына түсирилген проекциясы  $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$  квантлық санның жәрдемтінде анықланады. Бундай жағдайда

$$L_{sz} = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}, \quad (2.5.47)$$

$$p_{sz}^m = 2m_s \mu_B = \pm \mu_B \quad (2.5.48)$$

шамаларына тең болады. (2.5.44 - 5.48) аңлатпалардан электронның спинлик моментлериниң шамаларының турақты екенлиги келип шығады. Ал электронның қосымша еркинлик дәрежеси менен бул моментлердің z дана проекциясы байланыслы. Бул проекциялар  $m_s$  квантлық санның жәрдемінде анықланады ҳәм тек еки мәниске ийе болады. Бундай еки квантлық ҳаллар ҳақында гәп еткенде спини жоқарыға қарай бағытланған ( $m_s = +\frac{1}{2}$ ) ҳәм спини төменге қарай бағытланған ( $m_s = -\frac{1}{2}$ ) ҳаллар нәзерде тутылады. Соныңтан электронның қәлеген системадағы ҳалы ҳақында гәп етилгенде спини бағытын да көрсетиү керек болады.

Демек электронның атомдағы квантлық ҳал төрт квантлық санның жәрдемінде анықланады екен. Оларды төмендегидей кесте түринде көрсетемиз.

	гиси	мәнислери
Бас квантлық сан	$n$	1, 2, 3, ...
Орбиталық (азимутал) квантлық сан	$l$	1, 2, 3, ..., (n-1)
Магнит квантлық сан	$m$	- $l$ , ..., -2, -1, 0, +1, +2, ..., + $l$
Спин квантлық сан	$m_s$	$-\frac{1}{2}$ , $+\frac{1}{2}$

$n$  бас квантлық санның ҳәр бир мәнисине басқа квантлық санларның

$$2 \sum_0^{n-1} (2l + 1) = n^2 \quad (2.5.49)$$

комбинациясы сәйкес келеди.

Электронда спинниң бар екенлигин есапқа алғып водород атомының импульсiniң толық моментин анықтаймыз. Бул толық момент электронның орбиталық ҳәм меншикли моментлериниң қосындысынан турады. Квантлық системадағы қәлелеген импульс моменти сыйқылы қосынды моменттиң шамасы

$$L_j = \hbar \sqrt{j(j+1)} \quad (2.5.50)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпадағы  $j$  квантлық сан

$$j = l + s \text{ ҳәм } j = |l - s|$$

мәнислерине иие бола алады. Электронның спини  $s = \frac{1}{2}$  шамасына тең болғанлықтан

$$j = l + \frac{1}{2} \text{ ҳәм } j = \left| l - \frac{1}{2} \right|$$

ярым пүтин мәнислерин аламыз. Егер  $l = 0$  болса  $j$  квантлық санның мәниси тек  $\frac{1}{2}$  ге тең болады. Егер  $l$  дииң мәниси нолге тең болмаса  $j$  квантлық санның  $j = l + \frac{1}{2}$  ҳәм  $j = l - \frac{1}{2}$  мәнислери болып, олар орбиталық моментке салыстырғанда спин моментлериниң ҳәр қыйлы бағыттарына сәйкес келеди.

Атомның толық импульс моментиниң квантлық сан ушын төмендегидей таңлап алай қағыйдасы орын алады:

$$\Delta j = 0, \pm 1.$$

Механикалық моментлер менен магнит моментлери байланысқан. Олар еки түйік тоқ сыйқылы бир бири менен тәсир етиседи. Бундай тәсирлесіү спин-орбиталық тәсирлесіү деп аталады. Бундай тәсирлесіү атомның толық энергиясын өзгертерди ҳәм сонлықтан ҳәр қыйлы  $j$  квантлық санна иие ҳалларда атом ҳәр қыйлы энергияға иие болыуы керек. Бундай айырманың болыуы атомның оптикалық спектриндеги сыйықтардың бир неше сыйықтарға айрылыуын тәмийинлейді. Оптикалық спектр сыйықтарының бир неше сыйықтарға айрылыуы жүдә кишкене мәниске иие болып, ол водород атомының оптикалық спектриниң жуқа курылышының пайда болыуына алып келеди. Бундай спектрде спектр сыйықтары

дублетлик (қос) структураға ийе. Бундай жуқа структурадағы сывықтар арасындағы қашықлықтар тийкарғы сывықтар арасындағы қашықлықтардан жүзлеген мың есе киши болса да экспериментаторлар бундай жуқа структураның бар екенлигин тәжирийбелериниң барысында жүдә сезгир ҳәм жоқары ажырата алғышылық қәбилеттікке ийе оптикалық әсбаплардың жәрдемінде анықлады.

Электронның спинге ийе болыўының физикалық тәбияты нелерден ибарат? Бул сораўға жуўап классикалық физикада да жоқ, релятивисттик емес квантлық механиканда да жоқ. Релятивисттик емес квантлық механиканың тийкарында Шредингер теңлемесиниң жататуғынлығын биз жақсы билемиз. Бундай теорияда спин қосымша гипотезаның жәрдемінде киргизиледи. Бул гипотеза теорияның тийкарғы қағыйдаларынан келип шықпайды, ал эксперимент пенен теорияның нәтийжелерин бир бири менен сәйкеслендириў мақсетінде пайдаланылады.

1928-жылы П.Дирак квантлық механикан бөлекшениң релятивисттик қозғалысы ушын улыўмаластырды. Релятивисттик квантлық теорияның (кват механикасының) тийкарында дәслеп релятивисттик электрон ушын жазылған Дирак теңлемеси жатады. Бул теңлеме өзиниң структурасы ҳәм математикалық аппараты бойынша Шредингер теңлемесине салыстырғанда әдеўир қурамалы. Бизиң курсымызда Дирак теңлемесин таллай алмаймыз. Бирақ Шредингер теңлемесин шешиўдің барысында үш квантлық санна ийе болғанымыздай, Дирак теңлемесин шешиўдің барысында төрттінши, спин квантлық санның тәбийи түрде пайда болатуғынлығын атап өтемиз.

Релятивисттик квантлық теория водород атомының жуқа спектрин пайда ететуғын энергия қәддилери арасындағы қашықлық ушын

$$\Delta E = \frac{\alpha^2}{16} E_i$$

шамасын береди. Бул аңлатпада  $E_i$  арқалы водород атомының ионизация энергиясы белгиленген.  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$  шамасы универсаллық дүньялық константа болып табылады. Ол жуқа структура турақтысы атамасына ийе болды.

Солай етип улыўмалық сөзлер менен электронның меншикли механикалық ҳәм магнит моментлериниң квантлық механикандағы релятивисттик эффект сипатында пайда болатуғынлығын айтып өтемиз.

Тек электрон емес, ал басқа да көп санлы элементар бөлекшелер  $s$  спинге ийе болады. Бир қатар бөлекшелер ушын спин путин мәниске ийе, ал басқа бөлекшелер ушын ярым путин мәниске ийе. Мысалы ядроның қурамалық бөлекшелери болған нейтрон менен протонның спинлери  $s = \frac{1}{2}$ . Сонлықтан водород атомының ядросы да механикалық ҳәм магнит моментлерине ийе. Электрон менен ядроның магнит моментлериниң өз-ара тәсирлесійиниң салдарынан водород атомларының оптикалық спектриниң аса жуқа структурасы жүзеге келеди. Бул спектр сывықтарының "аса киши" бөлеклерге бөлиниүй (бир сывықтың бир бирине аса жақын жайласқан сывықтарға ажыралыўы) түрінде көринеди.

**5.5-мәселе.** Водород атомы тийкарғы ҳалда радиусы  $R = 5$  м ҳәм тоқ күши  $I = 10$  А болған дөңгелек тоқтың көшеринде жайласқан. Атомның дөңгелек тоқтың орайына шекемги қашықлық  $z = 10$  см. Магнит майданы тәрепинен спинди есапқа алғанда водород атомына тәсир ететуғын күشتі анықлаңыз. Ядроның магнит моментин есапқа алмаңыз.

**Шешими:** Магнитостатиканың белгили формуласының жәрдемінде дөңгелек тоқтың көшериндеги оның орайынан  $z$  қашықлықта жайласқан орындағы магнит майданының индукциясын есаптаймыз

$$B(z) = \frac{\mu_0 I R^2}{2(R^2 + z^2)^{3/2}}.$$

*B* шамасын өзгериүши *z* бойынша дифференциаллап дөңгелек тоқтың орайынан *z* қашықлығындағы магнит майданының индукциясының градиентин табамыз

$$\left| \frac{\partial B}{\partial z} \right| = \frac{3}{2} \frac{\mu_0 I R^2 \cdot z}{(R^2 + z^2)^{5/2}}.$$

Егер ядроның магнит моментин есапқа алмасақ, онда  $1s$  ҳалдағы водород атомының магнит моменти ( $l = 0$ ) тек электронның спини тәрепинен пайда етиледи. Сонықтан

$$p_z^m = p_{zs}^m = \pm \mu_B.$$

Демек магнит майданы тәрепинен атомға модули

$$F = \mu_B \left| \frac{\partial B}{\partial z} \right| = \frac{3}{2} \frac{\mu_0 I R^2 \cdot z}{(R^2 + z^2)^{5/2}} \cdot \mu_B$$

шамасына тең болған күш тәсир етеди. Егер электронның магнит моменти магнит майданына паралель болса, онда бул күш дөңгелек тоқтың көшери бойлап орайына қарай бағытланған. Ал спинниң бағыты қарама-қарсы тәрепке қарай бағытланған болса, онда бул күш дөңгелек тоқтың көшери бойлап қарама-қарсы тәрепке қарай бағытланған. Санлық мәнислерин қойып  $F = 2,5 \cdot 10^{-26}$  Н мәнисин аламыз.

## 2-6-6. Шредингер теңлемесин жууық түрде шешиў усыллары

### Уйытқыў теориясының тийкарғы теңлемелери

Квантлық механиканың мәселелериниң барлығын дәл шешиў мүмкін емес. Көпшиликтік жағдайларда энергия менен толқын функцияларының мәнислерин тек жууық түрде ғана анықлауға болады. Сонықтан квантлық механикада Шредингер теңлемесин жууық түрде есаплау усыллары кеңнен қолланылады. Бундай усыллардың ең кең тарқалған түри уйытқыў теориясы болып табылады.

Квантлық механикада атомдағы электронлардың қозғалысларын изертлеў ушын тийкарғы күш сипатында ядро менен электронлар арасындағы электростатикалық тәсир етисиў күши алынады. Ал уйытқыў сипатында электролардың бир бири менен тәсирлесиў (ийтерисиў) күшлерин алғыуға болады. Егер атом сыртқы электр ямаса магнит майданына жайластырылған болса, онда бул майданлар шамасы бойынша ядро пайда еткен электр майданының шамасынан әдеүир киши болады. Бул жағдайда уйытқыў сипатында электронлардың сыртқы электр ямаса магнит майданындағы қозғалысын қарай аламыз.

Системаның гамильтонианы ўақытқа байланыслы болмайтуғын стационар жағдайлар ушын уйытқыў теориясын қараймыз. Бундай жағдайда системаның гамильтонианы:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \hat{T} + \hat{V}_0 + \hat{V}' = \hat{H}^0 + \hat{V}' \quad (2.6.1)$$

түринде жазылады. Бул аңлатпадағы уйытқыў операторы  $V' \ll V$ , ал потенциаллық энергияның тийкарғы бөлеги  $V^0$  дәл шешимге ииे

$$\hat{H}^0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 \quad (2.6.2)$$

Шредингер теңлемесин қанаатландырады. Егер  $V' = 0$  теңлиги орынланатуғын болса бул теңлемениң энергия  $E_n^0$  ҳәм толқын функциясы  $\Psi_n^0$  менен тәрийипленетуғын дәл шешимлери болады. Бирақ  $V'$  нолге тең болмағанда бизиң мынадай теңлемени шешиўимиз керек болады:

$$(\hat{H}^0 + \hat{V}') \Psi = E \Psi. \quad (2.6.3)$$

Бизиң ўазыйпамыз (2.6.3)-теңлемедеги  $V'$  уйытқыў энергиясын есапқа алып жууық түрде болса да  $(\hat{H}^0 + \hat{V}')$  операторының меншикли мәнислері  $E_n$  менен  $\Psi_n$  меншикли функцияларын табыудан ибарат.

Уйытқыў теориясы бойынша энергия  $E$  менен толқын функциясы  $\Psi$  дин мәнислері тәмендегидей қатарлар түринде изленеди:

$$\Psi = \Psi^0 + \Psi' + \Psi'' + \dots \quad (2.6.4)$$

$$E = E^0 + E' + E'' + \dots \quad (2.6.5)$$

Бул аңлатпадағы  $E', \Psi'$  менен  $E'', \Psi''$  шамалары  $\Psi^0, E^0$  шамаларына салыстырғанда кишилиги бойынша биринши ҳәм екинши тәртипли шамалар болып табылады. Уйытқыў энергиясын  $V^0$  потенциалының энергиясы менен киши  $\lambda$  шамасының ( $\lambda \ll 1$ ) көбеймеси түринде жазамыз:

$$V' = V^0 \cdot \lambda.$$

(2.6.4)- ҳәм (2.6.4)-теңликлердеги биринши тәртипли киши шамалар менен шекленип, оларды (2.6.3)-теңлемеге қойсақ  $\Psi'$  ҳәм  $E'$  шамаларының мәнислерин анықлау ушын тәмендегидей теңлеме аламыз:

$$(E^0 + E' - \hat{H}^0 - \hat{V}') (\Psi^0 + \Psi') = 0. \quad (2.6.6)$$

Бут теңлемеде қатнасатуғын ағзаларды мәнислеринин үлкенлигине қарай жыйннасақ тәмендегидей теңлемени аламыз:

$$(E^0 - \hat{H}^0) \Psi^0 + [(E' - \hat{V}') \Psi^0 + (E^0 - \hat{H}^0) \Psi'] + (E' - \hat{V}') \Psi' = 0. \quad (2.6.7)$$

Уйытқыў теориясының биринши тәртипли жууық шешимлерин табыу ушын кишилиги бойынша екинши тәртипли  $(E' - \hat{V}') \Psi'$  шамасын нолге тең деп есапладап дәл

шешимниң  $(E^0 - \hat{H}^0)\Psi^0$  көбеймеси ушын алынатуғынлығын аңғарамыз. Бундай жағдайда (2.6.7)-теңлеме ноллик жуўықлауда

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi_n^0 = 0 \quad (2.6.8)$$

теңлемесине айланады ҳәм бул теңлемени шешиў арқалы Гамильтон операторының

$$E_1^0, E_2^0, E_3^0, \dots, E_n^0, \dots$$

меншикли мәнислери менен

$$\Psi_1^0, \Psi_2^0, \Psi_3^0, \dots, \Psi_n^0, \dots$$

меншикли функцияларын анықлауға болады. Бундай жағдайда (2.6.7)-теңлемениң орнына

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi' = -(E' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (2.6.9)$$

түриндеги теңлемени аламыз.

Мейли басланғыш моментте система  $n' = n$  квантлық ҳалда турған болсын. Дәл шешимде  $E^0 = E_n^0, \Psi^0 = \Psi_n^0$  теңликлери орынланатуғын болғанлықтан бириңи тәртипли жуўықлауда  $E' = E_n', \Psi' = \Psi_n'$  теңликлерин қабыл етсек болады. Бундай жағдайда (2.6.9)-теңлемени былайынша жазыуға болады:

$$(E_n^0 - \hat{H}^0)\Psi_n' = -(E_n' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (2.6.10)$$

Қәлеген функцияны ортонормировкаланған функциялардың толық системасы бойынша қатарға жайыуға болғанлықтан  $\Psi_{n'}^0$  функциясын төмендегидей қатар түринде излеймиз:

$$\Psi_n' = \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^0. \quad (2.6.11)$$

Ендиги ўазыйпа усы Фурье қатарындағы белгисиз  $C_{n'}$  коэффициентлерин анықлаудан ибарат болады. (2.6.11)-аңлатпаны (2.6.10)-теңлемеге қойсақ

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_{n'}^0 = -(E_n' - \hat{V}') \Psi_n^0 \quad (2.6.12)$$

теңлемесин аламыз, ал (2.6.8)-теңлемени есапқа алсақ, онда (2.6.12)-теңлеме былайынша жазылады:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \Psi_{n'}^0 = -(E_n' - \hat{V}') \Psi_n^0. \quad (2.6.13)$$

### Энергия қәддилери азғынбаған жағдай

Егер берилген система азбаған болса, яғни әнергияның ҳәр бир  $E_n^0$  меншикли мәнисине  $\Psi_n^0$  меншикли функциялардың тек бир ғана мәниси сәйкес келетуғын

болса, онда (2.6.13)-теңлемениң шеп тәрепин  $\Psi_n^{0*}$  ге көбейтип пүткіл кеңислик бойынша интегралласақ тәмендегидей қатнасқа келемиз:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \delta_{nn'} = -E' + \int \Psi_n^{0*} \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x. \quad (2.6.14)$$

Бул аңлатпада  $\Psi_n^0$  меншикли функциясының ортонормалық шәрти

$$\int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 d^3x = \delta_{nn'} \quad (2.6.15)$$

пайдаланылған.

(2.6.14)-теңликтин шеп тәрепи нолге тең болғанлықтан  $n' = n$  болғанда  $(E_n^0 - E_{n'}^0) = 0$ , ал  $n' \neq n$  болған жағдайда  $\delta_{nn'} = 0$  ҳәм изленип атырған энергия ушын

$$E'_n = \overline{V'_{nn}} \quad (2.6.16)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада

$$\overline{V'} = \int \Psi_n^{0*} \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x. \quad (2.6.17)$$

Демек системаның уйытқыў нәтийжесинде алатуғын энергиясы уйытқыў энергиясының орташа мәнисине тең екен.

Енди уйытқыў теориясының биринши тәртипли жуұықлауын тәрийиплейтуғын (2.6.13)-Шредингер теңлемесин түрлендірип жазайық:

$$\sum_{n''} C_{n''} (E_n^0 - E_{n''}^0) \Psi_{n''}^0 = -(E'_n - V') \Psi_n^0. \quad (2.6.18)$$

Бул теңлемениң шеп тәрепин  $\Psi_n^{0*}$  (бул жерде  $n' \neq n$ ) функциясына көбейтип ҳәм ортонормалық шәртті есапқа алып пүткіл кеңислик бойынша интегралласақ  $C_{n'}$  коэффициенти ушын мынадай қатнас аламыз:

$$C_{n'} = \frac{\overline{V'_{nn}}}{E_n^0 - E_{n'}}. \quad (2.6.19)$$

Бул аңлатпада

$$\overline{V'} = \int \Psi_{n'}^{0*} \hat{V}' \Psi_{n'}^0 d^3x. \quad (2.6.20)$$

Бундай жағдайда  $\Psi_n'$  функциясы ушын

$$\Psi_n' = C_n \Psi_n^0 + \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^0 \quad (2.6.21)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпадағы сумма белгисиндеги штрих белгиси қосыў операциясының  $n' = n$  мәнисинен басқа барлық индекслер бойынша жүргизилетуғынлығын аңғартады. (У21)- теңликтеги белгисиз  $C_{n'}$  коэффициенти ноллик жуұықлаудағы

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \Psi'_n = C_n^0 \Psi_n^0 + \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^0 \quad (2.6.22)$$

түринде жазылатуғын ноллик жуұықлаудағы толық толқынлық функцияларды нормалау (нормировка) шәртинен алынады:

$$\int \Psi_n^* \Psi_n d^3x = 1. \quad (2.6.23)$$

(2.6.22)-аңлатпада

$$C_n^0 = 1 + C_n. \quad (2.6.24)$$

(2.6.22)-толқынлық функцияны (2.6.23)-нормалау шәртине қойып кишилиги бойынша тек биринши тәртипли шамалар менен шекленсек, онда

$$\left| C_n^0 \right|^2 \int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 d^3x + \sum_{n'} \left\{ C_n^{0*} C_{n'} \int \Psi_n^{0*} \Psi_{n'}^0 d^3x + C_{n'}^* C_n^0 \int \Psi_{n'}^{0*} \Psi_n^0 d^3x \right\} = 1 \quad (2.6.25)$$

түриндеги аңлатпаға ийе боламыз. Бундай жағдайда толқынлық функцияның ортонормалық шәртинен

$$C_n^0 = 1, \quad (2.6.26)$$

ал (2.6.24)-теңлемеден  $C_n = 0$  мәнислерин аламыз. Демек уйытқыў теориясының биринши тәртипли жуұықлауы бойынша толқынлық функция

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \sum_{n'} \frac{\overline{V'_{n'n}}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \Psi_{n'}^0 \quad (2.6.27)$$

түринде болады. Усының менен бир қатарда  $\Psi'_{n'n}$  толқынлық функциясы энергияның меншикли мәниси  $E'_{n'}$  сыяқты уйытқыў энергиясының биринши дәрежесине пропорционал болады.

## Энергия қәддилериниң азғын жағдайы ушын уйытқыў теориясы

Енди энергияның  $E_n^0$  меншикли мәнисине  $j$  дана  $\Psi_{n_1}^0, \Psi_{n_2}^0, \dots, \Psi_{n_j}^0$  меншикли функцияларының сәйкес келетуғын уйытқыў теориясын қараймыз.

Бул функциялардың қәлелеген

$$\Psi_n^0 = \sum_{i=1}^j C_i^0 \Psi_{n_i}^0$$

сызықтық түрленийи де энергиясының меншикли мәнислері  $E_n^0$  болған ноллик жуұықлаудағы

$$(E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_n^0 = 0$$

Шредингер теңлемесиниң шешими болып табылады. Егер системаға энергиясы  $V'$  болған уйытқыў қосылса  $C_i^0$  коэффициентлериниң арасында байланыстың пайда болатуғынлығын көрсетейик. Буның ушын (2.6.10)-теңликтин шеп тәрепин  $\Psi_{n_i}^{0*}$  функциясына көбейтил барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз. Сонда

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_{n_i}^{0*} d^3x = - \int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') \Psi_{n_i}^0 d^3x \quad (2.6.28)$$

теңлемесин аламыз. Туұындыларды аўыстырыў теориясынан пайдалансақ, онда кейинги теңликтин орнына

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_{n_i}^{0*} d^3x = - \int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - \hat{V}') \Psi_{n_i}^0 d^3x \quad (2.6.29)$$

теңлигин аламыз. Бул теңликтеги  $\Psi_{n_i}^{0*}$  функциясының  $(E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_{n_i}^{0*} = 0$  Шредингер теңлемесиниң шешими екенлигин есапқа алсақ мынадай теңликтеке ийе боламыз:

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') \sum_{i'=1}^j C_{i'}^0 \Psi_{n_i}^0 d^3x = 0. \quad (2.6.30)$$

$\Psi_{n_i}^0$  меншикли функциясының  $\int \Psi_{n_i}^{0*} \Psi_{n_i}^0 d^3x = \delta_{n_i n_i}$  түринде ортонормаланған деп есапласақ, онда (2.6.30)-теңликтин орнына төмөндегидей теңлеме жазамыз:

$$C_i^0 (E_n' - \overline{V_{ii}}) = \sum_{i'=1}^j C_{i'}^0 \overline{V_{ii'}}. \quad (2.6.31)$$

Бул теңликтеке

$$\overline{V_{ii}} = \int \Psi_{n_i}^{0*} \hat{V} \Psi_{n_i}^0 d^3x, \quad (2.6.32)$$

$$\overline{V_{ii'}} = \int \Psi_{n_i}^{0*} \hat{V} \Psi_{n_{i'}}^0 d^3x. \quad (2.6.33)$$

(2.6.31)-теңликтеги сумма белгисиниң жоқарысындағы штрих қосыў суммалаў процедурасының индекстиң  $i=j$  мәнисинен басқа барлығы бойынша жүргизилетуғынлығын аңғартады. (2.6.31)-формуладағы индекс  $i$  дин бирден (1 ден)  $j$  шамасына шекемги аралықтағы қәлеген мәниске ийе болатуғынлығынан  $E_n'$  энергияның ҳәм  $C_i^0$  коэффициентлериниң белгисиз мәнислері ушын  $j$  дана бир текли теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned} C_i^0 (E_n' - V_{11}') - C_2^0 V_{12}' - \dots - C_j^0 V_{1j}' &= 0, \\ -C_1^0 V_{21}' + C_2^0 (E_n' - V_{22}') - \dots - C_j^0 V_{2j}' &, \\ \dots &, \\ -C_1^0 V_{j1}' - C_2^0 V_{j2}' - \dots + C_j^0 (E_n' - V_{jj}') &= 0. \end{aligned} \quad (2.6.34)$$

Егер  $\Psi_n^0$  толқынлық функциясының

$$\int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 d^3x = 1 \quad (2.6.35)$$

нормалау щәртін қанаатландыратуғынлығын есапқа алсақ, онда уйытқыў энергиясы  $E'_n$  менен  $C_i^0$  белгисиз коэффициентлерин анықлаудың қыйын емес екенлигин аңғарамыз.

(2.6.34)-системаның нолге тең емес шешимлериниң болыўы ушын оның детерминаттының нолге тең болыўы керек. Бундай жағдайда  $E'_n$  энергиясының мәнислерин табыў ушын төмендегидей теңлеме аламыз:

$$\begin{vmatrix} (E'_n - V'_{11}), V'_{12}, \dots, -V'_{1j} \\ -V'_{21}, (E'_n - V'_{22}), \dots, -V'_{2j} \\ -V'_{j1}, -V'_{j2}, \dots, (E'_n - V'_{jj}) \end{vmatrix} = 0. \quad (2.6.36)$$

Бул теңлемени әсирилік теңлеме деп атайды. Бул термин аспан механикасынан алғынған.

Егер әсирилік теңлемениң бир неше түбіри болса ( $j$  ға тең болыўы шәрт емес), онда ҳәр бир түбір ушын (2.6.34)-теңлемеден пайдаланып табылған  $C_i^0$  коэффициентлер сәйкес келеди. Яғнай  $E'_n$  қосымша энергияның мәнислерине сәйкес келетуғын меншикли энергиялар да ҳәр қыйлы болады. Соның менен бирге энергиясы  $V'$  шамасына тең уйытқыўға қосылғанға шекем системаның ҳалы  $j$  рет азған болса, уйытқыўдың тәсиринде азғынлықтың ретлиги кемейеди, ал гейпара жағдайларда азғынлықтың тұтқиллей жоғалыўы да мүмкін.

## Штарк эффекти

Егер атомды сырттан түсирилген электр майданына орналастыrsa, онда атомның энергия қәддилери қосымша қәддилерге ажыралады. Улыўма физика курсынан бул эффектti Штарк эффекти деп аталатуғынлығын ҳәм оның 1913-жылы ашылғанлығын билемиз. Энергия қәддилериниң магнит майданы тәсиринде қосымша қәддилерге ажыралыўын Зееман эффекти деп атайды. Тәжирибелерге электр майданының водород ҳәм басқа да атомларға ҳәр қыйлы тәсир ететуғынлығы анықланған. Мысалы электр майданының кернеўлилиги киши болғанда водород атомларының энергиясының қәддилериниң бир неше қәддилерге ажыралыўы кернеўликтиң биринши дәрежесине (сызықты Штарк эффекти), ал басқа атомларды кернеўликтиң екинши дәрежесине (квадратлық Штарк эффекти) пропорционал болып шықты.

Классикалық физика көз-караслары бойынша Штарк эффектин түсіндіриў мүмкін болмады. Кватлық механика ғана бул құбылысты түсіндіре алды.

Водород атомы ушын сызықты Штарк эффектин үйренейик ҳәм екинши энергия қәдди менен шекленемиз ( $n = 2$ ). Сырттан түсирилген майданың кернеўлигинин шамасы  $10^4 - 10^5$  В/см. Ал водород ядросы тәрепинен пайда етілген электр майданының кернеўлиги шама менен  $5 \cdot 10^9$  В/см шамасына тең. Демек сырттан түсирилген электр майданын уйытқыў сыпатында қарай алады екенбиз.

Уйытқыў энергиясы сыпатында электронның сыртқы электр майданындағы

$$V' = e_0 \epsilon z$$

потенциал энергиясын ала аламыз. Уйытқыў болмаған жағдайдағы электронны потенциал энергиясы

$$E_2^0 = -\frac{R\hbar}{4}$$

хәм энергияның усы мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциялар

$$\Psi_1^0 = \Psi_{2,0,0} = R_{20}(r)Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r), \quad (2.6.38)$$

$$\Psi_2^0 = \Psi_{2,1,0} = R_{21}(r)Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21} \cos\theta, \quad (2.6.39)$$

$$\Psi_3^0 = \Psi_{2,1,1} = R_{21}(r)Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} e^{i\varphi}, \quad (2.6.40)$$

$$\Psi_4^0 = \Psi_{2,1,-1} = R_{21}(r)Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi}. \quad (2.6.41)$$

$\theta$  ҳәм  $\varphi$  мүйешлерин декарт координаталары менен алмастырсақ жоқарыдағы функциялар төмендегидей түрге енди:

$$\Psi_1^0 = f_1(r), \quad (2.6.43)$$

$$\Psi_2^0 = f_2(r)z, \quad (2.6.44)$$

$$\Psi_3^0 = f_2(r) \frac{x+iy}{\sqrt{2}}, \quad (2.6.45)$$

$$\Psi_4^0 = -f_2(r) \frac{x-iy}{\sqrt{2}}. \quad (2.6.46)$$

Бул аңлатпалардағы

$$f_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r), \quad (2.6.47)$$

$$f_2(r) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{R_{21}(r)}{r}, \quad (2.6.48)$$

ал электронның улыўмалық толқын функциясын

$$\Psi^0 = \sum_{i=1}^4 C_i^0 \Psi_i^0 \quad (2.6.49)$$

түринде жазамыз.

Биз қарап атырған жағдайда системаның азғыныўының еселиги 4 ке тең (яғни  $j = 4$ ) болғанлықтан белгисиз  $C_i^0$  коэффициентлер менен системаның уйытқымаған

ҳалын тәрийиплейтуғын  $E_2^0$  энергияға мәнис беріү ушын (2.6.34)-қатнастан төмендегидей теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned} C_1^0(E'_2 - \bar{V}'_{11}) - C_2^0\bar{V}'_{12} - C_3^0\bar{V}'_{13} - C_4^0\bar{V}'_{14} &= 0, \\ -C_1^0\bar{V}'_{21} + C_2^0(E'_2 - \bar{V}'_{22}) - C_3^0\bar{V}'_{23} - C_4^0\bar{V}'_{24} &= 0, \\ -C_1^0\bar{V}'_{31} - C_2^0\bar{V}'_{22} + C_3^0(E'_3 - \bar{V}'_{33}) - C_4^0\bar{V}'_{34} &= 0, \\ -C_1^0\bar{V}'_{41} - C_2^0\bar{V}'_{42} - C_3^0\bar{V}'_{43} + C_4^0(E'_4 - \bar{V}'_{44}) &= 0. \end{aligned} \quad (2.6.49)$$

Бул аңлатпада

$$\bar{V}'_{ii} = \int \Psi^{0*}_{i'} \hat{V}' \Psi^0_i d^3x = e_0 \epsilon \int \Psi^{0*}_{i'} \hat{Z}' \Psi^0_i d^3x. \quad (2.6.50)$$

Көлем бойынша интеграллауда  $\bar{V}'_{11}, \bar{V}'_{22}, \bar{V}'_{33}, \bar{V}'_{13}, \bar{V}'_{23}, \bar{V}'_{14}, \bar{V}'_{24}, \bar{V}'_{34}$  матрицалық элементлер нолге тең болады. Себеби бул матрицалық элементтиң интегралына  $Z, X$  ҳәм  $Y$  координаталарының тақ функциялары киреди. Усы үш координаталардың жуп функцияларын өз ишине алатуғын  $\bar{V}'_{12}$  ҳәм  $\bar{V}'_{21} = \bar{V}'_{12}$  матрицалық элементлери ғана нолге тең болмайды:

$$\bar{V}'_{12} = \bar{V}'_{21} = e_0 \epsilon f_1(r) f_2(r) z^2 d_3 x. \quad (2.6.51)$$

Бул теңликке (2.6.46)- ҳәм (2.6.47)-қатнаслардан  $f(r), f(r)$  функцияларының мәнислерин қойып,

$$R_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2a_0^{3/2}}} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{\frac{r}{2a_0}} \quad \text{және} \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6a_0^{5/2}}} r e^{\frac{r}{2a_0}}$$

екенлигин есапқа алып  $\theta$  ҳәм  $\varphi$  мүйешлери бойынша интеграллағаннан кейин төмендегидей теңликти аламыз:

$$V'_{21} = V'_{12} = \frac{e_0 \epsilon}{24a_0^4} \int_0^\infty r^4 \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{\frac{r}{a_0}} dr. \quad (2.6.52)$$

Егер  $\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^s d\rho = r(s+1)$  екенлигин есапқа алсақ, онда матрицалық элементлер ушын

$$V'_{12} = V'_{21} = -3e_0 \epsilon a_0 \quad (2.6.53)$$

шамаларына ийе боламыз.  $V'_{ii}$  матрицалық элементлериниң усы мәнислерин есапқа алған жағдайда энергияның  $E'_2$  мәнислери ушын төмендегидей әсирлик теңлеме аламыз:

$$\begin{vmatrix} E'_2 & 3a_0 & 0 & 0 \\ 3a_0 e_0 \varepsilon & E'_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E'_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E'_2 \end{vmatrix} = 0. \quad (2.6.54)$$

Бул теңлемени  $E'^2_2(E'^2_2 - 9a_0^2 e_0^2 \varepsilon^2) = 0$  түрінде жазыўға болады:

$$\begin{aligned} E'^{(1)}_2 &= -3a_0 e_0 \varepsilon, \\ E'^{(2)}_2 &= -3a_0 e_0 \varepsilon, \\ E'^{(3)}_2 &= E'^{(4)}_2 = 0. \end{aligned} \quad (2.6.55)$$

Ал бул энергияның ҳәр бир мәнисине (2.6.49)-теңлик бойынша ҳәр түрли  $C_i$  коэффициентлери сәйкес келеди:

$$\begin{aligned} C_1^{(1)} &= C_2^{(1)}; C_3^{(1)} = C_4^{(1)} = 0, \\ C_1^{(2)} &= -C_2^{(2)}; C_3^{(2)} = C_4^{(2)} = 0, \\ C_1^{(3)} &= -C_2^{(3)}; C_3^{(3)}, C_4^{(3)} \neq 0, \\ C_1^{(4)} &= C_2^{(4)}; C_3^{(4)}, C_4^{(4)} \neq 0. \end{aligned} \quad (2.6.56)$$

Усының менен бирге энергиясы

$$E_2^{(1)} = E_2^0 + E_2'^{(1)} = -\frac{R\hbar}{4} - 3e_0 a_0 \varepsilon \quad (2.6.57)$$

шамасына тең қәддиге ноллик жуўықлауда

$$\Psi^{0(1)} = C_1^{(1)} (\Psi_{2,0,0} + \Psi_{2,1,0}) \quad (2.6.58)$$

меншикли функция сәйкес келеди.

Егер толқынлық функцияның нормаллаў шәртін болған  $\int \Psi^{0(1)*} \Psi^{0(1)} d^3x = 1$  шәртін есапқа алсақ (2.6.58)-функцияны

$$\Psi^{0(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{2,0,0} + \Psi_{2,1,0}) \quad (2.6.59)$$

түрінде жаза аламыз. Ал келеси квантлық ҳал ушын

$$E_2^{(2)} = E_2^0 + E_2'^{(2)} = -\frac{R\hbar}{4} + 3e_0 a_0 \varepsilon. \quad (2.6.60)$$

Ноллик жуўықлаудағы толқынлық функция

$$\Psi^{0(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{2,0,0} - \Psi_{2,1,0}). \quad (2.6.61)$$

(2.6.55)-қатнасларда  $E_2^{(3)} = E_2^{(4)} + E_2'^0$  болған ҳаллар электр майданында уйытқыұға ушырамайтуғын болғанлықтан бул ҳаллар ушын

$$\begin{aligned}\Psi^{0(3)} &= \Psi_{2,1,1} \quad (m = +1) \\ \Psi^{0(4)} &= \Psi_{2,1,-1} \quad (m = -1)\end{aligned}$$

түриндеги толқынлық функцияларды ямаса олардың сзықтық түрлениўлерин пайдаланыўға болады (яғни  $m = \pm 1$  болғанда электр майданындағы энергия қәддилери азғын болады).

Усы айтылғанлар менен бир қатарда импульс моментиниң  $Z$  көшерине түсирилген проекциясы нолге тең болмаса ( $m = \pm 1$ ) электронның қозғалысы тийкарынан  $xu$  тегислигинде болады, сырткы электр майданында энергия қәддилери қосымша қәддилерге бөлинбейди. Ал егер импульс моментиниң  $Z$  көшерине түсирилген проекциясы нолге тең болса ( $m = 0$ ) электрон  $Z$  көшерин кесип өтетуғын тегисликте қозғалады. Бундай жағдайда электр майданында энергия қәддилери қосымша қәддилерге бөлинеди.

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \frac{-R\hbar}{4} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{a)} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ \frac{-R\hbar}{4} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{b)} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ \frac{-R\hbar}{4} + 3e_0a_0\varepsilon \\ \frac{-R\hbar}{4} \\ \frac{-R\hbar}{4} - 3e_0a_0\varepsilon \end{array}$$

Водород атомындағы екинши энергия қәддиниң электр майданындағы бир неше қәддилерге бөлиниўи. а) электр майданы болмағанда, б) сырттан түсирилген электр майданы бар болғанда.

Сзықтық Штарк эффектин былайынша түсіндіриўге болады:  $n = 2$  болған ҳалда атомдағы электронның қозғалысын тәрийиплейтуғын толқынлық функция орайлық симметрияға ийе болмайды. Нәтийжеде атомда қосымша  $p'$  моменти пайда болады. Соныңтан сырттан түсирилген электр майданына ( $E_x = E_y = 0, E_z = \varepsilon$ ) жайластырылған атом қосымша

$$V' = -(\vec{p}\vec{E}) = -p\varepsilon \cos\gamma \quad (2.6.62)$$

энергиясына ийе болады. Бул аңлатпада  $\gamma$  арқалы атомның электрлік диполлик моменти менен  $Z$  көшери арасындағы мүйеш белгиленген. (2.6.62)-теңлигі (2.6.55)-қатнас пенен салыстырсақ атомның электрлік моментиниң  $p = 3e_0a_0$  шамасына тең,  $\Psi^{0(1)}$  шешими ушын мүйештиң  $\gamma = 0$ , ал  $\Psi^{0(2)}$  шешими ушын  $\gamma = \pi$  шамасына тең болатуғынлығын көремиз.

Энергияның  $E_2^{(3)}, E_2^{(4)}$  мәнислери ушын  $\gamma = \pm \frac{\pi}{2}$  теңлиги орынланады деп қабыл етсек, электрлік момент электр майданына перпендикуляр болады ҳәм усыған сәйкес атом қосымша энергияға ийе бола алмайды.

Солай етип водород атомының  $n = 2$  болған ҳал ушын сзықтық Штарк эффектиниң жүзеге келиў себеби  $\vec{p}$  электр моментине байланыслы екен. Квнатлық теория тийкарында орынланған есаплаўлар нәтийжелери ҳәлсиз электр майданында ( $\varepsilon \sim 10^4$  В/см) өткерилген экспериментлер нәтийжелери менен толық сәйкес келеди.



### III бөлім

## Паули теориясы

### 3-1. Электронның қозғалыс мұғдарының моменти (импульс моменти)

**Ескертиў:** Биз төменде операторлардың үстине «қалпақ» белгисин қоймаймыз. Бирақ қандай шаманың оператор екенлиги текстте атап өтиледи.

Қосымшалар: Электронның импульс моментине мәселелерине тийисли болған коммутацияланбайтуғын операторлар ҳақында гәп еткенде әдетте төмендегидей уш операторды көрсетиўге болады (бул жерде  $\hbar = 1$  бирлиги қолланылған):

$$\left. \begin{array}{l} m_x = yp_z - zp_y, \\ m_y = zp_x - xp_z, \\ m_z = xp_y - yp_x. \end{array} \right\} \quad (3.1.1)$$

Бул операторлар координата ҳәм моментлер операторларынан дүзилген (классикалық механикада да тап усындей әмелди пайдаланады). Егер «қалпақлары» менен жазатуғын болсақ (3.1.1)-аңлатпаларды былайынша жазамыз:

$$\hbar \hat{l}_x = y \hat{p}_z - z \hat{p}_y, \quad \hbar \hat{l}_y = z \hat{p}_x - x \hat{p}_z, \quad \hbar \hat{l}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x.$$

Электронның квантлық қозғалыс теңлемесин қарағанда (3.1.1)-аңлатпалардың ҳақыйқатында да импульс моменти ушын жазылған операторлар екенлигине исенийге болады.

Жоқарыдағы операторлардың координата ҳәм импульслер операторлары менен Пуассон қаұсырмаларын дүземиз. Биз мынаған ийе боламыз

$$[m_x, x] = \frac{i}{\hbar} (m_x x - x m_x) = 0. \quad (3.1.1^*)$$

Себеби  $m_x$  операторы  $x$  бойынша дифференциаллауды өз ишине алмайды ҳәм сонлықтан  $x$  қа көбейтиўге коммутативли. Буннан кейин мынаған ийе боламыз:

$$\left. \begin{array}{l} [m_x, y] = -z [p_y, y] = -z, \\ [m_x, z] = y [p_z, z] = y. \end{array} \right\}$$

Буз бул жерде Пуассон қаұсырмаларының қәсийетлеринен пайдаландық. Тап усындей жоллар менен төмендеги аңлатпаларға ийе боламыз:

$$\left. \begin{array}{l} [m_x, p_x] = 0, \\ [m_x, p_y] = -p_z, \\ [m_x, p_z] = p_y. \end{array} \right\} \quad (3.1.1^{**})$$

(3.1.1<sup>\*</sup>)-хәм (3.1.1<sup>\*\*</sup>)-формулалардың жәрдеминде импульс моментиниң ҳәр қыйлы болған еки қураўшысы ушын Пуассон қаұсырмаларын аламыз:

$$\begin{aligned} [m_x, m_y] &= [m_x, zp_x - xp_z] = [m_x, z] p_x - x [m_x, p_z] = \\ &= yp_x - xp_y = -m_z. \end{aligned}$$

Солай етип

$$\left. \begin{array}{l} [m_y, m_z] = -m_x, \\ [m_z, m_x] = -m_y, \\ [m_x, m_y] = -m_z. \end{array} \right\} \quad (3.1.4)$$

Биз алған аңлатпалардың барлығы да классикалық аңлатпаларға сәйкес келеди.

Жоқарыда келтирілген формулалардың айырымларын көп тарқалған әдебиятта былайынша да жазады:

$$\begin{aligned} \{\hat{l}_x, x\} &= 0, & \{\hat{l}_x, y\} &= iz, & \{\hat{l}_x, z\} &= -iy, \\ \{\hat{l}_y, y\} &= 0, & \{\hat{l}_y, z\} &= ix, & \{\hat{l}_y, x\} &= -iz, \\ \{\hat{l}_z, z\} &= 0, & \{\hat{l}_z, x\} &= iy, & \{\hat{l}_z, y\} &= -ix. \end{aligned}$$

Бул аңлатпаларда  $m_x$  моменти операторы  $\hat{l}_x$  арқалы, ал «[» түриндеги Пуассон қаўсырмасы «{» түриндеги қаўсырма менен алмастырылған.

(3.1.1)-аңлатпада берилген операторларды кеңисликтеги қозғалысқа сәйкес келиүши үш еркинлик дәрежесине ийе материаллық ноқаттың қозғалыс муғдарының моменти менен салыстырыу мүмкін. Электронның магнит майданындағы қәсийетлери, көп электронлардан туратуғын системаның (мысалы атомлардың электронлық қабықтары) қәсийетлери электронның және де бир еркинлик дәрежесине ийе екенлигин көрсетеди. Бул еркинлик дәрежеси электронның кеңисликтеги қозғалысына байланыслы емес меншикли қозғалыс муғдарының моменти менен байланыслы Бундай еркинлик дәрежесин (хәм оған сәйкес келетуғын электронның меншикли қозғалыс муғдарының моментин, яғни импульс моментин) инглиз сөзи менен «спин» деп атайды.

Электронның меншикли (спинлик) импульс моментиниң қәсийетлерин әдеттеги (орбиталық) момент ушын орын алмастырыу қатнасларынан үйрениү мүмкін:

$$\left. \begin{array}{l} m_y m_z - m_z m_y = i\hbar m_x, \\ m_z m_x - m_x m_z = i\hbar m_y, \\ m_x m_y - m_y m_x = i\hbar m_z, \end{array} \right\} \quad (3.1.2)$$

(3.1.2)-аңлатпаларды жазғанымызда спин моменти де орбиталық момент ушын арналған орын алмастырыу қатнасларын қанаатландырады хәм электронның спин моментиниң хәр бир қураўшысы операторы бир бириңен белгиси менен ғана айырмада ийе тек еки меншикли мәниске ийе деген гипотезаны қабыл етиў керек.

Сpin моментиниң қураўшылары ушын операторларды

$$(m_x)_{\text{сп}} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \quad (m_y)_{\text{сп}} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \quad (m_z)_{\text{сп}} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (3.1.3)$$

түринде жазылады деп болжай керек. Бул аңлатпада  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  арқалы меншикли мәнислери  $\pm 1$  ге тең болған өзи өзине түйинлес оператор белгиленген.  $\frac{1}{2}$  шамасына тең көбейтиші (3.1.3)-операторлардың (3.1.2)- қатнасларды қанаатландырыуының керек екенлигинен келип шығады.

Спинди  $\hbar$  бирликлеринде есаплағанда (ал  $\hbar/2$  бирликлеринде емес)  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторларының орнына

$$s_x = \frac{1}{2} \sigma_x, \quad s_y = \frac{1}{2} \sigma_y, \quad s_z = \frac{1}{2} \sigma_z$$

операторларын пайдаланған қолайлы. Бул операторлар көп электронлы мәселелерди қарағанда қолланылады.

$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторлары ушын орын алмастырыу қатнаслары мына түрге ийе

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\sigma_x, \\ \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y, \\ \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z. \end{array} \right\} \quad (3.1.4)$$

Бирақ биз

$$\sigma_x^2 \sigma_z - \sigma_z \sigma_x^2 = \sigma_x (\sigma_x \sigma_z - \sigma_z \sigma_x) + (\sigma_x \sigma_z - \sigma_z \sigma_x) \sigma_x$$

аңлатпасына ийемиз ҳәм оннан алдыңғы қатнаслардан

$$\sigma_x^2 \sigma_z - \sigma_z \sigma_x^2 = -2i(\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x)$$

аңлатпасын аламыз.

Бизиң гипотезамызға сәйкес  $\sigma_x$  операторының меншикли мәнислері  $\pm 1$  ге тең. Соныңтан  $\sigma_x^2$  операторы тек бир ғана меншикли мәниске ийе болады, яғни  $\sigma_x^2 = 1$ . Демек бул шама енди оператор болып табылмайды. Ол енди қәлелеген оператор менен, соның ишинде  $\sigma_z$  пенен де коммутацияланады. Соныңтан соңғы теңлемениң оң тәрепи нолге тең. Бул теңликти соған усаған еки теңлик пенен жазсак, төмендеги аңлатпалар системасын аламыз

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = 0, \\ \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = 0, \\ \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0. \end{array} \right\} \quad (3.1.5)$$

(3.1.4)- ҳәм (3.1.5)-аңлатпаларды бир бирине теңлестирип мынаны аламыз:

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y, \\ \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z. \end{array} \right\} \quad (3.1.6)$$

Усының менен бирге биз

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad (3.1.7)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Енди  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторларын еки қатар ҳәм еки бағанадан туратуғын матрица деп қарай аламыз. Соның менен бирге бул операторларды тек  $\sigma = \pm 1$  мәнислерине тең (координаталарға қосымша болған) жаңа өзгериүшиниң функциясына тәсир ететуғын операторлар деп те қарай аламыз.

Бул функцияны  $\psi(\mathbf{r}, \sigma)$  арқалы белгилеп ( $\mathbf{r}$  арқалы барлық кеңисликтік координаталардың жыйнағы белгиленген) ҳәм

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_x \psi(\mathbf{r}, \sigma) = \psi(\mathbf{r}, -\sigma), \\ \sigma_y \psi(\mathbf{r}, \sigma) = -i\sigma \psi(\mathbf{r}, -\sigma), \\ \sigma_z \psi(\mathbf{r}, \sigma) = \sigma \psi(\mathbf{r}, \sigma). \end{array} \right\} \quad (3.1.8)$$

деп болжап биз (3.1.6)- ҳәм (3.1.7)-қатнасларды қанаатландыра аламыз.

Егер  $\psi$  функциясын

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \quad (3.1.9)$$

бағанасы сыптында жазсақ [бул аңлатпада  $\xi = \psi(2, +1)$  ҳәм  $\eta = \psi(2, -1)$ ] жоқарыдағы формулалар былайынша жазылады:

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_x \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix}, \\ \sigma_y \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\eta \\ i\xi \end{pmatrix}, \\ \sigma_z \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi \\ -\eta \end{pmatrix}. \end{array} \right\} \quad (3.1.10)$$

Солай етип  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторлары

$$\sigma_x = \sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \sigma_3 \quad (3.1.11)$$

матрицалары формасын қабыллайды. Бул аңлатпада

$$\sigma_1 = \begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{Bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{Bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix}. \quad (3.1.12)$$

Бул матрицалар Паули (Pauli) матрицалары деп аталады.  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторлары ушын матрицаларды сайлап алғы тек каноникалық түрлендириў ( $\xi, \eta$  шамалары үстинен исленетуғын сзықты орын алмастырыўларға сәйкес) дәллигине шекемги дәлликте анықланған. Соныңтан (бул жағдай илимий әдебиятта қабыл етилген)  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  лар ҳақында гәп етилгенде (3.1.12)-санлы матрица түснүйетуғын болса ҳәм (80-формуладан келип шығатуғын  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  шамаларының физикалық мәнислерин сақласақ, онда (3.1.11)-теңлик шәртли теңлик болып қалмайды, ал басқа да эквивалент болған теңликлер менен алмастырылыуы мумкин.

(3.1.6)- ҳәм (3.1.7)-теңлемелерди қанаатландыратуғын  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторлары биз төмендегидей үш сзықты комбинацияларды киргизетуғын болсақ

$$\left. \begin{array}{l} \sigma'_x = l_1 \sigma_x + m_1 \sigma_y + n_1 \sigma_z, \\ \sigma'_y = l_2 \sigma_x + m_2 \sigma_y + n_2 \sigma_z, \\ \sigma'_z = l_3 \sigma_x + m_3 \sigma_y + n_3 \sigma_z \end{array} \right\} \quad (3.1.13)$$

векторлық характерге ийе болады. Бул аңлатпаларда  $l_k, m_k, n_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) шамаларының мәниси туры мүйешли еки координаталар системасы арасындағы

мүйешлердиң косинусларына сәйкес келеди. Бирақ жаңа  $\sigma'_x$ ,  $\sigma'_y$ ,  $\sigma'_z$  операторлары есеки  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  операторлар сыйықлы (3.1.6)- ҳәм (3.1.7)- қәсийетлерге ийе болады. Буннан әхмийетли жуўмақ келип шығады: егер биз бул шамаларды вектордың қураўшылары деп қарайтуғын болсақ, онда бул вектордың қәлеген бағытқа түсирилген проекциялары  $\pm 1$  ге тең меншикли мәнислерге ийе болады. Егер биз (3.1.11) ге сәйкес  $\sigma'_x$ ,  $\sigma'_y$ ,  $\sigma'_z$  лар сырттында (3.1.12)-матриналарды алатуғын болсақ, онда (13)-аңлатпалар (3.1.6)- ҳәм (3.1.7)-шәртлерди қанаатландыратуғын еки бағанаға ҳәм еки қатарға ийе матриналардың ең улыўмалық түрин береди.

(3.1.12)- үш матрица бирлик матрица менен бирликте толық системаны пайда етеди (яғнайын группаны пайда етеди). Бирақ бул жағдайды мынадай мәнисте қараў керек: еки қатарға ҳәм еки бағанаға ийе (яғнайын 4 элементке ийе) қәлеген матрицаны усы төрт санлы коэффициентлердиң сыйықлы комбинациясы түринде қараў керек. Егер берилген матрица өзи-өзине түйинлес болса, онда бул коэффициентлер ҳақыйқыл мәнислерге ийе болады.

Қозғалыс муғдарының толық моменти (импульстиң толық моменти) ушын операторларды дүзиүге кирисемиз. Спинлик қозғалыс моменти ушын (3.1.3)-аңлатпаны қабыл етип биз электронның қозғалыс муғдарының торлық моменти ушын оператордың тәмендегидей түрге ийе болады деген жуўмаққа келемиз:

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{M}_x = m_x + \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \\ \mathcal{M}_y = m_y + \frac{\hbar}{2} \sigma_y, \\ \mathcal{M}_z = m_z + \frac{\hbar}{2} \sigma_z. \end{array} \right\} \quad (3.1.14)$$

Қозғалыс муғдары моментиниң улыўмалық қәсийетлері бойынша қосылыўшы операторлар қандай орын алмастырыў қатнасларын қанаатландыратуғын болса қосынды қозғалыс муғдары моменти операторыда тап сондай орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады. Демек (3.1.2)-аңлатпаға сәйкес бизлер тәмендеги аңлатпаларға ийе болыўымыз керек:

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{M}_y \mathcal{M}_z - \mathcal{M}_z \mathcal{M}_y = i\hbar \mathcal{M}_x, \\ \mathcal{M}_z \mathcal{M}_x - \mathcal{M}_x \mathcal{M}_z = i\hbar \mathcal{M}_y, \\ \mathcal{M}_x \mathcal{M}_y - \mathcal{M}_y \mathcal{M}_x = i\hbar \mathcal{M}_z. \end{array} \right\} \quad (3.1.15)$$

(3.1.15)-теңдиктиң дурыс екенлигин  $m_x$ ,  $m_y$ ,  $m_z$  ҳәм  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  шамалары ушын жазылған (3.1.2)- ҳәм (3.1.4)-аңлатпалардан, соның менен бирге қозғалыс муғдарының орбиталық ҳәм спин моментлериниң бир бири менен коммутацияланыў фактинен тиккелей тексерип көриў мүмкін.

Қозғалыс муғдарының орбиталық ҳәм спинлик моментлериниң қураўшыларынан толық қозғалыс муғдарының қураўшылары менен коммутацияланатуғын бисызықлы комбинацияны дүзиў мүмкін. Ҳақыйқатында да

$$\mathcal{M} = \sigma_x m_x + \sigma_y m_y + \sigma_z m_z + \hbar \quad (3.1.16)$$

ямаса тап усының өзи

$$\mathcal{M} = \sigma_x \mathcal{M}_x + \sigma_y \mathcal{M}_y + \sigma_z \mathcal{M}_z - \frac{1}{2} \hbar \quad (3.1.16^*)$$

деп болжаймыз. Биз  $m_x, m_y, m_z$  семействосы бойынша

$$\mathcal{M}m_x - m_x\mathcal{M} = -i\hbar(\sigma_y m_z - \sigma_z m_y)$$

аңлатпасына, ал  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  семействосы бойынша

$$\frac{\hbar}{2}(\mathcal{M}\sigma_x - \sigma_x\mathcal{M}) = i\hbar(\sigma_y m_z - \sigma_z m_y)$$

аңлатпаларына ийемиз. Бул теңликлерди бир бирине қоссақ оң тәрепинде нолди аламыз. Шеп тәрепиндеги аңлатпаны ҳәм  $y$  пенен  $z$  бойынша қураўшыны

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{M}\mathcal{M}_x - \mathcal{M}_x\mathcal{M} = 0, \\ \mathcal{M}\mathcal{M}_y - \mathcal{M}_y\mathcal{M} = 0, \\ \mathcal{M}\mathcal{M}_z - \mathcal{M}_z\mathcal{M} = 0. \end{array} \right\} \quad (3.1.17)$$

түринде жазыўға болады.

Шредингер теориясында қолланылатуғын  $\mathcal{M}$  операторы менен қозғалыс муғдарының орбиталық моменти аңлатпасы арасындағы байланысты табамыз. Биз мынаған ийемиз

$$\mathcal{M}^2 - \mathcal{M}\hbar = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2. \quad (3.1.18)$$

Екинши тәрептен қозғалыс муғдарының толық моментиниң қураўшылары ушын (3.1.14)-операторлардың квадратларының суммасын (қосындысын) алатуғын болсақ ҳәм (3.1.18)-аңлатпадан пайдалансақ, мынаны аламыз

$$\mathcal{M}_x^2 + \mathcal{M}_y^2 + \mathcal{M}_z^2 = \mathcal{M}^2 - \frac{1}{4}\hbar^2. \quad (3.1.19)$$

Солай етип  $\mathcal{M}_x, \mathcal{M}_y, \mathcal{M}_z$  векторының квадраты  $\mathcal{M}$  скалярының квадратынан тек  $\frac{1}{4}\hbar^2$  қосылыўшысы бойынша ғана айрылады екен. Биз  $\mathcal{M}$  операторын қозғалыс муғдарының моментиниң спин-орбиталық скаляры деп атаемиз.

(3.1.18)-аңлатпаның оң тәреци Шредингер теориясында ушырасатуғын ҳәм Паули матрицасына ийе емес оператор болып табылады. Оның меншикли мәнислері  $\frac{\hbar^2}{4}(l+1)$  шамасына тең. Бул аңлатпада  $l$  арқалы пүтін оң сан ямаса нол белгиленген. Егер биз  $\mathcal{M}$  операторының меншикли мәнислерин  $\hbar k$  арқалы белгилесек, онда

$$k(k-1) = l(l+1) \quad (3.1.20)$$

аңлатпасына ийе боламыз ҳәм буннан берилген  $l$  ушын

$$k = -l \text{ ямаса } k = l+1 \quad (3.1.21)$$

мәнислерин аламыз. Бирақ  $k$  шамасы нолге тең бола алмайды. Ҳақыйқатында да (3.1.19)-формуладан  $\mathcal{M}^2$  операторының математикалық күтилиүи (математическое ожидание) қәлеген ҳалда  $\frac{1}{4}\hbar^2$  шамасынан үлкен болады. Соныңтан  $\mathcal{M}$  операторының меншикли мәнислері ушын жазылған

$$\mathcal{M}\psi = k\hbar\psi \quad (3.1.22)$$

теңлемеси нолге тең болған меншикли мәниске ийе бола алмайды. Бул  $l = 0$  болғанда  $k$  ның бирден бир мүмкін болған мәниси 1 ге тең, ал  $l \geq 1$  болғанда  $k$  ның (3.1.21)-формула менен берилетуғын еки мәниси болады.

### 3-2. Сфералық координаталардағы қозғалыс муғдарының толық муғдарының операторлары

Шредингер теориясында орайлық симметрияға ийе мәселени қарағанымызда қозғалыс муғдарының орбиталық моменти операторлары ушын аңлатпалар алынған еди.  $r, \vartheta, \varphi$  сфералық координаталар усы координаталар менен байланыслы болған туұры мүйешли  $x, y, z$  координаталары менен

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta \quad (3.2.1)$$

аңлатпалары арқалы байланысқан.

$$p_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}, \quad p_\vartheta = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \quad p_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (3.2.2)$$

деп болжап биз

$$\left. \begin{aligned} m_x &= -\sin \varphi p_\vartheta - \operatorname{ctg} \vartheta \cos \varphi p_\varphi, \\ m_y &= \cos \varphi p_\vartheta - \operatorname{ctg} \vartheta \sin \varphi p_\varphi, \\ m_z &= p_\varphi. \end{aligned} \right\} \quad (3.2.3)$$

аңлатпаларын аламыз [II бөлімниң IV бабының 3-параграфындағы (2)-аңлатпа].

Қозғалыс муғдары моментиниң ҳәм оның  $z$  көшери бойынша қураушылары операторларының меншикли функциялары Шредингер теориясында

$$m^2 \psi = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] = \hbar^2 l(l+1) \psi, \quad (3.2.4)$$

$$m_z \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = m \psi \quad (3.2.5)$$

теңлемелерин ҳәм шардың бетиндеги бир мәнислик талабын қанаатландырады.

Қозғалыс муғдарының толық моментине (бул толық момент спинди өз ишине алады) өтиў ушын биз өткен параграфтың (3.2.14)- ҳәм (3.2.16)-формулаларына  $\mathcal{M}_z$  ҳәм  $\mathcal{M}$  лерди қосамыз.  $p_\vartheta$  ҳәм  $p_\varphi$  шамаларында аңлатылған ҳалда бул операторлар

$$\mathcal{M}_z = p_\varphi + \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (3.2.6)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M} = & (-\sigma_x \sin \varphi + \sigma_y \cos \varphi) p_\vartheta + \\ & + (-\sigma_x \operatorname{ctg} \vartheta \cos \varphi - \sigma_y \operatorname{ctg} \vartheta \sin \varphi + \sigma_z) p_\varphi + \hbar \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

турине ийе.

$\mathcal{M}_z$  ҳәм  $\mathcal{M}$  операторларының улыўмалық меншикли мәнислерин табамыз. Бул функциялар

$$\mathcal{M}_z \psi = \hbar \left( m + \frac{1}{2} \right) \psi, \quad (3.2.8)$$

$$\mathcal{M}\psi = \hbar k\psi \quad (3.2.9)$$

теңлемелерин ҳәм шардың бетиндеги бир мәнислик талабын қанаатландырады.

Биз қарап атырған операторлардың меншикли мәнислері биз жоқарыда таптық: нолге тең емес  $l$  квантлық санда  $k$  тек  $k = -l$  ҳәм  $k = l + 1$  мәнислерин ғана қабыл ете алады. Ал  $m$  квантлық саны болса Шредингер теориясындағыдай мәнислерди қабыл етеди: ол  $m = -l$  ден  $m = +l$  ге шекемги пүтиң мәнислерди қабыл етеди.

$\mathcal{M}_z$  ҳәм  $\mathcal{M}$  операторлары ушын жазылған (3.2.6)- ҳәм (3.2.7)- аңлатпаларды әпиүайыластырыў ушын

$$L' = SLS^+, \quad \psi' = S\psi \quad (3.2.10)$$

каноникалық түрлендириўлерин қолланамыз. Бул аңлатпада

$$S = \cos \frac{\varphi}{2} + i\sigma_z \sin \frac{\varphi}{2}, \quad S^+ = \cos \frac{\varphi}{2} - i\sigma_z \sin \frac{\varphi}{2}. \quad (3.2.11)$$

Егер түрлендириўге шекем

$$\sigma_x = \sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \sigma_3, \quad (3.2.12)$$

$$\mathcal{M}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \quad (3.2.13)$$

аңлатпаларына ийе болған болсақ, онда түрлендириўлерден кейин мыналарға ийе боламыз:

$$\left. \begin{array}{l} \sigma'_x = \sigma_1 \cos \varphi - \sigma_2 \sin \varphi, \\ \sigma'_y = \sigma_2 \sin \varphi + \sigma_1 \cos \varphi, \\ \sigma'_z = \sigma_3, \end{array} \right\} \quad (3.2.14)$$

$$\mathcal{M}'_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (3.2.15)$$

(3.2.7)-формуладағы  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  операторларын  $\sigma'_x$ ,  $\sigma'_y$ ,  $\sigma'_z$  операторларына ҳәм (3.2.14)-формула бойынша  $p_\varphi$  ди

$$p'_\varphi = Sp_\varphi S^+ = p_\varphi - \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \quad (3.2.16)$$

аңлатпасы менен алмастырсақ, онда түрлендирилген  $\mathcal{M}$  операторын

$$\mathcal{M}' = -\sigma_1 \operatorname{ctg} \vartheta p_\varphi + \sigma_2 \left( p_\vartheta - \frac{i\hbar}{2} \operatorname{ctg} \vartheta \right) + \sigma_3 p_\varphi + \frac{\hbar}{2} \quad (3.2.17)$$

түринде аламыз. Бул аңлатпада  $p_\varphi$  менен  $p_\vartheta$  шамалары (3.2.2)-операторлар болып табылады.

$\mathcal{M}$  ушын аңлатпаны буннан да әпиүайыластырыў ушын оған избе-из еки түрлендириўди қолланамыз. Бириңшиден

$$\mathcal{M}'' = T\mathcal{M}' T^+, \quad \psi'' = T\psi' \quad (3.2.18)$$

белгилеўин қабыл етемиз. Бул жерде

$$T = \cos \frac{\theta}{2} + i\sigma_2 \sin \frac{\theta}{2}, \quad T^+ = \cos \frac{\theta}{2} - i\sigma_2 \sin \frac{\theta}{2}. \quad (3.2.19)$$

Нәтийжеде мынаны аламыз:

$$\mathcal{M}'' = -\frac{\sigma_1}{\sin \theta} p_\varphi + \sigma_2 \left( p_\theta - \frac{i\hbar}{2} \operatorname{ctg} \theta \right). \quad (3.2.20)$$

Екиншиден

$$\mathcal{M}^* = \sqrt{\sin \theta} \mathcal{M}'' \frac{1}{\sqrt{\sin \theta}}, \quad \psi^* = \sqrt{\sin \theta} \psi'' \quad (3.2.21)$$

деп болжаймыз. Буннан кейин түрлендирилген  $\mathcal{M}$  мына түрге енеди:

$$\mathcal{M}^* = -\frac{\sigma_1}{\sin \theta} p_\varphi + \sigma_2 p_\theta. \quad (3.2.22)$$

Оператордың бул түри (3.2.7)-аңлатпада берилген дәслепки түринен әдеүир әпиүайы.  $\mathcal{M}'$  операторы болса (3.2.18)- ҳәм (3.2.21)- түрлендириўлерден кейин өзгериске ушырамады. Соныңтан оның ушын

$$\mathcal{M}_z^* = p_\varphi \quad (3.2.23)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

$\psi$  толқын функциясын

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (3.2.24)$$

түриндеги шардың бетиндеги еки қураушыға ийе толқын функциясы деп қарап ҳәм

$$|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 \quad (3.2.25)$$

деп есаплап биз нормировка шәрти сыйпатында мына қатнасты қабыл ете аламыз:

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1. \quad (3.2.26)$$

$\psi'$  ҳәм  $\psi''$  функциялары ушын да нормировка шәрти тап усындай түрге ийе болады.  $\psi''$  функциясынан  $\sqrt{\sin \theta}$  көбейтиүшиси менен айрылатуғын  $\psi^*$  функциясы ушын нормировка шәрти төмендегидей болады:

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi^*|^2 d\theta d\varphi = 1. \quad (3.2.27)$$

Бир мәнислик шәрти тек дәслепки толқын функциясына ғана тийисли болады. Ал түрлендирилген толқын функцияларына келетуғын болсақ, онда (3.2.11)-түрлендириў операторлары сыйықты түрде  $\sin \frac{\varphi}{2}$  ҳәм  $\cos \frac{\varphi}{2}$  лерге ийе болғанлықтан олар (толқын функциялары) ф шамасы  $2\pi$  ге шекем үлкейгенде белгисин өзгертеди. Демек олар кеңисликтеги ноқаттың еки мәнисли функциялары болып табылады

деген сөз.

### 3-3. Спинге ийе шар функциялары

Егер еки қураўшыға ийе толқын функциясын

$$\psi^* = \begin{pmatrix} Y \\ Z \end{pmatrix} \quad (3.3.1)$$

түринде (бағана түринде) жазсақ, онда жоқарыдағы параграфтағы (3.2.28)-формула бирдей болған еки теңлеме түринде жазылады:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial Y}{\partial \varphi} = i \left( m + \frac{1}{2} \right) Y, \\ \frac{\partial Z}{\partial \varphi} = i \left( m + \frac{1}{2} \right) Z, \end{array} \right\} \quad (3.3.2)$$

ал (3.2.29)-теңлеме

$$\left. \begin{array}{l} \frac{i}{\sin \vartheta} \frac{\partial Z}{\partial \varphi} - \frac{\partial Z}{\partial \vartheta} = kY, \\ \frac{i}{\sin \vartheta} \frac{\partial Y}{\partial \varphi} + \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} = kZ \end{array} \right\} \quad (3.3.3)$$

теңлемелер системасына алып келинеди. (3.3.2)-теңлемени де қанаатландырыўы ушын функцияларды

$$\left. \begin{array}{l} Y(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{i \left( m + \frac{1}{2} \right) \varphi} A(\vartheta), \\ Z(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{i \left( m + \frac{1}{2} \right) \varphi} B(\vartheta) \end{array} \right\} \quad (3.3.4)$$

түринде аламыз. Бундай жағдайда  $A(\vartheta)$  жәм  $B(\vartheta)$  функциялары төмендегидей теңлемелер системасын қанаатландырады

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dA}{d\vartheta} = \frac{\left( m + \frac{1}{2} \right)}{\sin \vartheta} A + kB, \\ \frac{dB}{d\vartheta} = -\frac{\left( m + \frac{1}{2} \right)}{\sin \vartheta} B - kA, \end{array} \right\} \quad (3.3.5)$$

ал олар ушын нормировка шәрти

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi (A^2 + B^2) d\vartheta = 1 \quad (3.3.6)$$

аңлатпасы болады. Бул функцияларды әдеттеги  $P_l^m(\cos \vartheta)$  шар функциялары арқалы аңлатыўға болады. Бу функциялардың айырым қәсийетлерин еске түсиремиз.

$$P_l^m(x) = P_l^m(\cos \vartheta) \quad (3.3.7)$$

функциясы

$$\frac{d}{dx} \left[ (1 - x^2) \frac{dP_l^m}{dx} \right] - \frac{m^2}{1 - x^2} P_l^m + l(l+1) P_l^m = 0 \quad (3.3.8)$$

теңлемесин қанаатландырады ҳәм  $x = \pm 1$  болған жағдайдағы оның шешимин көрсетеди.  $m = 0$  болғанда  $P_l^m(x)$  Лежандр полиномына алып келинеди

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad (3.3.9)$$

ал  $m \geq 0$  болғанда мынаған тәң болады:

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x). \quad (3.3.10)$$

$m$  ниң терис мәнислеринде  $P_l^m(x)$  функциясы оң  $m$  ниң мәниси қойылатуғын функциялар арқалы

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x). \quad (3.3.11)$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

Биз қарап атырған  $\vartheta$  мүйешиниң функциялары  $P_l^m(\cos \vartheta)$  ҳәм  $P_l^{m+1}(\cos \vartheta)$  төмендегидей биринши тәртипли теңлемелер системасын қанаатландырады:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{d\vartheta} P_l^m(\cos \vartheta) - m \operatorname{ctg} \vartheta P_l^m(\cos \vartheta) &= -P_l^{m+1}(\cos \vartheta), \\ \frac{d}{d\vartheta} P_l^{m+1}(\cos \vartheta) + (m+1) \operatorname{ctg} \vartheta P_l^{m+1}(\cos \vartheta) &= \\ &= (l+m+1)(l-m) P_l^m(\cos \vartheta) \end{aligned} \right\} \quad (3.3.12)$$

Усы системаға  $A$  ҳәм  $B$  функциялары ушын (3.3.5)-теңлеме де алып келинеди. (3.3.5)-аңлатпадан (3.3.12)-аңлатпаға өтій ушын дәслеп

$$A + iB = \sqrt{\sin \vartheta} e^{-i \frac{\vartheta}{2}} (y_1 + iy_2) \quad (3.3.13)$$

түрлендириүин орынлауымыз керек [усыған уқсас болған  $\psi$  функциясынан ден  $\psi^*$  функциясына түрлендириуди өткен параграфтың (3.2.18)- ҳәм (3.2.21)-формулалардың жәрдеминде исследик].  $y_1$  менен  $y_2$  ушын теңлемелер байланыша жазылады:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dy_1}{d\vartheta} - m \operatorname{ctg} \vartheta y_1 &= (k+m) y_2, \\ \frac{dy_2}{d\vartheta} + (m+1) \operatorname{ctg} \vartheta y_2 &= -(-k+m+1) y_1. \end{aligned} \right\} \quad (3.3.14)$$

Егер биз

$$y_1 = -c(k+m) P_l^m, \quad y_2 = c P_l^{m+1} \quad (3.3.15)$$

ямаса

$$y_1 = -c' P_l^{-m}, \quad y_2 = c' (-k + m + 1) P_l^{-m-1} \quad (3.3.16)$$

деп алсақ ҳәм (3.3.20)-формулаға сәйкес

$$k(k-1) = l(l+1) \quad (3.3.17)$$

деп алсақ бул теңлемелер әдеттеги шар функциялар ушын жазылған (3.3.12)-теңлемелерге сәйкес келеди.

$l$  сыптында биз терис болмаған

$$-k, k-1$$

санларының бирин алыўымыз мүмкин. Буны былайынша жазыўға болады:

$$l + \frac{1}{2} = \left| k - \frac{1}{2} \right|. \quad (3.3.18)$$

(3.3.16)- ҳәм (3.3.16)-аңлатпаларды теңлестирип, буннан кейин (3.3.11)-формуланы пайдалансақ  $c'$  пенен  $c$  шамаларының қатнасы ушын

$$\frac{c'}{c} = (-1)^m (k+m) \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \quad (3.3.19)$$

аңлатпасын аламыз. Бул турақтылардың мәнислери (3.3.6)-нормировка шәртинен анықланады. Бул нормировка шәртин былайынша жаза аламыз:

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi (y_1^2 + y_2^2) \sin \theta d\theta = 1. \quad (3.3.20)$$

Буннан кейин биз мыналарды ала аламыз:

$$c = \frac{1}{\sqrt{|k+m|}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}, \quad c' = (-1)^m \frac{k+m}{\sqrt{|k+m|}} \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}. \quad (3.3.21)$$

Егер биз

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} [P_l^m(x)]^2 dx = \frac{1}{2} \int_0^\pi [P_l^m(\cos \theta)]^2 \sin \theta d\theta = 1 \quad (3.3.22)$$

шәртине сәйкес нормировкаланған

$$P_l^m(x) = \sqrt{2l+1} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(x) \quad (x = \cos \theta), \quad (3.3.23)$$

шар функциясын киргизетүгүн болсақ, онда төмендеги аңлатпаларға ийе боламыз:

$$y_1 = -\frac{k+m}{\sqrt{(k+m)(2k-1)}} P_l^m, \quad y_2 = \sqrt{\frac{k-m-1}{2k-1}} P_l^{m+1}. \quad (3.3.24)$$

Бул аңлатпалардағы квадрат түбірлерди оң белги менен алғыш керек.  $k$  менен  $l$  шамалары арасындағы (3.3.18)-қатнасты итибарға алып жоқарыдағы формулаларды былайынша жаза аламыз:

$$y_1 = -\sqrt{\frac{k+m}{2k-1}} P_{k-1}^{*m}, \quad y_2 = \sqrt{\frac{k-m-1}{2k-1}} P_{k-1}^{*m+1} \quad (k > 0), \quad (3.3.25)$$

$$y_1 = \sqrt{\frac{k+m}{2k-1}} P_{-k}^{*m}, \quad y_2 = \sqrt{\frac{k-m-1}{2k-1}} P_{-k}^{*m+1} \quad (k < 0). \quad (3.3.25^*)$$

Бул формулалардан терис белгиге ийе  $k$  ларға ийе  $y$  функцияларының оң мәнисли  $k$  ларға ийе функциялар арқалы былайынша аңлатылатуғынлығы көринип түр:

$$\left. \begin{array}{l} y_1(-k, m, \theta) = -\sqrt{\frac{k-m}{k+m+1}} y_1(k+1, m, \theta), \\ y_2(-k, m, \theta) = \sqrt{\frac{k+m+1}{k-m}} y_2(k+1, m, \theta). \end{array} \right\} \quad (3.3.26)$$

Бизиң шар функцияларды  $k$  ның бир неше мәнислери ушын қандай мәнислерге ийе болатуғынлығын тәмендеги кестеде беремиз:

$k = +1 \quad (l = 0)$		
$m = -1$	$y_1 = 0$	$y_2 = 1$
$m = 0$	$y_1 = -1$	$y_2 = 0$
$k = -1 \quad (l = 1)$		
$m = -1$	$y_1 = -\sin \theta$	$y_2 = \cos \theta$
$m = 0$	$y_1 = \cos \theta$	$y_2 = \sin \theta$
$k = +2 \quad (l = 1)$		
$m = -2$	$y_1 = 0$	$y_2 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta$
$m = -1$	$y_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta$	$y_2 = \sqrt{2} \cos \theta$
$m = 0$	$y_1 = -\sqrt{2} \cos \theta$	$y_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta$
$m = 1$	$y_1 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta$	$y_2 = 0$

### 3-4. Спинге ийе шар функцияларының базы бир қәсийетлери

Өткен параграфтағы

$$\left[ -i\sigma_2 \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\left(m + \frac{1}{2}\right)}{\sin \vartheta} \sigma_1 \right] \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (3.4.1)$$

түрінде жазылған (3.3.5)-теңлемелерди өзи өзине түйинлес

$$\mathcal{L} = -i\sigma_2 \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\left(m + \frac{1}{2}\right)}{\sin \vartheta} \sigma_1 \quad (3.4.2)$$

операторының  $k$  меншикли мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциялары ушын жазылған теңлемелер деп қараўға болады. Буннан  $A$  ҳәм  $B$  функцияларының ортогоналлық қәсийетке ийе болатуғынлығы келип шығады:

$$\int_0^\pi [A(k, \vartheta) A(k', \vartheta) + B(k, \vartheta) B(k', \vartheta)] d\vartheta = 0 \quad (k \neq k') \quad (3.4.3)$$

хәм функциялардың түйік системасын өз ишине алады.

3-параграфтағын (3.3.13)-формула бойынша  $A$  ҳәм  $B$  функцияларынан  $y_1$  ҳәм  $y_2$  функцияларына өтип биз бул функциялардың да түйік ортогоналлық системаны өз ишине алатуғынлығы ҳаққында жуўмақ шығарамыз. 3-параграфтағы (3.3.20)-нормировканы дыққатқа алып быз былайынша

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^\pi [y_1(k, m, \vartheta) y_1(k', m, \vartheta) + \\ & + y_2(k, m, \vartheta) y_2(k', m, \vartheta)] \sin \vartheta d\vartheta = \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

яmasa қысқаша

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi y(k, m, \vartheta) y(k', m, \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = \delta_{kk'} \quad (3.4.5)$$

аңлатпасын жаза аламыз. Бул аңлатпада  $y$  белгиси арқалы  $y_1$  ҳәм  $y_2$  функцияларының жыйнағын түсінемиз.

$u_1(\vartheta)$  ҳәм  $u_2(\vartheta)$  функцияларының ықтаярлы жубын биз бир  $u(\vartheta)$  белгиси менен аңлатып  $y(k, m, \vartheta)$  функциялары бойынша қатарға

$$u(\vartheta) = \sum_k c(k) y(k, m, \vartheta) \quad (3.4.6)$$

түрінде жайыў мүмкин. (3.4.6)-аңлатпаның астында еки теңлик тур деп түсініў керек:

$$u_p(\vartheta) = \sum_k c(k) y_p(k, m, \vartheta) \quad (p = 1, 2) \quad (3.4.6')$$

хәм  $c(k)$  коэффициентлери еки теңликтөр де бирдей мәнислерге ийе. Бул коэффициентлер

$$c(k) = \frac{1}{2} \int_0^\pi y(k, m, \vartheta) u(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta \quad (3.4.7)$$

ямаса толығырақ

$$c(k) = \frac{1}{2} \int_0^\pi [y_1(k, m, \vartheta) u_1(\vartheta) + y_2(k, m, \vartheta) u_2(\vartheta)] \sin \vartheta d\vartheta \quad (3.4.7')$$

формуласының жәрдемінде есапланады. Бул жерде

$$u(\vartheta) = \cos \vartheta \cdot y(k_0, m, \vartheta) \quad (3.4.8)$$

деп аламыз.

(3.4.7') түріндеги интегралды есаплау ушын  $y(k, m, \vartheta)$  функцияларын (3.4.25)-хәм (3.4.25\*)-формулалар бойынша шар функциялары арқалы аңлатыўға ҳәм квантлық механикада шар функцияларына тийисли болған мағлұйматлар ишинде кеңнен белгили болған

$$x P_l^{*m}(x) = \frac{\sqrt{l^2 - m^2}}{\sqrt{4l^2 - 1}} P_{l-1}^{*m}(x) + \frac{\sqrt{(l+1)^2 - m^2}}{\sqrt{4(l+1)^2 - 1}} P_{l+1}^{*m}(x)$$

рекуррентли формуладан пайдаланыўға болады. Есаплаўлар тек үш  $c(k)$  коэффициентлериниң нолге тең емес екенligин, сонлықтан (3.4.6)-аңлатпанды қатарға жайыў тек үш ағзаға ийе болатуғынлығын, егер биз  $k_0$  дин орнына  $k$  ны жазатуғын болсақ, онда қатардың

$$\begin{aligned} \cos \vartheta \cdot y(k, m, \vartheta) = & -\frac{2m+1}{4k^2-1} y(-k, m, \vartheta) + \\ & + \frac{\sqrt{(k+m)(k-m-1)}}{|2k-1|} y(k-1, m, \vartheta) + \\ & + \frac{\sqrt{(k-m)(k+m+1)}}{|2k+1|} y(k+1, m, \vartheta) \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

түрине ийе болатуғынлығын көрсетеди.

Бул формуланың дұрыс екенligин  $y(k, m, \vartheta)$  функцияларын әдеттеги шар функциялар арқалы аңлатыў жолы менен көрсетиўге болады.

Егер

$$u(\vartheta) = \sin \vartheta y(k_0, m-1, \vartheta) \quad (3.4.8^*)$$

түріндеги белгилеўди алсақ, онда жоқарыдағыдай есаплаўлардың нәтийжесинде төмендеги теңлемени аламыз:

$$\begin{aligned} \sin \vartheta \cdot y(k, m-1, \vartheta) = & 2 \frac{\sqrt{k^2 - m^2}}{4k^2 - 1} y(-k, m, \vartheta) - \\ & - \frac{\sqrt{(k-m-1)(k-m)}}{2k-1} y(k-1, m, \vartheta) + \\ & + \frac{\sqrt{(k+m+1)(k+m)}}{2k+1} y(k+1, m, \vartheta). \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

Бул формуланың дурыслығы шар нормировкаланған функцияларына тийисли көп қолланылатуғын

$$\begin{aligned} (1-x^2)^{1/2} P_l^{*m}(x) = & -\frac{\sqrt{(l-m)(l-m-1)}}{\sqrt{4l^2-1}} P_{l-1}^{*m+1}(x) + \\ & + \frac{\sqrt{l+m+1)(l+m+2)}}{\sqrt{4(l+1)^2-1}} P_{l+1}^{*m+1}(x) \end{aligned}$$

рекуррентли формуланың жәрдеминде тексерилип көриледи [(3.4.10)-формуланың ези соңғы формуланың улыўмаластырылған түри болып табылады].

(3.4.9)- ҳәм (3.4.10)-аңлатпалардың тек  $y_1$  ҳәм  $y_2$  функциялары ушын ғана емес, ал  $A$  ҳәм  $B$  функциялары ушын да дурыс болып табылады. Себеби олардың бири екиншисиниң  $k$  ҳәм  $m$  шамаларынан ғәрзесиз коэффициентлерге ийе сзықты комбинациялары болып табылады.

Биз жоқарыда түйіктық теоремасына тийкарланып рекуррентлик қатнасларды келтирип шығарыў усылын баянладық. Бул жағдай әдеттеги шар функциялары, Легардың улыўмаласқан полиномлары ушын қолланылатуғын улыўмалық жағдай болып табылады.

### 3-5. Паулидин толқын теңлемеси

Классикалық релятивистлик емес механикада  $A_x, A_y, A_z$  векторлық ҳәм  $\Phi$  скаляр потенциалға ийе электромагнит майданында турған заряды  $-e$  ге, массасы  $m$  ге тең болған бөлекше ушын Лагранж функциясы

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - \frac{e}{c} (\dot{x}A_x + \dot{y}A_y + \dot{z}A_z) + e\Phi \quad (3.5.1)$$

турине ийе болады.  $x, y, z$  координаталары менен түйинлес улыўмаласқан

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}, \quad p_y = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}}, \quad p_z = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{z}} \quad (3.5.2)$$

«моментлер» қозғалыс мұғдарының қураўшылары болған

$$P_x = m\dot{x}, \quad P_y = m\dot{y}, \quad P_z = m\dot{z} \quad (3.5.3)$$

шамаларына сәйкес келмейди, ал

$$p_x = P_x - \frac{e}{c} A_x, \quad p_y = P_y - \frac{e}{c} A_y, \quad p_z = P_z - \frac{e}{c} A_z \quad (3.5.4)$$

қатнаслары арқалы байланысқан. Бөлекшениң энергиясы

$$E = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y + \dot{z}p_z - \mathcal{L} = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - e\Phi \quad (3.5.5)$$

шамасына тең. Энергияны улыўмаласқан моментлер арқалы аңлатып биз классикалық Гамильтон функциясын аламыз:

$$H = \frac{1}{2m} \left[ \left( p_x + \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \left( p_y + \frac{e}{c} A_y \right)^2 + \left( p_z + \frac{e}{c} A_z \right)^2 \right] - e\Phi. \quad (3.5.6)$$

Магнит майданы жоқ болғанда векторлық потенциалды нолге тең деп есаплау мүмкін ҳәм алдыңғы аңлатпа

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - e\Phi \quad (3.5.7)$$

түрине ямаса

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z) \quad (3.5.8)$$

түрине енеди. Бул аңлатпада

$$U = -e\Phi \quad (3.5.9)$$

шамасы бөлекшениң потенциал энергиясы болып табылады.

Биз Шредингер теориясында энергия операторының классикалық Гамильтон функциясынан  $p_x, p_y, p_z$  улыўмаласқан моментлерин

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (3.5.10)$$

операторлары менен алмастырыў жолы менен алынатуғынлығын билемиз. Спин менен байланысқан жаңа еркинлик дәрежесин киргизиў

$$P = \sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z \quad (3.5.11)$$

операторын дүзиўге ҳәм оны энергия операторын дүзиў ушын пайдаланыўға мүмкіншиликтен береди.

Операторының 1-параграфта қарап өтилген

$$\mathcal{M} = \sigma_x m_x + \sigma_y m_y + \sigma_z m_z + \hbar \quad (3.5.12)$$

операторы менен антикоммутацияға ушырайтуғынлығын көрсетиў мүмкін [1-параграфтағы (3.1.15)- формула]. Соныңқтан

$$\mathcal{M}P + P\mathcal{M} = 0 \quad (3.5.13)$$

теңлигине ийе боламыз.

Дәлили ушын 1-параграфтағы  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  матрицаларының қәсийеттери ҳәм

$$\left. \begin{array}{l} m_y p_z - p_z m_y = p_y m_z - m_z p_y = i\hbar p_x, \\ m_z p_x - p_x m_z = p_z m_x - m_x p_z = i\hbar p_y, \\ m_x p_y - p_y m_x = p_x m_y - m_y p_x = i\hbar p_z. \end{array} \right\} \quad (3.5.14)$$

қатнаслары қолланылады.

Биз бул жерде есаплаўлар жүргизбеймиз, бирақ есаплаўларды декарт координаталарында емес, ал сфералық координаталарда жүргизсек есаплаўлардың әдеўир әпиўайыласатуғының аңғарамыз. Бундай есаплаўлар келеси параграфта әмелге асырылады.

Егер биз электрон тек материаллық бөлекшениң  $x, y, z$  координаталары кеңислигиндеги қозғалысына сәйкес келетуғын еркинлик дәрежелерине ғана ийе болатуғын болса, онда биз энергия операторы ушын Шредингер аңлатпасына қайтып келемиз. Электронның спин менен байланыслы болған еркинлик дәрежесин киргизиў классикалық механиканың шамаларынан квантлық механиканың шамаларына өтигө жаңа мүмкіншиліклер ашып береди.

$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  матрицаларының қәсийетлерин және  $p_x, p_y, p_z$  операторларының коммутативлигин пайдаланып биз (3.5.8)-энергия операторын

$$H = \frac{1}{2m} (\sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z)^2 + U(x, y, z) \quad (3.5.15)$$

түринде жаза аламыз. Демек (3.5.11)-формуланың жәрдеминде анықланатуғын  $P$  операторын киргизиў бул жерде ҳеш нәрсени де өзгертпейди екен. Магнит майданы болғанда аўжал басқаша болады. Бул жағдайда классикалық Гамильтон функциясы (3.5.6) түрине ийе болады ҳәм координаталар менен каноникалық түйинлес улыўмаласқан моментлер қозғалыс муғдарының қураўшылары менен сәйкес келмейди, ал олар менен (3.5.4)-қатнаслар менен байланысқан. Биз бул қатнасларды былайынша көширип жазамыз:

$$P_x = p_x + \frac{e}{c} A_x, \quad P_y = p_y + \frac{e}{c} A_y, \quad P_z = p_z + \frac{e}{c} A_z, \quad (3.5.16)$$

Егер биз бул шамаларды операторлар деп қарайтуғын болсақ, онда олар коммутативлик болмайды, ал

$$\left. \begin{aligned} \frac{i}{\hbar} (P_y P_z - P_z P_y) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_x, \\ \frac{i}{\hbar} (P_z P_x - P_x P_z) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_y, \\ \frac{i}{\hbar} (P_x P_y - P_y P_x) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_z. \end{aligned} \right\} \quad (3.5.16)$$

орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады. Бул аңлатпада  $\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y, \mathcal{H}_z$  лар арқалы магнит майданының қураўшылары белгиленген. Сонықтан магнит майданы болғанда  $p_x, p_y, p_z$  операторларынан  $P_x, P_y, P_z$  операторларына өтий бундай алмастырыўдың (3.5.8)- ямаса (3.5.15)-теңлемеде әмелге асырылғанлығына байланыслы ҳәр қандай нәтийжени береди. Егер  $p_x, p_y, p_z$  операторларынан  $P_x, P_y, P_z$  операторларына өтий (3.5.8)-теңлемеде өтилсе, онда (3.5.6)-аңлатпаға қайтып келемиз. Оны  $H^0$  арқалы белгилеймиз, сонықтан

$$H^0 = \frac{1}{2m} \left[ \left( p_x + \frac{e}{c} A_x \right)^2 + \left( p_y + \frac{e}{c} A_y \right)^2 + \left( p_z + \frac{e}{c} A_z \right)^2 \right] - e\Phi. \quad (3.5.18)$$

Егер бул өтийди (3.5.15)-теңлемеде әмелге асырсақ ҳәм  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  лар ушын 1-параграфтағы (3.5.6)-қантасты ҳәм усы параграфтағы қозғалыс муғдары операторлары ушын (3.5.17)-орын алмастырыў қатнасларынан пайдалансақ, онда биз

$$H^* = H^0 + \mu^0 (\sigma_x \mathcal{H}_x + \sigma_y \mathcal{H}_y + \sigma_z \mathcal{H}_z) \quad (3.5.19)$$

операторын аламыз. Биз бул жерде қысқалық ушын

$$\mu^0 = \frac{\hbar e}{2mc} \quad (3.5.20)$$

аңлатпасынан пайдаландық.  $\mu^0$  турақтысын биз электронның магнит моменти деп қарай аламыз.

(19)-энергия операторы Шредингер теориясындағы сәйкес оператордың магнит майданы бар жағдай ушын (салыстырмалық теориясы ушын қосымшалар киргизилмеген) улыўмаластырылған түри болып табылады. биз оны Паули операторы деп,

$$H^* \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.5.21)$$

толқын теңлемесин Паули толқын теңлемеси деп атайды.

## IV бөлім

### Квантлық механиканың көп электронлық мәселеси ҳәм атомның құрылышы

#### 4-1. Толқын функциясының симметриялық қәсийетлери

Биз жоқарыда бир электронның ҳалын тәрийиплейтуғын толқын функциясын қарадық. Стационар ҳаллар ушын толқын функциясы Шредингер теңлемесин қанаатландырыуы керек.  $n$  электроннан туратуғын системаның ҳалын анықлау мәселесинде толқын функциясы электронлардың координаталарын алмастырыў менен спинлик өзгериүшилерге қарата базы бир симметрия шәртин (дұрысырағы антисимметрия шәртин) қанаатландырыуы керек. Бул шәрт Паули шәрти деп аталады. Усының менен бир қатарда көплеген мәселелерде электронлар системасының толық спини (қозғалыс муғдарының меншикли моменти) берилген деп есаплауға болады. Бундай жағдайда толқын функциясы және де бир қосымша шәртти қанаатландырыуы керек болады.

Бир электронның толқын функциясының үш кеңисликий координата  $x, y, z$  ҳәм тек еки мәниске ийе болатуғын (мысалы  $\sigma = +1$  ҳәм  $\sigma = -1$ ) спинлик өзгериүшиге байланыслы екенлигин биз билемиз. Үш кеңисликий координатаның жыйнағын  $r$  арқалы белгилеп электронның толқын функциясын

$$\psi(x, y, z, \sigma) = \psi(r, \sigma) \quad (4.1.1)$$

түрінде жаза аламыз.  $n$  электроннан туратуғын системаның толқын функциясы бул электронлардың барлық координаталардан ҳәм спинлик өзгериүшилеринен тәрзели болады. Биз мынаған ийе боламыз:

$$\psi = \psi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2; \dots; r_n, \sigma_n). \quad (4.1.2)$$

Көпшилик жағдайда  $i$ -номерли электронға тиисли болған барлық өзгериүшилердин жыйнағын  $x_i$  арқалы белгилеген қолайлыш болады (яғни оның кеңисликий координаталары менен спинлик өзгериүшилериниң жыйнағы).  $n$  электроннан туратуғын системаның толқын функциясын бундай жағдайда мына түрде жазамыз:

$$\psi = \psi(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (4.1.3)$$

Паули принципине муýапық толқын функциясы  $x_1, x_2, \dots, x_n$  өзгериүшилерине қарата антисимметриялық болыўы керек. Яғни толқын функциясы усы өзгериүшилердин қәлеген жубының орынларын алмастырғанда белгисин өзгертийі керек. Мысалы

$$\psi(x_2, x_1, x_3, \dots, x_n) = -\psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n). \quad (4.1.4)$$

Енди  $n$  электроннан туратуғын системаның базы бир (қосынды) спинге ийе болыўы талабын келтирип шығарыуға кирисемиз. Буның ушын спинниң тийкарғы қәсийетлерин еске түсиремиз.

Бир электрон жағдайында спинлик өзгериүшиге тәсир ететуғын қәлеген оператордың

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_x \psi(r, \sigma) = \psi(r, -\sigma), \\ \sigma_y \psi(r, \sigma) = -i\sigma \psi(r, -\sigma), \\ \sigma_z \psi(r, \sigma) = \sigma \psi(r, \sigma). \end{array} \right\} \quad (4.1.5)$$

теңликтери менен анықланатуғын үш  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторларының сыйықлы комбинациясы түрінде көрсетилийи мүмкін<sup>1</sup>.

Егер  $\psi$  толқын функциясын еки қураўшыдан туратуғын толқын функциясы, солардың бири  $\psi(r, +1)$ , ал екиншиси  $\psi(r, -1)$  ге тен деп есапласақ, онда  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторларының тәсіри Паули матрицаларының тәсіриндей болады:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.1.6)$$

Ал

$$s_x = \frac{1}{2} \sigma_x, \quad s_y = \frac{1}{2} \sigma_y, \quad s_z = \frac{1}{2} \sigma_z \quad (4.1.7)$$

операторлары

$$\left. \begin{array}{l} s_y s_z - s_z s_y = i s_x, \\ s_z s_x - s_x s_z = i s_y, \\ s_x s_y - s_y s_x = i s_z, \end{array} \right\} \quad (4.1.8)$$

орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады. Бул қатнаслар (һ бирликлеринде аңлатылған) қозғалыс муғдарының моментиниң қәсийетлерин тәрийиплейди. Соныңтан оларды электронның меншикли қозғалыс муғдары моментиниң қураўшыларының операторлары деп қараўымызға болады. Көп электронларға ийе болған жағдайда (4.1.5)-аңлатпаға сәйкес  $l$ -электронның спинлик өзгериүшине тәсір етиўши  $\sigma_{lx}, \sigma_{ly}, \sigma_{lz}$  операторлары сыйықлы анықлауға болады. Биз мынаған ийе боламыз

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_{lx} \psi = \psi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2; \dots; r_l, -\sigma_l; \dots), \\ \sigma_{ly} \psi = -i\sigma_l \psi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2; \dots; r_l, -\sigma_l; \dots), \\ \sigma_{lz} \psi = \sigma_l \psi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2; \dots; r_l, \sigma_l; \dots). \end{array} \right\} \quad (4.1.9)$$

һ бирликлеринде жазылған электронлар системасының қозғалыс муғдарының спинлик моментиниң қураўшылары ушын жазылған операторлар (4.1.7)-аңлатпадағыдай түрде анықланыуы мүмкін. Атап айтқанда

$$\left. \begin{array}{l} s_x = \frac{1}{2} (\sigma_{1x} + \sigma_{2x} + \dots + \sigma_{nx}), \\ s_y = \frac{1}{2} (\sigma_{1y} + \sigma_{2y} + \dots + \sigma_{ny}), \\ s_z = \frac{1}{2} (\sigma_{1z} + \sigma_{2z} + \dots + \sigma_{nz}). \end{array} \right\} \quad (4.1.10)$$

<sup>1</sup> Биз белгисине «қалпақ» дегенде көймейді. Операторлар белгисиниң устине «қалпақ» қойыў зәрүрлиги пайдада болғандығын көрсетемиз.

Бул операторлар (4.1.8)-орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады. (4.1.8)-орын алмастырыў қатнасларынан электронлардың қозғалыс муғдарының моменти ушын жазылған

$$\mathbf{s}^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 \quad (4.1.11)$$

операторы  $s_x, s_y, s_z$  операторларының ҳәр бири менен коммутацияланатуғының ҳәм оның меншикли мәнислериниң  $s(s+1)$  шамасына тең екенлигин, ал  $s$  шамасының пүтин терис емес саны жартысы екенлигин келтирип шығарыўға болады. Егер электронлардың саны  $n$  жуп болса  $s$  тиң мәниси пүтин оң санға ямаса нолге тең болады. Егер электронлардың саны тақ болса, онда  $s$  ярым пүтин санға (тақ саның ярымына) тең. Еки жағдайда да  $\frac{n}{2} - s = k$  шамасы терис емес пүтин санға тең болады. Бул  $k$  санын компенсацияланбаған спинге ийе электронлар жубының саны деп түснүүгө болады.

$s$  шамасы берилген жағдайда  $s_x, s_y, s_z$  операторларының ҳәр қайсысының меншикли мәнислери

$$-s, -s+1, \dots, s-1, s \quad (4.1.12)$$

санларына тең болады (бул санлардың саны  $2s+1$  дана).

$\mathbf{s}^2$  ушын жазылған (11)-оператордың

$$\mathbf{s}^2 = n - \frac{n^2}{4} + \sum_{i < j} P_{ij} \quad (4.1.13)$$

түринде көрсетилийи мүмкін. Бул аңлатпадағы  $P_{ij}$  символы  $\sigma_i, \sigma_j$  спинлик өзгериүшилериниң орынларын алмастырыўын аңлатады.

$n$  дана электроннан туратуғын системаның анық қосынды спинге ийе болыўы талабын енди

$$s^2 \psi = s(s+1) \psi \quad (4.1.14)$$

теңлемеси түринде жазылышы мүмкін.

Бул теңлемени қанаатландыратуғын функцияны табамыз.  $k = \frac{n}{2} - s$  түринде аламыз ҳәм  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$  шамалары  $1, 2, 3, \dots, n$  қатарынан алынған  $k$  дана ҳәр қыйлы санлардың жыйнағы болсын. Буннан кейин мейли

$$F_{a_1 a_2 \dots a_k} = F(\sigma_{a_1} \sigma_{a_2} \dots \sigma_{a_k} | \sigma_{a_{k+1}} \sigma_{a_{k+2}} \dots \sigma_{a_n}) \quad (4.1.15)$$

функциясы вертикаль белгиге шекемги  $\sigma_{a_1}, \sigma_{a_2}, \dots, \sigma_{a_k}$  аргументлерине қарата да симметриялы ҳәм вертикаль белгиден кейинги  $\sigma_{a_{k+1}}, \sigma_{a_{k+2}}, \dots, \sigma_{a_n}$  спинлик өзгериүшилерге қарата да симметриялы функция болсын. Барлық электронлардың  $\binom{n}{k}$  координаталарынан тәрэзли болған  $\binom{n}{k}$  дана

$$\Psi_{a_1 a_2 \dots a_k} = \Psi(r_1, r_2, \dots, r_n) \quad (4.1.16)$$

функцияларын киргиземиз (бул функцияларда спинлик өзгериүшилер жоқ). (4.1.16)-функциялар да (4.1.15)-функциялар сыйылдырылғанда  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$ , шамаларының белгилерине қарата симметриялы. Енди

$$\begin{aligned} \psi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2; \dots; r_n, \sigma_n) &= \\ &= \sum_{(\alpha_1 \dots \alpha_k)} \psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}(r_1, r_2, \dots, r_n) F_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \end{aligned} \quad (4.1.17)$$

суммасын дүземиз. (4.1.13)-формуланың тийкарында (4.1.17)-функцияның  $s$  тиң  $\frac{n}{2} - k$  шамасына тең мәнислеринде егер (4.1.16)-координаталық функциялар

$$\sum_a \psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k} = 0 \quad (4.1.18)$$

аңлатпасы арқалы байланысқан болса (4.1.14)-теңлемени қанаатландыратуғынлығы көрсетиүге болады. (4.1.18)-формуладағы  $\alpha$  шамалары  $1, 2, 3, \dots, n$  мәнислерин қабыл етеди ( $\alpha_2, \dots, \alpha_k$  шамаларынан басқасын) (4.1.18)-қатнаслардың (аңлатпалардың) саны  $\binom{n}{k-1}$  шамасына тең.

$s^2$  операторының меншикли меншикли функциясы электронлардың спини берилген системасының физикалық мүмкін болған ҳалын анықлауды ушын Паули принципин қанаатландырыуы зәрүр (яғни  $x_i$  өзгериүшилерине қарата антисимметриялы болыуы керек). Бундай жағдайға

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}(r_1, r_2, \dots, r_n) &= \\ &= \epsilon(P) \psi(r_{\alpha_1}, r_{\alpha_2}, \dots, r_{\alpha_k} | r_{\alpha_{k+1}}, r_{\alpha_{k+2}}, \dots, r_{\alpha_n}) \end{aligned} \quad (4.1.19)$$

функциясы бойынша (4.1.16)-функциялардың барлығын электронлардың координаталарының тек бир

$$\psi = \psi(r_1, r_2, \dots, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, \dots, r_n) \quad (4.1.20)$$

функциясы менен аңлатыуы арқалы жетиүге болады. (4.1.19)-формулада  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  арқалы ықтыярлы тәртипте алынған  $1, 2, \dots, n$  санлары, ал  $P$  арқалы

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix} \quad (4.1.21)$$

орын алмастырыуы белгиленген. (4.1.21)-орын алмастырыуы 1 ди  $\alpha_1$  ге, 2 ни  $\alpha_2$  ге ҳәм сол сыйылды орны алмастырыўларды орынлайды.  $\epsilon(P)$  арқалы +1 (егер орны алмастырыў жуп болса) ҳәм -1 (егер орын алмастырыў тақ болса) белгиленген.

(4.1.20)-функция симметрияның төмендегидей шәртлерин қанаатландырыуы керек:

1) биринши  $k$  аргументлерине қарата [(4.1.20)-аңлатпада сыйылыша белгисинин шеп тәрепинде турған]  $\psi$  функциясы антисимметриялы, мысалы

$$\begin{aligned} \psi(r_2, r_1, r_3, \dots, r_k | r_{k+1}, \dots, r_n) &= \\ &= -\psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_k | r_{k+1}, \dots, r_n), \end{aligned} \quad (4.1.22)$$

2) кейинги  $n - k$  аргументлерге қарата антисимметриялы (сызықшаның он тәрепинде жайласқан), мысалы

$$\begin{aligned} \psi(r_1, r_2, \dots, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, r_{k+3}, \dots, r_n) = \\ = -\psi(r_1, r_2, \dots, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, r_{k+3}, \dots, r_n), \end{aligned} \quad (4.1.23)$$

3)  $\psi$  функциясы цикллық симметрия қәсийетине ийе, бул қәсийет тәмендеги теңликтөркемнен көрінеди

$$\begin{aligned} \psi(r_1, \dots, r_{k-1}, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, \dots, r_n) = \\ = \psi(r_1, \dots, r_{k-1}, r_{k+1} | r_k, r_{k+2}, \dots, r_n) + \dots \\ \dots + \psi(r_1, \dots, r_{k-1}, r_{k+l} | r_{k+1}, \dots, r_{k+l-1}, r_k, r_{k+l+1}, \dots, r_n) + \dots \\ \dots + \psi(r_1, \dots, r_{k-1}, r_n | r_{k+1}, \dots, r_{n-1}, r_k). \end{aligned} \quad (4.1.24)$$

Бул теңлиktиң он тәрепи  $n - k$  ағзадан турады.  $r_k$  аргументи болса сызықтың он тәрепинде  $n - k$  ағзаның ҳәр бириниң орнына избе-из қойылып шығылады.

Цикллық симметрия қәсийети (4.1.18)-қатнастың нәтижеси болып табылады.  $\binom{n}{k-1}$  дана қатнастың ҳәр бири (4.1.24)-түрдеги теңлиktиң биреүине алып келеди. Бул жағдайда аңсат түрде тексерип көриў мүмкін [бұның ушын (4.1.22)- ҳәм (4.1.23)- аңлатпалардың антисимметрия қәсийетин есапқа алыў керек. Егер  $P$  арқалы  $(r_k, r_{k+1}, \dots, r_n)$  аргументлериниң цикллық орын алмастырыларын белгилесек [яғни  $(r_k, r_{k+1}, \dots, r_n)$  циклдың ҳәр бир ағзасы келеси ағза менен, ал ең ақырғы ағза биринши ағза менен алмастырылады], онда (4.1.24)-теңлик  $n - k$  айырмасы жуп болғанда

$$(1 + P + P^2 + \dots + P^{n-k}) \psi = 0, \quad (4.1.25)$$

ал  $n - k$  айырмасы тақ болғанда

$$(1 - P + P^2 - \dots - P^{n-k}) \psi = 0 \quad (4.1.26)$$

түріндегі жазылалады.

Сини нолге тең еки электроннан туратуғын дара жағдайда ( $n = 2, k = 1$ ) ҳал координатаға ғәрэзли болған симметриялық функцияның жәрдемінде тәрийипленеди. Ал спини  $s = 1$  болған ҳал ( $n = 2, k = 0$ ) антисимметриялық функция менен тәрийипленеди.

Жоқарыда келтирилген симметрияның үш талабын қанаатландыратуғын  $n$  дана  $r_1, r_2, \dots, r_n$  аргументлериниң функциясына мысал ретінде еки анықлаушының көбеймесин көрсетійгө болады:

$$\psi = \Psi^{(1)} \Psi^{(2)}. \quad (4.1.27)$$

Бул аңлатпада

$$\left. \begin{aligned} \Psi^{(1)} &= \left| \begin{array}{cccc} \psi_1(r_1) & \dots & \psi_1(r_k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_k(r_1) & \dots & \psi_k(r_k) \end{array} \right|, \\ \Psi^{(2)} &= \left| \begin{array}{cc} \psi_1(r_{k+1}) & \dots & \psi_1(r_n) \\ \psi_{n-k}(r_{k+1}) & \dots & \psi_{n-k}(r_n) \end{array} \right|. \end{aligned} \right\} \quad (4.1.28)$$

Бул анықлаушылар бир электронның координатасынан ғәрэзли болған

$$\psi_1(r), \psi_2(r), \dots, \psi_{n-k}(r) \quad (4.1.29)$$

функцияларынан турады. Усының менен бирге үлкен анықлаушы барлық  $n - k$  дана функцияға, ал кишкенеси солардың ишинде  $k$  дана функциясына ийе.

Биз өткөрген таллаўларымыз арқалы тек координаталардан емес, ал спинлик өзгериүшилерден де ғәрэзли болған (4.1.2)-толқын функциясын тек координаталардан ғәрэзли болған Шредингер толқын функциясы түринде көрсеттік. Усының менен бирге Паули принципи де, қозғалыс муғдарының спинлик моменти ушын (4.1.14) теңлеме де қатаң түрде есапқа алынды.

Шредингер толқын функциясы спинлик өзгериүшилерден ғәрэзли болмаса да қосынды спинниң мәниси оның қәсийетлеринде сәйкеленеди. Себеби сол қәсийетлерден оның симметриясы ғәрэзли.

Бирден қарағанда парадокс болып көринетүғын факт усы жағдайға байланыслы түсіндіриледи: Шредингер теңлемеси де, толқын функциясы да спинлик өзгериүшилерге ийе емес. Ал усы жағдайға қарамастан энергияның қәддилери қосынды спинниң мәнисинен ғәрэзли. Парадокс былайынша аңсат түрде түсіндіриледи: берилген спинге ийе энергияның қәддине сәйкес толқын функциясына қосынды спинниң ҳәр қыйлы мәнислерине сәйкес келиүши симметрия шәртлери қойылады.

## 4-2. Энергия операторы ҳәм оның симметриясы

Көп электронлы системаның стационар ҳалын тәрийиплейтуғын толқын функциясы энергия операторының меншикли функциясы болыуы керек. Энергия операторын классикалық механикаға сәйкес мына түрде жазамыз

$$\begin{aligned} H = & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^n \Delta_k + \sum_{k=1}^n U(x_k, y_k, z_k) + \\ & + \sum_{k>l=1}^n \frac{e^2}{\sqrt{(x_k - x_l)^2 + (y_k - y_l)^2 + (z_k - z_l)^2}}. \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

Бул аңлатпада  $k$ -санлы электронның координаталарына тәсир етиўши  $\Delta_k$  арқалы Лаплас операторы, ал  $U(x, y, z)$  арқалы электронға қатнасы бойынша сыртқы болған майданның потенциал энергиясы (мысалы атом ушын ядроның майданы ямаса молекула ушын бир неше ядроның майданы). Қос сумма электронлардың өзара тәсир етисиүине сәйкес келиүши потенциаллық энергия. (4.2.1)-энергия операторы магнит майданы болмаған жағдайға сәйкес келеди. Егер электронлар системасы сырттан түсирилген магнит майданында жайласқан болғанда энергия операторы спиннен ғәрэзли болған қосымша ағзаларға ийе болған болар еди.

Системаның энергиясының қәддилери ҳәм стационар ҳаллар

$$H\psi = E\psi \quad (4.2.2)$$

теңлемесиниң жәрдемінде анықланады. Бул аңлатпадағы  $H$  шамасы (4.2.1)-теңлемедеги энергия операторы болып табылады. Биз жоқарыда  $H$  операторы спинлик өзгериүшилерге ийе болмаса да энергия қәддилери  $E$  ниң  $s$  квантлық санға (қозғалыс мұғдарының спинлик моментине) байланыслы екенлигин көрсеттік. Бул жағдайда Шредингер толқын функциясы  $\psi$  дің симметриялық қәсийетиниң  $s$  тиң мәнисинен ғәрэзли екенлигінде екенлигинде биз билемиз.

Атомда  $H$  операторы сфералық симметрияға ийе, яғни оның түри координаталар көшерин кеңисликтеги қәлеген бурыўларда өзгериссиз қалады. Бундай жағдайда Шредингердин (координаталық) толқын функциясының орбиталық қозғалыс мұғдары моментиниң квадраты операторының ( $l$  квантлық саны) ҳәм оның бир координата көшерине түсирилген проекциясы операторы ( $m$  квантлық саны) ушын меншикли функциясы болыўы керек талабына бағындырыўымыз керек болады. Егер бул функция  $s$  тиң белгили бир мәниси ушын симметрия қәсийетине де ийе болатуғын болса, онда оның жәрдемінде 1-параграфтың (4.2.2)-түрдеги спинге ийе толқын функциясын дүзиўге болады. Бундай функция Паули принципин қанаатландырады ҳәм төмендегидей бес оператордың меншикли функциясы болады:

- 1) энергия операторының,
- 2) орбиталық қозғалыс мұғдары моментиниң квадраты операторының,
- 3) спинлик қозғалыс мұғдарының квадраты операторының,
- 4) қозғалыс мұғдарының толық моментиниң (орбиталық плюс спинлик) квадраты операторының,
- 5) қозғалыс мұғдарының толық моментиниң көшерлердин бирине түсирилген кураўшысы операторының.

Жоқарыда айтылған жағдай бойынша дүзиўлер векторлық модель бойынша алып барылады. Бул модель ҳаққында биз гәп етпеймиз.

Еки атомлы молекула жағдайында энергия операторы сфералық симметрияға емес, ал аксиаллық симметрияға ийе болады (яғни координаталар системасын еки ядроны тутастырыўши көшердин дөгерегинде бурғанда өзгермейди). Аксиаллық симметрия да квантлық санларды киргизиў ҳәм толқын функциясын (толық емес) анықлаў ушын қолланылады.

Сфералық ямаса аксиаллық симметрияны қолланыў квантлық санларды киргизиўге ҳәм усындей жоллар менен энергияның қәддилерин классификациялаўға мүмкіншілік береди. Бирақ симметрия көз-қараслары қәддилердин өзлерин ҳәм стационар ҳалларды анықлаў ушын жеткилиken емес. (4.2.2)-теңлемени дәл шешиў (бир электрон болған жағдай буған кирмейди) ушын оғада қыйын математикалық қыйыншылықтарды бастан кешириуди талап етеди. Сонлықтан жууық усылларды раўажландырыў үлкен әхмийетке ийе болады. Бул усыллардың ең әхмийетлісі келисилген майдан усылы болып табылады. Енди усы усылды баянлаўға кирисемиз.

### 4-3. Келисилген майдан усылы

Энергия операторының меншикли функциялары ушын теңлемени вариациялық басламадан алыў мүмкін

$$\delta W = 0. \quad (4.3.1)$$

Бул теңлемедеги  $W$

$$W = \frac{1}{N} \int \bar{\psi} H \psi dV, \quad N = \int \bar{\psi} \psi dV \quad (4.3.2)$$

аңлатпаларының жәрдеминде анықланады. Бул формуладағы  $\Psi$  4-1 параграфта киргизилген спинлик өзгеріушілерден ғәрэзсиз координаталық функция болып табылады. Конфигурациялық кеңисликтің көлем элементи  $dV$  барлық электронлардың координаталарының дифференциалларының көбеймесине тең болады

$$dV = dx_1 dy_1 dz_1 \dots dx_n dy_n dz_n. \quad (4.3.3)$$

Нормировкалаұшы интеграл болған  $N$  ди биз берилген турақты деп есаптай аламыз.

Бизиң тастыйықлаўымыздың дұрыслығын дәлиллеу ушын (4.3.2)-аңлатпаға кириўши интеграллардың вариацияларын дүземиз. Н өзине өзи түйинлес оператор болғанлықтан биз

$$\delta \int \bar{\psi} H \psi dV = \int \delta \bar{\psi} H \psi dV + \text{түйинлес.} \quad (4.3.4)$$

Усының менен бир қатарда

$$\delta \int \bar{\psi} \psi dV = \int \delta \bar{\psi} \psi dV + \text{түйинлес.} \quad (4.3.5)$$

Екинши теңлікти  $E$  ҳақыйқый көбейтиўшисине көбейтип ҳәм бириңишен оны алып, буннан кейин алынған нәтийжени нолге теңеп

$$\int \delta \bar{\psi} (H\psi - E\psi) dV + \text{түйинлес} = 0. \quad (4.3.6)$$

Бул теңлік интеграл астындағы  $\delta\psi$  көбейтиўшиси нолге тең болған жағдайда  $\psi$  дин ҳақыйқый ҳәм жormal бөлімлерин ықтыйярлы түрдеги вариацияларда ғана орынланады. Буннан

$$H\psi = E\psi \quad (4.3.7)$$

аңлатпасы келип шығады. Бул теңлеме энергия операторының меншикли функциялары ушын жазылған теңлеме болып табылады. Солай етип бизиң тастыйықлаўымыздың дұрыс екенлеги дәлилленди.

$W$  шамасының физикалық мәниси  $\Psi$  ҳалындағы системаның энергиясының математикалық күтийинен ибарат.  $W$ дың экстремаллық мәниси энергияның қәдди  $E$  ге тең. С квантлық санның берилген мәнисине сәйкес келиўши ең төменде турған қәддини табыў ушын интегралды вариациялағанда бизге керекли болған симметрияға ийе ҳәм базы бир улыўмалық шәртлерди қанаатландыратуғын (тууындыларға ийе, интеграллардың жыйнақтырылғаны) барлық функцияларын салыстырыў ушын алыўымыз керек. Буннан кейинги қәддилерди алыў ушын жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда толқын функциясының төмениректе жайласқан қәддилерге сәйкес келиўши барлық толқын функцияларына ортогоналлық болыўын талап етиўимиз керек.

Мәселени шешиўди әпиўайыластырыў ушын биз толқын функциясына қосымша шәртлерди қойыўымыз керек. Мысалы 4-1 параграфтағы (4.1.27)- ҳәм (4.1.28)-

аңлатпаларға сәйкес толқын функциясы бир электронлық функциялардан қуалған еки анықлаушының көбеймесинен турыўы талап етиледи. Бундай жағдайда ең төмендеги қәддиниң орнына энергияның бир қанша жоқары мәнисин аламыз. Бирақ энергияның бул мәниси ең төменги қәддиге сәйкес келиўши энергияның мәнисинен азмаз ғана айырмаға ийе болады. Тап усындај жоллар менен келеси қәддилер ушын оған жақын мәнислер алынады.

$W$  ға 4-2 параграфтағы (4.2.28)-анықлаушылардың көбеймесин қойыудың нәтийжесин есаптаймыз. Бул жағдайда да  $\psi_p(r)$  функцияларын бир бири менен ортогонал деп есаптаймыз:

$$\int \bar{\psi}_p(r) \psi_q(r) d\tau = \delta_{pq}, \quad d\tau = dx dy dz. \quad (4.3.8)$$

Бул жағдайдың улыўмалықта тәсир етпейтуғынлығы айқын. Буның ушын 4-2 параграфтағы (4.2.1)-энергия операторын

$$H(r_1, r_2, \dots, r_n) = \sum_{p=1}^n H(r_p) + \sum_{p>q=1}^n \frac{e^2}{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_q|} \quad (4.3.9)$$

түринде жазамыз. Бул аңлатпада

$$H(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z). \quad (4.3.10)$$

Бундай жағдайда биз мына аңлатпаны аламыз:

$$\begin{aligned} W = & \sum_{p=1}^k \int \bar{\psi}_p(r) H(r) \psi_p(r) d\tau + \sum_{p=1}^{n-k} \int \bar{\psi}_p(r) H(r) \psi_p(r) d\tau + \\ & + \frac{e^2}{2} \iint \frac{\rho^{(1)}(r, r') \rho^{(1)}(r', r') - |\rho^{(1)}(r, r')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau d\tau' + \\ & + \frac{e^2}{2} \iint \frac{\rho^{(2)}(r, r') \rho^{(2)}(r', r') - |\rho^{(2)}(r, r')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau d\tau' + \\ & + e^2 \iint \frac{\rho^{(1)}(r, r') \rho^{(2)}(r', r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau d\tau'. \end{aligned} \quad (4.3.11)$$

Бул аңлатпада биз  $\rho^{(1)}$  ҳәм  $\rho^{(2)}$  арқалы

$$\rho^{(1)}(r, r') = \sum_{p=1}^k \bar{\psi}_p(r) \psi_p(r'), \quad (4.3.12)$$

$$\rho^{(2)}(r, r') = \sum_{p=1}^{n-k} \bar{\psi}_p(r) \psi_p(r') \quad (4.3.13)$$

аңлатпаларды белгиледик. Алынған формулалар көргизбелі түрде түсіндіриледи. Бириңи гезекте системаның толық толқын функциясын  $\psi_p(r)$  арқалы белгилеў системаның ҳәр бир электроны ушын өзиниң толқын функциясы жазыў мүмкін деген болжаўға сәйкес келеди (биз шәртли түрде «өзиниң орбитасын» деп айтыўымыз мүмкін). Бундай жағдайда электронлар еки топарға бөлинеди: бириңисине  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$  «орбиталарындағы» электронлар, ал екинши топарға  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{n-k}$  «орбиталарында жайласқан» электронлар киреди. Еки

топар бир бириңен спинлериниң қарама-қарсы екенлиги менен айрылады.  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_k$  орбиталарында ҳәр қыйлы спинге ийе болған еки электроннан жайласады. Ал басқа  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_{n-k}$  орбиталарында болса бирдей спинге ийе бир электроннан жайласады. Бириңи  $k$  орбиталардағы спинлер бир бириң жоқ қылады. Ал қалған  $n - 2k$  орбиталардағы электронлардың спинлері бир бириңе қосылады. Ҳәр бир электронның спининиң абсолют мәниси  $\frac{1}{2}$  ге тең болғанлықтан системаның толық спини бизиң күткенимиздегі  $\frac{n}{2} - k = s$  шамасына тең болып шығады.

$$e\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = e \sum_{p=1}^k |\Psi_p(\mathbf{r})|^2 \quad (4.3.14)$$

шамасына тең электронның заряды  $e$  ге көбейтилген  $\rho^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  шамасын бириңи топардағы электронлардың зарядының кеңисликлик тығызлығы деп түснійімиз керек.  $e\rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r})$  шамасы да тап сондай етип түснідириледи. Ҳәр қыйлы  $r, r'$  аргументлерине ийе (4.3.12)- ҳәм (4.3.13)-аңлатпаларды классикалық көз-қарасларда турып түснідириүге болмайды. Оларға шартли түрде «аралас тығызлық» деп атама беріў мүмкін.

Электронлар системасының энергиясы ушын (4.3.11)-аңлатпаға мәни беремиз. Бириңи сумма ядролар майданындағы бириңи топарға кириўши электронлардың потенциал ҳәм кинетикалық энергиялары болып табылады. Ал екинши сумма екинши топарға кириўши потенциал ҳәм кинетикалық энергиялар болып табылады. Қос интегралдағы (двойной интегралдағы) бирдей аргументлерге ийе  $\rho^{(1)}$  ағзалар бириңи топардағы электронлардың электростатикалық энергиясын береди. Ал аралас тығызлыққа ийе ағзаның классикалық мәниси жоқ ҳәм бул ағзаның энергия ушын жазылған аңлатпаға қатнасыўы өзине тән квантлық эффект болып табылады (оны квантлық алмасыў энергиясы деп атайды). Екинши қос интеграл екинши топардағы электронлар ушын тап сондай мәниске ийе. Ең ақырғы қос интеграл еки топар электронлар арасындағы электростатикалық тәсир етисиў энергиясын көрсетеди.

Бизиң формулаларымызға берилген мәни қатаң түрде берилген болмаса да өзиниң көргизбелілігі менен айрылады. Соныңтан олардың физикалық мәнисин түснійүү ушын пайдалы. (4.3.11)-аңлатпаға қатаң түрде мәни беріў де вариацияланатуғын интегралға белгили симметрияға ийе толқын функциясын қойыўға алып келинеди.

Биз излеп атырған  $\Psi_p(\mathbf{r})$  функциялары ушын теңлемелер системасы (4.3.8)-қосымша шартлер тийкарында (4.3.11)-аңлатпаны вариациялаў жолы менен алынады. Бул теңлемелер системасы

$$\begin{aligned} 2[H(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})]\Psi_p(\mathbf{r}) - e^2 \int \frac{[\rho^{(1)}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) + \rho^{(2)}(\mathbf{r}', \mathbf{r})]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi_p(\mathbf{r}') d\tau' = \\ = \sum_{q=1}^{n-k} \lambda_{qp} \Psi_q(\mathbf{r}) \quad (p = 1, 2, \dots, k), \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

$$\begin{aligned} [H(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})]\Psi_p(\mathbf{r}) - e^2 \int \frac{\rho^{(2)}(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi_p(\mathbf{r}') d\tau' = \\ = \sum_{q=1}^{n-k} \lambda_{qp} \Psi_q(\mathbf{r}) \quad (p = k+1, \dots, n-k) \end{aligned} \quad (4.3.16)$$

турине ийе. Бул формулаларда  $V(r)$  шамасы

$$V(r) = e^2 \int \frac{\rho^{(1)}(r', r') + \rho^{(2)}(r', r')}{|r - r'|} d\tau' \quad (4.3.17)$$

мәнисине ийе ҳәм оған барлық электронлардың потенциалының е ге көбеймеси мәнисин беріү мүмкін.  $\lambda_{qp}$  шамалары (4.3.8)-ортогоналлық шәртлерине сәйкес келиүши лагранжлық көбейтиүшилер болып табылады. Бул көбейтиүшилер  $\delta W$  вариацияларын қурастырғанда есапқа алғының керек.  $\lambda_{qp}$  матрицаларының диагоналлық емес элементлери бир индекстің мәниси  $k + 1$ ден үлкен болса, ал екиншисиниң мәниси  $k$  да тең ямаса оннан киши болғанда ғана нолге тең болмайды деп есаплауға болады.

(4.3.16)-теңлемениң  $\Psi_p(r)$  ушын өзиниң коэффициентлеринде бундай функцияға ийе емес екенлигин аңғарамыз. Соныңтан  $\Psi_p(r)$  функциясынан басқа барлық функцияларды белгили деп есапласақ, онда  $\Psi_p(r)$  ушын жазылған теңлеме сыйықты болады.

Теңлемениң бул қәсийетин былайынша келтирип шығарыуға болады.

$$\rho_p^{(2)}(r, r') = \sum_{q=1}^{n-k} (1 - \delta_{pq}) \bar{\Psi}_q(r) \Psi_q(r') \quad (4.3.18)$$

деп есаплайық ҳәм  $V_p(r)$  арқалы (4.3.12)- ҳәм (4.3.13)-аңлатпалардың жәрдеминде емес, ал (4.3.12)- ҳәм (4.3.18)-суммалардың жәрдеминде есапланған (4.3.17)-аңлатпаға уқсас аңлатпаны белгилейик Бундай жағдайда егер  $V$ ны  $V_p$  да,  $\rho_p^{(2)}$ ни  $\rho_p^{(2)}$  да алмастырсақ (4.3.16)-теңлеме өзиниң түрін сақтайылады.

Енди (4.3.15)-теңлемеге келемиз. Оны ҳәр бир орбитада еки электроннан бар, яғни  $s = 0$  болған жағдай ушын жазамыз. Бундай жағдайда  $n$  жуп сан болады,  $k = \frac{n}{2}$  ҳәм (4.3.12)- ҳәм (4.3.13)-суммалары  $\rho$  дағы жоқарғы индекси алғып таслайтуғындағы болып бир бири менен сәйкес келеди. Усының менен бир қатарда  $\lambda_{qp}$  матрицасын диагоналлық матрица деп қарауға болады

$$\lambda_{qp} = 2E_p \delta_{qp} \quad (4.3.19)$$

түринде ала аламыз. Нәтийжеде

$$[H(r) + V(r)] \Psi_p(r) - e^2 \int \frac{\rho(r', r)}{|r - r'|} \Psi_p(r') d\tau' = E_p \Psi_p(r) \quad (4.3.20)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада

$$V(r) = 2e^2 \int \frac{\rho(r', r)}{|r - r'|} d\tau' \quad (4.3.21)$$

хәм

$$\rho(r', r) = \sum_{q=1}^{\frac{n}{2}} \bar{\Psi}_q(r') \Psi_q(r). \quad (4.3.22)$$

Егер енди  $V_p(r)$  ушын жаңа анықлама

$$V_p(r) = 2e^2 \int \frac{\rho(r', r')}{|r - r'|} d\tau' - e^2 \int \frac{|\psi_p(r')|^2}{|r - r'|} d\tau' \quad (4.3.22)$$

киргизетуғын болсақ ҳәм (4.3.18)-аңлатпа сыйқылды белгилесек

$$\rho_p(r', r) = \sum_{q=1}^{n-k} (1 - \delta_{pq}) \bar{\psi}_q(r') \psi_q(r),$$

онда (4.3.20)-теңлеме байлайынша жазылады:

$$[H(r) + V_p(r)] \psi_p(r) - e^2 \int \frac{\rho_p(r', r)}{|r - r'|} \psi_p(r') d\tau' = E_p \psi_p(r). \quad (4.3.23)$$

Бул теңлемеде интеграллық ағзаны алып тасласақ, онда оны потенциал энергиясы

$$\Phi = U(r) + V_p(r) \quad (4.3.24)$$

шамасына тең майдандағы электрон ушын Шредингер теңлемеси деп қарауға болады. Бул аңлатпада  $U(r)$  арқалы (4.3.10)-аңлатпаға кириўши сыртқы майданның потенциал энергиясы, ал  $V_p(r)$  арқалы белгиленген басқа барлық (берилген электроннан басқа) электронлар пайда еткен майданның потенциал энергиясы белгиленген. Ҳақыйқатында да (4.3.22)-формула бойынша есапланған  $V_p(r)$  дың шамасы  $\rho - |\psi_p|^2$  тығызлығына сәйкес келиўши потенциалға пропорционал. (4.3.20)-теңлемедеги интеграллық ағзаға классикалық мағана болады. Ол квантлық алмасыў энергиясына дүзетиў атамасын алды.

Интеграллық ағзаға ийе емес (4.3.20)-теңлемелер (дұрысырағы дәллиги бир қанша киши теңлемелер) бириңи рет англиялы математик Хартри (Hartree) тәрепинен усынылды. Бирақ ол теңлемеге қанаатландырлық тийкарлама бере алмады. Себеби ол теңлемени келтирип шығарғанда вариациялық басламалардан пайдаланбады ҳәм электронлар системасының толқын функциясын қарап шықпай, тек ғана ҳәзир ғана айтылып өтилген көргизбели көз-қарасларға сүйенди. (4.3.20)-теңлемелер Хартри тәрепинен өзи өзи менен келистирилген майдан теңлемеси деп аталды (толқын функциялары ушын теңлемелерге кириўши потенцил  $V$  ның өзи толқын функциялар арқалы аңлатылады деген мәнисте).

Берилген спин ушын толқын функциясының симметрия қәсийетлерин есапқа алыўшы интеграллық ағзаларға ийе толық теңлемелерди бизлер вариациялық принциптен келтирип шығардық. Усының менен бирге Хартри теңлемеси де тийкарланды. Бул теңлемелер әдебиятта квантлық алмасыўға ийе өзи өзи менен келистирилген ямаса келисилген майдан атамасын алды.

Квантлық алмасыўға ийе келисилген майдан теңлемелери ушын басқа да формулировка орынлы болады. Бул формулировканы Дирак берди ҳәм онда спинлик өзгериўшилер әүел бастан жоқ етилмейди, ал олар бир электронлық толқын функцияларына киреди. 1-параграфтағы электронлар системасының толқын функциясы

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \dots & \psi_1(x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_n(x_1) & \dots & \psi_n(x_n) \end{vmatrix} \quad (4.3.24)$$

туриндеңи бир электронлық функцияларға ийе бир анықлаушы арқалы жуўық

түрде аңлатылады. Бул бир электронлық функциялар ушын биз алған теңлемелерге сәйкес келетуғын теңлемелер алынады. Бул усылдың артықмашлығы есаплаўлардың әпиүайылығында ( себеби еки анықлаўшының көбеймеси менен емес, ал тек бир анықлаўшы менен жумыс ислеўге туұры келеди). Бирақ бул усылдың кемшилиги де бар. Кемшилик соннан ибарат, 1-параграфтағы қозғалыс муғдарының спинлик моменти ушын жазылған (4.3.14)-теңлеме барлық ўақытта орынланбайды, ал тек ғана бир электронлық функцияларды сәйкес түрде сайлап алғанда ғана орынланады. Сфералық симметрия бар болғанда (4.3.24)-анықлаўшыға кириўши  $\Psi_i(x)$  функцияларын радиаллық  $R_{nl}$  функциялары арқалы анықлаўға болады. Усындағы симметрия бар болған жағдайларда  $\Psi_i(x)$  функцияларын спинге ииे шар функциялары арқалы да анықлаўға болады. Бундай жағдайларда радиаллық функциялар ушын теңлемелер бизиң дәслепки усыл менен алынған функциялар менен бирдей болыўы шәрт.

Спинге ииे толқын функциялары ушын келисилген майдан теңлемелери екинши квантланыў теориясының жәреминде де келтирип шығарылады.

## V бөлім

### Дирак теориясы

#### I бап. Дирактың толқын теңлемеси

##### 5-1. Квантлық механика ҳәм салыстырмалық теориясы

Шредингер теориясы да, Паули теориясы да релятивистлик емес характерге ийе. Бул теорияларда материаллық бөлекшениң ямаса қандай да бир тәсирдиң кеңисликтеги тарқалығының жақтылықтың тезлигинен үлкен тезликлерде бола алмайтуғынлығы есапқа алынбаған. Квантлық механиканың релятивистлик улыұмаластырылығы жаңа физикалық түсніклерди пайдаланыуды ҳәм ҳэтте толқын теңлемесиниң интерпретациясын өзгертиүди талап етеди. Толқын функциясының түрин өзгертиү электрон ушын спиннен басқа және де бир еркинлик дәрежесин киргизиү зәрүрлиги ҳәм бир дene мәселеси шеклеринде турып оны таллаудың мүмкін емес екенлигинен ибарат.

Бирақ салыстырмалық теориясының талаптарын есапқа алған ҳалда берилген электромагнит майданындағы бир дene (бир электрон) мәселесин формаллық жақтан қойыудың мүмкін екенлеги Дирак тәрепинен табылды. Ол электрон ушын өзиниң релятивистлик теңлемесин усынды.

Биз III баптың 13-параграфтың биринши бөлімінде толқын теңлемеси, яғни үақыттың өтийи менен ҳалының өзгерисин тәрийиплейтуғын теңлемениң

$$H\psi - i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad (5.1.1)$$

түрине ийе болатуғынлығын көрген едик. Бул теңлемеде  $H$  арқалы энергия операторы (Гамильтон операторы) белгиленген. Толқын теңлемеси менен квантлық қозғалыс теңлемеси тығыз байланысқан. Биз қозғалыс теңлемесинен толқын теңлемесин алған едик (I бөлімниң III бабының 13-параграфы). Толқын теңлемесин қозғалыс теңлемесинен де алыў мүмкін (IV баптың I бөлімниң 4-параграфы). Енди биз Дирактың идеяларын пайдаланып (5.1.1)-толқын теңлемесин салыстырмалық теориясына улыұмаластырыўымыз керек. Алынған теңлемениң Лоренц түрлендіриўлерине қарата инвариантлығын талап етийимиз керек ҳәм оннан салыстырмалық теориясының классикалық қозғалыс теңлемесиниң алыныўы шәрт.

##### 5-2. Классикалық қозғалыс теңлемеси

Салыстырмалық теориясының классикалық қозғалыс теңлемесиниң ҳәм оған сәйкес келетуғын Лагранж ҳәм Гамильтон функцияларының қандай болатуғынлығын еске түсірип өтемиз.

Салыстырмалық теориясының механикасында  $P_x, P_y, P_z$  қозғалыс муғдары  $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$  тезлиги менен

$$P_x = \frac{m\dot{x}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad P_y = \frac{m\dot{y}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad P_z = \frac{m\dot{z}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (5.2.1)$$

теңлемелери арқалы байланысқан. Бул аңлатпаларда

$$v^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2. \quad (5.2.1^*)$$

Бул жағдайда электромагнит майданындағы массасы  $m$  ҳәм заряды  $-e$  болған электронның қозғалыс теңлемеси

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dP_x}{dt} = -\frac{e}{c} (\dot{y}\mathcal{H}_z - \dot{z}\mathcal{H}_y) - e\mathcal{E}_x, \\ \frac{dP_y}{dt} = -\frac{e}{c} (\dot{z}\mathcal{H}_x - \dot{x}\mathcal{H}_z) - e\mathcal{E}_y, \\ \frac{dP_z}{dt} = -\frac{e}{c} (\dot{x}\mathcal{H}_y - \dot{y}\mathcal{H}_x) - e\mathcal{E}_z. \end{array} \right\} \quad (5.2.2)$$

турине ийе болады. Бул теңлемелерден

$$\frac{dT}{dt} = -e(\dot{x}\mathcal{E}_x + \dot{y}\mathcal{E}_y + \dot{z}\mathcal{E}_z) \quad (5.2.3)$$

теңлемеси келтирилип шығарылады. Бул аңлатпада

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (5.2.4)$$

электронның кинетикалық энергиясы болып табылады.

Бул теңлемелерди Лагранж

$$\mathcal{L} = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - \frac{e}{c} (\dot{x}A_x + \dot{y}A_y + \dot{z}A_z) + e\Phi \quad (5.2.5)$$

функциясынан да алыў мүмкін. Бул аңлатпада  $\Phi$  арқалы скаляр, ал  $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$  арқалы векторлық потенциал белгиленген.  $\mathbf{x}$  координатасы менен түйинлес улыўмаласқан «момент»

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{m\dot{x}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{e}{c} A_x = P_x - \frac{e}{c} A_x \quad (5.2.6)$$

аңлатпасы арқалы жазылады. Басқа координаталар ушын да тап усындај аңлатпалар алынады. Солай етип  $p_x, p_y, p_z$  «моментлері»  $P_x, P_y, P_z$  қозғалыс муғдарларының қураўшылары менен бирдей емес екен. Олар арасындағы байланыс релятивистлик емес жағдайдағыдай

$$P_x = p_x + \frac{e}{c} A_x, \quad P_y = p_y + \frac{e}{c} A_y, \quad P_z = p_z + \frac{e}{c} A_z \quad (5.2.7)$$

қатнасларының жәрдеминде бериледи [III бөлімниң 5-параграфының (3.5.16)-

формуласына қараңыз]. Электронның энергиясы

$$E = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y + \dot{z}p_z - \mathcal{L} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - e\Phi \quad (5.2.8)$$

шамасына тең. Оны улыўмаласқан моментлер арқалы аңлатып Гамильтонның классикалық функциясын аламыз:

$$H_{\text{класс}} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{1}{m^2 c^2} \left( p + \frac{e}{c} A \right)^2} - e\Phi. \quad (5.2.9)$$

### 5-3. Толқын теңлемесин келтирип шығарыў

Бизге жоқарыдағы параграфтағы (9)-Гамильтон функциясына сәйкес келетуғын квантлық операторды табыўымыз керек. Биз еркин электронның әпиўайы жағдайынан баслаймыз: электромагнит майданы жоқ, скаляр ҳәм векторлық потенциаллар нолге тең. Бул жағдайда

$$H_{\text{класс}} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{1}{m^2 c^2} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}. \quad (5.3.1)$$

Салыстырмалық теориясы ушын характерли болған теңлемелердин координаталарға ҳәм ўақытқа қарата симметриясынан, толқын теңлемеси сзықты түрде ўақыт бойынша дифференциаллаў операторын өз ишине қамтыйтуғын болғанлықтан бул теңлеме сзықты түрдеги координаталар бойынша дифференциаллаў операторына да иие болыўы керек. Демек энергия квантлық оператор

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

операторларына қарата сзықты болыўы, яғни

$$H = \beta_1 p_x + \beta_2 p_y + \beta_3 p_z + \beta_4 \quad (5.3.2)$$

түрине иие болыўы керек. Бул аңлатпада  $\beta_h$  арқалы  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  шамаларына иие емес ҳәзирше белгисиз болған операторлар белгиленген. Бирақ бул операторлар  $x$ ,  $y$ ,  $z$  координаталарына иие болмаўы керек. Себеби еркин электрон ушын кеңисликтиң барлық ноқатлары бирдей хұқыққа иие болыўы керек. Демек олар Шредингер теориясының толқын функциясы ғәрезли емес қандайда бир жаңа өзгериўшилерге тәсір етийи керек. Бул жаңа өзгериўшилердин мәнисин биз төменде анықтаймыз. Олардың Паули теориясы тәрепинен киргизилетуғын операторлардың улыўмаласқан түри болып табылады.

$\beta_h$  операторларының қәсийетлерин анықлаў ушын квантлық механикандағы электронның энергияның квадраты менен қозғалыс муғдарының квадраты арасындағы қатнас классикалық физикада орын алатуғын қатнастай, атап айтқанда

$$H^2 = m^2 c^4 + c^2 (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (5.3.3)$$

түринде болыўын талап етемиз.

$\beta_h$  операторларының өз ишине кординаталарды алмайтуғынлығы ҳәм сонлықтан  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  операторлары менен коммутацияланатуғынлығы есапқа алған ҳалда (5.3.2)-оператордың квадратын есаптаймыз. Бул мынаған ийе боламыз:

$$\begin{aligned} H^2 = & \beta_4^2 + \beta_1^2 p_x^2 + \beta_2^2 p_y^2 + \beta_3^2 p_z^2 + \\ & + (\beta_1\beta_4 + \beta_4\beta_1) p_x + (\beta_2\beta_4 + \beta_4\beta_2) p_y + (\beta_3\beta_4 + \beta_4\beta_3) p_z + \\ & + (\beta_2\beta_3 + \beta_3\beta_2) p_y p_z + (\beta_3\beta_1 + \beta_1\beta_3) p_z p_x + (\beta_1\beta_2 + \beta_2\beta_1) p_x p_y. \end{aligned} \quad (5.3.4)$$

Егер

$$\beta_4^2 = m^2 c^4, \quad \beta_1^2 = \beta_2^2 = \beta_3^2 = c^2, \quad \beta_i \beta_k + \beta_k \beta_i = 0 \quad (i \neq k) \quad (5.3.5)$$

шәрти орынланатуғын болса (5.3.4)-аңлатпа (5.3.3)-аңлатпаға сәйкес келеди.

Егер биз

$$\alpha_1 = c a_1, \quad \alpha_2 = c a_2, \quad \alpha_3 = c a_3, \quad \alpha_4 = m c^2 a_4 \quad (5.3.6)$$

қатнасларының жәрдеминде  $\beta_h$  операторының орнына оған пропорционал болған  $\alpha_k$  операторын киргизетуғын болсақ, онда  $H$  операторы былайынша жазылады:

$$H = c(a_1 p_x + a_2 p_y + a_3 p_z) + m c^2 a_4, \quad (5.3.7)$$

ал жаңа  $\alpha_k$  операторы

$$\alpha_k^2 = 1, \quad a_i \alpha_k + \alpha_k a_i = 0 \quad (i \neq k) \quad (5.3.8)$$

шәрттин қанаатландыратуғын болады. Бул шәртлерди былайынша жаза аламыз

$$a_i \alpha_k + \alpha_k a_i = 2 \delta_{ik} \quad (i, k = 1, 2, 3, 4). \quad (5.3.9)$$

## 5-4. Дирак матрицалары

Паули матрицаларының еки функция үстинен подстановка болғанлығы сыйқылды  $\alpha_k$  операторын төрт  $\psi_1$ ,  $\psi_2$ ,  $\psi_3$ ,  $\psi_4$  функциялары үстинен подстановка деп қарауға болатуғынлығын биз төменде көремиз. Солай етип  $\alpha_k$  операторының тәсир етиў объекті төрт функцияның жыйнағы болады, ал операторлардың өзлерин подстановка коэффициентлеринен туратуғын матрица түрінде көрсетиў мүмкін.

$\psi_1$ ,  $\psi_2$ ,  $\psi_3$ ,  $\psi_4$  функцияларының жыйнағын бир  $\Psi$  символы менен жийи белгилеймиз, ал

$$\left. \begin{aligned} \psi'_1 &= \alpha_{11}\psi_1 + \alpha_{12}\psi_2 + \alpha_{13}\psi_3 + \alpha_{14}\psi_4, \\ \psi'_2 &= \alpha_{21}\psi_1 + \alpha_{22}\psi_2 + \alpha_{23}\psi_3 + \alpha_{24}\psi_4, \\ \psi'_3 &= \alpha_{31}\psi_1 + \alpha_{32}\psi_2 + \alpha_{33}\psi_3 + \alpha_{34}\psi_4, \\ \psi'_4 &= \alpha_{41}\psi_1 + \alpha_{42}\psi_2 + \alpha_{43}\psi_3 + \alpha_{44}\psi_4 \end{aligned} \right\} \quad (5.4.1)$$

подстановкасын (орнына қойыуын) қысқа түрде былайынша

$$\psi' = \alpha \psi \quad (5.4.2)$$

жазамыз. Бул аңлатпада  $\alpha$  арқалы

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & \alpha_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{pmatrix} \quad (5.4.3)$$

матрицасы белгиленген.

5-3 параграфтағы (5.3.9)-қатнасларды қанаатландыратуғын  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  операторларын Паули теориясын қарағанымыздығы матрица сыйқылы матрицалар менен аңғартамыз.

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  матрицаларынан алты матрица қурамыз: бириңишиден

$$\sigma_x = -i\alpha_2\alpha_3, \quad \sigma_y = -i\alpha_3\alpha_1, \quad \sigma_z = -i\alpha_1\alpha_2 \quad (5.4.4)$$

матрицаларын, екиншиден

$$\rho_a = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3, \quad \rho_b = \alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4, \quad \rho_c = \alpha_4 \quad (5.4.5)$$

матрицалары.

Паули матрицалары қандай қатнасларды қанаатландыратуғын болса  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  матрицаларының да тап сондай қатнасларды қанаатландыратуғынлығын аңсат тексерип көриүге болады. Атап айтқанда

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y, \\ \sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z. \end{array} \right\} \quad (5.4.6)$$

Олардың ҳәр бириниң квадраты 1 ге тең болады:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \quad (5.4.7)$$

Тап усындай қатнасларды  $\rho_a, \rho_b, \rho_c$  матрицалары да қанаатландырады. Олар ушын биз

$$\left. \begin{array}{l} \rho_b\rho_c = -\rho_c\rho_b = i\rho_a, \\ \rho_c\rho_a = -\rho_a\rho_c = i\rho_b, \\ \rho_a\rho_b = -\rho_b\rho_a = i\rho_c, \end{array} \right\} \quad (5.4.8)$$

Хәм

$$\rho_a^2 = \rho_b^2 = \rho_c^2 = 1 \quad (5.4.9)$$

аңлатпаларына ийе боламыз.

$\rho$  матрицасының  $\sigma$  матрицасына көбеймеси ушын

$$\left. \begin{array}{l} \rho_a \sigma_x = \sigma_x \rho_a = a_1, \\ \rho_a \sigma_y = \sigma_y \rho_a = a_2, \\ \rho_a \sigma_z = \sigma_z \rho_a = a_3, \end{array} \right\} \quad (5.4.10)$$

буннан кейин

$$\left. \begin{array}{l} \rho_b \sigma_x = \sigma_x \rho_b = i a_1 a_4, \\ \rho_b \sigma_y = \sigma_y \rho_b = i a_2 a_4, \\ \rho_b \sigma_z = \sigma_z \rho_b = i a_3 a_4 \end{array} \right\} \quad (5.4.11)$$

хәм ең ақырында

$$\left. \begin{array}{l} \rho_c \sigma_x = \sigma_x \rho_c = -i a_2 a_3 a_4, \\ \rho_c \sigma_y = \sigma_y \rho_c = -i a_3 a_1 a_4, \\ \rho_c \sigma_z = \sigma_z \rho_c = -i a_1 a_2 a_4 \end{array} \right\} \quad (5.4.12)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Солай етип  $\rho$  матрицаларының ҳәр қайсысы  $\sigma$  матрицаларының ҳәр қайсысы менен коммутацияланады. Усы жағдайға байланыслы  $\rho$  ҳәм  $\sigma$  матрицаларын электронның ҳәр қыйлы еркинлик дәрежелери менен байланысқан деп айта аламыз.

$\rho$  ҳәм  $\sigma$  шамалары арқалы  $a_i$  матрицалары ушын жазылған аңлатпадан пайдаланып 3-параграфтағы энергия операторы ушын жазылған (5.4.7)-аңлатпаны мына түде жазыўымыз мүмкін:

$$H = c \rho_a (\sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z) + mc^2 \rho_c \quad (5.4.13)$$

3-параграфтағы энергия операторы ушын жазылған (5.4.9)-шәртти қанаатландыратуғын  $a_1, a_2, a_3, a_4$  матрицаларына  $a_5 = \rho_b$  деп есаплада бесинши матрицаны қосыўымыз мүмкін екенлигин аңғарамыз. Бул матрица (5.4.13)-энергия операторы менен антикоммутацияға ушырайды.

Жоқарыда қәлипестирилген қәсийетлерге ийе төрт бағанаға ҳәм төрт қатарға ийе матрицаны құрыў менен шуғылланамыз. Буның ушын дәслеп Паули теориясында ушырасатуғын еки бағанаға ҳәм еки қатарға ийе үш матрицаны қараймыз. Оларды  $\sigma_1^0, \sigma_2^0, \sigma_3^0$  арқалы белгилеймиз ҳәм былайынша жазамыз:

$$\sigma_1^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2^0 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.4.14)$$

Буннан кейин

$$\sigma_1^0 \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix}, \quad \sigma_2^0 \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\eta \\ i\xi \end{pmatrix}, \quad \sigma_3^0 \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi \\ -\eta \end{pmatrix} \quad (5.4.15)$$

подстановкасы бир шаманың үстинде емес, ал бир ўақытта еки  $\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$  ҳәм  $\begin{pmatrix} \xi^* \\ \eta^* \end{pmatrix}$  санлары үстинде жүргизиледи деп болжаймыз. Санлардың болғанда еки жубын  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4$  санларының төрттен бири деп қараў керек. Соның менен бирге  $\xi, \eta, \xi^*, \eta^*$  санларын  $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4$  санлары менен саластырыуды ҳәр қыйлы жоллар менен әмелге асырыў мүмкін.

Мысалы былайынша болжаўға болады:

$$\psi_1 = \xi, \quad \psi_2 = \eta, \quad \psi_3 = \xi^*, \quad \psi_4 = \eta^* \quad (5.4.16)$$

ямаса

$$\psi_1 = \xi, \quad \psi_2 = \xi^*, \quad \psi_3 = \eta, \quad \psi_4 = \eta^*. \quad (5.4.17)$$

Биринши жағдайда бизинқ подставкамызға сәйкес келиүши матрица былайынша жазылады:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.4.18)$$

ал екинши жағдайда болса матрицалар басқаша жазылады

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.4.19)$$

Әлбетте өз алдына алынған  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  подстановкалары ҳәм өз алдына  $\rho_1, \rho_2, \rho_3$  орнына қойыўларды да еки функция үстинен исленген (5.4.15)- орнына қойыў (подстановка) қанаатландыратуғын қатнасларды қанаатландырады. Атап айтқанда

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_2\sigma_3 = -\sigma_3\sigma_2 = i\sigma_1, \\ \sigma_3\sigma_1 = -\sigma_1\sigma_3 = i\sigma_2, \\ \sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3, \\ \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1, \end{array} \right\} \quad (5.4.20)$$

$$\left. \begin{array}{l} \rho_2\rho_3 = -\rho_3\rho_2 = i\rho_1, \\ \rho_3\rho_1 = -\rho_1\rho_3 = i\rho_2, \\ \rho_1\rho_2 = -\rho_2\rho_1 = i\rho_3, \\ \rho_1^2 = \rho_2^2 = \rho_3^2 = 1. \end{array} \right\} \quad (5.4.21)$$

Екинши тәрептен ҳәм бир  $\sigma$  подстановкасы ҳәр бир  $\rho$  подстановкасы менен коммутацияланатуғының тексерип көриў мүмкін

$$\sigma_i\rho_k = \rho_k\sigma_i \quad (i, k = 1, 2, 3). \quad (5.4.22)$$

$\rho$  ҳәм  $\sigma$  матрицаларының ҳәр қайсысы, соның менен олардың (5.4.22)-көбеймелери де  $+1$  ҳәм  $-1$  болған еки қайтара меншикли мәнислерине иие болады.

Үш  $\sigma_i$  матрицасы, үш  $\rho_i$  матрицасы ҳәм тоғыз  $\sigma_i\rho_k$  матрицасы бирлик матрица менен биргеле 16 матрицаны пайда етеди. Бул матрицаны толық матрица деп айтыўға болады. Себеби төрт бағанаға ҳәм төрт қатарға иие матрицаны, ямаса 16 элементи бар матрицаны санлы коэффициентлери менен бул 16 матрицалардың сзығылышы комбинациясы түринде көрсетиў мүмкін.

Мысалы,  $\rho_i$  ҳәм  $\sigma_i$  матрицалары арқалы Дирак теңлемесине кириўши

матрицаларды ҳәм олар менен байланыслы болған  $\rho_a, \rho_b, \rho_c$  ҳәм  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  матрицаларын аңлатыўымыз мүмкін. Буны ҳәр қыйлы жоллар менен орынлаў мүмкін. Демек берилген физикалық мәниске ийе матрица ҳәр қыйлы математикалық формаларға ийе болады екен. Әдебиятта Дирак тәрепинен усынылған жазыў жийи ушырасады. Ол мынадай жазыўды усынды

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_x = \sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \sigma_3, \\ \rho_a = \rho_1, \quad \rho_b = \rho_2, \quad \rho_c = \rho_3. \end{array} \right\} \quad (5.4.23)$$

(5.4.15)- ҳәм (5.4.10)-формулаларға сәйкес  $\alpha_k$  матрицасы мынадай түрге ийе

$$a'_1 = \rho_1 \sigma_1, \quad a'_2 = \rho_1 \sigma_2, \quad a'_3 = \rho_1 \sigma_3, \quad a'_4 = \rho_3 \quad (5.4.24)$$

(биз бул матрицаларды буннан кейин биз пайдаланатуғын матрицалардан айырыў ушын штрих пенен жаздық).

Гейпара жағдайларға байланыслы матрицаларды тәмендегидей етип сайлап алыў қолайлырақ:

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_x = \rho_3 \sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \rho_3 \sigma_3, \\ \rho_a = \rho_3, \quad \rho_b = \rho_1 \sigma_2, \quad \rho_c = \rho_2 \sigma_2 \end{array} \right\} \quad (5.4.25)$$

яmasa анық түрде

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.4.26)$$

$$\rho_a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \rho_b = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_c = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.4.27)$$

Буннан  $\alpha_k$  матрицасы ушын тәмендегидей мәнислер алынады:

$$\alpha_1 = \sigma_1, \quad \alpha_2 = \rho_3 \sigma_2, \quad \alpha_3 = \sigma_3, \quad \alpha_4 = \rho_2 \sigma_2 \quad (5.4.28)$$

яmasa анық түрде

$$\left. \begin{array}{l} \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, \\ \alpha_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{array} \right\} \quad (5.4.29)$$

## 5-5. Еркин электрон ушын Дирак теңлемеси

Енди биз еркин электрон ушын Дирак теңлемесин ашылған түрде жаза аламыз. Егер  $H$  арқалы 5-3 параграфтағы (5.3.7)-оператор белгиленген болса, онда

$$H\psi = [c(a_1 p_x + a_2 p_y + a_3 p_z) + mc^2 a_4] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (5.5.1)$$

толқын теңлемеси төрт дифференциал теңлеме системасы түринде жазылады:

$$\left. \begin{array}{l} -i\hbar c \left( \frac{\partial \psi_2}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_2}{\partial y} + \frac{\partial \psi_1}{\partial z} \right) - mc^2 \psi_4 = i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t}, \\ -i\hbar c \left( \frac{\partial \psi_1}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_1}{\partial y} - \frac{\partial \psi_2}{\partial z} \right) + mc^2 \psi_3 = i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t}, \\ -i\hbar c \left( \frac{\partial \psi_4}{\partial x} + i \frac{\partial \psi_4}{\partial y} + \frac{\partial \psi_3}{\partial z} \right) + mc^2 \psi_2 = i\hbar \frac{\partial \psi_3}{\partial t}, \\ -i\hbar c \left( \frac{\partial \psi_3}{\partial x} - i \frac{\partial \psi_3}{\partial y} - \frac{\partial \psi_4}{\partial z} \right) - mc^2 \psi_1 = i\hbar \frac{\partial \psi_4}{\partial t}. \end{array} \right\} \quad (5.5.2)$$

Егер Дирак теңлемеси (5.5.1)-түрде жазылған болса (бундай жазыўды символлық түрдеги жазыў деп атайды) изертлеў қолайлырақ болады. Сонлықтан (5.5.2)-түрдеги формууланы пайдаланыў ушын зәрүрлик болмайды.

Биз матрицалардың салалық еки вариантын қарап шықтық. Олардың бириншиси (Дирак тәрепинен усынылғаны) 5-4 параграфтағы (5.5.23)-формулаға, екиншиси болса 5-4 параграфтағы (5.5.25)-формулаға сәйкес келеди.

Базы бир мақсетлер ушын еркин электронның төрт қураушыдан туратуғын толқын функциясы ушын жазылған теңлемелер системасы ҳақыйқый коэффициентлерге ийе болатуғын  $\alpha_k$  матрицаңың көриниси қолайлы. Буның ушын 4-параграфтағы (5.5.25)-формулалардағы  $\rho_2$  менен  $\rho_3$  матрицаларының орынларын алмастырыў ҳәм  $\rho_1$  матрицасының алдындағы белгини өзгертиў керек. Бундай жағдайда 4-параграфтағы (5.5.25)-аңлатпаның орнына:

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_x^0 = \rho_2 \sigma_1, \quad \sigma_y^0 = \sigma_2, \quad \sigma_z^0 = \rho_2 \sigma_3, \\ \rho_a^0 = \rho_2, \quad \rho_b^0 = -\rho_1 \sigma_2, \quad \rho_c^0 = \rho_3 \sigma_2. \end{array} \right\} \quad (5.5.3)$$

аңлатпаларына ийе боламыз.

Жаңа матрицаларды есқилеринен айырыў ушын «0» значоклары менен тәмийинледик<sup>2</sup>. Барлық (5.5.3)-матрицалар таза жормал элементлерге ийе болады.

Жаңа ҳәм ески матрицалар арасындағы байланыс матрицалар менен исленетуғын каноникалық түрлендіриўлердин жәрдеминде әмелге асырылады:

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} (\rho_2 + \rho_3). \quad (5.5.4)$$

Бул матрица өзи өзине түйинлес ҳәм унитар матрица болып табылады. Сонлықтан

$$T^{-1} = T^+ = T, \quad T^2 = 1. \quad (5.5.5)$$

Ҳақыйқатында биз

<sup>2</sup> Ҳәзир гәп төрт қатарлы матрицалар ҳақында айттылып атыр. Сонлықтан бул матрицаларды 4-параграфтағы (5.4.14)-Паули матрицалары менен алжастырыў мүмкін емес.

$$T\rho_2 T = \rho_3, \quad T\rho_3 T = \rho_2, \quad T\rho_1 T = -\rho_1 \quad (5.5.6)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Жаңа  $\alpha_k$  матрицасы (енди биз оны  $\alpha_k^0$  арқалы белгилеймиз) ески матрица менен каноникалық түрлендириўлер менен байланысқан:

$$\alpha_k^0 = T^+ \alpha_k T. \quad (5.5.7)$$

Олар мынаған тең:

$$\alpha_1^0 = \sigma_1, \quad \alpha_2^0 = \rho_2 \sigma_2, \quad \alpha_3^0 = \sigma_3, \quad \alpha_4^0 = \rho_3 \sigma_2. \quad (5.5.8)$$

5-4 параграфтағы (5.4.28)-аңлатпа менен салыстырыў олардың  $\alpha_2$  менен  $\alpha_4$  тиң орын алмасыўы менен айрылатуғынлығы көрсетеди. Биринши үш  $\alpha_k^0$  матрицасының элементлери ҳақыйқый, ал  $\alpha_4^0$  элементлери жормал болады.

Еркин электрон ушын (5.5.2)-төрт дифференциал теңлемелер системасын енди былайынша жаза аламыз:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \psi_2^0}{\partial x} - \frac{\partial \psi_4^0}{\partial y} + \frac{\partial \psi_1^0}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial \psi_1^0}{\partial t} + \frac{mc}{\hbar} \psi_2^0 &= 0, \\ \frac{\partial \psi_1^0}{\partial x} + \frac{\partial \psi_3^0}{\partial y} - \frac{\partial \psi_2^0}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial \psi_2^0}{\partial t} - \frac{mc}{\hbar} \psi_1^0 &= 0, \\ \frac{\partial \psi_4^0}{\partial x} + \frac{\partial \psi_2^0}{\partial y} + \frac{\partial \psi_3^0}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial \psi_3^0}{\partial t} - \frac{mc}{\hbar} \psi_4^0 &= 0, \\ \frac{\partial \psi_3^0}{\partial x} - \frac{\partial \psi_1^0}{\partial y} - \frac{\partial \psi_4^0}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial \psi_4^0}{\partial t} + \frac{mc}{\hbar} \psi_3^0 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (5.5.9)$$

Ең ақырында бизиң толқын функцияларымыз бенен Дирак бойынша [5-4 параграфтағы (5.4.24)-аңлатпа] сайлап алынған  $\alpha'_k$  матрикаларына сәйкес келиўши  $\psi'_k$  толқын функциялары арасындағы байланысты жазамыз. Биз мынадай қатнасларға ийемиз:

$$\left. \begin{aligned} \psi'_1 &= \frac{\psi_1 - \psi_4}{\sqrt{2}}, & \psi'_2 &= \frac{\psi_2 + \psi_3}{\sqrt{2}}, \\ \psi'_3 &= \frac{\psi_1 + \psi_4}{\sqrt{2}}, & \psi'_4 &= \frac{\psi_2 - \psi_3}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (5.5.10)$$

$$\psi' = S\psi \quad (5.5.11)$$

түрлендириўине сәйкес келиўши унитар матрица  $S$  мынаған тең:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1 - i\rho_2}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1 + i\sigma_2}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1 - i\rho_3\sigma_2}{\sqrt{2}}. \quad (5.5.12)$$

Ал

$$\psi^0 = T\psi \quad (5.5.13)$$

түрлендириүине сәйкес келиўши  $\psi^0$  ҳәм  $\psi$  арасындағы байланысқа келетуғын болсақ, онда бундай байланыс

$$\left. \begin{array}{l} \psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - i\psi_3), \quad \psi_2^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_2 - i\psi_4), \\ \psi_3^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\psi_3 + i\psi_1), \quad \psi_4^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\psi_4 + i\psi_2). \end{array} \right\} \quad (5.5.14)$$

формулаларының жәрдеминде жазылады.  $T^2 = 1$  болғанлықтан бундай формулалар  $\psi_i$  ди  $\psi_i^0$  арқалы аңлатыўға мүмкіншилик береди. Биз мынаған ииे боламыз:

$$\left. \begin{array}{l} \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^0 - i\psi_3^0), \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_2^0 - i\psi_4^0), \\ \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\psi_3^0 + i\psi_1^0), \quad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\psi_4^0 + i\psi_2^0). \end{array} \right\} \quad (5.5.15)$$

## 5-6. Лоренц түрлендириўлери

Биз енди толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығын ҳәм  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  функцияларының геометриялық қәсийетлерин үйренийү менен шуғылланамыз.

$$x = x_1, \quad y = x_2, \quad z = x_3, \quad ct = x_0 \quad (5.6.1)$$

деп болжайық ҳәм

$$e_0 = 1, \quad e_1 = e_2 = e_3 = -1 \quad (5.6.2)$$

төрт санын киргиземиз. Буны биз төрт өлшемли қашықлықтың квадратын

$$\pm ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 = \sum_{k=0}^3 e_k dx_k^2 \quad (5.6.3)$$

түринде жазыў ушын исследик.

Лоренц түрлендириўлерин

$$x'_i = \sum_{k=0}^3 e_k a_{ik} x_k \quad (5.6.4)$$

түринде жазамыз. Бул аңлатпада  $a_{ik}$  арқалы

$$\sum_{i=0}^3 e_i a_{ik} a_{il} = e_k \delta_{kl} \quad (5.6.5)$$

шәртин қанаатландыратуғын ҳақыйқый санлар белгиленген. Бул (5.6.4)-түрлендириўдин  $ds^2$  шамасын инвариант етип қалдыратуғынан келип шығады. Бул жағдайлардың орын алғыуының себебинен (5.6.4)-теңлеме  $x_i$  шамасына қарата былайынша жазылады:

$$x_i = \sum_{k=0}^3 e_k a_{ki} x'_k. \quad (5.6.6)$$

Буннан өз гезегинде

$$\sum_{i=0}^3 e_i a_{ki} a_{li} = e_k \delta_{kl} \quad (5.6.7)$$

теңлемеси келип шығады. 5-5 параграфтағы (5.5.1)-теңлемени  $\frac{i}{\hbar c}$  шамасына көбейтип егер  $\alpha_0$  ди бирлик матрица деп түсінсек былайынша жазамыз:

$$\sum_{k=1}^3 \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x_0} = 0 \quad (5.6.8)$$

ямаса

$$\sum_{k=0}^3 \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi = 0. \quad (5.6.9)$$

Енди биз (5.6.6)-өзгериүшилерди алмастырамыз. Мынаған ийе боламыз:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_k} = \sum_{l=0}^3 e_k a_{lk} \frac{\partial \psi}{\partial x'_l}.$$

Сонлықтан

$$\sum_{l=0}^3 \sum_{k=0}^3 e_k a_{lk} \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x'_l} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi = 0. \quad (5.6.10)$$

Егер бизге

$$a'_l = S^+ a_l S = \sum_{k=0}^3 e_k a_{lk} \alpha_k \quad (l = 0, 1, 2, 3), \quad (5.6.11)$$

$$S^+ a_4 S = \alpha_4 \quad (5.6.12)$$

түриндеги  $S$  матрикасын (улыўма айтқанда унитар емес матрикасын) табыў сәти түссе, онда (5.6.10)-теңлемени

$$\sum_{l=0}^3 S^+ a_l S \frac{\partial \psi}{\partial x'_l} + \frac{imc}{\hbar} S^+ a_4 S \psi = 0 \quad (5.6.13)$$

түринде жазыўға мүмкін болар еди. Буннан кейин

$$\psi' = S \psi \quad (5.6.14)$$

деп болжап ҳәм (5.6.13)-аңлатпаның шеп тәрепин  $(S^+)^{-1}$  ге көбейтип [яғый (5.6.13)-төрт теңлеме үстинен  $S^+$  ке кери болған орын алмастырыуды ислеп]

$$\sum_{k=0}^3 \alpha_k \frac{\partial \psi'}{\partial x'_k} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi' = 0 \quad (5.6.15)$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлеме дәслепки (5.6.9)-теңлеме сияқты теңлеме болып табылады. Бул теңлеме бурынғы  $\alpha_k$  матрикаларына, бирақ жаңа  $x'_0, x'_1, x'_2, x'_3$  ғәрәзсиз өзгериүшилерине ҳәм жаңа  $\psi'_1, \psi'_2, \psi'_3, \psi'_4$  функцияларына ийе. Солай етип егер Лоренц түрлендириўлерин функциялары үстинен (5.6.14)-подстановка жәрдеминде исленсе толқын теңлемесиниң өзиниң дәслепки түрин сақтайтуғынлығы дәлилленди. Басқа сөзлер менен айтқанда толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығы дәлилленеди.

### 5-7. *S* матрикасының көшерлерди кеңисликлик бурыўға ҳәм Лоренц түрлендириўлери ушын түри

Биз бизге керек қәсийетлерге ийе *S* матрикасының бар екенлигин ҳәм  $\alpha_k$  матрикаларын бизлер сайлап алған жағдайда

$$S = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \gamma & \delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\alpha} & \bar{\beta} \\ 0 & 0 & \bar{\gamma} & \bar{\delta} \end{pmatrix} \quad (5.7.1)$$

түрине ийе болатуғынлығын көрсетемиз. Бул аңлатпада  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  лар арқалы бир бири менен

$$\alpha\delta - \beta\gamma = 1 \quad (5.7.2)$$

аңлатпасы арқалы байланысқан ҳәм Кэйлей-Клейн (Cayley – Klein) улыўмаласқан параметрлери деп аталатуғын төрт комплексли параметр белгиленген. Түйинлес  $S^+$  матрикасы

$$S^+ = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} & \bar{\gamma} & 0 & 0 \\ \bar{\beta} & \bar{\delta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & \gamma \\ 0 & 0 & \beta & \delta \end{pmatrix} \quad (5.7.3)$$

түрине ийе болады.

Ең дәслеп (5.7.2)-қатнасқа байланыслы 5-6 параграфтың (5.6.12)-формуласының орынланатуғынлығын аңсат тексерип көриўге болады. Буның ушын избе-из үш подстановка ислеймиз: дәслеп *S*, буннан кейин  $\alpha_4$  ҳәм ең кейнинен  $S^+$  ти. Усының менен бир қатарда

$$S^+ \alpha_5 S = \alpha_5 \quad (5.7.4)$$

теңлигиниң орныланатуғынлығын да аңғарамыз.

5-6 параграфтың (5.6.11)-аңлатпасының орынланатуғындағы етип Лоренцтиң қәлелеген түрлендирийі ушын  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\sigma$  параметрлерин сайладап алғыудың мүмкіншилигине исениү мақсетинде Лоренц түрлендириўлериниң де,  $S$  подстановкаларының да группаны пайдалағанамыз (яғни избе-из орынланатуғын бир неше түрлендириўлер сол типтеги бир түрлендирий менен алмастырылады). Лоренцтиң ең улыўмалық түрлендириўин дара типтеги түрлендириўлерди избе-из қолланыў менен алғы мүмкін. Мысалы бундай жағдайды әмелге асырыў ушын координаталар системасын  $x$ ,  $y$ ,  $z$  көшерлери дөгерегинде бурыў ҳәм

$$z' = \frac{z - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad t' = \frac{t - \frac{v}{c^2} z}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (5.7.5)$$

түрлендириўлерин орынлау мүмкін.

Егер бизлер усы дара түрлендириўлердин ҳәр бири ушын сәйкес  $S$  подстановкасын тапсақ, онда улыўма жағдай ушын болған  $S$  подстановкасы бул дара постановкаларды избе-из қолланыў жолы менен алғынады.

Биз дәслеп  $\mathbf{z}$  көшери дөгерегиндеги бурыұды қараймыз. Себеби бундай жағдайдың  $S$  матрицасы ең әпиүайы түрге ийе болады. Көшерлердин бурылыўы ушын формулалар былайынша жазылады:

$$\left. \begin{array}{l} x'_1 = x_1 \cos \varphi - x_2 \sin \varphi, \\ x'_2 = x_1 \sin \varphi + x_2 \cos \varphi, \\ x'_3 = x_3, \\ x'_0 = x_0. \end{array} \right\} \quad (5.7.6)$$

Бул бурылыўларға

$$\alpha = e^{-i \frac{\Phi}{2}}, \quad \beta = 0, \quad \gamma = 0, \quad \delta = e^{i \frac{\Phi}{2}} \quad (5.7.7)$$

параметрлериниң сәйкес келетуғынлығын көрсетемиз.  $S$  матрицасы мынадай болады:

$$S = \begin{pmatrix} e^{-i \frac{\Phi}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i \frac{\Phi}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i \frac{\Phi}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i \frac{\Phi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (5.7.8)$$

Бул матрицаны

$$S = \cos \frac{\Phi}{2} - i \sin \frac{\Phi}{2} \rho_3 \sigma_3 \quad (5.7.9)$$

түринде де жаза аламыз ямаса 5-4 параграфтағы (5.4.25)-аңлатпа тийкарында

$$S = \cos \frac{\Phi}{2} - i \sin \frac{\Phi}{2} \sigma_z \quad (5.7.10)$$

аңлатпасын жазамыз. Жоқарыда келтирилген аңлатпалар тийкарында

$$\begin{aligned} S^+ \alpha_1 S &= S^+ \rho_a \sigma_x S = \\ &= \rho_a \left( \cos \frac{\Phi}{2} + i \sin \frac{\Phi}{2} \sigma_z \right) \sigma_x \left( \cos \frac{\Phi}{2} - i \sin \frac{\Phi}{2} \sigma_z \right) = \\ &= \rho_a (\cos \varphi + i \sin \varphi \sigma_z) \sigma_x = \rho_a (\sigma_x \cos \varphi - \sigma_y \sin \varphi), \end{aligned}$$

демек

$$\alpha'_1 = S^+ \alpha_1 S = \alpha_1 \cos \varphi - \alpha_2 \sin \varphi. \quad (5.7.11)$$

Тап сол сыйқлы

$$\left. \begin{array}{l} \alpha'_2 = S^+ \alpha_2 S = \alpha_1 \sin \varphi + \alpha_2 \cos \varphi, \\ \alpha'_3 = S^+ \alpha_3 S = \alpha_3, \\ \alpha'_0 = S^+ \alpha_0 S = \alpha_0. \end{array} \right\} \quad (5.7.11')$$

теңлиги дәлилленеди.

Солай етип  $x'_k$  түрлендирилген координаталарының дәслепки  $x_k$  координаталары арқалы аңлатылғанында, түрлендирилген  $\alpha'_k$  матрицалары да дәслепки  $\alpha_k$  матрицалары арқалы аңлатылады екен. Басқа сөз бенен айтқанда 5-6 параграфтың (5.6.11)-аңлатпасы орынланады екен.

Енди  $x = x_1$  көшери дөгерегинде бурыұды қараймыз:

$$\left. \begin{array}{l} x'_1 = x_1, \\ x'_2 = x_2 \cos \varphi - x_3 \sin \varphi, \\ x'_3 = x_2 \sin \varphi + x_3 \cos \varphi, \\ x'_0 = x_0. \end{array} \right\} \quad (5.7.12)$$

Бул аңлатпада

$$\alpha = \cos \frac{\Phi}{2}, \quad \beta = -i \sin \frac{\Phi}{2}, \quad \gamma = -i \sin \frac{\Phi}{2}, \quad \delta = \cos \frac{\Phi}{2} \quad (5.7.13)$$

хәм  $S$  матрицасы

$$S = \cos \frac{\Phi}{2} - i \sin \frac{\Phi}{2} \rho_3 \sigma_1 \quad (5.7.14)$$

түрине ямаса

$$S = \cos \frac{\Phi}{2} - i \sin \frac{\Phi}{2} \sigma_x \quad (5.7.14^*)$$

түрине ийе болады.

5-6 параграфтағы (5.6.11)-аңлатпа жоқарыда келтирилген жағдайдағыдай түрде дәлилленеди.

Ең ақырында  $y = x_2$  көшери дөгерегиндеи бурыўға

$$\left. \begin{array}{l} x'_1 = x_1 \cos \varphi + x_3 \sin \varphi, \\ x'_2 = x_2, \\ x'_3 = -x_1 \sin \varphi + x_3 \cos \varphi, \\ x'_0 = x_0, \end{array} \right\} \quad (5.7.15)$$

параметрлердиң мәнислери

$$\alpha = \cos \frac{\varphi}{2}, \quad \beta = -\sin \frac{\varphi}{2}, \quad \gamma = \sin \frac{\varphi}{2}, \quad \delta = \cos \frac{\varphi}{2} \quad (5.7.16)$$

хәм усы параметрлерден қуралған  $S$  матрицасы былайынша жазылады:

$$S = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sin \frac{\varphi}{2} \sigma_2 \quad (5.7.17)$$

ямаса

$$S = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sin \frac{\varphi}{2} \sigma_y. \quad (5.7.17^*)$$

Барлық үш жағдайда да  $x_k$  көшериниң дөгерегинде оң бағытта  $\varphi$  мүйешине бурыўға

$$S = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sin \frac{\varphi}{2} \sigma_{x_k} \quad (5.7.18)$$

унитар матрицасы сәйкес келеди. Соның менен бирге бул нәтийже  $\alpha_k$  матриналарын сайлап алыўдан ғәрзели емес. Бул нәтийжелерди улыўмаластырамыз ҳәм  $l, m, n$  бағытлаўши косинусларына ийе көшердин дөгерегинде  $\omega$  мүйешине бурған жағдай ушын

$$S = \cos \frac{\omega}{2} - i \sin \frac{\omega}{2} (l \sigma_x + m \sigma_y + n \sigma_z) \quad (5.7.19)$$

матрицасының сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз.

Енди Лоренцтиң (5)-меншикли түрлендириўлерин қараймыз. Бул түрлендириўлер былайынша жазылады:

$$\left. \begin{array}{l} x'_1 = x_1, \quad x'_2 = x_2, \\ x'_3 = \frac{x_3 - \frac{v}{c} x_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad x'_0 = \frac{x_0 - \frac{v}{c} x_3}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \end{array} \right\} \quad (5.7.20)$$

$$\frac{v}{c} = \operatorname{th} u \quad (5.7.21)$$

түриндеги белгилеў қабыл етемиз. Усыған байланыслы

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \operatorname{ch} u, \quad \frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \operatorname{sh} u. \quad (5.7.21^*)$$

Бул жағдайда параметрлер мыналарға тең болады:

$$\alpha = e^{-\frac{1}{2}u}, \quad \beta = 0, \quad \gamma = 0, \quad \delta = e^{\frac{1}{2}u} \quad (5.7.22)$$

Хәм  $S$  матрицасы енди унитар матрица болмайды, бирақ  $\alpha_k$  матрикалары бизлердин сайлап алғанымыздай етип сайлап алынса бурынғысынша (5.7.1)-түрге ийе болады хәм

$$S = \operatorname{ch} \frac{u}{2} - \operatorname{sh} \frac{u}{2} \sigma_3 \quad (5.7.23)$$

ямаса

$$S = \operatorname{ch} \frac{u}{2} - \operatorname{sh} \frac{u}{2} \alpha_3 \quad (5.7.24)$$

түринде жазылады. Енди 5-6 параграфтағы (5.6.11)-қатнастың орынланатуғының да аңсат тексерип көриүге болады.

$x_k$  көшериниң бағытында  $v = c \operatorname{th} u$  тезлиги менен қозғалысқа сәйкес келетуғын  $S$  матрицасы былайынша жазылады:

$$S = \operatorname{ch} \frac{u}{2} - \operatorname{sh} \frac{u}{2} \alpha_k, \quad (5.7.25)$$

ал косинуслары  $l, m, n$  болған бағыттағы қозғалыс ушын  $S$  матрицасы былайынша жазылады

$$S = \operatorname{ch} \frac{u}{2} - \operatorname{sh} \frac{u}{2} (l \alpha_1 + m \alpha_2 + n \alpha_3). \quad (5.7.26)$$

Солай етип барлық жағдайда да 6-параграфтағы (11)-шәртти қанаатландыратуғын (1)-түрдеги  $S$  матрицасының түрин табыў мүмкин екен. Усының менен толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығы дәлилләнди.

Кэйлей-Клейн параметрлері, демек  $S$  матрицасы да берилген бурылыў ушын белгиге шекемги дәлликте анықланатуғының аңғарамыз. Бизиң формулаларымызда  $S$  матрицасының белгиси шексиз киши бурыўға ямаса шексиз киши тезликли Лоренц түрлендириўлерине  $S = +1$  дең шексиз киши шамаға айрылатуғын (парыққа ийе) болатуғындай етип сайлап алынған.

## 5-8. Тоқ векторы

Биз жоқарыда Лоренцтиң ҳәр бир түрлендириўине  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  функцияларының белгили бир (белгиге шекемги дәлликтеги) түрлендириўиниң сәйкес келетуғының көрдик. «Ярым рангалы тензор» ямаса «ярым вектор» деп атайды болатуғын тензор ямаса вектор сыйқылды бул функциялар өзине тән геометриялық фигураны береди (көрсетеди). Бул атаманың дурыслығы  $\psi$  функциясының базы бир квадратлық комбинацияларының төрт өлшемли вектор сыпатында түрленетуғының менен байланыслы. Ҳақыйқатында да

$$A_k = \bar{\psi} \alpha_k \psi \quad (k = 0, 1, 2, 3, 4, 5) \quad (5.8.1)$$

деп ямаса толығырақ ( $\alpha_k$  шамаларын бизиң сайлап алғыўымыз жағдайында)

$$\left. \begin{array}{l} A_0 = \bar{\psi}_1 \psi_1 + \bar{\psi}_2 \psi_2 + \bar{\psi}_3 \psi_3 + \bar{\psi}_4 \psi_4, \\ A_1 = \bar{\psi}_1 \psi_2 + \bar{\psi}_2 \psi_1 + \bar{\psi}_3 \psi_4 + \bar{\psi}_4 \psi_3, \\ A_2 = -i \bar{\psi}_1 \psi_2 + i \bar{\psi}_2 \psi_1 + i \bar{\psi}_3 \psi_4 - i \bar{\psi}_4 \psi_3, \\ A_3 = \bar{\psi}_1 \psi_1 - \bar{\psi}_2 \psi_2 + \bar{\psi}_3 \psi_3 - \bar{\psi}_4 \psi_4, \\ A_4 = -\bar{\psi}_1 \psi_4 + \bar{\psi}_2 \psi_3 + \bar{\psi}_3 \psi_2 - \bar{\psi}_4 \psi_1, \\ A_5 = -i \bar{\psi}_1 \psi_4 + i \bar{\psi}_2 \psi_3 - i \bar{\psi}_3 \psi_2 + i \bar{\psi}_4 \psi_1. \end{array} \right\} \quad (5.8.2)$$

деп қабыл етемиз. Бундай жағдайда 5-6 параграфты (5.6.11)-формуласы мынаны береди:

$$A'_l = \bar{\psi}' \alpha_l \psi' = \bar{\psi} S^+ \alpha_l S \psi = \bar{\psi} \alpha'_l \psi = \sum_{k=0}^3 e_k a_{kl} A_k \quad (l = 0, 1, 2, 3), \quad (5.8.3)$$

ал бул теңлик  $A_0, A_1, A_2, A_3$  лердин төрт өлшемли вектордың қураўшыларындағ болып түрленетуғынлығын көрсетеди. 5-6 параграфтың (5.6.12)- ҳәм 5-7 параграфтың (5.7.4)-формуласы бул жағдайда

$$A'_4 = A_4, \quad A'_5 = A_5 \quad (5.8.4)$$

екенлигин береди. Бул жағдай  $A_4$  пенен  $A_5$  шамаларының төрт өлшемли инвариантлар екенлигин аңғартады.  $A_k$  шамалары

$$A_1^2 + A_2^2 + A_3^2 + A_4^2 + A_5^2 = A_0^2 \quad (5.8.5)$$

аңлатпасы арқалы байланысқан.

Егер  $A_k$  шамалары толқын теңлемесин қанаатландыратуғын  $\psi$  функцияларынан туратуғын болса, онда

$$\frac{\partial A_1}{\partial x} + \frac{\partial A_2}{\partial y} + \frac{\partial A_3}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_0}{\partial t} = 0 \quad (5.8.6)$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын көрсетемиз. Буның ушын 5-6 параграфтағы (5.6.9)-аңлатпаны ҳәм оған түйинлести жазамыз:

$$\sum_{k=0}^3 a_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \frac{imc}{\hbar} a_4 \psi = 0 \quad (5.8.7)$$

$$\sum_{k=0}^3 \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_k} a_k - i \frac{mc}{\hbar} \bar{\psi} a_4 = 0. \quad (5.8.7')$$

Бул теңлемелердин бириншисиниң оң тәрепин  $\bar{\Psi}$  ге, ал екиншисиниң оң тәрепин  $\psi$  ге көбейтемиз ҳәм нәтийжелерди бир бирине қосамыз. Теңлемелердеги екинши ағзалар қысқарады ҳәм (5.8.6)-теңлеме болған

$$\sum_{k=0}^3 \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\Psi} \alpha_k \psi) = 0 \quad (5.8.8)$$

теңлемесин аламыз.

(5.8.6)-теңлемени базы бир  $\sigma$  бети мене шекленген  $V$  көлеми бойынша интеграллап

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V A_0 d\tau = -c \int [A_1 \cos(n, x) + A_2 \cos(n, y) + A_3 \cos(n, z)] d\tau \quad (5.8.9)$$

аңлатпасын аламыз.

$A_0$  шамасының физикалық мәниси итималлықтың тығызлығы болып табылады. Бул шама Шредингер теориясындағы  $\Psi$  көбеймесиниң орнын тутады. (5.8.6)- ҳәм (5.8.9)- формулаларды III баптың II бөлиминин 2-параграфындағы (9)- ҳәм (7)- формулалар менен салыстырсақ  $eA_k$  векторының Шредингер теориясындағы  $S$  векторының орнын ийелейтуғынлығын ҳәм электронлар ағысының тығызлығының аналогы болып табылатуғынлығын көриүге болады. Классикалық электр зарядларының тығызлығы  $\rho$  ның ҳәм  $v$  тоқ векторының квантлық аналоглары төмөндегилер болып табылады:

$$\rho \rightarrow -e\bar{\Psi}\psi = -eA_0, \quad (5.8.10)$$

$$\rho v_k \rightarrow -eS_k = -ec\bar{\Psi}\alpha_k\psi = -ecA_k \quad (k = 1, 2, 3). \quad (5.8.11)$$

### 5-9. Майдан бар жағдайдағы Дирак теңлемеси. Қозғалыс теңлемелери

Жоқарыдағы параграфларда еркін электрон ушын келтирилип шығарылған толқын теңлемеси

$$H\Psi - i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0 \quad (5.9.1)$$

түрине ийе еди. Бул теңлемеде энергия операторы  $H$  мынаған тең

$$H = c(a_1 p_x + a_2 p_y + a_3 p_z) + mc^2 a_4. \quad (5.9.2)$$

Биз усы теңлемени электромагнит майданы бар жағдай ушын улыұмаластырыўымыз керек. Майдан ушын Гамильтон функциясы болған (5.2.9)-функция (5-2 параграфтағы) майданы жоқ функциядан потенциал энергия  $-e\varphi$  шамасын қосыў ҳәм  $p_x, p_y, p_z$  «моментлерин» 5-2 параграфтағы (5.2.7)-формула бойынша қозғалыс муғдарының  $P_x, P_y, P_z$  қураўышылары менен алмастырыў арқалы алғынады. Тап усындей алмастырыўды биз Паули теориясында орынладық. Усындей алмастырыўды (5.9.2)-релятивистлик квантлық операторнда ислеп көремиз ҳәм

$$H = c[a_1 P_x + a_2 P_y + a_3 P_z] + mc^2 a_4 - e\varphi \quad (5.9.3)$$

деп болжаймыз. Бул аңлатпада

$$P_x = p_x + \frac{e}{c} A_x, \quad P_y = p_y + \frac{e}{c} A_y, \quad P_z = p_z + \frac{e}{c} A_z \quad (5.9.4)$$

хәм бул жерде  $p_x, p_y, p_z$  шамаларын бурынғыдай

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

операторлары деп түснемиз.

Майдан жоқ теңлемеден электромагнит майданындағы электрон ушын теңлемеге усындағы өтиўдің баслы тийкары төмендегидей көз-қаразтан ибарат. Электр майданы  $\mathcal{E}$  менен магнит майданы  $\mathcal{H}$  тиккелей бақланатуғын физикалық шамалар болып табылады. Потенциаллар болса

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \text{grad } f, \quad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \quad (5.9.5)$$

түрлендирийине шекемги дәлликте анықланатуғын жәрдемши математикалық шамалар болып табылады. Олар майданды өзгериссиз қалдырады. Усыған байланыслы  $\mathbf{A}$  менен  $\varphi$  ди  $\mathbf{A}'$  пенен  $\varphi'$  ке түрлендиргенде толқын теңлемесинен келип шығатуғын барлық нәтийжелердин өзгериссиз қалыўын талап етиўимиз керек. Бул талап бундай алмастырыўға операторлардың ҳәм толқын функцияларының унитарлық түрлендирийи сәйкес келген жағдайда ғана орынланады. Егер энергия операторы (5.9.3) түрине ийе болса бул жағдайдың ҳақыйқатында да орын алатуғынлығын көрсетемиз.

$\mathbf{A}$  менен  $\varphi$  лер  $\mathbf{A}'$  пенен  $\varphi'$  лер менен (5)-формула жәрдеминде алмастырылған (5.9.3)-түрдеги операторды  $H'$  арқалы белгилеймиз.

$$\left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} \left( \mathcal{A}_x + \frac{\partial f}{\partial x} \right) \right] \psi' = e^{-\frac{ie}{\hbar c} f} \left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} \mathcal{A}_x \right] e^{\frac{ie}{\hbar c} f} \psi' \quad (5.9.6)$$

түриндеги теңсизликтиң тийкарында егер  $\psi$  функциясы (5.9.1)-теңлемени қанаатландыратуғын болса, онда

$$\psi' = e^{-\frac{ief}{\hbar c}} \psi \quad (5.9.7)$$

функциясының

$$H' \psi' - i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = 0 \quad (5.9.8)$$

теңлемесиниң шешими болатуғынлығын көрсетиў қыйын емес.

Солай етип вектор-потенциалға градиентти қосыўға толқын функциясына фазалық көбейтиўшини киргизиўге сәйкес келеди еken (яғни унитарлық түрлендириўдің дара жағдайы). (5.9.3)-энергия операторы бар (5.9.1)-толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант екенлиги анық. Себеби вектор-потенциал градиент түрленетуғын нызам бойынша түрленеди, ал скаляр потенциал  $-\frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$  шамасындағы болып түрленеди. Усының менен бир қатарда 5-8 параграфтағы (5.8.6)-теңлик те бурынғыдай болып орын алатуғынлығын тексерип көриў қыйын емес.

Формаллық жақтан қозғалыс теңлемеси жаңа толқын теңлемесин тексерип

көриўши бола алады. Базы бир  $L$  операторының толық туўындысы ушын

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (HL - LH) \quad (5.9.9)$$

формуласының бар екенлиги еске аламыз ҳәм сол  $L$  операторының орнына избе-из  $x, y, z, P_x, P_y, P_z$  шамаларын қоямыз. Усындај жол менен Шредингер теориясынан алынғандай классикалық қозғалыс теңлемесиниң алынатуғынлығын ямаса алынбайтуғынлығын көремиз.

$$L = x, y, z$$

деп алып

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = ca_1, \quad \dot{y} = \frac{dy}{dt} = ca_2, \quad \dot{z} = \frac{dz}{dt} = ca \quad (5.9.10)$$

аңлатпаларын аламыз. Электронның тезликлериниң қураўшылары ушын операторлар усындај болады. Олар бир бири менен коммутацияланбайды ҳәм олардың ҳәр бириниң квадраты  $c^2$  қа, яғни жақтылықтың тезлигиниң квадратына тең. Олардың ҳәр қайсысының меншикли мәнис  $\pm c$  ға тең. Демек электронның тезлигиниң өлшенетуғын ҳәр бир қураўшысы тек  $\pm c$  ға тең болып шығады. Бул парадокслық нәтийжениң физикалық мәниске ийе болыў мәселесин ашық қалдырамыз. Бул Дирак теориясының кемшилиги болса керек.

Енди

$$L = P_x = p_x + \frac{e}{c} A_x$$

теңлигин аламыз  $\frac{dP_x}{dt}$  туўындысын есаптаймыз. Буның ушын дәслеп

$$\left. \begin{aligned} \frac{i}{\hbar} (P_y P_z - P_z P_y) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_x, \\ \frac{i}{\hbar} (P_z P_x - P_x P_z) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_y, \\ \frac{i}{\hbar} (P_x P_y - P_y P_x) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_z. \end{aligned} \right\} \quad (5.9.11)$$

аңлатпаларын табамыз. Бул аңлатпалар тийкарында

$$\begin{aligned} \frac{dP_x}{dt} &= \frac{e}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{ic}{\hbar} [a_2 (P_y P_x - P_x P_y) + a_3 (P_z P_x - P_x P_z)] - \\ &\quad - \frac{ie}{\hbar} (\Phi P_x - P_x \Phi) = e \left( \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) - ea_2 \mathcal{H}_z + ea_3 \mathcal{H}_y \end{aligned}$$

ямаса

$$\frac{dP_x}{dt} = -e(a_2 \mathcal{H}_z - a_3 \mathcal{H}_y) - e\mathcal{E}_x \quad (5.9.12)$$

теңлигине ийе боламыз. Енди (5.9.10)-формула бойынша  $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$  шамаларын киргиземиз ҳәм  $\frac{dP_y}{dt}$  пенен  $\frac{dP_z}{dt}$  ушын жазылған теңлемелерди (5.9.12) ге

байланыстырамыз. Нәтийжеде биз

$$\left. \begin{aligned} \frac{dP_x}{dt} &= -\frac{e}{c} (\dot{y}\mathcal{H}_z - \dot{z}\mathcal{H}_y) - e\mathcal{E}_x = F_x, \\ \frac{dP_y}{dt} &= -\frac{e}{c} (\dot{z}\mathcal{H}_x - \dot{x}\mathcal{H}_z) - e\mathcal{E}_y = F_y, \\ \frac{dP_z}{dt} &= -\frac{e}{c} (\dot{x}\mathcal{H}_y - \dot{y}\mathcal{H}_x) - e\mathcal{E}_z = F_z. \end{aligned} \right\} \quad (5.9.13)$$

теңлемелер системасын аламыз. Бул теңлемелер 5-2 параграфтағы (5.2.2)-классикалық теңлемелерге дәл сәйкес келеди.

### 5-10. Дирак теориясындағы қозғалыс мұғдары моменти ҳәм спин векторы

Енди улыўмаласқан Паули операторларын көрсететуғын  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторларынан үақыт бойынша туўынды аламыз. Бул туўындыларды есаплаў ушын 5-9 параграфтағы (5.9.3)-энергия операторындағы  $a_k$  матрицаларын 5-4 параграфтағы (5.4.5)- ҳәм (5.4.10)-формулалар бойынша  $\rho$  ҳәм  $\sigma$  арқалы аңлатып былайынша жазыўға болады

$$H = c\rho_a(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z) + mc^2\rho_c - e\Phi. \quad (5.10.1)$$

$\sigma$  операторының  $\rho$  операторы менен коммутацияланатуғынлығын еске алып 5-9 параграфтағы (5.9.9)-улыўмалық формула бойынша үақыт бойынша туўынды ушын

$$\frac{d\sigma_x}{dt} = \frac{ic\rho_a}{\hbar} [(\sigma_y\sigma_x - \sigma_x\sigma_y) P_y + (\sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z) P_z].$$

Буннан 5-4 параграфтағы  $\sigma$  матрицасының (5.4.6)-қәсийетиниң тийкарында

$$\frac{d\sigma_x}{dt} = \frac{2c}{\hbar} \rho_a (\sigma_z P_y - \sigma_y P_z) \quad (5.10.2)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпаны ҳәм усы аңлатпаға сәйкес келетуғын еки аңлатпаны 5-4 параграфтағы (5.4.10)-аңлатпалар (бул аңлатпаларда  $a_k$  матрицалары  $\rho$  ҳәм  $\sigma$  лар арқалы аңлатылған) 5-9 параграфтағы қозғалыс теңлемелери тийкарында

$$\left. \begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \frac{d\sigma_x}{dt} &= -\dot{y}P_z + \dot{z}P_y, \\ \frac{\hbar}{2} \frac{d\sigma_y}{dt} &= -\dot{z}P_x + \dot{x}P_z, \\ \frac{\hbar}{2} \frac{d\sigma_z}{dt} &= -\dot{x}P_y + \dot{y}P_x. \end{aligned} \right\} \quad (5.10.3)$$

түринде жазамыз.

Классикалық механикада  $P_x, P_y, P_z$  шамалары  $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$  шамаларына пропорционал. (5.10.3)-теңлемелердин оң тәреплери нолге тең. Соның менен бирге классикалық механикаға өтий  $\hbar = 0$  шәрти бойынша әмелге асырылатуғын болғанлықтан (5.10.3)-теңлемелердин шеп тәреплери де нолге тең болыуы керек.

(5.10.3)-теңлемелердиң оң бөлимлериндеги көбейтиүшилердин тәртибинин әхмийетиниң жоқ екенлигин аңғарамыз.

(5.10.3)-теңлемелердиң биринши теңлемесиниң оң бөлимин былайынша жазыў мүмкин:

$$-\dot{y}P_z + \dot{z}P_y = -\frac{d}{dt}(yP_z - zP_y) + y\frac{dP_z}{dt} - z\frac{dP_y}{dt}.$$

Егер  $\dot{P}_y$  ҳәм  $\dot{P}_z$  шамаларын 5-9 параграфтағы (5.9.13)-қозғалыс теңлемесиндеги олардың аңлатпалары менен алмастырсақ, онда (5.10.3)-теңлемелер мынаны береди:

$$\frac{d}{dt}\left(yP_z - zP_y + \frac{\hbar}{2}\sigma_x\right) = yF_z - zF_y \quad (5.10.4)$$

Тап усынданай жоллар менен

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dt}\left(zP_x - xP_z + \frac{\hbar}{2}\sigma_y\right) &= zF_x - xF_z, \\ \frac{d}{dt}\left(xP_y - yP_x + \frac{\hbar}{2}\sigma_z\right) &= xF_y - yF_x \end{aligned} \right\} \quad (5.10.4^*)$$

аңлатпаларын да аламыз.

Бул теңлемелерди классикалық механиканың нызамына аналог сыйратында түсіндіриў мүмкин. Бул нызам бойынша қозғалыс муғдарының моментинен (импульс моментинен) ўақыт бойынша алынған тууынды тәсир ететүүгүн күшлердин моментине тең. Бул жерде қозғалыс муғдарының моменти (импульс моменти) мынадай түрге ийе:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{M}_x &= yP_z - zP_y + \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \\ \mathcal{M}_y &= zP_x - xP_z + \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \\ \mathcal{M}_z &= xP_y - yP_x + \frac{\hbar}{2}\sigma_z. \end{aligned} \right\} \quad (5.10.5)$$

Егер вектор-потенциалды нолге тең деп есапласақ (демек  $P_x = p_x$ ,  $P_y = p_y$ ,  $P_z = p_z$  теңликleri орынланады) ҳәм  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  операторларын Паулидин еки қатарлы матрицалары түринде жазсақ, онда бул жағдай Паули теориясын үйренгенимизде алынған нәтийжелердин улыўмаластырылыўы болып табылады.

$$P = \sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z \quad (5.10.6)$$

операторының сәйкес улыўмаластырылыўын қараймыз (бул аператорды Паули теориясын баянлағанда үйрендик). (5.10.1)-энергия операторына сәйкес келиўши  $P$  операторынан ўақыт бойынша тууынды аламыз. Энергия операторын  $P$  арқалы былайынша аңлатамыз:

$$H = c\rho_a P + mc^2\rho_c - e\Phi. \quad (5.10.7)$$

Бул жерде энергия операторында  $P$  менен коммутацияланбайтуғын бирден бир ағзаның скаляр потенциал екенлиги көринип тур. Соңлықтан

$$\begin{aligned}\frac{dP}{dt} &= \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{ie}{\hbar} (P\Phi - \Phi P) = \\ &= \frac{e}{c} \left( \sigma_x \frac{\partial A_x}{\partial t} + \sigma_y \frac{\partial A_y}{\partial t} + \sigma_z \frac{\partial A_z}{\partial t} \right) + e \left( \sigma_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \sigma_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \sigma_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right)\end{aligned}$$

ямаса

$$\frac{dP}{dt} = -e(\sigma_x \mathcal{E}_x + \sigma_y \mathcal{E}_y + \sigma_z \mathcal{E}_z). \quad (5.10.8)$$

Солай етип  $P$  дан ўақыт бойынша алынған туўынды электро майданының спин векторы  $\sigma$  ға көбеймесине туўры пропорционал екен ҳәм электр майданы нолге тең болғанда  $P$  қозғалыс интегралы болып табылады.  $P$  операторы ушын тап усындағы қозғалыс теңлемеси Паули теориясында да алынған болар еди. Бул теорияда оператор энергия операторына сзықты емес ал квадратлық болып киреди.

Паули теориясында биз

$$\mathcal{M} = \sigma_x m_x + \sigma_y m_y + \sigma_z m_z + \hbar \quad (5.10.9)$$

операторы менен ушырасқан едик. Биз сол жерде бул оператордың  $P$  операторы менен коммутацияланатуғының көрсеткен едик. Сонықтан Дирак теориясында  $\mathcal{M}$  операторы ҳәтте еркин электрон ушын да қозғалыс интегралы бола алмайды. Бирақ  $\rho_c$  матрицасы  $H$  ушын жазылған (5.10.7)-аңлатпаның биринши ағзасына киретуғын  $\rho_a$  матрицасы менен антикоммутацияланатуғын ҳәм басқа барлық ағзалар менен коммутацияланатуғын болғанлықтан майдан болмаған жағдайда  $\mathcal{M}_D = \rho_c \mathcal{M}$  операторы  $H$  операторының барлық ағзалары менен коммутацияланады ҳәм сонықтан қозғалыс теңлемелериниң интегралы бола алады.

Майдан болмаған жағдайда  $\mathcal{M}$  операторы мына түрде жазылады

$$\mathcal{M} = \sigma_x \mathcal{M}_x + \sigma_y \mathcal{M}_y + \sigma_z \mathcal{M}_z - \frac{\hbar}{2}. \quad (5.10.10)$$

Бул аңлатпада  $\mathcal{M}_x, \mathcal{M}_y, \mathcal{M}_z$  шамалары (5.10.5)-аңлатпадағы мәнислерге ийе.  $\mathcal{M}$  операторы ҳаққында гәп еткенде (5.10.5)-формулаға кириўши қозғалыс муғдарының операторлары (импульс операторлары)  $P_x, P_y, P_z$  лер вектор-потенциалға ийе болса да (5.10.10)-аңлатпаны түсінемиз. Бул (улыўмалық) жағдайда  $\mathcal{M}_D = \rho_c \mathcal{M}$  операторының ўақыт бойынша алынған толық туўындысы ушын аңлатпа дүземиз. Биз мынаған ийе боламыз:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{M}_D}{dt} &= \frac{d}{dt} (\rho_c \mathcal{M}) = \\ &= -e\rho_c [\sigma_x (y\mathcal{E}_z - z\mathcal{E}_y) + \sigma_y (z\mathcal{E}_x - x\mathcal{E}_z) + \sigma_z (x\mathcal{E}_y - y\mathcal{E}_x)] + \\ &+ e\rho_b [\sigma_x (y\mathcal{H}_z - z\mathcal{H}_y) + \sigma_y (z\mathcal{H}_x - x\mathcal{H}_z) + \sigma_z (x\mathcal{H}_y - y\mathcal{H}_x)].\end{aligned} \quad (5.10.11)$$

Бул аңлатпаның оң тәрепи тек ғана майдан болмаған жағдайда нолге айланып қоймайды, ал магнит майданы нолге, ал электр майданы радиус-вектор бағытында бағытланған жағдайда да (орайлық майдан) нолге тең болады (бул көп физикалық мәселелерди шешкенде үлкен әхмийетке ийе). Орайлық симметрияға ийе майдандағы электрон ҳаққындағы мәселени биз кейинирек келеси бапта қараймыз.

## 5-11. Электронның кинетикалық энергиясы

Егер электронның толық энергиясы операторы ушын жазылған 5-9 параграфтағы (5.9.3)-аңлатпадан ҳәм (5.10.1)-аңлатпадан потенциал энергияға ийе ағзаны алып тасласақ, онда

$$T = c(a_1 P_x + a_2 P_y + a_3 P_z) + mc^2 a_4 \quad (5.11.1)$$

яmasa

$$T = c\rho_a (\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z) + mc^2 \rho_c \quad (5.11.2)$$

операторын аламыз. Бул аңлатпалардағы  $T$  шамасын кинетикалық энергия ушын оператор деп түсінемиз. Бул оператордың классикалық аналогы былайынша жазылады:

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = c \sqrt{m^2 c^2 + \mathbf{p}^2}. \quad (5.11.3)$$

Бул аңлатпада  $v$  арқалы электронның тезлиги, ал  $\mathbf{p}$  арқалы қозғалыс мұғдары (импульси) белгиленген. Бундай түсіндіриў еки себепке байланыслы тастыбықланады: бириңишиден  $T$  шамасынан ўақыт бойынша алынған туғындының классикалық ҳәм кванттық аңлатпалары арасындағы аналогиядан, екіншиден  $T$  операторының меншикли мәнисиниң абсолют шамасы бойынша  $mc^2$  шамасынан үлкенлигінде. Егер бизлер классикалық шамалар менен оператордың өзлерин салыстырмай, ал бул оператор ушын дүзилген Гейзенберг матрицасының орташаланған мәнисин қойсақ, онда аналогия жүдә жақын болады.

Ең дәслеп  $T$  операторынан ўақыт бойынша туғынды аламыз. Биз улыўмалық формула бойынша мынаған ийе боламыз:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (HT - TH) \quad (5.11.4)$$

ҳәм соның менен бирге

$$H = T - e\Phi. \quad (5.11.5)$$

Бирақ  $T$  операторы ўақыттан анық тек  $P_x, P_y, P_z$  операторларына кириўши вектор-потенциал арқалы ғана байланысқан. Екінши тәрептен  $H$  операторындағы  $T$  менен коммутацияланатуғын бирден бир ағза  $e\Phi$  болып табылады. Сонықтан

$$\frac{dT}{dt} = e \left( a_1 \frac{\partial A_x}{\partial t} + a_2 \frac{\partial A_y}{\partial t} + a_3 \frac{\partial A_z}{\partial t} \right) + ec \left( a_1 \frac{\partial \Phi}{\partial x} + a_2 \frac{\partial \Phi}{\partial y} + a_3 \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \quad (5.11.7)$$

яmasa

$$\frac{dT}{dt} = -ec (a_1 \mathcal{E}_x + a_2 \mathcal{E}_y + a_3 \mathcal{E}_z) \quad (5.11.6^*)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бирақ 5-9 параграфта биз Дирак теңлемесине сәйкес

$$\dot{x} = ca_1, \quad \dot{y} = ca_2, \quad \dot{z} = ca_3 \quad (5.11.7)$$

екенлигин көрдик. Соныңтан (5.11.6)-аңлатпаны формаллық жақтан былайынша жазыўға болады:

$$\frac{dT}{dt} = -e(\dot{x}\mathcal{E}_x + \dot{y}\mathcal{E}_y + \dot{z}\mathcal{E}_z). \quad (5.11.8)$$

Формаллық жақтан бул аңлатпа (5.2.3)-теңлемеге сәйкес келеди.

$T$  операторының меншикли мәнисиниң абсолют шамасы бойынша  $mc^2$  шамасынан үлкен екенлигine исениў ушын оның квадратын дүземиз. (5.11.2)-формуланы ҳәм  $\rho$  матрицарапының қәсийетлерин пайдаланып

$$T^2 = m^2c^4 + c^2P^2 \quad (5.11.9)$$

аңлатпасын аламыз. Екинши ағза болса бизге Паули теориясынан белгили болған  $c^2$  шамасына көбейтилген өзи өзине түйинлес

$$P = \sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z \quad (5.11.10)$$

операторының квадраты болып табылады. Егер биз оның меншикли мәнислерин  $P'$  арқалы белгилесек, онда  $T^2$  операторының меншикли мәнислері

$$T'^2 = c^2(m^2c^2 + P'^2) \quad (5.11.11)$$

шамасына тең болады. Соныңтан

$$T' = \pm c \sqrt{m^2c^2 + P'^2} \quad (5.11.12)$$

ҳәм усыған сәйкес

$$|T'| \geq mc^2. \quad (5.11.13)$$

(5.11.12)-формулада квадрат түбирге ийе аңлатпаның алдына қос белги қойдық. Ҳақыйқатында да кинетикалық энергия ушын теорияның еки белгиге де ийе мәнислерди береди.  $T$  операторының меншикли функциялары ушын теңлеме жазамыз

$$T\psi = c\rho_a(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z)\psi + mc^2\rho_c\psi = T'\psi. \quad (5.11.14)$$

Егер  $\psi$  функциясы бул теңлемениң  $T'$  меншикли мәниси ушын шешими болатуғын болса, онда

$$\psi^* = \rho_b\psi \quad (5.11.15)$$

функциясы  $-T'$  ушын шешим болып табылады. Ҳақыйқатында да  $\rho_b$  матрицасы  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  матрицарапар менен коммутацияланатуғын ҳәм  $\rho_a$  ҳәм  $\rho_c$  матрицарапар менен антикоммутацияланатуғын болғанлықтан биз мынаны жаза аламыз:

$$T\psi^* = T\rho_b\psi = -\rho_bT\psi = -\rho_bT'\psi = -T'\rho_b\psi,$$

**яғның**

$$T\psi^* = -T'\psi^* \quad (5.11.16)$$

екенлигине ийе боламыз. Бул аңлатпа бизиң тастыйықлаўымыздың дурыс екенлигин дәлилләйди.

## VI бөлім

### Релятивистлик квантлық механика

#### 6-1. Скаляр релятивистлик Клейн-Гордон теңлемеси

а) Классикалық релятивистлик механика ҳәм Клейн-Гордон теңлемеси. Биз жоқарыда үйренген Шредингер теңлемеси  $\psi$  тезлиги жақтылықтың тезлиги с дан әдеүир киши болған бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплеу ушын қолланылады. Релятивистлик емес Шредингер теңлемеси Лоренц түрлендериўлерине қарата инвариант емес. Себеби ўақыт ҳәм кеңислик координаталары Шредингер теңлемесине бирдей ҳуқық пенен кирмейди: теңлеме ўақыт бойынша алынған бириńши тәртипли туұындыны ҳәм координаталар бойынша алынған екинши тәртипли туұындыны өз ишине алады. Ал арнаўлы салыстырмалық теориясы болса теңлемеге ўақытлық ҳәм кеңисликтік координаталардың бирдей тиімділік кириўин талап етеди.

Релятивистлик толқын теңлемесин алыў ушын масса менен энергия арасындағы классикалық релятивистлик қатнастан пайдаланамыз. Бул қатнас еркін бөлекше ушын байлайынша жазылады:

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}. \quad (6.1.1)$$

Буннан кейин релятивистлик емес Шредингер теңлемесин алғандағы усылдан, яғнай энергия менен импульстиң орнына

$$E \rightarrow E = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}, \quad p \rightarrow p = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (6.1.2)$$

операторларын киргизгенде болар еди. Бирақ квадрат түбір белгиси астындағы операторлардың толқын функциясына қалай тәсир ететуғынлығы бизге мәлим емес. Соныңтан классикалық толқын функциясынан релятивистлик толқын функциясына өтерді бириńши гезекте биз квадрат түбірден қутылыўымыз керек. Буны еки жол менен әмелге асырыўға болады: теңлиktиң еки тәрепин де квадратқа көтерип Клейн-Гордонның скаляр теңлемеси алыў ямаса матрицалардың жәрдемінде квадрат түбірден шығарыў ҳәм Дирактың спинорлық теңлемесин алыў. Дирактың бул спинорлық теңлемеси релятивистлик эффектлерди де есапқа алады (Клейн-Гордон теңлемеси сыйқыл), спинлик эффектлерди де есапқа алады.

Бул параграфта биз бириńши усылды қарап шығамыз (бул усыл Клейн, Гордон ҳәм Фок тәрепинен раýажландырылған). (1)-теңлемениң еки тәрепин де квадратқа көтерип биз

$$E^2 - c^2 p^2 - m_0^2 c^4 = 0 \quad (6.1.3)$$

теңлемесине ийе боламыз.

Бул теңлемеге (2)-аңлатпадан операторлардың мәнислерин қоятуғын болсақ биз еркін бөлекше ушын Клейн-Гордон теңлемесин аламыз<sup>3</sup>:

---

<sup>3</sup> (4)-теңлемеде  $\psi$  толқын функциясы тек  $r$  радиус-векторынан ғана ғәрэзли емес, ал ўақыт  $t$  дан да ғәрэзли. Бирақ оқыуышы толқын функциясының  $t$  дан ғәрэзли екенligин өзи түснійі керек (мысалы

$$\left( c^2 \hbar^2 \nabla^2 - \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - m_0^2 c^4 \right) \Psi = 0. \quad (6.1.4)$$

Электромагнит майданы қатнасатуғын жағдайда (6.1.2)-аңлатпаның орнына төмендегидей улыўмаласқан операторларды қойыў керек болады<sup>4</sup>:

$$\begin{aligned} E \rightarrow F &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \\ p \rightarrow P &= \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} A. \end{aligned} \quad (6.1.5)$$

Бундай жағдайда майдан бар болған жағдай ушын релятивистлик теңлемени аламыз

$$\left[ \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right)^2 - c^2 \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} A \right)^2 - m_0^2 c^4 \right] \Psi = 0. \quad (6.1.6)$$

(6)-релятивистлик толқын теңлемеси Лоренц түрлендириўлерина қарата инвариант. Себеби бул теңлемеге ўақыт та, кеңисликий координаталар да теңдей тийкарда киреди ҳәм бул (6)-теңлемени релятивитлик жақтан инвариант формада жазыў мүмкін.

$$(P_t^2 - P^2 - m_0^2 c^2) \Psi = 0.$$

Бул аңлатпада

$$P_t = \frac{F}{c}.$$

б) Зарядтың ҳәм тоқтың тығызлығы. Зарядтың ҳәм тоқтың тығызлығы ушын аңлатпаны электромагнит майданлары болмаған жағдай ушын табамыз ( $\Phi = A = 0$ ).

Шредингер теориясындағыдай жуўмақтарымыздың тийкарына үзлиksизлик теңлемесин қоямыз

$$\operatorname{div} j + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (6.1.7)$$

Бул теңлеме релятивистлик инвариант формаға ийе болады. (6.1.4)-теңлемениң шеп тәрепин  $\Psi^*$  функциясына, ал комплексли-түйинлес теңлемени (бул жағдайда сол теңлемедеги  $\Psi$  функциясы  $\Psi^*$  функциясы менен алмастырылады)  $\Psi$  ге көбейтип, буннан кейин биринен бириң алып төмендегидей аңлатпаға ийе боламыз:

$$\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* - \frac{1}{c^2} \left( \Psi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi - \Psi \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi^* \right) = 0. \quad (6.1.8)$$

Соңғы теңликті

теңлемеде ўақыт бойынша тууынды тур). Соңықтан буннан былай  $\Psi$  менен  $t$  арасындағы байланысты тек бул байланыс анық көринип турмаған жағдайда көрсетип өтемиз.

<sup>4</sup> Классикалық жағдайда майдан бар болған жағдайда (1)-аңлатпаның орнына табамыз:

$$E = \sqrt{c^2 P^2 + m_0^2 c^4} \text{ ямаса } F = \sqrt{c^2 P^2 + m_0^2 c^4}.$$

Бул жағдай (5)-оператордың киргизилийине эквивалент.

$$\operatorname{div} \{\psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi\} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right\} = 0 \quad (6.1.9)$$

түрине түрлендириў мүмкин.

Енди заряд пенен тоқтың тығызлықтарын сәйкес

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2m_0c^2} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \psi \right], \quad (6.1.10)$$

$$\mathbf{j} = \frac{e\hbar}{2im_0} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi]. \quad (6.1.11)$$

аңлатпаларының жәрдеминде анықладап олардың (6.1.7)- үзликсизлик теңлемесин қанаатландыратуғынлығын ҳәм усының менен бирге төрт өлшемли

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{2m_0i} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} - \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu} \right) \psi \right] \quad (6.1.12)$$

векторын пайда ететуғынлығын аңфарамыз. Бул аңлатпада

$$x_4 = ict, \quad j_4 = ic\rho. \quad (6.1.13)$$

Тоқтың тығызлығы ушын (6.1.11)-формула релятивистлик емес

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar e}{2m_0} (\psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi)$$

формула менен бирдей болады екен. Зарядтың тығызлығы ушын жазылған аңлатпа  $v \ll c$  болғанда релятивистлик емес  $\rho = e\psi^*\psi$  аңлатпасына өтеди. Ҳақыйқатында да  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E$  алмастырыуын пайдаланып [(6.1.4)-формулаға қараңыз] (6.1.10)-аңлатпаның жәрдеминде зарядтың тығызлығы ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз

$$\rho = \frac{eE}{m_0c^2} \psi^* \psi. \quad (6.1.14)$$

Бул формула болса  $E \approx m_0c^2$  релятивистлик жақынласыуында әдеттеги  $\rho = e\psi^*\psi$  формуласына өтеди. Бирақ релятивистлик теорияда  $E$  ниң терис мәнислерине ийе екинши шешимның болыуы мүмкін ( $E < 0$ ). Бундай жағдайда  $\rho$  тығызлығы ушын е ниң белгисине қарата-қарсы белгини қоямыз.

Солай етип релятивистлик теңлеме принципинде тек терис белгиге ийе зарядқа ийе емес, ал оң белгиге ийе зарядланған бөлекшелерди де тәрийиплей алады екен (мысалы зарядланған пи-мезонлар ушын бул теңлемени қолланыўға болады).

Бөлекшелердин тығызлығы түснеги болса (зарядтың тығызлығынан басқа)

$$\rho_0 = \frac{\rho}{e} = \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right] \quad (6.1.15)$$

улыўма жағдайда өзиниң мәнисин жоғалтады. Себеби бул аңлатпа оң анық шама болмайды ҳәм бул жағдай оның релятивистлик емес теориядағы аңлатпа болған

$$\rho_0 = \psi^* \psi \quad (6.1.16)$$

аңлатпасынан тийкарғы айырмасы болып табылады.

в) Водород тәризли атомның релятивистлик теориясы (спинди есапқа алмаған

жағдай). Бул мәселени (6.1.6)-толқын теңлемесиниң жәрдеминде шешиўимиз керек. Бул теңлемеде

$$\mathbf{A} = 0, \quad e\Phi = V = -\frac{Ze_0^2}{r} \quad (6.1.17)$$

Бундай жағдайда төмендегидей теңлемеге ийе боламыз:

$$\nabla^2\psi + \frac{1}{c^2\hbar^2} \{(E - V)^2 - m_0^2c^4\} \psi = 0. \quad (6.1.18)$$

Соңғы теңлемеде потенциал энергия ўақыттан ғәрзесиз болғанлықтан стационар жағдайға өтиүге болады. Оның ушын улыўма энергиядан (улыўма  $E + m_0c^2 > 0$  энергияны биз оң шама деп есаптаймыз) бөлекшениң меншикли энергиясы болған  $m_0c^2$  энергиясын айырып аламыз:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E + m_0c^2)t\right]. \quad (6.1.19)$$

Буннан кейин энергия операторы болған

$$E\psi(\mathbf{r}, t) = (E + m_0c^2)\psi(\mathbf{r}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E + m_0c^2)t\right] \quad (6.1.20)$$

операторының тәсирин есапқа алып (6.1.18)-теңлемени

$$\nabla^2\psi + \frac{1}{c^2\hbar^2} \left[ \left( E + m_0c^2 + \frac{Ze_0^2}{r} \right)^2 - m_0^2c^4 \right] \psi = 0 \quad (6.1.21)$$

түрине алып келемиз.

Шредингер теориясындағыдай соңғы теңлемениң шешимин

$$\psi = R(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (6.1.22)$$

формасында излеймиз. Бундай жағдайда радиаллық бөлім ушын

$$\left( \nabla_r^2 - A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1) - \alpha^2 Z^2}{r^2} \right) R = 0 \quad (6.1.23)$$

теңлемесин аламыз. Бул жерде  $\alpha = \frac{e_0^2}{c\hbar} \simeq \frac{1}{137}$  шамасы бирлиги жоқ шама болып табылады ҳәм оны жуқа структура турақтысы деп атайды.

$$A = \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \left( 1 + \frac{E}{m_0c^2} \right)^2 \right], \quad (6.1.24)$$

$$B = \frac{m_0Ze_0^2}{\hbar^2} \left[ 1 + \frac{E}{m_0c^2} \right].$$

$c^2 \rightarrow \infty$  шегинде соңғы аңлатпа релятивистлик емес теорияның сәйкес аңлатпасына дәл өтеди.

Релятивистлик эффектлерди есапқа алыў менен А ҳәм В турақтыларының мәнислириниң дәллигин арттырыў релятивистлик толқын теңлемесиниң шешиминиң характеристерине қандай да бир тәсир жасай алмайды (Шердингер

теңлемесиниң шешимине салыстырғанда). (6.1.23)-теңлемеде қосымша  $\frac{Z^2\alpha^2}{r^2}$  қосымша ағзасының пайда болыуын тартысынға сәйкес келетуғын қосымша релятивистлик потенциал энергиясын киргизилийи сыпатында қараўға болады. Қашықлыққа кери пропорционал бул потенциал энергия айырым жағдайларда шешимниң характеристерин өзгерте алады. Бул ҳақында кейинирек гәп етемиз.

Ең дәслеп  $r \rightarrow 0$  шегиндеги асимптотикалық  $R_0$  шешимин изертлеймиз.

Бул жағдайда (6.1.23)-теңлеме мынадай түрге ийе болады:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2(rR_0)}{dr^2} - \frac{l(l+1) - Z^2\alpha^2}{r^2} R_0 = 0. \quad (6.1.25)$$

Бул теңлемениң шешимин

$$R_0 = Cr^s$$

түринде излеймиз. Бундай жағдайда  $s$  ти анықлау ушын шешими

$$s_{1,2} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2} \quad (6.1.26)$$

түриндеги

$$s(s+1) - l(l+1) + Z^2\alpha^2 = 0 \quad (6.1.27)$$

теңлемесин шешемиз. Бул жағдайда

$$R_0 = C_1 r^{s_1} + C_2 r^{s_2}. \quad (6.1.28)$$

Егер

$$Z\alpha < \frac{1}{2}$$

теңсизлиги орынланатуғын болса еки  $s_1$  ҳәм  $s_2$  түбири де  $l = 0, 1, 2, \dots$  шамасының қәлеген мәнисинде ҳақыйқый түбирге ийе болады. Бул жағдайда биз  $rR_0$  шамасы нолге тарқалмайтуғын  $R_0$  шешими менен шекленсек болады (яғнай бул жағдайда  $C_2 = 0$  шәрти орынланады). Усының менен биргеле  $E < 0$  ( $A > 0$  теңсизлиги орынланғанда)  $r \rightarrow \infty$  шегинде толқын функциясы ушын аңлатпада экспоненциаллық түрде кемейетуғын шешим менен шеклениүге болады.

Еки тәрептен де кемейетуғын шешимлер менен шеклениү энергияның спектри ушын Шредингер теориясында алынғандай аңлатпаны береди (бул жағдайда  $\frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + l + 1 = n$  теңлемесидеги  $l$  ди  $s_1$  шамасына алмастырыў керек). Бундай жағдайда меншикли мәнислерди анықлау ушын

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2} \quad (6.1.29)$$

теңлемесине ийе боламыз. Бул теңлемеге  $A$  ҳәм  $B$  тұрақтыларының (6.1.24)-аңлатпа бойынша алынған мәнислерин қойып ( $n = n_r + l + 1$ )

$$E_{nl} = m_0 c^2 \left[ 1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - Z^2 \alpha^2})^2} \right]^{-\frac{1}{2}} - m_0 c^2 \quad (6.1.30)$$

формуласын аламыз. Бул аңлатпаны  $Z^2\alpha^2$  бойынша қатарға жайып ҳәм нолге айланбайтуғын дәслепки еки ағзасын қалдырып энергия спектрин табамыз:

$$E_{nl} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (6.1.31)$$

Бириңи ағза релятивистлик емес теорияның сәйкес аңлатпасына сәйкес келеди;  $\alpha \approx 1/137$  жуқа структура турақтысының квадратына туұры пропорционал болған екинши ағза релятивистлик дүзетиўлерди береди.

Водород атомы ( $Z = 1$ ) ушын релятивистлик дүзетиўлерди есапқа алыудың қызықты тәрепи  $l$  бойынша айныұдың алып тасланыўында. Усының себебинен  $n$  ниң берилген мәнисіндеги қәддилер ( $\alpha^2$  шамасының киши екенлигине байланыслы) бир бирине жақын жайласқан  $n$  дана қәддиге ажыралады. Себеби  $l$  квантлық сан  $n$  дана мәниске ийе болады ( $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ ).

Эксперимент пенен салыстырыў ушын Бальмер сериясы ушын дублетлик бөлиніүди (дублетное расщепление) есаплау мүмкін ( $n = 2$ ). Бундай бөлиніүдин (спектр сызығының бөлиніүинин) шамасы ушын (6.1.31)-формуланың жәрдемінде мынаны аламыз

$$\Delta\omega = \frac{E_{21} - E_{20}}{\hbar} = \frac{8}{3} \frac{R\alpha^2}{16}. \quad (6.1.32)$$

Экспериментте алынған мағлыўматлар менен салыстырыў Бальмер сериясы ушын сызықтарға бөлиніүдин ҳақыйқый кеңлигинин (6.1.32)-формула бойынша алынған шамадан үш еседей киши екенлигин көрсетеди. Бундай қарама-қарсылықтың себеби мынадан ибарат: водород атомының қәддилеринин жуқа структурасы тек ғана энергия менен тезлик арасындағы байланыс пенен байланыслы емес. Төменде көрсетилетуғындағы болады. Дәслеп Клейн-Гордон теңлемеси релятивистлик электронды тәрийиплеў ушын жарамалы деп есапланды. Бирақ бул спини нолге тең болған бөлекшениң қозғалыс теңлемеси болып табылады. Ал электронның спини болса  $1/2$  ге тең. Клейн-Гордон теңлемесин спинлери нолге тең пи-мезонлар ушын қолланыўға болатуғын болса керек. Мысалы, бул теңлеме дара жағдайда терис пи-мезонлардың ядроның дөгерегінде айланыўын тәрийиплей алады. Тап усындағы пи-мезоатомлар экспериментте алынды.

Ескериў. Ең ақырында (6.1.27)-теңлемеде

$$Z\alpha > 1/2 \quad (6.1.33)$$

болған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда принципиаллық жақтан пүткіллей жаңа шешим алынады.

Хақыйқатында да  $l = 0$  болғанда  $s_1$  және  $s_2$  түбірлеринин екеюи де комплексли болады ҳәм сонлықтан (6.1.28)-асимптотикалық шешими мына түрге ийе болады

$$R_0 = \frac{1}{\sqrt{r}} (C_1 r^{i\nu} + C_2 r^{-i\nu}). \quad (6.1.34)$$

Бул аңлатпада  $\nu = \sqrt{Z^2\alpha^2 - 1/4}$ . Биз мәселемизди  $C_2 = 0$  ҳәм  $C_1 = 0$  шәрти менен шеклей алмаймыз. Себеби еки шешим де  $r \rightarrow 0$  шегинде бирдей сингулярлықта жағдайды.

Сонлықтан  $l = 0$  болғанда үзлиksiz спектр алынады. Бул дара жағдай бөлекшениң орайға “қулап түсиүине” мүмкіншилик береди.

## 6-2. Дирак теңлемеси

Алдыңғы параграфта релятивистлик квантлық механика дүзиүдің тийкарында бөлекшениң энергиясы  $E$ , импульси  $\mathbf{p}$  ҳәм массасы  $m_0$  арасындағы белгилі релятивистлик қатнастың ( $E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}$  формуласы) жататуғынлығы атап етилди.

Квадрат түбірден қутылған ушын теңликтің еки тәрепин де квадратқа көтериў керек. Усындаған усыл менен спинге ийе емес бөлекшелердин қозғалысын тәрийиплейтуғын Клейн-Гордон теңлемеси алғынған еди. Соныңтан оны спини  $\frac{1}{2}$  ге тең (ін бирлигіндегі) электронлар ушын қолланыўға болмайды.

Басқа жол 1928-жылы Дирак тәрепинен усынылды. Бул усыл (6.1.1)-қатнастың «линеаризациясына» алғып келинеди. Бул спини  $\frac{1}{2}$  ге тең болған электрон ушын релятивистлик толқын теңлемесиниң ашылыуын тәмийинледи. Классикалық Максвелл-Лоренц электродинамикасынан соңғы электрон ҳаққындағы тәлимділік рауажланыўының әхмийетли басқышы Дирактың теңлемеси менен байланыслы екенligин атап өтемиз. Шредингердин релятивистлик емес квантлық механика менен Паули теңлемеси Дирак теңлемесиниң базы бир жақынласыўлары болып табылады.

а) Энергия операторының «линеаризациясы». Энергия менен импульс арасындағы релятивисттик қатнасты «линеаризация» қылған ушын, яғни төрт ағзалыдан квадрат түбір алғыу ушын (6.1.1)-теңлемени былайынша жазамыз:

$$E = c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} = c \sum_{\mu=0}^3 \alpha_{\mu} p_{\mu}. \quad (\text{D.1})$$

Бул аңлатпада

$$p_0 = m_0 c, \quad p_1 = p_x, \quad p_2 = p_y, \quad p_3 = p_z. \quad (\text{D.2})$$

Бундай жағдайда биз мынаған ийе боламыз:

$$E^2 = c^2 \sum_{\mu=0}^3 p_{\mu} p_{\mu} = c^2 (p^2 + m_0^2 c^2). \quad (\text{D.3})$$

$\alpha_{\mu}$  шамаларының қандай шәртлерди қанаатландыратуғынлығын табыу ушын (D.1) қатнасының еки тәрпин де квадратқа көтеремиз. Егер усындаған жағдайда  $p_{\mu}$  операторы менен  $p_{\mu'}$  операторының орныларын алмастырып қойыуға болатуғын болса (яғни коммутацияланатуғын болса), онда мынадай аңлатпаны табамыз

$$E^2 = c^2 \sum_{\mu} \sum_{\mu'} p_{\mu} p_{\mu'} \alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} = \frac{c^2}{2} \sum_{\mu} \sum_{\mu'} p_{\mu} p_{\mu'} (\alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_{\mu}). \quad (\text{D.4})$$

Егер

$$\alpha_{\mu} \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_{\mu} = 2 \delta_{\mu\mu'} \quad (\text{D.5})$$

теңлиги орынланатуғын болса, онда (D.4) аңлатпасы (D.3)-аңлатпаға сәйкес келеди, яғни төрт  $\alpha_{\mu}$  шамасы бир бири менен антикоммутацияланатуғын

$$\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu = 0, \quad \mu \neq \mu' \quad (\text{D.6})$$

болса олардың ҳәр бириниң квадраты 1 ге тең болады

$$\alpha_\mu^2 = 1. \quad (\text{D.7})$$

Тап усындағы қәсийетлерге Паулидин еки қатарлы матрицаларының да ийе екенлегин еске түсіремиз:

$$\sigma'_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma'_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.8})$$

ал атап айтқанда олардың барлығы да бир бири менен коммутацияланады және олардың ҳәр бириниң квадраты 1 ге тең.

Бирақ төрт ағзалыдан квадрат түбірди алғы ушын үш қатнас керек болады.

Бул қыйыншылықтан өтиў ушын Дирак төрт қатарлы  $\sigma_n$  ҳәм  $\rho_n$  матрицаларының жыйнағын алғыуды усынды. Бул матрицаар еки қатарлы матрицаар менен

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} \sigma'_n & 0' \\ 0' & \sigma'_n \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, 3), \quad (\text{D.9})$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0' & I' \\ I' & 0' \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0' & -iI' \\ iI' & 0' \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix} \quad (\text{D.10})$$

қатнасларының жәрдемінде байланысқан.  $\sigma'_n$  арқалы Паули матрицаары белгиленген.

$$0' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.11})$$

Паули матрицаары қандай шәртлерди қанаатландыратуғын болса, бул төрт қатарлы матрицаар да тап сондай шәртлерди қанаатландырады:

$$\sigma_n^2 = \rho_n^2 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.12})$$

$$\sigma_1 \sigma_2 = -\sigma_2 \sigma_1 = i \sigma_3 \text{ ҳ.т.б.} \quad (\text{D.13})$$

$$\rho_1 \rho_2 = -\rho_2 \rho_1 = i \rho_3 \text{ ҳ.т.б.} \quad (\text{D.14})$$

Соңғы қатнасты биз былайынша жаза аламыз:

$$\sigma_n \sigma_{n'} + \sigma_{n'} \sigma_n = \rho_n \rho_{n'} + \rho_{n'} \rho_n = 2 \delta_{nn'}. \quad (\text{D.15})$$

Бул теңликтерге биз  $\sigma_n$  ҳәм  $\rho_{n'}$  шамаларының коммутативлигин қосыўымыз керек:

$$\sigma_n \rho_{n'} = \rho_{n'} \sigma_n. \quad (\text{D.16})$$

Бул коммутативликтиң ҳақыншылығында да орын алатуғынлығын (D.9)- ҳәм (D.10)-

аңлатпалар бойынша тиккелей есаплар жүргизиў жолы менен исенийге болады.

(D.1) аңлатпасындағы  $\alpha_n$  матрицасы сыпатында Дирак

$$\begin{aligned}\alpha_n &= \rho_1 \sigma_n = \begin{pmatrix} 0' & \sigma_n' \\ \sigma_n' & 0' \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, 3), \\ \alpha_0 &= \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{D.17}$$

матрицаларын алды усынды. Бул матрицалар (D.15)- ҳәм (D.16)-аңлатпаларға сәйкес (D.15)-шәртти қанаатландырады. Ҳақыйқатында да

$$\begin{aligned}\alpha_1^2 &= \rho_1^2 \sigma_1^2 = I, \quad \alpha_0^2 = \rho_3^2 = 1, \\ \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2 &= \rho_1^2 (\sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_2) = 0, \\ \alpha_0 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_0 &= \sigma_1 (\rho_3 \rho_1 + \rho_1 \rho_3) = 0\end{aligned}\tag{D.18}$$

ҳәм тағы басқалар.

Бул матрицаларды жазыў арқалы биз төмендегилерди табамыз:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \alpha_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{D.19}$$

b) Дирак теңлемеси. Тоқ пенен зарядтың тығызлығы.  $\alpha_n$  матрицаларының жәрдеминде линеаризация қылынған энергия менен импульс арасындағы (D.1) қатнасына өтиў арқалы биз еркин бөлекше ушын Дирак теңлемесин аламыз

$$(E - H) \Psi = 0. \tag{D.20}$$

Бул аңлатпада  $E$  ҳәм  $P$  операторлары әдеттегидей төмендеги аңлатпалар түринде жазылады

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad p = -i\hbar \nabla,$$

ал гамильтониан  $H$

$$H = c(\alpha p) + \rho_3 m_0 c^2 \tag{D.21}$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Электрон векторлық ҳәм скаляр потенциаллары ( $A, \Phi$ ) болған электромагнит майданында қозғалатуғын болса да биз (D.20)- ҳәм (D.21)-теңлемелерден пайдалана беремиз. Бирақ бул жерде толқын механикасының улыўма қағыйдаларына сәйкес энергия менен импульс операторлары сыпатында олардың улыўмаластырылған мәнислері алышыўы керек [Еске түсиремиз, олардың улыўмаластырылған мәнислері

$$\begin{aligned} E \rightarrow F &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \\ p \rightarrow P &= \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}. \end{aligned}$$

схемасы бойынша табылатуғын еди (6.1.5)-аңлатпаға қараңыз]:

$$F = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \quad P = -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}. \quad (\text{D.22})$$

Сонлықтан Дирак толқын теңлемесин электромагнит майданы бар болған жағдай ушын мына түрде жазамыз:

$$(F - c(\alpha P) - \rho_3 m_0 c^2) \psi = 0. \quad (\text{D.23})$$

α ҳәм ρ<sub>3</sub> матрицаларының қатар ҳәм бағаналар санына сәйкес ψ толқын функциясы төрт қураушыға ииे болыўы керек. Толқын функциясының бул төрт қураушыларды бир бағанадан туратуғын бир матрицаға бириктіремиз:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.24})$$

Бул матрицаға түйинлес функция сыпатында бир қатардан туратуғын эрмитлик-түйинлес матрицаны түсінемиз:

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*). \quad (\text{D.25})$$

Солай етип (D.23)-Дирактың матрицалық теңлемеси тәмендегидей төрт теңлемеден туратуғын системаға эквивалент екен:

$$\begin{aligned} (F - m_0 c^2) \psi_1 - c(P_x - iP_y) \psi_4 - cP_z \psi_3 &= 0, \\ (F - m_0 c^2) \psi_2 - c(P_x + iP_y) \psi_3 + cP_z \psi_4 &= 0, \\ (F + m_0 c^2) \psi_3 - c(P_x - iP_y) \psi_2 - cP_z \psi_1 &= 0, \\ (F + m_0 c^2) \psi_4 - c(P_x + iP_y) \psi_1 + cP_z \psi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (\text{D.26})$$

Комплексли түйинлес теңлеме де тәмендегидей матрицалық теңлеме түринде көрсетилийи мүмкін:

$$\psi^+ (F - c(\alpha P) - \rho_3 m_0 c^2) = 0. \quad (\text{D.27})$$

Бул теңлемеде  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  ҳәм  $-i\hbar \nabla$  операторларының өзиниң шеп тәрепинде турған толқын функциясына тәсирин әдеттегидей емес түсіниў керек:

$$-\psi^+ i\hbar \nabla \rightarrow i\hbar \nabla \psi^+, \quad \psi^+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^+. \quad (\text{D.28})$$

Солай етип (D.28)- ҳәм (D.27)-теңлемелерди былайынша жазыўға болады екен:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \psi - c \left( \alpha \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) \psi - \rho_3 m_0 c^2 \psi = 0, \quad (\text{D.29})$$

$$\left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \psi^+ - c \left( \left( i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi^+ \alpha \right) - m_0 c^2 \psi^+ \rho_3 = 0. \quad (\text{D.30})$$

(D.29)-теңлемени шеп тәрептен  $\psi^+$  ке, ал (D.30)-теңлемени оң тәрептен  $\psi$  ге көбейтсек ҳәм екинши теңлемени бириңшиден алсақ тәмендегидей қатнасты алаңыз:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi^+ \psi + \operatorname{div} \psi^+ \alpha \psi = 0 \quad (\text{D.31})$$

ҳәм бул теңлемени итималлықтың тығызлығы  $\rho$  ушын ҳәм тоқтың тығызлығы  $j$  ушын үзликсизлик теңлемеси сипатында қараўымызға болады:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} j = 0. \quad (\text{D.32})$$

Бул жерде

$$\rho = e\psi^+ \psi, \quad j = ec\psi^+ \alpha \psi.$$

Соңғы формуладан  $c\alpha$  матрицасын тезлик операторы деп түсіндирсе болатуғынлығы көринип түр.

Егер (D.32) теңлигин ашсақ тәмендегини табамыз:

$$\rho_0 = \frac{\rho}{e} = \psi^+ \psi = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_3^* \psi_3 + \psi_4^* \psi_4, \quad (\text{D.33})$$

яғни  $\rho_0$  бир элементтен туратуғын матрица болып табылады ҳәм соңықтан ол әдеттеги функцияға сәйкес келеди.

Тап сол сыйқлы, тәмендегидей аңлатпаның орын алатуғынлығын аңсат көрсетиўге болады

$$\begin{aligned} \frac{j_x}{ec} &= \psi^+ \alpha_1 \psi = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_4 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix} = \\ &= \psi_1^* \psi_4 + \psi_2^* \psi_3 + \psi_3^* \psi_2 + \psi_4^* \psi_1. \end{aligned} \quad (\text{D.34})$$

Бул жерде Клейн-Гордон теңлемесинен айырмаға ийе жағдай сипатында  $\rho_0$  тығызлығының оң мәнисте анықланатуғын шама екенлигин көремиз. Бирақ бул жағдайдың өзи Дирак теориясында  $\rho_0$  шамасын бөлекшелердиң тығызлығы деп қараўға болмайтуғынлығын көрсетеди. Клейн-Гордон теориясындағыдей Дирак теориясында да электронлар менен бирге оң зарядқа ийе бөлекшелер болған позитронлардың бар болыўы мүмкін. Бул ҳақында кейинирек гәп етиледи (Дирак теңлемесинң толық шешимлерин изертлегендеге).

в) Лоренц түрлендириўлериндеги ҳәм кеңисликтеги айландырыўлардағы толқын функциясының трансформациялық қәсийетлери. Арнаұлы салыстырмалық теориясы бойынша физикалық нызамлар координаталар системасын Лоренц бойынша сайлып алғыдан ғәрэзли емес болыўы керек. Соңықтан Максвелл теңлемелери сыйқлы Клейн-Гордон теңлемеси де, Дирак теңлемеси де Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант болыўы керек.

Дирак толқын функциясының трансформациялық қәсийетлерин изертлеймиз.

Буның ушын ең дәслеп Лоренц түрлендириўлерин жазамыз

$$ct' = ct \operatorname{ch} \gamma - x \operatorname{sh} \gamma, \quad x' = x \operatorname{ch} \gamma - ct \operatorname{sh} \gamma, \quad y' = y, \quad z' = z. \quad (\text{D.35})$$

Бул аңлатпада

$$\operatorname{ch} \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \operatorname{sh} \gamma = \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Бул түрлендириўди қәлеген төрт өлшемли вектор, соның ишинде зарядтың тығызлығы да, тоқтың тығызлығы да қанаатландырады:

$$c\rho' = c\rho \operatorname{ch} \gamma - j_x \operatorname{sh} \gamma, \quad j'_x = j_x \operatorname{ch} \gamma - c\rho \operatorname{sh} \gamma, \quad j'_{y,z} = j_{y,z}.$$

Бул шамалардың анықламасынан келип шыққан ҳалда Дирак теориясы бойынша төмөндегилерге ийе боламыз:

$$\begin{aligned} \psi'^+ \psi' &= \psi^+ (\operatorname{ch} \gamma - \alpha_1 \operatorname{sh} \gamma) \psi = \psi^+ e^{-\gamma \alpha_1} \psi, \\ \psi'^+ \alpha_1 \psi' &= \psi^+ (\alpha_1 \operatorname{ch} \gamma - \operatorname{sh} \gamma) \psi = \psi^+ \alpha_1 e^{-\gamma \alpha_1} \psi, \\ \psi'^+ \alpha_{2,3} \psi' &= \psi^+ \alpha_{2,3} \psi. \end{aligned} \quad (\text{D.36})$$

Биз бул жерде  $\alpha_1^{2n} = 1$ ,  $\alpha_1^{2n+1} = \alpha_1$ , ал  $n$  пүтиң сан болғанлықтан

$$e^{-\gamma \alpha_1} = \operatorname{ch} \gamma \alpha_1 - \operatorname{sh} \gamma \alpha_1 = \operatorname{ch} \gamma - \alpha_1 \operatorname{sh} \gamma$$

теңликтериниң орын алатуғынлығын инабатқа алдық.

Соңғы қатнасларды қанаатландырыў ушын биз

$$\begin{aligned} \psi' &= \left( \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \alpha_1 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \right) \psi = e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \psi, \\ \psi'^+ &= \psi^+ \left( \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \alpha_1 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \right) = \psi^+ e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \end{aligned} \quad (\text{D.37})$$

деп есаплаўымыз керек. Бундай жағдайда

$$\alpha_1 e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} = e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \alpha_1, \quad \alpha_2 e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} = e^{\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \alpha_2 \quad (\text{D.38})$$

екенлигин есапқа алыш (D.36)-қатнастың дұрыслығын аңсат көрсетиүге болады. (D.37)-аңлатпадан толқын функцияларының вектор сыпатында емес (пүтиң  $\gamma$  мүйешлери), тензор сыпатында да емес (еки еселенген  $\gamma$  мүйешлери), түрленийи  $\gamma/2$  мүйеши менен характерленетуғын ярым векторы сыпатында түрленетуғынлығы көринип тур. (D.37)-нызам бойынша түрленетуғын шамалар спинорлар ямаса ярым рангалы тензорлар атамасын алды.

Жоқарыда келтирилгендей усыллар менен әдеттеги кенисликтік түрлендириўлерде (мысалы  $z$  көшериниң дөгерегинде мүйешине бурғанда) спинордың

$$\psi' = e^{i\sigma_3 \frac{\Phi}{2}} \psi, \quad \psi'^+ = \psi^+ e^{-i\sigma_3 \frac{\Phi}{2}} \quad (\text{D.39})$$

нызамы бойынша түрленетуғынлығын көрсетиүге болады. Соңғы аңлатпалар тоқ векторы ушын исленген түрлендириўлерден келип шығады:

$$\begin{aligned} j'_x &= j_x \cos \varphi + j_y \sin \varphi, \\ j'_y &= j_y \cos \varphi - j_x \sin \varphi, \\ j'_z &= j_z, \end{aligned} \quad (\text{D.40})$$

ал бул шамалардың Дирак теориясында былайынша көрсетилийи мүмкін:

$$\begin{aligned} \psi'^+ \alpha_1 \psi' &= \psi^+ (\alpha_1 \cos \varphi + \alpha_2 \sin \varphi) \psi, \\ \psi'^+ \alpha_3 \psi' &= \psi^+ \alpha_3 \psi \end{aligned} \quad (\text{D.41})$$

Хәм тағы басқалар. Бул аңлатпаға (D.39) дан  $\psi'$  тың мәнисин қойып ҳәм

$$\begin{aligned} \alpha_1 e^{i\sigma_3 \frac{\Psi}{2}} &= \alpha_1 \left( \cos \frac{\Psi}{2} + i\sigma_3 \sin \frac{\Psi}{2} \right) = \left( \cos \frac{\Psi}{2} - i\sigma_3 \sin \frac{\Psi}{2} \right) \alpha_1 = \\ &= e^{-i\sigma_3 \frac{\Psi}{2}} \alpha_1, \quad \alpha_3 e^{i\sigma_3 \frac{\Psi}{2}} = e^{i\sigma_3 \frac{\Psi}{2}} \alpha_3 \end{aligned}$$

екенлигин есапқа алыш (D.40) қатнасына келемиз.

### 6-3. Дирак электронының орайлық күшлер майданындағы қозғалысы

а) Қозғалыс муғдарының орбиталық, спинлик ҳәм толық моментлери. Ең дәслеп орайлық күшлер майданындағы қозғалыс муғдары моментиниң сақланыў нызамын изертлеймиз:

$$V = e\Phi(r). \quad (6.3.1)$$

Шредингердин релятивисттик емес теориясында бундай жағдайда қозғалыс муғдарының орбиталық моментиниң сақланатуғынлығы белгилі

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}].$$

Бирақ электронның спини де есапқа алынатуғын Дирак теориясында қозғалыс муғдарының орбиталық моменти операторы гамильтониан менен коммутацияланбайды, яғни қозғалыс интегралы болып табылмайды. Ҳақыйқатында да гамильтонианды

$$H = c\alpha_1 p_x + c\alpha_2 p_y + c\alpha_3 p_z + \rho_3 m_0 c^2 + V(r) \quad (6.3.2)$$

түринде көрсетип  $L_z = (xp_y - yp_x)$  қураўшысының биринши еки ағзасы менен коммутацияланбайтуғынлығын көремиз:

$$HL_z - L_z H = c\alpha_1 p_y (p_x x - xp_x) - c\alpha_2 p_x (p_y y - yp_y). \quad (6.3.3)$$

Буннан кейин

$$(p_x x - x p_x) = (p_y y - y p_y) = \frac{\hbar}{i}$$

екенлигин есапқа алып

$$H L_z - L_z H = \frac{c\hbar}{i} (\alpha_1 p_y - \alpha_2 p_x) \neq 0 \quad (6.3.3a)$$

аңлатпасын аламыз.

Спинге иие бөлекшелердиң моментиниң сақланыў нызамын табыў ушын

$$\begin{aligned} H \sigma_3 - \sigma_3 H &= c p_x \rho_1 (\sigma_1 \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_1) + c p_y \rho_1 (\sigma_2 \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_2) = \\ &= \frac{2c}{i} (\alpha_2 p_x - \alpha_1 p_y) \end{aligned} \quad (6.3.4)$$

аңлатпасын да пайдаланамыз.

Орбиталық **L** ҳәм спинлик

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \quad (6.3.4a)$$

моментлердиң қосындысынан туратуғын қозғалыс муғдарының толық моменти ушын оператор

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (6.3.4)$$

түснегин киргизип (6.3.3a) ҳәм (6.3.36) теңликлеринен қозғалыс муғдарының тек қураўшысының ғана (бул жағдайда  $J_z$  қураўшысының) гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын, яғни сақланыў нызамын қанаатландыратуғынлығын көриўге болады.

б) Момент операторлары ушын орын алмастырыў қатнаслары. Орбиталық моменттиң қураўшыларының бир бири менен коммутацияланбайтуғынлығы және

$$L_x L_y - L_y L_x = i\hbar L \quad (6.3.5)$$

ҳәм тағы басқа да ( $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x \dots$ ) орын алмастырыў қатнасларына бағынатуғынлығы мәлим.

Меншикли момент операторы (спин) Дирак матрицаларына пропорционал

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}. \quad (6.3.6)$$

Сонлықтан оның қураўшылары өз-ара коммутацияланбаўы керек. Паулидиң еки қатарлы матрицалары  $\boldsymbol{\sigma}'$  ҳәм Дирактың төрт қатарлы матрицалары бирдей коммутацияланыў қәғыйдаларына бағынатуғын болғанлықтан биз Дирак спини ушын Паули спини ушын табылғандай орын алмастырыў қатнасларын табамыз, яғни

$$S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z \quad (6.3.6a)$$

ҳәм тағы басқалар.

Орбиталық ҳәм спин моментлеринин қураўшылары операторлар болып табылатуғын ҳәм бирдей болған орын алмастырыў қатнасларына бағынатуғын

болса да олар бири бири менен коммутацияланады. Себеби бул қураўшыларды пайда ететуғын операторлар пүткіллей ҳәр қыйлы ҳәм ғәрэзсиз характерлерге ийе (тууындылары ҳәм матрикалар).

Толық момент операторының қураўшылары ушын бул ескертиўлерди есапқа алыш (19.5)- ҳәм (19.6а)-орын алмастырыўлары қатнасларына сәйкес орын алмастырыў қатнасларын аламыз

$$\begin{aligned} J_x J_y - J_y J_x &= (L_x + S_x)(L_y + S_y) - (L_y + S_y)(L_x + S_x) = \\ &= i\hbar(L_z + S_z). \end{aligned}$$

Буннан төменги аңлатпаларды табамыз:

$$\begin{aligned} J_x J_y - J_y J_x &= i\hbar J_z, \\ J_y J_z - J_z J_y &= i\hbar J_x, \\ J_z J_x - J_x J_z &= i\hbar J_y. \end{aligned} \tag{6.3.7}$$

Кейинги еки орын алмастырыў қатнаслары бириншиден  $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x, \dots$  цикллық орын алмастырыў жолы менен алынды.

Толық моменттиң квадраты операторы

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2(LS) \tag{6.3.8}$$

үш ағзаға ийе. Биринши ағза

$$L^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \phi}^2 \tag{6.3.9}$$

$Y_l^m$  шар функциясына тәсир еткенде оның меншикли мәнислери төмендегилерге тең болады:

$$L^2 \rightarrow \hbar^2 l(l+1), \tag{6.3.9a}$$

яғний орбиталық момент  $l$  ге тең болған ( $\hbar$  бирликлериндеги) жағдайлардағы ҳалларды тәрийиплейди.

Екинши ағза

$$S^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 = s(s+1)\hbar^2 \tag{6.3.10}$$

сан болып табылады ҳәм  $\hbar$  бирликлериндеги спинди тәрийиплейди. Оның мәниси  $s = 1/2$ .

Ең ақырында үшинши ағза

$$2(LS) = 2(L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z) \tag{6.3.10a}$$

спин-орбиталық байланыс деп аталатуғын байланысты характерлейди.  $L_z$  ҳәм  $S_z$  моментлериниң қураўшылары айырым түрде (6.3.9)- оператор менен де, (6.3.10)- оператор менен де коммутацияланбайтуғынлығын атап өтемиз.

Хақыйқатында да (6.3.5)- ҳәм (6.3.6а)-теңликлерди есапқа алған ҳалда

$$\begin{aligned} L_z(LS) - (LS)L_z &= i\hbar(L_yS_x - L_xS_y), \\ S_z(LS) - (LS)S_z &= i\hbar(L_xS_y - L_yS_x) \end{aligned} \quad (6.3.11)$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын аңсат көрсетиүге болады.

Буннан усы ағза менен тек толық моменттиң коммутацияланыуының кереклигі

$$(L_z + S_z)(LS) - (LS)(L_z + S_z) = 0, \quad (6.3.12)$$

ал соның менен бирге толық моменттиң квадраты

$$J_z J^2 - J^2 J_z = 0 \quad (6.3.)$$

коммутацияланатуғынлығы көринип тур.

Жоқарыда айтылғанларға байланыслы қозғалыс муғдарының толық моменти сақланатуғын мәселелерде (мысалы орайлық күшлер майданындағы спинлик бөлекше) толық моменттиң квадраты хәм оның қураўшыларының қәлегени (мысалы  $\mathbf{z}$  көшерине түсирилгени) улыўмалық меншикли функцияға ийе бола алады. Толық моменттиң еки қураўшысының бир ўақытта улыўмалық толқын функциясына ийе бола алмайтуғынлығын аңғарамыз. Себеби олар бир бири менен коммутацияланбайды [(6.3.7)-аңлатпаға қараңыз].

в) Моментлерди қосыў. Толық момент ушын сақланыў нызамын қанаатландыратуғын толқын функциясының мүйешлик бөлимин қараймыз. Толық момент орбиталық ҳәм спинлик моментлердин қосындысына тең болғанлықтан бундай мәселе момнетлерди қосыўға байланыслы мәселе деп аталады

Әпіүайылық ушын Паули жақынласыўы менен шекленемиз. Бул жағдайда спин  $\sigma'$  еки қатарлы матриналар жәрдеминде тәрийипленеди. Бул жағдайда шешимди еки қураўшыға ийе матрица түринде излеймиз

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (6.3.14)$$

ал бул матрицаның элементтери арасында қозғалыс муғдарының толық момнетиниң сақланыў нызамын есапқа алатуғын байланыстың орнатылыўы керек:

$$\begin{aligned} J^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &= \left( \mathbf{L} + \frac{1}{2} \hbar \sigma' \right)^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \\ J_z \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &= \left( L_z + \frac{1}{2} \hbar \sigma'_3 \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar m_l \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.3.15)$$

Бул аңлатпада  $\mathbf{L} = [rp]$  арқалы орбиталық момент операторы, ал  $\sigma'$  арқалы Паулидин еки қураўшыға ийе матрикалары белгиленген. (6.3.15)-теңлемелердин шешимлерин

$$\Psi_1 = C_1 Y_l^{m'}, \quad \Psi_2 = C_2 Y_l^m \quad (6.3.16)$$

түринде излеймиз<sup>5</sup>. Бул аңлатпада  $Y_l^m$  арқалы шар функциялары белгиленген. Бундай жағдайда

---

<sup>5</sup> т менен  $m'$  тың ҳәр қыйлы мәнислеринде тек орбиталық моменттиң квадраты ғана сақланады, бирақ оның  $z$  көшерине түсирилген проекциясы сақланбайды.

$$\mathbf{L}^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l(l+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (6.3.17)$$

екенлигин есапқа алып (6.3.15), (19.12) ҳәм (19.13) аңлатпаларына сәйкес

$$\frac{1}{\hbar} (\sigma' \mathbf{L}) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (19.18)$$

аңлатпасына ямаса

$$\frac{1}{\hbar} [(L_x - iL_y)\Psi_2 + L_z\Psi_1] = q\Psi_1, \quad (6.3.18)$$

$$\frac{1}{\hbar} [(L_x + iL_y)\Psi_1 - L_z\Psi_2] = q\Psi_2$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада

$$q = j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}. \quad (6.3.18a)$$

Буннан кейин

$$L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m$$

ҳәм

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar \sqrt{(l+1 \pm m)(l \mp m)} Y_l^{m \pm 1}$$

аңлатпалардан пайдаланамыз. Нәтийжеде төмендигилерге ийе боламыз:

$$L_z Y_l^m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \Phi} Y_l^m = m\hbar Y_l^m, \quad (6.3.19)$$

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar \sqrt{(l+1 \pm m)(l \mp m)} Y_l^{m \pm 1}. \quad (6.3.20)$$

Буннан, егер биз  $m' = m - 1$  деп есапласақ (6.3.18)-аңлатпаданың оң ҳәм шептәреплериндеги шар функцияларын қысқартта алатуғынымыз көринип тур. Бундай жағдайда коэффициентлер арасындағы мынадай қатнасларды аламыз

$$\begin{aligned} (q - m + 1)C_1 + \sqrt{(l+1-m)(l+m)} C_2 &= 0, \\ \sqrt{(l+1-m)(l+m)} C_1 + (q + m) C_2 &= 0. \end{aligned} \quad (6.3.21)$$

Детерминанттың нолге тең болыў шәртинен шешимлердин мүмкин болған еки типине сәйкес келетуғын қ шамасының еки мәнисин табамыз<sup>6</sup>:

$$q = l, \quad j = l + \frac{1}{2}, \quad C_2 = -\sqrt{\frac{l-m+1}{l+m}} C_1, \quad (6.3.22)$$

$$q = -(l+1), \quad j = l - \frac{1}{2}, \quad C_2 = \sqrt{\frac{l+m}{l-m+1}} C_1. \quad (6.3.23)$$

<sup>6</sup> Усының менен бир қатарда  $j$  шамасының терис мәниске ийе болған жағдайдағы да шешим бар. Бул шешимди биз есапқа алмаймыз.

Моментерди қосқанда шар функциялары арасындағы қатнасты анықтайды.  $C_1^2 + C_2^2 = 1$  нормировка шәртин пайдаланып,  $j = l + 1/2$ ,  $l = 0, 1, \dots$  болған жағдайда бириңи типтеги шешимди былайынша жазамыз<sup>7</sup>:

$$\Psi^{(j=l+1/2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_l^{m-1} \\ -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}} Y_l^m \end{pmatrix} = Y_{l,m}^{(j=l+1/2)}. \quad (6.3.24)$$

$j = l - 1/2$ ,  $l = 1, 2, \dots$  болған жағдайда болса (шешимниң екинши типи) толқын функциясы мынаған тең:

$$\Psi^{(j=l-1/2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} Y_l^{m-1} \\ \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_l^m \end{pmatrix} = Y_{l,m}^{(j=l-1/2)}. \quad (6.3.25)$$

Бул аңлатпада  $Y_{l,m}^{(j)}$  арқалы шар спинорлары белгиленген. Олар ушын ортонормировка шәрти

$$\oint d\Omega Y_{l'm'}^{(j')+\} Y_{lm}^{(j)} = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6.3.26)$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада  $j = l + 1/2$  болған жағдай спинлик ҳәм орбиталық моментлер өз-ара параллель, ал  $j = l - 1/2$  болған жағдай спинлик ҳәр орбиталық моментлер өз-ара антипараллель болған жағдайға сәйкес келеди. Егер  $Y_{l'm}^{(j)+}$  шар спиноры бир қатарға ийе матрица болса ҳәм шар функцияларының ортонормировкалғанлығын дыққатқа алсақ (6.3.26)-шәрт аңсат алынады. (6.3.24) ҳәм (6.3.25) шар спинорлары әдеттеги шар функцияларының спинорлық улыўмаластырылышы болып табылады орайлық күшлер майданындағы ярым шешимниң мүйешлилік болып табылады.

Ψ функциясы ушын бул шешимлерди (6.3.4)-аңлатпаға қойсақ қозғалыс муғдарының толық моментиниң  $J_z$  проекциясының  $J_z = \hbar m_j$  мәнислерин қабыл ететуғынлығын табамыз. Усының менен бирге  $m_j$  квантлық сан  $m_j = m - 1/2$  мәнислерине тең. (6.3.24)-аңлатпадан көринип турғанындай бириңи тип шешимлери ушын ( $j = l + 1/2$ )  $m$  саны  $-l$  ( $m_j = -l - 1/2 = -j$ ) ден  $l + 1$  ( $m_j = l + 1/2 = j$ ) шамасына шекем өзгереди. Тап сол сияқты (6.3.25)-аңлатпаға сәйкес екинши тип шешим ушын ( $j = l - 1/2$ )  $m$  саны  $-l + 1$  ( $m_j = -j$ ) шамасынан  $l$  шамасына ( $m_j = j$ ) шекем өзгереди<sup>8</sup>. Солай етип бизиң нәтийжелеримиз мыналарға алып келинеди: қозғалыс муғдарының толық моментиниң квадраты

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j = \begin{cases} l \pm 1/2, & l \neq 0, \\ 1/2, & l = 0 \end{cases} \quad (6.3.26a)$$

меншикли мәнислерине ийе, яғнай орбиталық момент сияқты квантланады, бирақ бул жағдайда ишки квантлық сан деп аталатуғын  $j$  саны ярым пүтиң мәнислерди

<sup>7</sup> Биз шар функциялары арасындағы байланыстың тек спин-орбиталық тәсирлесіүй бар болған жағдайда ғана орын алатуғынлығын аңғарамыз.

<sup>8</sup> Бул шеклердин орын алғыуындағы себеп мынадан ибарат:  $|m| > l$  шеклеринде  $Y_l^m$  шар функциясы нолге айланады.

қабыллайды<sup>9</sup>. Моменттиң  $z$  көшерине түсирилген проекциясының меншикли мәнислери де ярым пүтин квантлық санлар менен характерленеди:

$$J_z = \hbar m_l, \quad m_l = -j, \dots, +j. \quad (6.3.27)$$

(6.3.8)-(6.3.10) қатнаслардан ҳәм (6.3.26a) квантланыў қағыйдасынан келип шыққан халда спектроскопияда әхмийетли болған скаляр көбеймелердиң квантланыў формулаларын алыўға болады

$$(\mathbf{LS}) = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) = \frac{\hbar^2}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\} \quad (6.3.28)$$

Хәм

$$(\mathbf{JS}) = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 + S^2) = \frac{\hbar^2}{2} \{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)\}. \quad (6.3.29)$$

г) Спини бар бөлекшелердиң орайлық күшлер майданындағы қозғалысы Ротатор. Егер бизлер спинлик эфектлерди есапқа алып бөлекшениң орайлық күшлер майданындағы қозғалысын релятивистлик емес жақынласыуда изертлегимиз келсе, онда қозғалыс муғдарының орбиталық моменти сақланатуғын қатнасларды характеристрейтуғын  $Y_l^m$  шар функцияларының орнына биз қозғалыс муғдарының толық моменти (орбиталық плюс спинлик) сақланатуғын ҳалларды характеристрейтуғын  $Y_{lm}^{(j)}$  шар спинорларын қолланыўымыз керек болады.

Релятивистлик емес жақынласыўларда шар спинорлары  $l$  квантлық санларның бирдей мәнисине ийе шар функцияларынан қуралатуғын болғанлықтан бундай жағдайда радиаллық бөлими ушын спинге ийе емес, релятивистлик емес бөлекшеге тийисли болған теңлемени аламыз, яғни

$$\nabla_r^2 R + \left( \frac{2m_0 E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0. \quad (6.3.30)$$

Солай етип орайлық күшлер майданындағы электронлар ушын толқын функциялары

$$\Psi = R Y_{lm}^{(j)} \quad (6.3.31)$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпадағы  $Y_{lm}^{(j)}$  спиноры (6.3.24)- ямаса (6.3.25)- аңлатпаның жәрдеминде анықланады.

Дара жағдайда ротатор ушын биз  $r = a = \text{const}$  деп, ал толқын функциясының радиаллық бөлімин бирге тең ( $R = 1$ ) деп алыўымызға болады. Бундай жағдайда спинлик эфектлер ротатордың энергиясы ушын ҳеш қандай қосымша ағзаларды бермейди. Ал ротатордың энергиясы спинсиз бөлекше ушын келтирилип шығарылған аңлатпа менен анықланады, яғни

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 a^2}. \quad (6.3.32)$$

Ал толқын функциясына келетуғын болсақ, онда ол  $Y_{lm}^{(j)}$  шар спиноры менен характерленеди. Сонықтан бизлер ең дәслеп  $l, m_l$  ҳәм  $j$  квантлық санлар ушын

<sup>9</sup> Бул атама мәселениң тарийхы менен байланыслы:  $j$  саны спектроскопистлер тәрепинен спин ашылмастан бурын эмперикалық түрде киргизилген еди. Ал “ишкі” деген термин сол ўақытлары анық емес болған бөлекшелердин қандай да бир ишкі қәсийетин сәүлелendirди.

таңлап алыў қағыйдасын (правило отбора) табыўымыз керек. Бул таңлап алыў қағыйдалары тек ғана ротатор ҳақындағы мәселеде орын алып қоймай, орайлық күшлер майданында қозғалатуғын бөлекшеге тийисли қәлеген мәселеде, соның ишинде водород атомына арналған мәселеде де орын алыўы керек.

Спинге иие емес бөлекшелер ушын табылған таңлап алыў қағыйдаларының орнына енди төмендегидей қағыйдаларды жазамыз:

$$\langle l'm'j' | q | lmj \rangle = \oint (Y_{l'm'}^{(j')})^* q Y_{lm}^{(j)} d\Omega, \quad (6.3.33)$$

ал кейинги формуладағы  $q$  шамасы үш мәниске иие болады:

$$q = z = \cos \theta, \quad q = x \pm iy = \sin \theta e^{\pm i\phi}. \quad (6.3.34)$$

Бул формулада әпиүайылық ушын ротатордың радиусын бирге тең деп аламыз:  $a=1$ .

Егер шар спинорларының орнына (6.3.24) ямаса (6.3.25) мәнислерин қойсак, онда бул матрицалық элемент ушын төмендегини аламыз

$$\begin{aligned} \langle l'm'j' | q | lmj \rangle &= \\ &= D^{(j'l')} \oint (Y_{l'}^{m'-1})^* q Y_l^{m-1} d\Omega + C^{(j'l')} \oint (Y_{l'}^{m'})^* q Y_l^m d\Omega. \end{aligned} \quad (6.3.35)$$

Бул жерде (6.3.35)-аңлатпадағы еки интегралдың да

$$\begin{aligned} \langle l'm' | z | lm \rangle &= \oint (Y_{l'}^{m'})^* \cos \theta Y_l^m d\Omega, \\ \langle l'm' | x + iy | lm \rangle &= \oint (Y_{l'}^{m'})^* \sin \theta e^{i\phi} Y_l^m d\Omega, \\ \langle l'm' | x - iy | lm \rangle &= \oint (Y_{l'}^{m'})^* \sin \theta e^{-i\phi} Y_l^m d\Omega \end{aligned}$$

интегралларына дәл сәйкес келетуғынлығы көремиз (бул формулалар релятивистлик емес ротатор ушын тығызылдықтың тарқалыуына тийисли). Соныңтан  $l$  ҳәм  $m$  квантлық санлар ушын спини жоқ ротатор ушын табылған таңлау қағыйдаларын табамыз, яғни

$$\Delta m_l = 0, \pm 1. \quad (6.3.37)$$

Егер  $j$  ушын таңлап алыў қағыйдасын анықлағанда бирдей типтеги шешимлер менен характерленетуғын ҳаллар арасында өтиўлер болатуғын болса ( $j' = l' + 1/2 \rightarrow j = l - 1/2$  ямаса  $j' = l' - 1/2 \rightarrow j = l + 1/2$ ) (6.3.24) ҳәм (6.3.25) аңлатпаларынан  $D^{(j'l')}$  ҳәм  $C^{(j'l')}$  коэффициентлериниң оң мәниске иие болатуғынлығы ҳәм бундай өтиўлердин руқсат етилгенлиги көринеди. Бул жағдайда  $j$  квантлық санының мүмкін болған өзгериси орбиталық квантлық сан  $l$  динде өзгериси менен бирге жүзеге келийи керек, яғни  $\Delta j = \Delta l = \pm 1$ .

Егер өтиўлер шешимлердин ҳәр қыйлы типтери менен характерленетуғын ҳаллар арасында жүзеге келетуғын болса ( $j' = l' + 1/2 \rightarrow j = l - 1/2$  ямаса  $j' = l' - 1/2 \rightarrow j = l + 1/2$ ), онда  $\Delta l = \pm 1$  ҳәм  $\Delta j = 0, +2, -2$  ушын үш мүмкін болған мәнислерди аламыз. Бирақ бул жерде  $D^{(j'l')}$  менен  $C^{(j'l')}$  коэффициентлериниң ҳәр қыйлы белгилерге иие болатуғынлығын есапқа алыў керек. Соның менен бирге  $\Delta j = \pm 2$  болған жағдайда ағзалардың екеўи де бир бириң компенсация қылады ҳәм соныңтан бундай өтиў қадаған етиледи.  $\Delta j = 0$  болған жағдайда бул айырма нолге айланбайды, бирақ еки ағза ҳәр қыйлы белгилер менен киретуғын болғанлықтан

бирдей типтеги шешимлерге сәйкес келетуғын ҳаллар арасындағы өтиўлердеги ( $\Delta j = \pm 1$  болған жағдай) нурланыў интенсивлигине қарағанда нурланыў интенсивлиги жүдә ҳәлсиз болады.

Солай етип спин есапқа алынған жағдайда орайлық күшлер майданындағы квантлық санлар ушын таңлап алыў қағыйдалары төмнедегидей болады:

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_l = 0, \pm 1, \\ \Delta j = \begin{cases} \pm 1 & (\text{әдеттегидей интенсивлик}), \\ 0 & (\text{ҳәлсиреген интенсивлик}). \end{cases} \quad (6.3.38)$$

#### 6-4. Дирак теңлемесиниң толық шешими

Бул параграфта бизлер тек оң энергияға ийе ҳалларды емес, ал терис энергияға ийе ҳалларды есапқа алып Дирак теңлемесиниң толық шешимин толығырақ изертлеймиз. Усыған байланыслы терис мәнисли энергияға ийе ҳалдың талланыўы позитронның бар екенин болжаўға, яғни элементар бөлекшелердин жаңа фундаменталлық қәсийетиниң ашылыўына, атап айтқанда антибөлекшелердин бар екенligиниң ҳәм бир элементар бөлекшелердин басқа элементар бөлекшелерге айланыўының ашылыўына алып келди.

а) Оң ҳәм терис энергияларды есапқа алып еркин бөлекше ушын Дирак теңлемесиниң шешими. Бириңи гезекте еркин бөлекше ушын жазылған Дирак теңлемесин изертлеймиз. Ол былайынша жазылады:

$$\left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi = 0, \quad (6.4.1)$$

ал бул аңлатпадағы гамильтониан

$$H = \frac{\hbar c}{i} (\alpha \nabla) + \rho_3 m_0 c^2 \quad (22.2)$$

формуласының жәрдеминде бериледи.

Еркин қозғалысты орайлық күшлердин тәсириндеги қозғалыстың дара жағдайы сыпатында қараўға болады ҳәм сонлықтан толық моменттиң сақланыў нызамы орынланады [(6.3.4)-аңлатпаға қараңыз]

$$J = [rp] + \frac{1}{2} \hbar \sigma = \text{const.} \quad (6.4.3)$$

Квантлық механиканың тилинде бул жағдай қозғалыс муғдарының толық моментиниң гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын аңғартады

Егер биз толық моменттиң импульстиң бағытындағы проекциясын алатуғын болсақ  $[rp]$  орбиталық моменттен күтыла аламыз. Себеби орбиталық моменттиң импульстиң бағытындағы проекциясы нолге тең:

$$(p [rp]) = p_x (y p_z - z p_y) + p_y (z p_x - x p_z) + p_z (x p_y - y p_x) = 0.$$

Буннан былай орынланатуғын есаплаўлар ушын импульс бағытындағы қозғалыс муғдарының моментиниң проекциясының операторын киргизген қолайлыш ( $\frac{1}{2}\hbar$  бирликлеринде)

$$S = 2 \frac{(Jp)}{\hbar p} = \frac{(\sigma \nabla)}{\sqrt{\nabla^2}} = \frac{(\sigma \nabla)}{ik}. \quad (6.4.4)$$

Бул аңлатпада импульс  $p = \hbar k$ , ал  $\nabla^2$  операторының меншикли мәниси  $-k^2$  шамасына тең.

Бул оператордың (6.4.2)-гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығы анық. Буның ушын тиккелей  $HS - SH = 0$  теңлигин пайдаланып тексерип көриүге болады.

Дирак теңлемесинң дара шешимин

$$\psi(k) = \frac{1}{L^{1/2}} b e^{-ic\epsilon Kt + ikr} \quad (6.4.5)$$

түринде излеймиз. Бул аңлатпада

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} \quad (6.4.6)$$

төрт қатарлы матрица болып табылады.  $L^3$  арқалы тийкарғы параллелопипедтиң көлеми белгиленген, ал  $k(k_1, k_2, k_3)$  толқын векторының қураушылары  $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  пүттин санлары менен  $k_1 = \frac{2\pi}{L} n_1$  ҳәм тағы усы сыйықлы аңлатпалар арқалы байланысқан

$E$  энергиясы

$$K = \sqrt{k^2 + k_0^2}$$

шамасы менен

$$E = c\hbar\epsilon K \quad (6.4.7)$$

аңлатпасы арқалы байланысқан. Бул аңлатпаларда  $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$  ҳәм  $k_0 = \frac{m_0 c}{\hbar}$ .  $\epsilon$  параметри ҳәзирше белгисиз болып қалады.

$S$  операторының (6.4.2)-гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын есапқа алып биз толқын функциясынан қосымша шәртти бағындыра аламыз:

$$\frac{(\sigma \nabla)}{ik} \psi(k) = s\psi(k). \quad (6.4.8)$$

Бул аңлатпада  $s$  шамасы (6.4.4)-оператордың меншикли мәниси болып табылады.

(6.4.5)-толқын функциясын (6.4.8)- ҳәм (6.4.1)-теңлемелргеге қойып биз  $b$  матрицасын анықлау ушын еки теңлеме табамыз:

$$(ks - (\sigma k)) b = 0, \quad (6.4.9)$$

$$(\epsilon K - s\rho_1 k - \rho_3 k_0) b = 0. \quad (6.4.10)$$

(D.9)- ҳәм (D.10)-аңлатпалардағы  $\sigma_n$  ҳәм  $\rho_n$  матрикаларының мәнислерин және (6.4.6)-тендикти есапқа алып соңғы еки матриналық теңлемени теңлемелер системасы түринде жазамыз:

$$\begin{aligned}
 (sk - k_3) b_{1,3} &= k_{12}^* b_{2,4}, \\
 (sk + k_3) b_{2,4} &= k_{12} b_{1,3}, \\
 (\epsilon K - k_0) b_{1,2} &= sk b_{3,4}, \\
 (\epsilon K + k_0) b_{3,4} &= sk b_{1,2}.
 \end{aligned} \tag{6.4.11}$$

Бул аңлатпада

$$k_{12} = k_1 + ik_2, \quad k_{12}^* = k_1 - ik_2.$$

Егер

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} A_1 B_1 \\ A_1 B_2 \\ A_2 B_1 \\ A_2 B_2 \end{pmatrix} \tag{6.4.12}$$

деп болжасақ соңғы теңлемелерди биз қанаатландыра аламыз. Бундай жағдайда  $A_{1,2}$  ҳәм  $B_{1,2}$  шамаларын анықлау ушын төмендегилерге ийе боламыз:

$$\begin{aligned}
 (sk - k_3) B_1 &= k_{12}^* B_2, \\
 (sk + k_3) B_2 &= k_{12} B_1,
 \end{aligned} \tag{6.4.13}$$

$$\begin{aligned}
 (\epsilon K - k_0) A_1 &= sk A_2, \\
 (\epsilon K + k_0) A_2 &= sk A_1.
 \end{aligned} \tag{6.4.13a}$$

(6.4.13)-теңликтен  $s$  ушын меншикли мәнислерди аңсат табыуға болады:

$$s = \pm 1, \tag{6.4.14}$$

ал (6.4.13a) теңлигинен  $\epsilon$  ниң мәнисин аңсат табамыз:

$$\epsilon = \pm 1. \tag{6.4.14a}$$

Демек  $\epsilon$  параметри энергияның белгисин анықлады екен.  
Буннан кейин

$$\begin{aligned}
 b^+ b &= b_1^* b_1 + b_2^* b_2 + b_3^* b_3 + b_4^* b_4 = \\
 &= \frac{1}{4} (A_1^* A_1 + A_2^* A_2) (B_1^* B_1 + B_2^* B_2) = 1
 \end{aligned} \tag{6.4.15}$$

нормировка шәртін есапқа алып

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \sqrt{1 + \epsilon \frac{k_0}{K}}, \quad A_2 = \epsilon s \sqrt{1 - \epsilon \frac{k_0}{K}}, \\
 B_1 &= se^{-\frac{1}{2}i\varphi} \sqrt{1 + s \cos \theta}, \\
 B_2 &= e^{\frac{1}{2}i\varphi} \sqrt{1 - s \cos \theta}
 \end{aligned} \tag{6.4.16}$$

екенлигин табамыз. Бул аңлатпаларда  $\theta$  менен  $\varphi$  шамалары  $\mathbf{k}$  толқын векторының сфералық мүйешлери болып табылады ( $k_{12} = k \sin \theta e^{i\varphi}$ ,  $k_3 = k \cos \theta$ ).

Алынған нәтийжелердиң анализи ушын улыўмалықты бузбай биз импульсти  $\mathbf{z}$  көшери бағытында жайластырамыз ( $\theta = 0$ ,  $\varphi = 0$ ,  $k_x = k_y = 0$ ,  $k_z = k$ ). төрт

шешим сәйкес келеди. Бул шешимлер энергияның ( $\epsilon = \pm 1$ ) ямаса спинниң ( $s = \pm 1$ ) белгиси менен айрылады. Олар  $b$  матрицасы ушын төмендегидей мәнислерди береди:

$$b(k, s=1, \epsilon=\pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} \begin{array}{c} \sqrt{1 \pm \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \pm \sqrt{1 \mp \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ 0 \end{array} \end{cases},$$

$$b(k, s=-1, \epsilon=\pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} \begin{array}{c} \sqrt{1 \pm \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \mp \sqrt{1 \mp \frac{k_0}{K}} \end{array} \end{cases}.$$
(6.4.17)

$s = 1$  шешими спин импульске бағытланған жағдайды, ал  $s = -1$  болған жағдай спин импульске қарама-қарсы бағытланған жағдайды тәрийиплейди.  $\epsilon$  шамасының белгиси энергияның белгисин анықтайты. Бул матрикалардың

$$b^+(k, s', \epsilon') b(k, s, \epsilon) = \delta_{ss'} \delta_{\epsilon\epsilon'}$$

ортонормировка шәртин қанаатландыратуғынлығын көрсетиү қыйын емес.

б) Еркин электронның спинлик қәсийетлерин изертлеү. Тек оң мәнисли энергиялар менен шекленип бөлекшелердиң спинлик қәсийетлерин изертлеймиз ( $\epsilon = 1$ ). Импульс  $z$  көшери менен бағытлас болған жағдайдағы толқын функциясы төмендегидей түрге ийе болады:

$$\Psi(k, \epsilon=1) =$$

$$= \frac{1}{L^{3/2}\sqrt{2}} \left[ C_1 \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix} + C_{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ -\sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix} \right] e^{-ikCt + ikz}.$$
(6.4.18)

Спинниң қураўшысы импульс пенен бағытлас болған жағдайда ғана емес, ал спинниң қәлеген қураўшысы (орбиталық моментсиз) қозғалыс интегралы болып қалатуғын жағдайда да спин түснегигин киргизиү мүмкін болып шығады. Еркин қозғалың орын алған жағдайда бул сақланатуғын спин мынаған тең ( $\frac{1}{2}\hbar$  бирлигінде):

$$\sigma^0 = \frac{\mathbf{k}(\sigma\mathbf{k})}{k^2} + \rho_3 \frac{\sigma k^2 - \mathbf{k}(\sigma\mathbf{k})}{k^2}. \quad (6.4.19)$$

(6.4.19)-аңлатпа бойынша анықланған спинниң сақланыўы оның қәлеген қураўшысының гамильтониан менен коммутиацияланыўына байланыслы келип шығады

Егер импульс  $z$  көшери бағытында бағытланған болса, онда  $\sigma^0$  операторының  $\sigma_z^0$  импульси бағытындағы ҳәм импульске перпендикуляр бағытланған  $\sigma_x^0$  ҳәм  $\sigma_y^0$  қураўшылары сәйкес төмендегилерге тең:

$$\sigma_z^0 = \frac{(\sigma\mathbf{k})}{k} = \sigma_3, \quad \sigma_x^0 = \rho_3 \sigma_1, \quad \sigma_y^0 = \rho_3 \sigma_2.$$

Бул оператордың меншикли мәнислерин  $s^0$  арқалы белгилеп төмендегилерди табамыз:

бойлық қураўшысы ушын

$$s_3^0 = \int \psi^+ \sigma_3 \psi d^3x = C_1^* C_1 - C_{-1}^* C_{-1};$$

көлденең қураўшылар ушын

$$\begin{aligned} s_1^0 &= \int \psi^+ \rho_3 \sigma_1 \psi d^3x = C_{-1}^* C_1 + C_1^* C_{-1}, \\ s_2^0 &= i(C_{-1}^* C_1 - C_1^* C_{-1}). \end{aligned}$$

Егер биз толқын функциясын ҳәр қыйлы энергияларға ийе (соның ишинде ҳәм терис энергияға да ийе) ҳаллардың қосындысы сыптында сайлап алатуғын болсақ, онда орташа мәнислерди есаплағанда ўақытлық ағзалар жоғалады, себеби улыўмаласқан спин операторы гамильтониан менен коммутацияланады. Усының менен бирге қозғалыс интеграллары да (яғни гамильтониан менен коммутацияланатуғын) болып табылатуғын ҳәр қыйлы операторлардың коммутативлик емеслиги системаның айнаған система екенлигин билдиреди (берилген импульс пенен энергияға спиннин ҳәр қыйлы бағытлары сәйкес келеди). Усыған байланыслы  $s^0$  векторының орташа мәниси  $C_1$  ҳәм  $C_{-1}$  амплитудаларының ҳәр қыйлы комбинацияларынан ғәрезли болады.  $s^0$  векторының үш өлшемли бирлик вектор екенлигин көрсетиүге болады. Себеби  $(s_1^0)^2 + (s_2^0)^2 + (s_3^0)^2 = (C_1^* C_1 + C_{-1}^* C_{-1})^2 = 1$ , ал оның қураўшылары Лоренц бурыўларында

$$\begin{aligned} s_3'^0 &= s_3^0 \cos \gamma + s_1^0 \sin \gamma, \\ s_1'^0 &= s_1^0 \cos \gamma - s_3^0 \sin \gamma, \quad s_2'^0 = s_2^0 \end{aligned} \tag{6.4.20}$$

нызамы бойынша түрленеди. Бул аңлатпада

$$\begin{aligned} \cos \gamma &= \frac{\beta_1 - \beta \cos \vartheta}{B}, \quad \sin \gamma = \frac{\beta \sqrt{1 - \beta_1^2} \sin \vartheta}{B}, \\ B &= \sqrt{(\beta_1 - \beta \cos \vartheta)^2 + \beta^2 (1 - \beta_1^2) \sin^2 \vartheta}. \end{aligned} \tag{6.4.21}$$

Бул аңлатпада бөлекшениң дәслепки координаталар системасындағы тезлиги болған  $c\beta_1 = c \frac{k}{K}$  шамасы  $z$  көшери бағытында бағытланған.  $z$  көшери менен арасындағы мүйеш  $\vartheta$  болған штрихланған координаталар системасының тезлиги  $c\beta$  шамасына тең. Штрихланған координаталар системасының тезлиги  $zx$  тегислигинге жатыўы керек.  $s_3'^0$  шамасы болса импульстиң жаңа бағытына салыстырғандағы спиннин өзіншілігі қураўшысы. Буннан үш өлшемли бирлик вектордың Лоренц түрлендириўлеринен кейин де үш өлшемли бирлик вектор болып қалатуғынлығы келип шығады.

Енди спираллықты анықтаймыз. Спираллық деп  $s_3^0 = 1$  ( $C_1 = 1, C_{-1} = 0$ ) шәрти орынланғанда импульске салыстырғандағы поляризация векторының айланыўын айтамыз. Бул жағдайда (6.4.18)-аңлатпадан көринип турғанында

$$\sigma_x^0 \psi = -i \sigma_y^0 \psi. \tag{6.4.21a}$$

Усының менен бирге толқын функциясының ўақыттан ғәрзелигин есапқа алып (яғни  $\psi \sim e^{-icKt}$  ғәрзелигин) айланыудың  $x$  тегислигінде ( $x$  көшеринен у көшерине қарай) жүзеге келетуғынлығын табамыз (бул тегислик импульске, яғни  $z$  көшерине перпендикуляр). Демек оң координаталар системасында  $s_3^0 = 1$  болған жағдай оң бурғы бойынша спираллықты, ал шеп координаталар системасында шеп бурғы болынша спираллықты тәрийиплейди. Бул нәтийже тәбийи нәтийже болып табылады. Себеби  $s_3^0 = (s^0 k^0)$  скаляр көбеймесинде  $k^0$  импульстиң бирлик поляр векторы, ал  $s^0$  болса спинниң бирлик аксиаллық векторы болып табылады. Оң координаталар системасынан терис координаталар системасына өткенде  $k^0$  векторының бағыты қарама-қарсы бағытқа өзгереди, ал  $s^0$  аксиаллық бирлик векторы бағытын өзгертпейди (яғни бул жағдайда тек спираллықтың математикалық формасы ғана өзгереди).

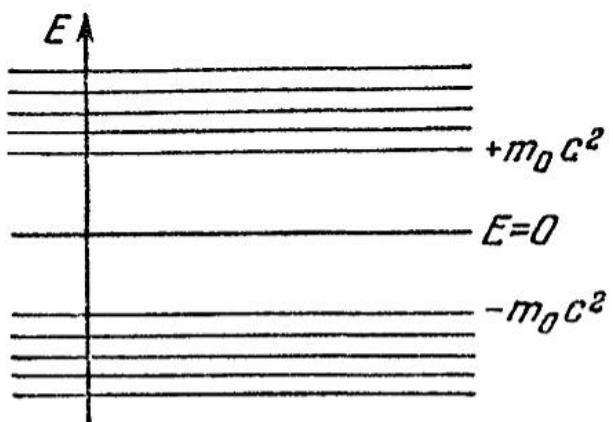
в) Терис энергияға иие ҳаллар. «Тесикшелердин» Дирак теориясы. Позитронның ашылыұы. Оң мәниске иие энергияға иие ҳаллар менен ( $\varepsilon = 1$ ) [(6.4.18) шешимин қараңыз] Дирак теориясы терис мәнисли энергияларға сәйкес келетуғын ( $\varepsilon = -1$ ) шешимлерге иие:

$$E = -c\hbar K. \quad (6.4.21б)$$

Бизлер терис энергияға иие шешимлердиң тек Дирак теориясына тән емес екенлигин, бундай шешимлердиң қәлеген релятивисттик теорияда, ҳэтте классикалық теорияда да пайда болатуғынлығын аңғарамыз. Ҳақыйқатында да еркин бөлекшениң энергиясы оның массасы ҳәм импульси менен былайынша байланысқан

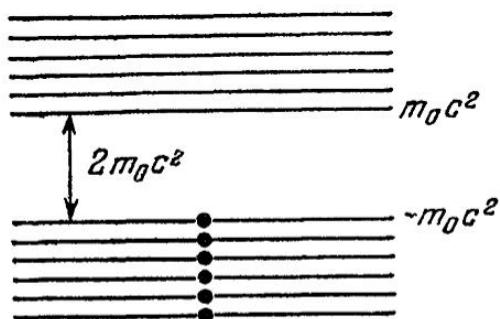
$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}$$

Демек еркин бөлекшениң энергиясы ушын теңдей ҳұқыққа иие еки шешим орын алады деген сөз. Соның менен бирге энергияның мәнислериниң еки обласы (оң ҳәм терис мәниске иие энергиялар)  $2m_0 c^2$  шамасына тең интервалға айрылған (сүүретте келтирилген). Бириңи рет қарағанда терис энергияға иие ҳаллар ҳақыйқатлықта сәйкес келмейтуғындай болып көринеди. Себеби терис энергиялар обласы шексизликке шекем дауам етеди ( $E = -\infty$ ) ҳәм сонлықтан ең тәменги энергетикалық ҳал болмайды. Ондай болса әдеттеги ҳаллардың ҳеш қайсысы да орнықлы бола алмайды, себеби барлық ўақытта да тәменирек энергетикалық ҳалға спонтан өтиўдидің жүзеге келийи мүмкін. Соның менен бирге терис массаға (яғни терис мәнисли энергияға) иие бөлекшениң қәсийетлери әдеттегидей болмайды: мысалы оң массаға иие бөлекше менен тартысында ол сол оң массаға иие бөлекшеден ийтерилийи керек. Дара жағдайда қыялымызда массаларының белгилери ҳәр қыйлы болған электронлар бир бири менен тәсир етискенде оң массаға иие электронның терис массаға иие электроннаң қашыұы, ал терис массаға иие электронның оң массаға иие электронды қуұыұы керек болады. Себеби олардың салмақ орайының бир ноқатта қозғалмай қалыұы керек.



Еркин Дирак бөлекшесиниң  
энергиясының мүмкін болған  
қәддилери

Классикалық физикада терис мәниске ийе болған ҳаллар мәниске ийе емес ҳәм сонлықтан бундай ҳалларды қарамайды. Себеби бөлекше қозғалғанда оның энергиясы ұзлиksiz өзгереди ҳәм оң энергияға ийе ҳалдан терис мәнисли энергияға ийе ҳалға энергияның секирмелі түрде  $\Delta E \geq 2m_0c^2$  шамасына өзгериүй мүмкін емес. Сонлықтан ўақыттың баслағыш моментіндегі терис энергияға ийе ҳалларды жоқ етип, буннан кейин оларды пүткіллей итибарға алмауымыз мүмкін.



Электрон-позитрон вакуумың ноллик ҳалының схемасы.



Электрон-позитрон жубының пайда болыў схемасы.

Квантлық теориядағы жағдай пүткіллей басқаша. Бул теория бойынша тек ұзлиksiz спектрге емес, ал дискрет спектрге ийе ҳаллар арасында да өтиўлердин жүзеге келийи мүмкін. Енди терис энергияға ийе ҳалларды механикалық түрде дыққаттан алып таслаўға болмайды. Себеби  $+m_0c^2$  энергиясына ийе ҳалдан  $-m_0c^2$  энергияға ийе ҳалға өтиўдиң итималлығы нолге тең болмай шығады.

Электронлардың терис энергияға ийе ҳалларға өтийинен қутылыў ушын Дирак 1931-жылы терис энергияға ийе қәддилердин барлығы толған деген идеяны усынды (сүүретте келтирілген). Усының нәтийжесинде әдеттеги жағдайларда оң энергияға ийе электронлар терис энергияға ийе қәддилерге өте алмайды.

Енди  $E > 2m_0c^2$  энергияға ийе гамма-квант вакуумың терис энергияға ийе электронына тәсир етип оны оң энергияға ийе ҳалға өткереди деп ойлайық. Бундай жағдайда мысалы ядро тәрепинен жутылған гамма-кванттың орнына оң энергияға ийе электрон ҳәм оның менен бирге электронлар тәрепинен толтырылған терис энергетикалық қәддилер фонында «тесикше» пайда болады (Электрон-позитрон жубының пайда болыў схемасы сүүретте көрсетілген).

Дирак гипотезасының ең әхмийетли табысы соннан ибарат, ол бул «тесикшени» массасы оң ҳәм электронның массасына тең, бирақ заряды қарама-қарсы белгиге ийе бөлекше (позитрон) деп түсіндірди. Ҳақыйқатында да дәслепки моментте бөлекшелер болмаған болсын. Бундай жағдайда фонның ноллик энергиясы  $E_{\text{вак}}$  терис энергиялық ҳаллардағы электронлардың  $n_-$  энергияларының қосындысына

тең:

$$E_{\text{вак}} = \sum_{n'_-} E_{n'_-}, \quad (6.4.22)$$

ал ноллик заряд болса

$$e_{\text{вак}} = - \sum_{n'_-} e_0 \quad (6.4.23)$$

шамасына тең.

Солай етип ҳақыйкый бөлекше болмаған жағдайда «тесикшелер» теориясы көз-қараслары бойынша оң энергияға ийе барлық ҳаллардың бос екенлигин, ал терис энергияға ийе барлық ҳаллардың ийеленген екенлигин аңғартады. Бул ҳалды биз ноллик ҳал деп қабыл етемиз (Электрон-позитрон вакуумның ноллик ҳалының схемасы сүүретте көрсетилген).

Электрон  $n_-$  терис энергияға ийе ҳалдан  $n_+$  оң энергияға ийе базы бир ҳалға өткен жағдайда системаның энергиясының улыўмалық өзгериси

$$\Delta E = E_{n_+} + \sum'_{n'_-} E_{n'_-} - \sum_{n'_-} E_{n'_-} \quad (6.4.24)$$

ямаса

$$\Delta E = E_{n_+} - E_{n_-} = E_{n_+} + |E_{n_-}| \quad (6.4.25)$$

шамалары пайда болған бөлекшелердин оң энергияларының қосындысына тең болады<sup>10</sup>.

Зарядқа қатнасы бар тап соңдай таллау «тесикшеге» сәйкес келетуғын бөлекшениң зарядының электронның зарядына қарама-қарсы болатуғынлығын көрсетеди:

$$e = -e_{n_+} - \sum'_{n'_-} e_0 + \sum_{n'_-} e_0 = -e_{n_+} + e_{n_-} = -e_0 + e_0. \quad (6.4.)$$

Солай етип электронның энергиясы терис болған ҳалдан энергиясы оң болған ҳалға өтийи (бундай өтийдің энергиясы  $2m_0c^2$  шамасынан үлкен болмаған гамма-квант жутылғанда жүзеге келетуғынлығы түснікли) еки бөлекшениң туўылышына алып келеди. Бул жағдайда электронның терис энергияға ийе ҳалын («тесикшे») оң  $+e_0$  зарядқа ийе ҳәм оң энергияға ийе бөлекше тәрепинен ийеленген ҳал деп қарауға болады<sup>11</sup>. Дирак тәрепинен болжап айтылған усындағы бөлекше Андерсон тәрепинен 1932-жылды космослық нурлардың қурамында ашылды.

Енди Дирак теориясы электрон менен бир қатарда толқын функциясы Дирак теңлемесин энергияның оң мәниси менен ҳәм зарядтың да оң мәниси менен қанаатландыратуғын позитронды да қосып алады.

<sup>10</sup> Сумма белгисинин үстиндеғи штрих ( $\Sigma'$ ) сумма алғыдың  $n'_- = n_-$  ҳалдан басқа барлық  $n'_-$  ҳаллары бойынша алынатуғынлығын аңғартады.

<sup>11</sup> Майданның кванттық теориясының усылларын пайдаланып зарядтың белгисине қарата симметриялы болған электрон-позитрон вакуумның теориясын дөретиүге болатуғынлығын аңғарамыз. Бирақ ҳәтте биз қарап атырған электронлар менен позитронларға қарата симметриялы болмаған теория (Электрон – бөлекше, ал позитрон “тесикше”) тийкарында да бөлекшелердин бир бирине айланыуыны менен байланыслы болған көп кубылысларды көргизбели түрде түснідириүге болады.

Дирак теориясы биз қарап атырған процесске қарама-қарсы процессти де бийкарламайды: «тесикше» бар болса оң мәнисли энергияға ийе электрон терис энергияға ийе ҳалға өте алады. Бул жағдайда электрон ҳәм позитрон гамма-квантларына айланады. Бундай айланыста орын алатуғын энергия менен импульстүрін сақланып нызамлары пайда болған гамма-квантларының санының екиден кем болмауын талап етеди.

г) Электрон-позитронлық вакуум ҳаққында түснік. Электромагнит вакуум менен бир қатарда электрон-позитронлық вакуум ҳәм басқа да бөлекшелердин вакуумлери бар. Барлық майданлар ушын мәлим дәрежеде улыўмалық болған екинши гезектеги квантланып усылы электрон-позитрон вакуумның тәсирин есапқа алыўға мүмкіншилик береди.

Хәзирги үақытлардағы майданың квантлық теорияда ҳәр қылыш бөлекшелердин вакуумлеринин қәсийеттери оғада әхмийетли орынды ийелейди. Вакуум биринши гезекте бөлекшелер арасындағы тәсирлесіўлерди тәмииинлейди. Мысалы электромагнит тәсирлесіўди (Кулон нызамын) еки зарядтың электромагнит вакуум арқалы тәсирлесіўиниң нәтийжеси деп қараўға болады. Бундай жағдайда бир электрон «псевдофотон» (оны көбінесе виртуаллық фотон деп атайды) шығарады, ал екиншиси оны жутады. Солай етип электр майданы электромагнит вакуумның қозған ҳалы болып табылады.

Екинши тәрептен вакуум өзине тән резервуар болып табылады. Вакуумнан ҳақыйқый бөлекшелерди (олар туүйлғанда) алады (бөлип алады) ҳәм аннигиляцияның нәтийжесинде сол бөлекшелер вакуумге «өтеди» (яmasa «вакуумге айланады»). Электрон-позитронлық вакуум мәниси бойынша биз ушын таныс болған электронлардың терис энергиялы ҳаллардағы фонды болып табылады. Тилекке қарсы бундай вакуум классикалық аналогқа ийе емес ҳәм сонлықтан электромагниттик вакуум жағдайындағы ярым классикалық түснідиригүе мүмкіншилик бермейди. Ядроның Кулон майданы (электр майданы) бул вакуумды поляризациялай алады (яғни электрон диэлектрикте жайласқан жағдайдағыдан айқалда болады). Усының нәтийжесинде

$$V_{\text{э.-п}} = -\frac{4}{15} e_0^2 a \left( \frac{\hbar}{m_0 c} \right)^2 \delta(r) \quad (6.4.27)$$

аңлатпасы менен анықланатуғын қосымша тәсирлесіў энергиясы пайда болады.

Электрон-позитрон вакуум әсиресе электронның магнитлик қәсийетине құшлы тәсир етеди. Усының салдарынан электронның магнит моменти Бор магнетонынан үлкен болатуғынлығын Швингер көрсетти:

$$\mu = -\mu_0 \left( 1 + \frac{a}{2\pi} \right). \quad (6.4.28)$$

Электронның магнит моментине қосылатуғын қосымта

$$\Delta\mu_{\text{э.-п}} = - \left( \frac{a}{2\pi} - 0,328 \frac{a^2}{\pi^2} + 0,13 \frac{a^3}{\pi^3} \right) \mu_0 = -0,0011596 \mu_0 \quad (6.4.29)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады ҳәм алынған шама радиоспектроскопиялық усыллардың жәрдеминде алынған эксперименталлық нәтийжелерге жақсы сәйкес келеди [(20.35)-аңлатпаға қараңыз].

д) Позитрон ушын толқын теңлемеси. Энергия ушын терис мәниске ийе шешимлердин электромагнит майданы бар болған жағдайлардағы шешимлердин физикалық мәнисин анықлау ушын Дирактың

$$\left\{ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi - c \left[ a_1 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) + a_2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) + a_3 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \psi = 0 \quad (6.4.30)$$

тийкарғы теңлемеси менен бир қатарда комплексли-түйинлес теңлемени де жазамыз:

$$\left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + c \left[ a_1 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right) - a_2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} A_y \right) + a_3 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \psi^* = 0. \quad (6.4.31)$$

Егер  $a_1^* = a_1, a_2^* = -a_2, a_3^* = a_3, \rho_3^* = \rho_3$  екенлигин, ал

$$\psi^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \psi_3^* \\ \psi_4^* \end{pmatrix} \quad (6.4.32)$$

комплексли-түйинлес толқын функциясының эрмитлик-түйинлес

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \quad (6.4.33)$$

толқын функциясынан айырмаға ийе екенлигин есапқа алғанда (6.4.31)-аңлатпаны аңсат алыға болады.

Комплексли-түйинлес теңлемениң эрмитлик-түйинлес теңлемеге пүткіллей эквивалент екенлигин аңғарамыз:

$$\psi^+ \left\{ \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) - c \left[ a_1 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) + a_2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) + a_3 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} = 0. \quad (6.4.34)$$

Бул аңлатпаның дұрыслығына (6.4.31)-теңлемени де, (6.4.34)-теңлемени де төрт теңлемелер системасы түринде жазсақ ҳәм толқын функциясынан соң турған оператордың

$$\psi^+ \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -\frac{\partial \psi^+}{\partial t}, \quad \psi^+ \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow -\frac{\partial \psi^+}{\partial x} \quad (6.4.35)$$

тәсир етиў қағыйдаларын есапқа алсақ (6.4.34)-аңлатпаның дұрыслығына аңсат исениүге болады

Дирактың комплексли-түйинлес теңлемесинде

$$\psi^* = i a_2 \rho_3 \psi \quad (6.4.36)$$

алмастырыуын әмелге асырамыз. Бундай жағдайда Дирак матрицаларының коммутация қағыйдаларын есапқа алып толқын функциясы ушын

$$\left\{ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi - c \left[ \alpha_1 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \tilde{\Psi} = 0, \quad (6.4.37)$$

теңлемесин табамыз. Бул теңлеме позитронның қозғалысын тәрийиплейди. Себеби бул теңлеме тийкарғы (6.4.30)-теңлемеден  $e$  зарядының  $-e$  менен алмасқанлығы менен айрылады. Усының менен бирге  $\psi(r, t) = e^{-i \frac{|E|}{\hbar} t} \Psi(r)$  ҳалы оң энергиялы ҳал, ал  $\psi^*(r, t) = e^{-i \frac{|E|}{\hbar} t} \Psi^*(r)$  ҳалы терис энергияға ийе ҳал деп түсіндірілетуғын болғанлықтан биз  $\tilde{\Psi}$  функциясындағы энергияны  $\Psi^*$  функциясындағы энергиядан басқа деп түсіниүимиз керек. Басқа сөзлер менен айтқанда (6.4.37)-теңлемедеги оң энергияға ийе ҳалларды позитронларға, ал терис энергияға ийе ҳалларды электронларға тийисли деп қараў керек.

## Мәселелер ҳәм олардың шешимлери

### 1-мәселе. Итималлықтың сақланыў нызамы

$\psi^*\psi d^3x$  аңлатпасы  $d^3x$  көлеминдеги бөлекшени табыудың итималлығына тең етип алынатуғын

$$\int \psi^*\psi d^3x = 1 \quad (1.1)$$

нормировка шәртиниң итималлық бойынша интерпретациясы сақланыў нызамына сөзсиз алып келеди. Бул нызамды ҳәм классикалық көз-қарасларда турып алынған нәтийжелердин мүмкін болған интерпретациясын табыңыз.

Шешими. Биз излеп атырған сақланыў нызамы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{s} = 0 \quad (1.2)$$

үзликсизлик теңлемеси түрине ийе болыўы керек. Бул аңлатпада

$$\rho = \psi^*\psi \quad (1.3)$$

арқалы итималлық тығыздығы, ал  $s$  арқалы итималлық тоғының тығыздығы белгиленген.  $\rho$  шамасы  $\psi$  ҳәм  $\psi^*$  шамаларына қарата бисызықлы форма (билинейная форма) болғанлықтан (1.2)-теңлемени еки жағдайда да бир

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

гамильтонианға ийе еки Шредингер теңлемесиниң комбинациясының нәтийжесинде алыў мүмкін:

$$H\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad H\psi^* = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t}. \quad (1.5)$$

Солай етип

$$\psi^*H\psi - \psi H\psi^* = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

теңлемесин аламыз. (1.2)-аңлатпаға сәйкес бул қатнастың шеп тәрепи дивергенция түринде жазылыўы керек. Ҳақыйқатында да

$$\psi^*H\psi - \psi H\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{div} (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

Сонлықтан  $s$  векторы ушын

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \quad (1.6)$$

аңлатпасын жаза аламыз.

Алынған нәтийжеге классикалық интерпретация бериў ушын төмендегидей таллаўларды өткеремиз.

Егер  $\rho$  шамасын да,  $s$  шамасын да  $m$  массаға көбейтсек, онда нәтийжеде биз массаның тығызлығы  $\rho_m$  ди ҳәм импульс тығызлығы  $\mathbf{g}$  ны аламыз:

$$\rho_m = m\rho, \quad \mathbf{g} = m\mathbf{s}. \quad (1.7)$$

Бундай жағдайда үзликсизлик теңлемесин массаның сақланыў нызамы сыпатында интерпретациялаў (түсндириў) мүмкін. Тап усындај жоллар менен бөлекшениң заряды  $e$  ге көбейтип зарядтың тығызлығы  $\rho_e$  ге ҳәм электр тоғының тығызлығы  $j$  ге келемиз:

$$\rho_e = e\rho, \quad \mathbf{j} = e\mathbf{s}. \quad (1.8)$$

Ал (1.2)-теңлеме зарядтың сақланыў нызамына айланады.

Массаның сақланыў нызамының ҳәм зарядтың сақланыў нызамына уқсас екенлиги дыққатқа ылайық. Себеби олардың екеуи де бир бөлекшениң конвекциялық тоғы менен байланыслы.

(1.6)-хәм (1.7)-аңлатпалардан алынған Шредингер майданының толық импульси ушын жазылған

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{g} d^3x = \frac{\hbar}{2i} \int (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) d^3x$$

аңлатпасын екинши қосылыўшыны бөлеклеп интеграллаудың жәрдеминде

$$\mathbf{p} = \int \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi d^3x \quad (1.9)$$

түрине алып келиўге болады. Бул  $\psi$  квантлық ҳалдағы  $(\hbar/i)\nabla$  импульс операторының орташа мәнисине берилген анықлама менен сәйкес келеди (3-мәселеге қараңыз).

## 2-мәселе. Шредингердин вариациялық принципи

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi = E\psi \quad (2.1)$$

Шредингер теңлемесин энергия ушын вариациялық принцип пенен алмастырыңыз.

Шешими. (2.1)-дифференциаллық теңлемениң қәлеген  $\psi$  шешими байланыс теңлемесин қанаатландырады (бул дискрет спектр ҳаллары ушын дұрыс):

$$\int \psi^* \psi d^3x = 1. \quad (2.2)$$

Сонлықтан энергия ушын аңлатпа (2.1)-теңлемени  $\psi^*$  функциясына көбейтиў ҳәм буннан кейин барлық кеңислик бойынша интеграллаў жолы менен алынады:

$$E = \int \psi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi \right] d^3x. \quad (2.3)$$

Грин формуласын есапқа алып бириңиши ағзаны бөлеклерге бөлип интеграллаў

$$\int \psi^* \nabla^2 \psi d^3x = \oint \psi^* \nabla \psi d\mathbf{f} - \int (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) d^3x \quad (2.4)$$

аңлатпасын береди. Егер  $\psi$  шешими үлкен  $r$  қашықтыларында

$$\psi \sim r^{-3/2-\epsilon}, \quad \epsilon > 0$$

аңлатпасына салыстырғанда әстерек киширейетуғын болса ғана (2.2)-нормировкалауышы интеграл бар болады. Бирақ бул шәрт орынланғанда шексиз қашықлатылған сфераның бети бойынша алынған (2.4) теги интеграл жоғалады. Соныңтан (2.3)-аңлатпаны былайынша жаза аламыз

$$E = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) + \psi^* V(\mathbf{r}) \psi \right] d^3x. \quad (2.5)$$

Бул теңдик  $\psi$  ҳәм  $\psi^*$  функцияларына қарата да, (2.2)-нормировка шәртине қарата да симметриялы. Соныңтан биз оны тап соңдай табыс пенен (2.1)-теңлемеге комплексли түйинлес болған

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V(\mathbf{r}) \psi^* = E \psi^* \quad (2.1a)$$

теңлемесинен де алған болар едик.

(2.1)- ҳәм (2.1a) теңлемелердин (2.2) байланысы бар болған жағдайлар ушын (2.5)-интегралдың экстремумы ҳақындағы вариациялық мәселе ушын Эйлер теңлемеси екенлигин көрсетиү қыйын емес. Бирақ биз вариациялық есаплау аппаратынан пайдаланбаймыз, ал туурыйдан-туурый дәлиллеуди қолланамыз.

Мейли  $\psi_\lambda$  арқалы  $E_\lambda$  меншикли мәнисине тийисли (2.1)-диффренциаллық теңлемениң шешими болсын. Бул теңлеме (2.5)-интегралға  $E_\lambda$  нин мәнисин береди. Енди  $\psi_\lambda$  функциясын оған жақын болған  $\psi_\lambda + \delta\psi$  функциясы менен алмастырамыз. Бул жерде  $\delta\psi$  арқалы киши, бирақ ықтыварлы вариация белгиленген. Егер (2.2)-шәртти  $\psi_\lambda + \delta\psi$  функциясы да  $\psi_\lambda$  функциясы қанаатландыратуғындей дәрежеде қанаатландырады деп есапламасақ, онда

$$\int (\psi_\lambda^* + \delta\psi^*) (\psi_\lambda + \delta\psi) d^3x = 1$$

ҳәм усыған сәйкес

$$\int (\psi_\lambda \delta\psi^* + \psi_\lambda^* \delta\psi) d^3x + \int (\delta\psi^* \delta\psi) d^3x = 0. \quad (2.6)$$

$\psi_\lambda + \delta\psi$  функциясын (2.5)-интегралға қойғаннан кейин энергия ушын  $E_\lambda + \delta E_\lambda$  аңлатпасын аламыз. Бул жерде

$$\begin{aligned} \delta E_\lambda = & \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla \psi_\lambda^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + (\nabla \psi_\lambda) \cdot (\nabla \delta\psi^*)] + V(\psi_\lambda \delta\psi^* + \psi_\lambda^* \delta\psi) \right\} d^3x + \\ & + \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \delta\psi^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + V \delta\psi^* \delta\psi \right] d^3x. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Бул аңлатпада бириңиши қатарда кишилиги бойынша бириңиши, ал екинши қатарда екинши тәртипли ағзалар жыйналған. Бурын бөлекке бөлип интеграллаўларды орынлаған едик. Енди де бөлеклерге бөлип, бирақ қарама-қарсы

бағытта интегралласақ биз биринши қатарда  $\delta\psi\nabla^2\psi_\lambda^*$  ҳәм  $\delta\psi^*\nabla^2\psi_\lambda$  аңлатпаларына, ал бундан кейин тууындылардан қутылыў ушын (2.1)- ҳәм (2.1a)-теңлемелерден пайдаланыўымыз мүмкин. Усының нәтийжесинде

$$\int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\psi_\lambda^*) \cdot (\nabla\delta\psi) + V\psi_\lambda^*\delta\psi \right] d^3x = E_\lambda \int \delta\psi\psi_\lambda^* d^3x$$

аңлатпасына ийе боламыз. Соңлықтан, егер (2.7)-теңликти есапқа алатуғын болсақ, онда (2.7)-қатнастың биринши қатары кишилиги бойынша екинши тәртипли үлес береди:

$$\delta E_\lambda = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\delta\psi|^2 + (V - E_\lambda) |\delta\psi|^2 \right] d^3x. \quad (2.8)$$

Бизде  $\delta\psi$  ямаса  $\delta\psi^*$  бойынша сзықлы ағзалар қалмағанлықтан  $E_\lambda$  энергиясы Шредингер теңлемесиниң щешимлери болған  $\psi_\lambda$  лер ушын  $\delta\psi = 0$  болған жағдайда минимумға ямаса максимумға ийе болады. Экстремумның неден ибарат екенлиги – максимум бе ямаса минимум ба екенлиги (2.8)-аңлатпаның белгисинен ғәрээли болады.

Бул мәселени теренирек түснүү ушын (2.1)-теңлемениң шешимлериниң жыйнағы болған  $\{\psi_\lambda\}$  функцияларынан пайдаланамыз ҳәм олардан функциялардың ортогоналлық системасын дүземиз:

$$\int \psi_\mu^* \psi_\nu d^3x = \delta_{\mu\nu}. \quad (2.9)$$

Енди функциялардың бул системасы бойынша  $\delta\psi$  дин үзүүлүштөрүүн жаямыз:

$$\delta\psi = \sum_v c_v \psi_v. \quad (2.10)$$

Бундай жағдайда (2.8)-теңлик

$$\begin{aligned} \delta E_\lambda &= \sum_\mu \sum_v c_\mu^* c_v \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\psi_\mu^*) \cdot (\nabla\psi_v) + (V - E_\lambda) \psi_\mu^* \psi_v \right] d^3x = \\ &= \sum_\mu \sum_v c_\mu^* c_v \int \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_v + (V - E_\lambda) \psi_v \right] \psi_\mu^* d^3x \end{aligned}$$

түрине ямаса (2.9) бенен (2.1) ди есапқа алсақ

$$\delta E_\lambda = \sum_\mu |c_\mu|^2 (E_\mu - E_\lambda) \quad (2.11)$$

түрине ийе болады. Егер  $E_\lambda$  энергиясы тийкарғы ҳалға тийисли болса, онда барлық  $\psi_\mu$  ҳаллары ушын  $E_\mu \geq E_\lambda$  ҳәм вариациялық принцип  $E_\lambda$  ушын минимумды береди. Себеби (2.11)-сумма оң мәниске ийе. Қозған ҳаллар ушын бундай улыўмалық қағыйданы келтирип шығарыўға болмайды. Себеби бундай жағдайда (2.11)-суммада оң мәнисли де, терис мәнисли де қосылыўшылар бар болады.

### 3-мәселе. Кеңисликтік орташалар ушын классикалық механика

Кеңисликтік орташалар (математикалық күтиўлер) ушын классикалық ньютонылық механиканың тиімділіктерінде болған

$$\frac{dp}{dt} = \mathbf{F} \quad (3.1)$$

теңлемесиниң кванттық механиканда да орын алғатуғынлығын көрсетиңиз. Бул формулаларда  $\mathbf{P}$  импульсти, ал  $\mathbf{F}$  күшти аңғартады.

**Шешими:** Мейли  $\mathbf{F}$  күши потенциал  $\mathbf{F} = -\nabla V$  потенциал арқалы аңлатылатуғын, ал  $\mathbf{P}$  импульс  $(\hbar/i)\nabla$  операторы менен алмастырылған болсын. Бизди қызықтыратуғын орташалар

$$\mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \nabla \psi d^3x, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{F} = - \int \psi^* (\nabla V) \psi d^3x \quad (3.3)$$

теңликлериниң жәрдемінде анықланады. Бизиң алдымызда турған мәселе егер  $\psi$  ҳәм  $\psi^*$  функциялары

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi, \\ +\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V \psi^* \end{aligned} \quad (3.4)$$

Шредингер теңлемесин қанаатландыратуғын болса (3.2)- ҳәм (3.3)-интеграллардың (3.1)-теңлемени қанаатландыратуғынлығын анықлаудан ибарат.

Дәліллеўди биз (3.2)-аңлатпанды ўақыт бойынша дифференциаллаудан баслаймыз:

$$\dot{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \int (\dot{\psi}^* \nabla \psi + \psi^* \nabla \dot{\psi}) d^3x = \frac{\hbar}{i} \int (\dot{\psi}^* \nabla \psi - \dot{\psi} \nabla \psi^*) d^3x. \quad (3.5)$$

Биз жоқарыда екинши қосылыўшыны бөлеклерге бөлип интеграллағанда пайда болатуғын бетлик интегралдың үлесиниң нолге тең екенligин ҳәм сонлықтан оны қалдырып кетиўге болатуғынлығын есапқа алдық. Бул жерде (3.4)-теңлемелердин жәрдемінде  $\psi$  ҳәм  $\psi^*$  функцияларынан құтылыш

$$\dot{\mathbf{P}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int [(\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi) (\nabla \psi^*)] d^3x + \int (\psi^* V \nabla \psi + V \psi \nabla \psi^*) d^3x \quad (3.6)$$

аңлатпасын аламыз. Бөлеклерге бөлип интеграллаў

$$\int (\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) d^3x = - \int (\nabla \psi^*) (\nabla^2 \psi) d^3x$$

(3.5)-интегралдағы еки қосылыўшының бир бири менен жыйынатуғынлығын көрсетеди. (3.5)-аңлатпадан ең кейинде қалған қосындыны бөлеклерге бөлип интеграллауды қоллансақ

$$\mathbf{p} = \int \psi^* [V \nabla \psi - \nabla (V\psi)] d^3x$$

аңлатпасын аламыз. Ең ақырында

$$\nabla (V\psi) = V \nabla \psi + \psi \nabla V$$

формуласынан пайдаланып

$$\dot{\mathbf{p}} = - \int \psi^* (\nabla V) \psi d^3x = \mathbf{F}$$

теңлемесине келемиз. Биз буның дұрыслығын дәлиллеўимиз керек еди.

#### **4-мәселе. Қозғалыс мұғдарының моменти ушын классикалық нызамлар**

Кеңисликий орташа мәнислер ушын қозғалыс мұғдарының моменти  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  менен күш моменти  $\mathbf{T} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$  арасындағы классикалық

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{T} \quad (4.1)$$

байланысының кванттық механиканда да орын алатуғынлығын көрсетиңиз. Бул формулаларда  $\mathbf{P}$  импульсти, ал  $\mathbf{F}$  күшти аңғартады.

Шешими: Жоқарыдағы мәселедегидей кеңисликий орташаларды анықлаудан баслаймыз:

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla) \psi d^3x, \quad (4.2)$$

$$\mathbf{T} = - \int \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla V) \psi d^3x. \quad (4.3)$$

Бул жағдайда да егер  $\psi$  ҳәм  $\psi^*$  функциялары (3.4)-Шредингер теңлемесин қанаатландырады деп есаптаймыз.

Биз дәлиллеўди (4.2)-аңлатпаны ўақыт бойынша дифференциаллаудан баслаймыз:

$$\dot{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \int [\dot{\psi}^* (\mathbf{r} \times \nabla \psi) + \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla \dot{\psi})] d^3x.$$

Екинши қосылышыны

$$\psi^* \nabla \dot{\psi} = \nabla (\psi^* \dot{\psi}) - \dot{\psi} \nabla \psi^*$$

теңлигиниң жәрдеминде түрлендиримиз ҳәм бул теңликтиң оң тәрепиндеги биринши ағзаға буннан былай векторлық анализдин төмендегидей улыўмалық формуласын пайдаланыўға болатуғынлығын есапқа аламыз:

$$\int \mathbf{r} \times \nabla f d^3x = 0. \quad (4.4)$$

Бул аңлатпада  $f = \psi^* \psi$ . Бул

$$\dot{L} = \frac{\hbar^2}{i} \int \mathbf{r} \times (\dot{\psi}^* \nabla \psi - \dot{\psi} \nabla \psi^*) d^3x$$

аңлатпасын береди. Енди (3.4)-теңлемелердин жәрдеминде  $\psi$  ҳәм  $\psi^*$  функцияларынан қутылсақ мынаған иие боламыз:

$$\begin{aligned} \dot{L} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \int \mathbf{r} \times [(\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi) (\nabla \psi^*)] d^3x + \\ & + \int V \mathbf{r} \times (\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*) d^3x. \end{aligned} \quad (4.5)$$

$(\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi) (\nabla \psi^*) = \nabla [(\nabla \psi^*) (\nabla \psi)]$  теңлиги орынлы болғанлықтан бириңи интегралдың белгиси астындағы қаўсырманың ишиндеги аңлатпа  $f = (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi)$  скаляр функцияның градиенти болып табылады. Соныңтан (4.4) ке сәйкес бул интеграл жоғалады. Екинши интеграл белгиси астындағы қаўсырма ишиндеги аңлатпа  $\nabla (\psi^* \psi)$  да тең Буннан кейин

$$V \nabla (\psi^* \psi) = \nabla (V \psi^* \psi) - \psi^* \psi \nabla V$$

теңлигин пайдаланып ҳәм (4.4)-формуланың жәрдеминен және пайдаланып екинши интегралды

$$\int \mathbf{r} \times [V \nabla (\psi^* \psi)] d^3x = - \int \mathbf{r} \times (\psi^* \psi \nabla V) d^3x$$

түрине алып келемиз Бул аңлатпа күш моментиниң орташа мәниси ушын жазылған (4.3)-аңлатпаға сәйкес келеди.

## 5-мәселе. Энергияның сақланыў нызамы

Мейли Шредингер толқын майданының энергиясы 2-мәселедеги (2.5)-интегралының жәрдеминде тәрийипленетуғын болсын. Бундай жағдайда энергияның сақланыў нызамы

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{S} = 0 \quad (5.1)$$

түрине иие болыўы керек. Бул аңлатпада  $W$  арқалы энергияның тығыздығы, ал  $S$  арқалы энергия ағысының тығыздығы белгиленген. Қолайлы болған  $S$  Умов-Пойнтинг векторын конструкциялап энергияның сақланыў нызамын көлтирип шығарыңыз.

Шешими: (2.5)-теңлемеге сәйкес

$$E = \int W d^3x. \quad (5.2)$$

Бул жерде

$$W = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) (\nabla \psi) + \psi^* V \psi. \quad (5.3)$$

Бул аңлатпадағы бириңи ағза кинетикалық энергияның, ал екинши ағза потенциал энергияның тығыздығы. (5.1)-теңлемеге сәйкес бизге

$$\dot{W} = \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla\dot{\psi}^*) (\nabla\psi) + (\nabla\psi^*) (\nabla\dot{\psi})] + V(\dot{\psi}^*\psi + \psi^*\dot{\psi}) \quad (5.4)$$

тууындысы керек.

$$(\nabla\dot{\psi}^*) (\nabla\psi) = \nabla(\dot{\psi}^*\nabla\psi) - \dot{\psi}^*\nabla^2\psi$$

ХЭМ

$$(\nabla\psi^*) (\nabla\dot{\psi}) = \nabla(\dot{\psi}\nabla\psi^*) - \dot{\psi}\nabla^2\psi^*$$

болғанлықтан (5.4)-аңлатпаның кинетикалық энергия менен байланыслы болған бөлимин түрлөндөрийимиз хэм төмөндегидей түрде жазыуымыз мүмкін

$$\dot{W} = \nabla \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\psi}^*\nabla\psi + \dot{\psi}\nabla\psi^*) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \dot{\psi}^*\nabla^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m} \dot{\psi}\nabla^2\psi^* + \dot{\psi}V\psi + \dot{\psi}\psi^*. \quad (5.5)$$

(3.4)-Шредингер теңлемеси бизге соңғы қосылыуышыдағы кеңисликлик тууындыларды хэм потенциалды үақыт бойынша тууындылар менен алмастырыуға мүмкіншилик береди. Нәтийжеде алынған ағзалар бир бири менен жыйысады:

$$\dot{\psi}^* \left( -\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} \right) + \dot{\psi} \left( \frac{\hbar}{i} \dot{\psi}^* \right) = 0.$$

Сонлықтан (5.5)-теңлеме өзиниң формасы бойынша (5.1)-теңлеме менен бирдей, ал биз излеп атырған Умов-Пойнтинг векторы

$$\mathbf{S} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\psi}^*\nabla\psi + \dot{\psi}\nabla\psi^*) \quad (5.6)$$

аңлатпасының жәрдеминде аңлатылады.

## 6-мәселе. Эрмитлик түйинлеслик

$\Omega$  операторы менен эрмитлик түйинлес  $\Omega^\dagger$  операторы

$$\int (\Omega\psi)^* \phi \, d\tau = \int \psi^* \Omega^\dagger \phi \, d\tau \quad (6.1)$$

теңлигиниң жәрдеминде анықланады. Бул теңликті функционаллық анализдин белгилеўлери (символикасы) жәрдеминде былайынша жазыу мүмкін:

$$\langle \Omega\psi | \phi \rangle = \langle \psi | \Omega^\dagger \phi \rangle. \quad (6.16)$$

Бул аңлатпада  $\psi$  менен  $\phi$  лер

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1, \langle \phi | \phi \rangle = 1 \quad (6.2)$$

нормировка шәртлерине бағынатуғын ықтыйярлы функциялар.

Бул анықламаны матрицалық көрсетиў тилинде келтирип шығарыңыз.  $\Omega = \Omega^\dagger$  теңлиги менен анықланатуғын эрмитлик оператордың меншикли мәнислері

хақында не айта аласыз?

**Шешими.** Оператордың матрицалық көриниси  $\{u_v\}$  ортонормировкаланған функциялардың толық жыйнағын сайлап алыў менен анықланады:

$$\langle u_v | u_\mu \rangle = \delta_{\mu v}. \quad (6.3)$$

Ықтыярлы нормировкаланған  $\psi$  ҳәм  $\varphi$  функциялары ушын

$$\psi = \sum_v a_v u_v, \quad \varphi = \sum_\mu b_\mu u_\mu \quad (6.4)$$

түриндеги жайылар (қатарларға жайылар) орын алады. (6.4)-аңлатпаны (6.1)-анықламаға қойсақ

$$\sum_\mu \sum_v a_v^* b_\mu \langle \Omega u_v | u_\mu \rangle = \sum \sum a_v^* b_\mu \langle u_v | \Omega^\dagger | u_\mu \rangle$$

аңлатпасын аламыз. Теңлик  $\psi$  ҳәм  $\varphi$  функцияларының қәлеген жубы ушын орынлы деп болжаймыз. Соның ушын ҳәр бир қосылышты ушын өз алдына

$$\langle \Omega u_v | u_\mu \rangle = \langle u_v | \Omega^\dagger | u_\mu \rangle \quad (6.5)$$

теңлигиниң орынланыуы керек. Енди  $\{u_v\}$  толық жыйнағын  $\Omega^\dagger$  операторының матрицасын анықлау ушын пайдаланамыз. буның ушын (6.5)-теңликтин оң тәрепин былайынша түрлендиримиз:

$$\langle u_v | \Omega^\dagger | u_\mu \rangle = (\Omega^\dagger)_{v\mu}.$$

Шеп тәрепин болса, оны былайынша түрлендириў мүмкін:

$$\langle \Omega u_v | u_\mu \rangle = \int (\Omega u_v)^* u_\mu d\tau = \left[ \int u_\mu^* (\Omega u_v) d\tau \right]^* = \langle u_\mu | \Omega | u_v \rangle^* = \Omega_{\mu v}^*.$$

Демек  $\Omega$  ҳәм  $\Omega^\dagger$  матрицаларының матрицалық элементлери (6.5)-аңлатпаға сәйкес

$$(\Omega^\dagger)_{\mu v} = \Omega_{v\mu}^* \quad (6.6)$$

қатнасы арқалы байланысқан болыуы керек. Басқаша айтқанда эрмитлик түйинлес  $\Omega^\dagger$  матрицасының элементлери  $\Omega$  матрицасының элементлеринен транспонирлеу ( $\mu \leftrightarrow v$ ) ҳәм комплексли түйинлеслеу операцияларының жәрдеминде алынады екен.

(6.6)-қатнастың жәрдеминде биз  $\Omega^{\dagger\dagger} = \Omega$  теңлигин бирден алатуғынымызды атап етемиз.

$\Omega$  эрмитлик (өзине өзи түйинлес) матрицасы ушын (анықлама бойынша  $\Omega = \Omega^\dagger$ ) биз (6.6)-аңлатпаға сәйкес

$$\Omega_{\mu v} = \Omega_{v\mu}^* \quad (6.7)$$

екенлигине ийе боламыз. Диагоналлық  $\mu = v$  матрицалық элементлери ҳақында. Бундай тастыйықлау функциялардың қәлеген ортонормировкаланған жыйнағы ушын дұрыс (яғни гильберт кеңислигидеги координаталар системасының қәлеген түрде сайлап алыныуы ушын орынлы). Мысалы  $\{u_v\}$  жыйнағының

жәрдеминде  $\Omega_{\mu\nu}$  матрицасы диагоналлық түрге алып келинеди:

$$\Omega_{\mu\nu} = \omega_\mu \delta_{\mu\nu}. \quad (6.8)$$

$\omega_\mu$  шамаларының мәниси  $\Omega$  матриналарының меншикли мәнислері еди, сонлықтан эрмитлик матрицаның меншикли мәнислері ҳақыйқый болып табылады.

**Ескертиў:** Ең кейинги нәтийжеге байланыслы барлық физикалық шамалардың операторлары (бақланатуғын шамалар) эрмитлик болып табылады.

## 7-мәселе. Эрмитлик операторды қурыў

Классикалық  $xp_x$  көбеймесине сәйкес келетуғын квантлық механикалық операторды қурыңыз (дүзиңиз).

Шешими.

a)  $x$  ҳәм  $p_x$  операторлары коммутацияланбайды ҳәм

$$p_x x - x p_x = \frac{\hbar}{i} \quad (7.1)$$

орын алмастырыў қатнасын қанаатландырады. Бул теңликтин дұрыслығын координаталық көринисте жеңил тексерип көриў мүмкін. Бул аңлатпада

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (7.2)$$

Сонлықтан  $xp_x$  классикалық көбеймесине

$$\Omega = (1 - \alpha) xp_x + \alpha p_x x \quad (7.3)$$

түріндеги ҳәр бир оператор сәйкес келеди. Дәслеп  $\alpha$  турақтысын ҳақыйқый деп есаптаймыз. Бул турақтыны қәлеген  $\psi$  квантлық ҳал ушын  $\Omega$  шамасының орташа мәниси

$$\langle \Omega \rangle = \int \psi^* \Omega \psi d^3x = \text{хақыйқый шама} \quad (7.4)$$

болатуғындағы етип сайлап аламыз.  $p_x$  операторы ушын жазылған (7.2)-аңлатпаны пайдаланып (7.4)-теңлиkti жайылған түрде былайынша жазамыз:

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \left[ (1 - \alpha) x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) \right] d^3x = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha \psi \right) d^3x.$$

Енди  $\psi$  дин,

$$\psi = f + ig$$

хақыйқый бөлімин жормал бөлекинен айырсақ төмендеги аңлатпаны аламыз:

$$\begin{aligned}\langle \Omega \rangle = & \frac{\hbar}{i} \int \left[ x \left( f \frac{\partial f}{\partial x} + g \frac{\partial g}{\partial x} \right) + \alpha (f^2 + g^2) \right] d^3x + \\ & + \hbar \int x \left( f \frac{\partial g}{\partial x} - g \frac{\partial f}{\partial x} \right) d^3x.\end{aligned}$$

Бул аңлатпанаң оң тәрепиндеги екинши интеграл ҳақыйқый. Ал бириңи интеграл болса жormal ҳәм (7.4)-аңлатпаға сәйкес жоғалыуы керек. Соның менен биргө

$$\int (f^2 + g^2) d^3x = 1$$

ҳәм бул теңликті

$$\frac{1}{2} \int x \frac{\partial}{\partial x} (f^2 + g^2) d^3x = -\alpha$$

теңлиги түринде жазыў мүмкин. Бул теңлик болса бөлеклерге бөлип интеграллағаннан кейин

$$\alpha = \frac{1}{2} \quad (7.5)$$

мәнисин береди.

Солай етип  $\Omega$  операторының эрмитлигин тәмийинлеўши

$$\Omega = \frac{1}{2} (xp_x + p_x x) \quad (7.6)$$

симметриялық комбинациясы дұрыс болады.

Егер комплексли  $\alpha$  ға өтсек  $\alpha$  шамасының

$$\alpha = \frac{1}{2} + i\beta \quad (7.7)$$

түриндеги қәлеген түри пайдаға асады. Бул аңлатпада  $\beta$  арқалы ықтыйярлы ҳақыйқый сан белгиленген. Ҳақыйқатында бул жағдайда

$$\Omega = \frac{1}{2} (xp_x + p_x x) + i\beta (p_x x - xp_x) \quad (7.8)$$

ҳәм биз бириңи қосылыўшының орташа мәнисиниң ҳақыйқый екенлигин, екиншисин орташалағанда болса (7.1)-орын алмастырыў қатнасының орын алдынына байланыслы квантлық ҳалдың сайлап алыныўынан ғәрэзесиз турақты  $\beta\hbar$  үлесин беретуғынлығын көремиз. Демек бул қосылыўшы физикалық мәниске ийе емес. Сонықтан оны есапқа алмаў керек.

б) Оператордың эрмитлигин тап сондай табыс пенен

$$\langle u | \Omega v \rangle = \langle \Omega u | v \rangle \quad (7.9a)$$

ямаса толығырақ

$$\int u^* \Omega v d^3x = \int (\Omega u)^* v d^3x \quad (7.9b)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықлау мүмкін. Бул жерде  $u$  менен  $v$  арқалы комплексли ықтыйрылған функциялар белгиленген. Бундай функцияларды сайлап алыу тек интеграллардың бар болыу шарты менен шекленеди. (7.3)-оператор ушын ҳақыйқый  $\alpha$  де бул

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{i} \int u^* \left[ (1-\alpha) x \frac{\partial v}{\partial x} + \alpha \frac{\partial (xv)}{\partial x} \right] d^3x = \\ & = - \frac{\hbar}{i} \int \left[ (1-\alpha) x \frac{\partial u^*}{\partial x} + \alpha \frac{\partial (xu^*)}{\partial x} \right] v d^3x \end{aligned}$$

ямаса

$$\int u^* \left( x \frac{\partial v}{\partial x} + \alpha v \right) d^3x = - \int \left( x \frac{\partial u^*}{\partial x} + \alpha u^* \right) v d^3x$$

аңлатпасын береди. Бул жерде қосылыуышылардың тәртибин өзгертип мынаны аламыз:

$$\int x \frac{\partial}{\partial x} (u^* v) d^3x = -2\alpha \int u^* v d^3x.$$

Шеп тәрепинде турған ағзадан бөлеклерге бөлип интеграл алсақ

$$- \int u^* v d^3x = -2\alpha \int u^* v d^3x$$

аңлатпасын табамыз. Бул бизиң ески (7.5) нәтийжемизди, яғни  $\alpha = 1/2$  ди береди.

## 8-мәселе. Операторды дифференциаллау

Мейли  $f(p, x)$  функциясы  $p_k, x_k$  операторларының пүтин функциясы болсын. Коммутациялық қағыйдалардан

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = - [f, p_k], \quad (8.1)$$

$$\frac{\partial f}{\partial p_k} = [f, x_k] \quad (8.2)$$

қатнасларының келип шығатуғынлығын көрсетиңиз. Бул аңлатпаларда қысқарттың мақсетинде

$$[f, g] = \frac{i}{\hbar} (fg - gf)$$

белгилеуи қолланылған.

**Шешими:** Каноникалық коммутациялық қағыйдалар

$$[p_k, p_l] = 0, \quad [x_k, x_l] = 0, \quad [p_k, x_l] = \delta_{kl} \quad (8.3)$$

формулалары менен бериледи. (8.1)- ҳәм (8.12)-аңлатпалардың дұрыслығы төрт

избе-из баскышқа бөлинеди.

1. Мейли  $f = p_l$ . Бул жағдайда  $\partial f / \partial x_k = 0$  ҳәм  $\partial f / \partial p_k = \delta_{kl}$ . Демек (8.1)- ҳәм (8.2)-қатнаслар

$$[p_k, p_l] = 0, \quad [p_l, x_k] = \delta_{lk}$$

түрине енди ҳәм сонлықтан (8.3)-формулаларға сәйкес келеди. Тап усындай жоллар менен олардың дұрыслығы  $f = x_l$ ,  $\partial f / \partial x_k = \delta_{kl}$ ,  $\partial f / \partial p_k = 0$  болған жағдайлар ушын да көрсетиледи.

2. Мейли (8.1)- ҳәм (8.2)-қатнаслар  $f$  ҳәм  $g$  функциялары ушын да орынлы болсын. Бирақ сзықтылық қәсийетке ийе болғанлықтан олар  $c_1$  ҳәм  $c_2$  ықтыярлы комплексли коэффициентлерге ийе қәлеген  $c_1f + c_2g$  сзықты комбинациясы ушын да дұрыс болады.

3.  $f$  ҳәм  $g$  функциялары ушын орынлы болған (дұрыс болған) бул қатнаслар  $fg$  көбеймеси ушын да дұрыс болады. (8.1) жағдайында буны тиккелей өткериленген

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k} (fg) &= f \frac{\partial g}{\partial x_k} + \frac{\partial f}{\partial x_k} g = - \{f [g, p_k] + [f, p_k] g\} = \\ &= - \frac{i}{\hbar} \{fg p_k - f p_k g + f p_k g - p_k fg\} = - [fg, p_k] \end{aligned}$$

есаплаўларының жәрдеминде тексерип көриў мүмкин. Тап сол сыйқты есаплаўларды (8.2)-қатнас жағдайы ушын да орынлауға болады.

4. Жоқарыдағы 3-пунктте көрсетилген жағдайлардан биз қарап атырған қатнаслардың қәлеген сандағы  $p_k$  ҳәм  $x_k$  көбейтиүшилерине ийе ықтыярлы көбеймелердин сзықты комбинациясы ушын да дұрыс. Бул жағдай олардың  $p_k$  ҳәм  $x_k$  өзгериүшилериниң қәлеген пүтин функциясы ушын да дұрыс екенлигин көрсетеди. Бул жағдайды бизин дәлиллеўимиз керек еди.

### 9-мәселе. Орташа мәнислердин ўақыттың өтиўи менен өзгериўи

Мейли  $\langle A \rangle$  арқалы  $\psi$  ҳалындағы  $A$  операторының ўақыттан ғәрэзсиз болған орташа мәниси болсын.  $\psi$  ҳалы ўақыттың өтиўи менен өзгеретуғын болсын.  $\langle A \rangle$  шамасының ўақыттың өтиўи менен қалайынша өзгеретуғының анықлаңыз. Сиз  $\langle x_k \rangle$  ҳәм  $\langle p_k \rangle$  орташа мәнислериниң өзгерислері ҳақында не айта аласыз?

**Шешими.**

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^* (t) A \psi (t) d\tau \quad (9.1)$$

орташа мәнисиниң өзгериў тезлиги

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \int (\dot{\psi}^* A \psi + \psi^* A \dot{\psi}) d\tau \quad (9.2)$$

шамасына тең.  $\psi$  ҳәм  $\psi^*$  толқын функцияларының туўындылары Шредингер теңлемесине бағынады:

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} = H\psi, \quad \frac{\hbar}{i} \dot{\psi}^* = H^\dagger \psi^*. \quad (9.3)$$

Бул жерде  $H$  гамильтонианы эрмитлик оператор болып табылады. Сонықтан  $H = H^\dagger$ .

(9.3)-аңлатпаны (9.2)-аңлатпаға қойып

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \int [(H^\dagger \psi^*) A \psi - \psi^* A H \psi] d\tau$$

екенлигине ямаса функционаллық анализ белгилеўлеринде

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} [\langle H\psi | A\psi \rangle - \langle \psi | AH\psi \rangle] \quad (9.4)$$

аңлатпасын аламыз. (9.4)-аңлатпаның биринши қосылыўшысын

$$\langle \Omega\psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \Omega^\dagger \varphi \rangle$$

аңлатпасының жәрдеминде түрлендирип

$$\langle H\psi | A\psi \rangle = \langle \psi | H^\dagger A\psi \rangle = \langle \psi | HA\psi \rangle$$

аңлатпасына ийе боламыз. Соныңтан (9.4)-теңлик

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | HA - AH | \psi \rangle \quad (9.5)$$

турине енеди ямаса қысқа түрде жазылған

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [H, A] \rangle \quad (9.6)$$

аңлатпасын аламыз. (9.6)-қатнасты  $A = x_k$  ҳәм  $A = p_k$  болған дара жағдай ушын қолланамыз. (8.1)- ҳәм (8.2)-қатнасларды есапқа алғанда бул қолланыў

$$\frac{d}{dt} \langle x_k \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_k} \right\rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle p_k \rangle = - \left\langle \frac{\partial H}{\partial x_k} \right\rangle \quad (9.7)$$

аңлатпаларын береди. Солай етип орташа мәнислер классикалық механиканың каноникалық нызамлары бойынша өзгереди екен.

**Ескертиў:** Гүман пайда болмаўы ушын улыўма жағдайда

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \langle [H, A] \rangle$$

теңлигиниң орынлы екенлигин атап өтемиз.

## II. Спин есапқа алынбайтуғын бир бөлекшели мәселелер

### A. Бир өлшемли мәселелер

Бир өлшемли мәселелер әдеўир идеалластырыў болып табылады. Бирақ бундай мәселелерди квантлық механиканың тийкарғы өзгешеликлерин айқынластырыў ушын пайдаланыў мүмкин. Бундай мәселелер

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x, t) \psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{A.1})$$

түриндеги толқынлық теңлемени шешкенде пайда болады. Бундай мәселеде потенциал тек бир  $x$  декарт координатасынан ғәрзели болады.

$$\psi = e^{i(k_1 x + k_2 y + k_3 z)} \varphi(x, t) \quad (\text{A.2})$$

факторластырылыуның жәрдеминде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) \varphi + V(x, t) \varphi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (\text{A.3})$$

теңлемесин аламыз. Егер

$$\varphi(x, t) = e^{-i\omega_0 t} u(x, t), \quad \hbar\omega_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) \quad (\text{A.4})$$

белгилеўлерин қабыл етсек бул теңлемени және де әпиүйайластырыўға болады. Усының нәтийжесинде биз бир өлшемли толқын теңлемесине келемиз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V(x, t) u = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (\text{A.5})$$

(A.2)-хәм (A.3)-формулалардағы экспоненциаллық көбейтиўшилер  $x$  көшерине перпендикуляр бағытта тарқалатуғын тегис толқынларды тәрийиплейди. Бул толқынлар  $x$  бағытындағы толқын функциясының қәсийетлерине тәспір етпейди.

## 16-мәселе. Еркин қозғалыс жағдайындағы фундаменталлық шешимлер

$V = 0$  болған жағдай ушын бир өлшемли толқын теңлемесин шешиңиз. Алынған шешимлердин физикалық мәнисин таллаңыз.

### Шешими.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (16.1)$$

толқын теңлемеси өзгериўшилерди айырыўға мүмкіншилик береди<sup>1</sup>:

$$\psi(x, t) = u(x) g(t). \quad (16.2)$$

Себеби (16.2)-аңлатпаны (16.1) теңлемеге қойсақ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u''}{u} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\dot{g}}{g} = \hbar\omega \quad (16.3)$$

теңлемесин аламыз. Бул аңлатпада  $\hbar\omega$  арқалы айырыў турақлысы белгиленген.

---

<sup>1</sup> Бул жерде ҳәм буннан кейин (A.4)-теңлемени қанаатландыратуғын бир өлшемли толқын функциясын  $\psi$  арқалы, ал оның кеңисликлик бөлімін  $u$  арқалы белгилеймиз.

(16.3)-теңлемени еки теңлемеге айырыў арқалы

$$\dot{g} = -i\omega g \quad \text{яғни} \quad g(t) = e^{-i\omega t} \quad (16.4)$$

Хәм

$$u'' + \frac{2m\omega}{\hbar} u = 0. \quad (16.5)$$

Егер  $\omega$  ҳақыйқый шама болып табылатуғын болса, онда толқын функциясы дәүирли болады ҳәм  $|\Psi|^2$  шамасы ўақыттан ғәрезли болмайды (стационар ҳал). Егер  $\omega$  оң шама болса, онда

$$\frac{2m\omega}{\hbar} = k^2 \quad (16.6)$$

шамасы да оң шама болады. Соныңтан жоқарыда айтылғанлардан басқа (16.5)-теңлемениң шешими х кеңисликлик өзгериүшисиниң дәүирли функциясы болады.

**Ескертиў:** Толқын функциясының ўақыттан ғәрезли екенлигин көрсететуғын (16.4) комплексли формасы квантлық механиканың өзине тән әхмийетли өзгешелигин қурайды:  $\sin\omega t$  менен  $\cos\omega t$  функциялары (16.4)-дифференциал теңлемениң шешимлері болып табылмайды. Классикалық физика менен квантлық механика арасындағы бундай айырма Шредингер теңлемесиниң ўақыт бойынша биринши тәртипли теңлеме екенлиги менен байланыслы.

$\omega$  параметриниң физикалық мәнисин (16.1)-теңлемениң шеп тәрепиндеги операторды Гамильтон операторы деп қарап анықтаймыз (бул жағдайда Гамильтон операторы тек кинетикалық энергияның операторы болған бир оператордан турады). Буннан  $E = \hbar\omega$  шамасының бөлекшениң кинетикалық энергиясы екенлиги келип шығады. Соныңтан оның мәниси барлық ўақытта да оң болыўы керек ҳәм бизиң шешимимиз гамильтонианның меншикли функциясы болып табылады.

$k^2$  шамасының мәниси оң болғанлықтан (16.5)теңлемениң ямаса

$$u'' + k^2 u = 0 \quad (16.7)$$

теңлемесиниң улыўмалық шешими

$$u(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (16.8a)$$

түрине ийе болады. Соныңтан бир өлшемли

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)} \quad (16.8b)$$

толқын функциясы қарама-қарсы бағытта тарқалатуғын еки толқыннан турады. Еки толқынның да фазалық тезлиги  $v_\phi = \omega/k$  шамасына тең.

Егер тығызлық ушын аңлатпаны анық түрде

$$\rho = \Psi^* \Psi, \quad (16.9)$$

ал ағыс ушын аңлатпана

$$s = \frac{\hbar}{2mi} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \quad (16.10)$$

түринде жазсак, онда толқын функциясының кеңисликтік бөлімінің физикалық мәниси айқынласады. (16.8б)-аңлатпаға муўапық биз

$$\rho = |A|^2 + |B|^2 + (AB^*e^{2ikx} + A^*Be^{-2ikx}),$$

$$s = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2)$$

аңлатпаларына ийе боламыз.  $A$  ҳәм  $B$  амплитудаларына ийе еки толқынның қарама-қарсы бағытланған еки ағысқа сәйкес келетуғынлығы көрініп тур. Олардың интенсивлиги толқынлардың салыстырмалы нормировка турақтысы арқалы анықланады ҳәм  $k$  ға пропорционал. Тығызлық ушын аңлатпа толқынлардың (когерент толқынлардың) интерференциясының орын алатуғынлығын көрсетеди. Бул интерференция кеңисликтік дәүирлиліктиң пайда болыўының себепшиси болады.

Когерентликтиң пайда болыўы ушын айрықша себеп болмаған жағдайда (мысалы шегаралық шәртлер болмағанда) ҳәр бир толқынды өз алдына қараў ақылға муўапық келеди. Бундай жағдайда  $B = 0$  деп болжаймыз ҳәм бул болжаў  $s > 0$  теңсизлигин береди. Соның менен бирге  $A = 0$  деп болжасақ та болады. Бундай жағдайда  $s < 0$  теңсизлигин аламыз. Нәтийжеде бир бирине қарама-қарсы болған анаў ямаса мына бағыттағы бөлекшениң туұры сыйықты қозғалысы алынады.  $k$  шамасы еки белгиге де ийе болады деп есаплап бизиң нәтийжелеримизди былайынша жуўмақлаў мүмкін:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= Ce^{i(kx - \omega t)}, \\ E &= \hbar\omega, \quad k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar}, \\ \rho &= |C|^2, \quad s = \frac{\hbar k}{m} |C|^2. \end{aligned} \quad (16.11)$$

$\omega$  ны жоқ етип

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (16.12)$$

екенлигине ийе боламыз. Соныңтан бөлекшениң импульси ҳәм оның классикалық тезлиги сәйкес

$$p = \hbar k \quad (16.13)$$

ҳәм

$$v = \frac{\hbar k}{m} \quad (16.14)$$

шамаларына тең болады. Тезлик ушын алынған соңғы аңлатпа

$$v_\Phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2} v$$

фазалық тезлик аңлатпасына пүткілләй сәйкес келмейди. Бирақ бул аңлатпа толқынның группалық тезлигине сәйкес келеди:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v.$$

Ескертиў: (16.1)-тийкарғы дифференциал теңлемени  $D$  жормал диффузия коэффициентине ийе диффузия теңлемеси деп қараўға болады:

$$D \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad D = i \frac{\hbar}{2m}.$$

Квантлық теорияда өзгериүшилерди айырыў әхмийетли орынды ийелейтуғынлығын, ал диффузия теориясында әхмийетли орынды ийелемейтуғынлығын есапқа алсақ диффузия мәселелериндеги көп ушырасатуғын  $D$  коэффициенти ҳақыйқый мәниске ийе болғандағы

$$\psi(x, t) = \frac{1}{V\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp \left[ \frac{im}{2\hbar} \cdot \frac{(x - \xi)^2}{t} \right] d\xi$$

шешими квантлық механиканда пайдаланылыў ушын орын таппайды.

(16.1)-теңлемедеги ўақыттың белгисин өзгертиў  $\psi$  толқын функциясын  $\Psi^*$  пenen алмастырыўға алыш келеди.

## 17-мәселе. Еркин қозғалыстағы толқын пакети

Толқын пакетин дүзиңиз ҳәм оның ўақытлық әволюциясын изертлеңиз.

**Шешими.** Биз толқын теңлемесин дара жағдай ушын шешемиз ҳәм оны бурын тапқан (16.11)-шешим түринде жазамыз:

$$\psi(k; x, t) = C(k) e^{i(kx - \omega t)}, \quad (17.1)$$

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2. \quad (17.2)$$

Бул аңлатпада  $C(k)$  арқалы ықтыярлы турақлы амплитуда белгиленген. Ал  $k$  шамасы болса елге шекем еркин параметр. Соныңтан толқын теңлемесиниң улыўмалық шешими

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(k; x, t) dk \quad (17.3)$$

аңлатпасындағы  $k$  бойынша қәлеген жыйнақлы интеграл түринде жазылады.

(17.3)-теңлик ең улыўма түрдеги бир өлшемли толқын пакетин тәрийиплейди. Интегралдың жыйнақлы болыўы ушын  $|k| \rightarrow \infty$  шегинде  $C(k)$  коэффициенти ең

кеминде  $1/k$  түринде нолге умтылыуы керек. Тап сол сыйынды сайлап алынған  $C(k)$  амплитудасы белгили бир түрдеги шешимге алып келеди.

Енди  $p_0 = \hbar k_0$  импульсine иие биз тәрийиплеп атырған бөлекшени  $t = 0$  басланғыш үақыт моментинде  $x = 0$  ноқатының әтирапында табыўдың итималлығы нолден сезилерликтей айырмасы бар жағдай ушын толқын пакетин қурамыз. Егер толқын пакетин

$$\psi(x, 0) = A \exp \left[ -\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x \right] \quad (17.4)$$

түринде алатуғын болсақ бул мақсетке жетиүге болады. Ҳақыйқатында да бул жағдайда

$$\rho(x, 0) = |\psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \exp \left( -\frac{x^2}{a^2} \right)$$

тығыздығы  $|x| \leq a$  областында локализацияланған бөлекшеге жуўап береди. Ал (16.10) ағысы

$$s(x, 0) = \frac{\hbar}{2m} 2ik_0 |A|^2 \exp \left( -\frac{x^2}{a^2} \right) = \rho \frac{\hbar}{m} k_0$$

шамасына тең. Соңықтан  $v_0 = \hbar k_0 / m$  шамасы бөлекшениң тезлигине, ал  $p_0 = mv_0 = \hbar k_0$  шамасы пакеттиң импульсine тең. Толқын функциясы тек бир бөлекшени тәрийиплейтуғын болғанлықтан

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho dx = 1$$

нормировка шәрти орынлы болады. Яғни

$$|A|^2 = \frac{1}{a \sqrt{\pi}}. \quad (17.5)$$

(17.3)- ҳәм (17.1)-аңлатпаларды пайдаланып (17.4)-аңлатпаны тегис толқынлар бойынша жайыу мүмкин:

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} dk. \quad (17.6)$$

Бул интеграл Фурье интегралы болып табылады. Бул аңлатпадан  $C(k)$  коэффициентлері былайынша табылады:

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x \right] dx.$$

Бул интегралды жақсы белгили болған

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi} \quad (17.7)$$

формуласының жәрдемінде есаплап ең ақырында

$$C(k) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (k - k_0)^2 \right] \quad (17.8)$$

екенлигине ийе боламыз. Бул нәтижени Гейзенбергтиң анықсызылық қатнасларын пайдаланған ҳалда аңсат түсніниүге болады. Басланғыш ҳалда (17.4)-аңлатпаға сәйкес бөлекшениң координатасының анықсызылығы  $\Delta x \approx a$  шамасына тең болады. Екинши тәрептен (17.8)-аңлатпаның көрсеткениндей толқын функциясына тийкарғы үlesti  $k = k_0$  ноқатының әтирапындағы кеңлиги  $\Delta k \approx 1/a$  шамасына тең  $k$  толқын санының спектри (ямаса кеңлиги  $\Delta p \approx \hbar/a$  шамасына тең  $p = \hbar k$  импульси спектри) береди. Демек  $a$  шамасының қалайынша сайлап алынғанлығынан ғәрэзсиз

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar \quad (17.9)$$

қатнасы орын алады. Бул Гейзенбергтиң анықсызылық қатнасы болып табылады.

$t = 0$  ўақыт моментіндеги  $C(k)$  амплитудасын анықладап (17.3)-антегралды қәлелеген ўақыт моменти ушын есаплауға өте аlamыз:

$$\psi(x, t) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{1}{2} a^2 (k - k_0)^2 + ikx - i \frac{\hbar t}{2m} k^2 \right] dk.$$

Бул аңлатпадағы экспонентада  $k$  ның квадратлық формасы тур. Сонықтан бул интегралды қайтадан (17.7) қәтелер интегралына алып келиүге болады. Нәтийже

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\left( 1 + i \frac{\hbar t}{ma^2} \right)^{1/2}} \exp \left[ -\frac{x^2 - 2ia^2 k_0 x + i \frac{\hbar t}{2m} k_0^2 a^2}{2a^2 \left( 1 + i \frac{\hbar t}{ma^2} \right)} \right] \quad (17.10)$$

түрине ийе болады.

Енди тығызылық  $\rho$  менен  $s$  ағысын қәлелеген ўақыт моментінде қарап бул әдеүир курамалы аңлатпаны түсніниү қыйын болмайды. Бул жағдайда тығызылық мынаған тең:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\left[ 1 + \left( \frac{\hbar t}{ma^2} \right)^2 \right]^{1/2}} \exp \left[ -\frac{\left( x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2}{a^2 \left[ 1 + \left( \frac{\hbar t}{ma^2} \right)^2 \right]} \right]. \quad (17.11)$$

Координата  $x$  тың функциясы сыпатында ол қоңыраў тәризли иймеклик формасына ийе болады. Бирақ бул жағдайда оның максимумы  $x = 0$  ноқаттан  $x = (\hbar k_0/m) t$  ноқатына айысқан болады. Демек (17.10)-аңлатпа менен тәрийипленетуғын «толқынның дөңес» орны  $v_0 = \hbar k_0/m$  тезлиги менен қозғалады (группалық тезлик бөлекшениң тезлигине тең). Соның менен бир қатарда (17.11)-экспонентадағы бөлшектиң бөлими толқын пакетиниң кеңлигиниң  $t = 0$  моменттен баслап  $a$  шамасынан  $t = t$  ўақыт моментінде

$$a' = a \left[ 1 + \left( \frac{\hbar t}{ma^2} \right)^2 \right]^{1/2} \approx \frac{\hbar}{ma} t$$

шамасына шекем үлкейетуғынлығын көрсетеди. Бул эффектти (17.8)-спектрлик функцияның түринен аңсат түсіндіриүге болады. Толқын санларының спектри  $\Delta k \approx 1/a$  шамасындағы кеңликтегі ийе болатуғын болғанлықтан ҳәр қыйлы толқынлардың тезликтери кеңлигі  $\Delta v = (\hbar/m) \Delta k = \hbar/maT$  шамасына тең областта жайылған. Сонлықтан пакет  $t$  ўақытқа пропорционал  $\Delta x = t \Delta v = (\hbar/ma) t$  шамасына кеңейеди. Бул нәтийжени жоқарыда тапқан едик.

Ағыс ушын аңлатпа (17.10)-аңлатпадан

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik_0 \frac{1 + i \frac{x}{a^2 k_0}}{1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}} \psi$$

аңлатпасының жәрдеминде алынады. (17.11)-формула менен салыстырғаннан кейинги тикелей есаплаўлар

$$s(x, t) = \rho(x, t) v_0 \frac{1 + \frac{\hbar t x}{ma^2 k_0}}{1 + \left( \frac{\hbar t}{ma^2} \right)^2} \quad (17.12)$$

формуласын береди. Бундан биз ықтыярлы ўақыт ушын  $s = \rho v_0$  теңлигине пүткіллей ийе болмайтуғынымызды көремиз (биз  $t = 0$  моментинде усындағы жағдайға ийе болған едик). Бул жағдай да тезликтер спектриниң шекли кеңлигиниң бар екенлигиниң нәтийжеси болып табылады.  $x_0 = v_0 t$  пакетиниң максимумы ушын (17.12)-теңлик те  $s = \rho v_0$  элементар қатнасына алып келеди. Екинши тәрептен  $x \leq x_0$  ушын  $s \leq \rho v_0$  теңсизлигине ийе боламыз. Бул да ақылға толық жуўап береди. Себеби  $t$  моментине шекем  $x < x_0$  ( $x > x_0$ ) ноқатына тезлиги  $v_0$  шамасынан киши (үлкен) болған толқын пакетиниң бөлімлери ғана жетеди.

Ең ақырында  $\int \rho dx = 1$  нормировка шәртиниң ўақыттың барлық моментлері ушын (барлық ўақыт ушын) орынланатуғынлығын еске түсирип өтемиз. Бул заттың сақланыў нызамының көриниўи болып табылады.

## 18-мәселе. Турғын толқынлар

Бөлекше  $x = -a$  ҳәм  $x = +a$  ноқатларында жайласқан өткермейтуғын дийўаллардың арасына қойылған (дийўаллар усы шегараларға белекшелер келгенде күшли ийтерилиске ушырауы ушын ойлап табылған идеализация болып табылады). Меншикли ҳалларды табыў ҳәм олардың қәсийетлерин таллаў керек.

**Шешими.** Стационар ҳаллар ушын биз

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-t \frac{E}{\hbar}} \quad (18.1)$$

функциясына ийе боламыз. Толқын функциясының кеңисликлик бөлеги  $u(x)$

$$u'' + k^2 u = 0 \quad (18.2)$$

Шредингер теңлемесин қанаатландырады. Бул аңлатпада

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (18.3)$$

хәм ең улыўмалық жағдайда

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (18.4)$$

түрине ийе болады.

Өткизбейтуғын дийўаллардың болыўы

$$u(a) = 0, \quad u(-a) = 0 \quad (18.5)$$

шегаралық шәртлерин пайда етеди. Бул шәртлер

$$\int_{-a}^a |u(x)|^2 dx = 1 \quad (18.6)$$

нормировка шәрти менен квантлық механиканда сайлап алыныўы ҳеш қашан регламентленбеген фазалық көбейтиўшини есапқа алмағанда меншикли функцияларды толық анықлауға мүмкиншилик береди.

(18.4)-аңлатпаны (18.5)-аңлатпаға қойсақ  $A$  хәм  $B$  ларды анықлау үшін бир текли теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned} Ae^{ika} + Be^{-ika} &= 0, \\ Ae^{-ika} + Be^{ika} &= 0. \end{aligned}$$

Бул система тек анықлаушы нолге тең болғанда ғана әпиўайы шешимге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} e^{ika}e^{-ika} \\ e^{-ika}e^{ika} \end{vmatrix} = 0 \text{ ямаса } \sin 2ka = 0. \quad (18.7)$$

(18.7) шәртти тек

$$k_n = \frac{\pi}{2a} n, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (18.8)$$

формуласы менен анықланатуғын  $k_n$  коэффициентлериниң меншикли мәнислері ғана қанаатландырады. (18.7)-шәртти қанаатландыратуғын  $k = 0$  мәниси (18.6)-нормировка шәртине қайши келгенликтен итибарға алынбауы керек. (18.3)- хәм (18.8)-аңлатпалардан энергияның меншикли мәнислері үшін

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \quad (18.9)$$

фомуласын аламыз.

(18.8)-аңлатпа тийкарында

$$e^{ik_n a} = e^{i \frac{\pi}{2} n} = i^n$$

теңликлерине ийе боламыз. Сонықтан

$$B = (-1)^{n+1} A.$$

Егер  $n$  тақ сан болса  $B = A$  ҳәм нормировкаланған функциялар төмендегилерге тең:

$$u_n^+(x) = a^{-\frac{1}{2}} \cos k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots \quad (18.10a)$$

Егер  $n$  жуп сан болса  $B = -A$  ҳәм

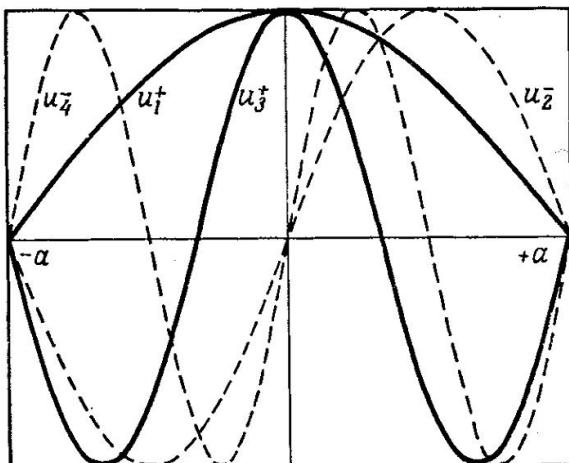
$$u_n^-(x) = a^{-\frac{1}{2}} \sin k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots \quad (18.10b)$$

$u_n$  функциялары [егер (18.10b) формуласындағы белгиниң сезилерликтей өзгерисин есапқа алмағанда]  $n$  ниң белгисинен ғәрзесиз болғанлықтан оның ( $n$  ниң) терис мәнислерин итибарға алмаўға болады. Сонықтан (мысал ретинде) ең төменги төрт ҳалдың толқын функциялары төмендегидей болады:

$$\begin{aligned} n = 1, \quad E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad u_1^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi x}{2a}, \\ n = 2, \quad E_2 = 4E_1, \quad u_2^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi x}{a}, \\ n = 3, \quad E_3 = 9E_1, \quad u_3^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{3\pi x}{2a}, \\ n = 4, \quad E_4 = 16E_1, \quad u_4^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{2\pi x}{a}. \end{aligned} \quad (18.11)$$

Координата басындағы орайдағы инверсияға қатнасы бойынша меншикли функциялардың жуп ( $n$  тақ болғанда) ямаса тақ ( $n$  жуп болғанда) болатуғынлығын атап өтиў керек. Толқын функцияларының усындей қәсийети ҳаққында гәп еткенде ҳалдың жуплығы ҳаққында гәп етеди: симметриялық толқын функциясы болған жағдайда жуплықты оң, ал қарама-қарсы жағдайда терис деп есаптаймыз. Қабыл етилген ( $u_n^+, u_n^-$ ) белгилеўлеринде жуплық жоқарғы «+» ҳәм «-» индекслері менен белгиленеди.

Биринши төрт меншикли функциялар 1-сүйретте көрсетилген.



1-сүйрет.

Шексиз бийик дийўалларға иие бир өлшемли потенциал қутыдағы биринши төрт меншикли функциялар.

Меншикли функциялардың кеңисликлик бөлімлери ҳақыйқый болғанлықтан итималлықтың қосынды тоғы (результирующий ток вероятности) ҳеш бир халда бар бола алмайды. Бул (18.4)-формулада  $|A| = |B|$  теңлигиниң орынланыуы менен байланыслы (16-мәселеде келтирилген таллаўларды еске түсириңиз). (18.4)-аңлатпадағы  $A$  ҳәм  $B$  амплитудаларына иие толқынлар тоқлар менен импульслерге қарама-қарсы болған үлеслерди қосады. Соныңтан энергияның дискрет меншикли мәнислерине тийисли гамильтонианның меншикли функциялары

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

импульс операторының меншикли функциялары бола алмайды. Ҳақыйқатында да (18.10a) ҳәм (18.10b) аңлатпаларын дифференциаллаў синусоидалық шешимлердин қайта тикленийине алып келмейди, ал синусоидалық шешимлерди косинусоидалық шешимлер менен алмастырады. Импульстиң орташа мәнисин болса

$$\langle n | p | n \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-a}^{a} u_n(x) \frac{\partial}{\partial x} u_n(x) dx$$

формуласының жәрдеминде есаплаўға болады. Барлық ҳаллар ушын бул интеграл жоғалады. Себеби интеграл белгиси астында турған аңлатпа  $x$  тың тақ функциясы болып табылады. Солай етип итималлық тоғының тығызлығының нолге айланыуына сәйкес  $\langle n | p | n \rangle = 0$  аңлатпасына иие боламыз.

**Ескертиў:** Математикалық көз-қарастан бул мәселе тардың (струнаның) тербелиси ҳаққындағы классикалық мәселе болып табылады. Бирден бир айырма мынадан ибарат: квантлық механиканда энергияның меншикли мәнислері квадратлық нызам бойынша өзгереди. Ал классикалық физикада болса меншикли жийиликлер усындағы нызам бойынша өзгереди. Бирақ тербелислердин классикалық энергиясы квантлық механиканда ҳеш қандай аналогқа иие емес. Себеби тербелислердин классикалық энергиясы тербелислердин амплитудасынан ғәрэзли ҳәм амплитуда ықтыярлы мәниске иие бола алмайды. Квантлық механиканда болса толқын функциясының амплитудасы (18.6)-нормировка шәрти менен бөлекшелердин саны бирге тең екенлиги жағдайы бойынша белгиленип алынған.

## 19-мәселе. Ярым өткериүши дийўал (полупроницаемая перегородка)

18-мәселениң шәртлерине қосымша  $x=0$  ноқатына жуқа ҳәм шексиз бийик ярым өткериүши дийўал орнатылған. Усы дийўалдың стационар ҳалларға тәсирин анықлаңыз.

**Шешими. Барлық областты** теңдей еки областқа бөлип туратуғын ярым өткериүши дийўалды  $2\varepsilon$  шекли кеңлигине ҳәм шекли  $V_0$  бийикликке ийе барьердин дара жағдайы сыпатында қарауға болады ( $x = -\varepsilon$  ҳәм  $x = +\varepsilon$  ноқатлары арасындағы). Қысқалық ушын

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) = \kappa^2 \quad (6.3.1)$$

белгилеўлерин киргиземиз. Еки  $u(\pm a) = 0$  шегаралық шәртинен басқа барьердин бар болғанлығы себепли биз және де төрт шегаралық шәртке ийе боламыз. Себеби  $u(x)$  ҳәм  $u'(x)$  функциялары  $x = \pm \varepsilon$  ноқатларында үзлиksиз болыуы керек. Бириňши еки шәртти қанаатландырып ҳәм шешимди ҳақыйқый формада алып

$$u = \begin{cases} A_1 \sin k(x+a), & -a \leq x \leq -\varepsilon, \\ Be^{-\kappa x} + Ce^{\kappa x}, & -\varepsilon \leq x \leq \varepsilon, \\ A_2 \sin k(x-a), & \varepsilon \leq x \leq a. \end{cases} \quad (6.3.2)$$

аңлатпаларына ийе боламыз.  $x = \pm \varepsilon$  ноқатларындағы үзлиksизлик шәрти енди

$$u(-\varepsilon) = A_1 \sin k(a - \varepsilon) = Be^{-\kappa\varepsilon} + Ce^{\kappa\varepsilon}, \quad (19.3a)$$

$$u'(-\varepsilon) = kA_1 \cos k(a - \varepsilon) = \kappa(-Be^{-\kappa\varepsilon} + Ce^{-\kappa\varepsilon}), \quad (19.3b)$$

$$u(+\varepsilon) = A_2 \sin k(\varepsilon - a) = Be^{-\kappa\varepsilon} + Ce^{\kappa\varepsilon}, \quad (19.3c)$$

$$u'(+\varepsilon) = kA_2 \cos k(\varepsilon - a) = \kappa(-Be^{-\kappa\varepsilon} + Ce^{-\kappa\varepsilon}) \quad (19.3d)$$

теңлемелерин береди. (19.3a), (19.3b) ҳәм (19.3c), (19.3d) теңликлеринен  $A_1$  менен  $A_2$  ни жоғалтсақ сәйкес еки аңлатпа қалады

$$\begin{aligned} k \operatorname{ctg} k(a - \varepsilon) &= \kappa \frac{-Be^{2\kappa\varepsilon} + C}{Be^{2\kappa\varepsilon} + C}, \\ k \operatorname{ctg} k(a - \varepsilon) &= \kappa \frac{B - Ce^{2\kappa\varepsilon}}{B + Ce^{2\kappa\varepsilon}}. \end{aligned} \quad (19.4)$$

Теңлемелердин шеп тәреплери бир бирине тең болғанлықтан оң тәреплери де бир бирине тең болады. Ал теңлемелердин оң тәреплери бир бири менен тек  $B = \pm C$  болған жағдайда ғана тең болады.  $B = +C$  болған жағдайда (19.3a) ҳәм-(19.3b) теңликлеринен  $A_1 = -A_2$  екенлигине ийе боламыз ҳәм оң жуплыққа ийе шешим аламыз. Егер  $B = -C$  теңлиги орынланатуғын болса  $A_1 = A_2$  ҳәм бизлер терис жуплыққа ийе шешим аламыз. Демек буннан бурынғы мәселедегидей стационар ҳаллар ҳәр қайлы жуплық пенен характерленетуғын еки классқа бөлинеди екен.

Енди  $\kappa\varepsilon \rightarrow 0$  ҳәм

$$\kappa^2 \varepsilon = \Omega \quad (19.5)$$

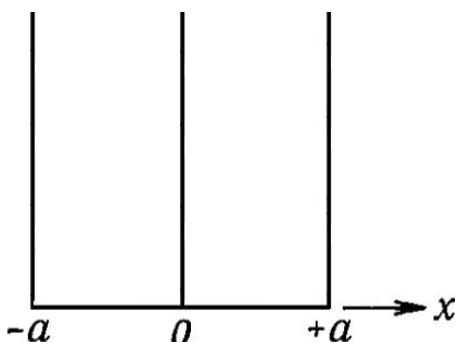
шамасы шекли болып қалатуғын  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $\kappa \rightarrow \infty$  шегине өтемиз.  $\Omega$  шамасын дийўалдың өткізбейшилик коэффициенти деп атайды. Себеби  $\Omega$  шамасының өсиүй менен дийўалдың өткериүшилиги кемейеди. Оң жуплықта ( $B = C$ ) (19.4)-қатнас оң тәрепин қатарға жайғанда

$$k \operatorname{ctg} ka = -\Omega \quad (19.6a)$$

аңлатпасын береди. Терис жуплықта ( $B = -C$ ) жоқарыда келтирилгендей жоллар менен

$$k \operatorname{ctg} ka \rightarrow -\infty \quad (19.6b)$$

аңлатпасы алынады.



2-сүүрет.

Ярым өткериүши дийўалға ийе потенциал қуты.

Екинши жағдай әдеүир әпиүайы. Меншикли функциялар дийўалда нолге айланады. Соңықтан шешим мынадай түрге ийе болады:

$$u_n^-(x) = \begin{cases} A \sin k_n^- (x + a), & -a \leq x < 0, \\ A \sin k_n^- (x - a), & 0 < x \leq a, \end{cases} \quad (19.7a)$$

$$k_n^- a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

$$u_n^-( -x) = -u_n^-(x), \quad |A|^2 = \frac{1}{a}.$$

(19.6a) теңлемеси болса, ол  $k_n^+$  меншикли мәнислерин тек санлы анықлауға мүмкіншилик береди. Тек еки шеклик жағдай буған кирмейди:

1) толық (пүткіллей) өткермейтуғын дийўал ( $\Omega \rightarrow \infty$ ), бундай жағдайда меншикли мәнислер ушын (19.6b) теңлемесиндегидей нәтийже, яғни  $k_n^+ = n\pi$  нәтийжеси алынады;

2) толық өткеретуғын дийўал ( $\Omega = 0$ ), бундай жағдайда  $k_n^+ = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi$  нәтийжесине ийе боламыз.

Солай етип өткізбейшилик коэффициенти шекли мәниске ийе болғанда  $k_n^+$  меншикли мәнислері  $k_n^-$  пенен  $k_{n-1}^-$  шамаларының арасында жатады, яғни оң хэм терис жуплыққа ийе қәддилер гезеклеседи екен. Меншикли функцияларды

$$u_n^+(x) = \begin{cases} -A \sin k_n^+ (x+a), & -a \leq x < 0, \\ +A \sin k_n^+ (x-a), & 0 < x \leq +a, \end{cases} \quad \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi < k_n^+ a < n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

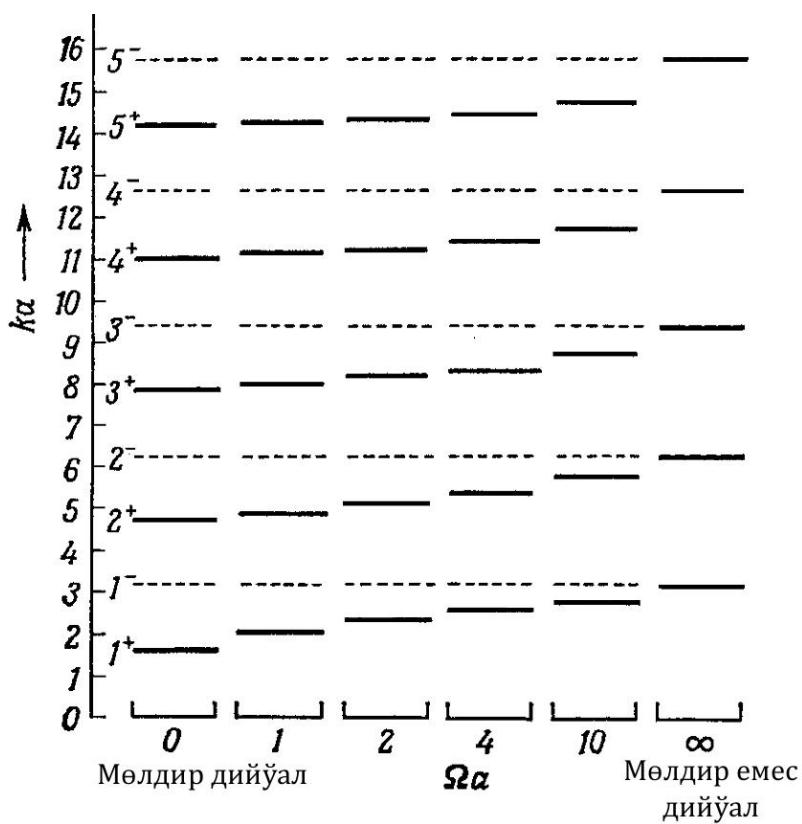
$$u_n^+(-x) = u_n^+(x), \quad |A|^2 = \frac{2k_n^+}{2k_n^+ a - \sin 2k_n^+ a}.$$
(19.76)

туринде жазыў мүмкін. Олардың мәниси  $x = 0$  ноқатында шекли ҳәм графиклерде сыйықлар пайда болады.

Төменде келтирилген кестеде өлшем бирлигине ийе емес  $\Omega a$  параметриниң базы бир мәнислериндеги төменги ҳаллар ушын (19.6а) теңлемесиниң жәрдеминде алынған  $k_n^+ a$  көбеймесиниң санлы мәнислери келтирилген:

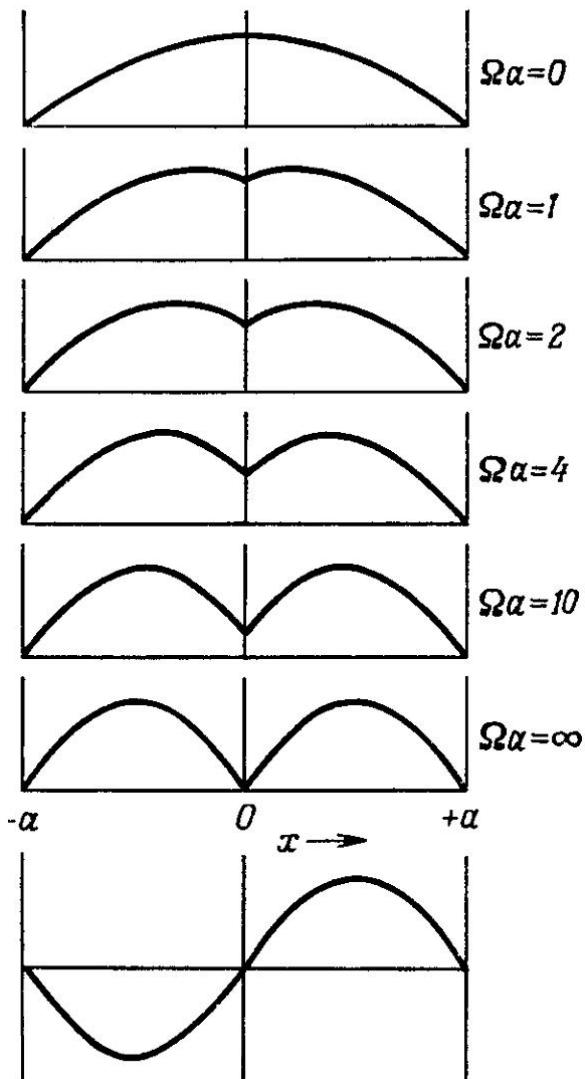
$\Omega a$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$
0	1,571	4,712	7,854	10,996	14,187
$\frac{1}{4}$	1,715	4,765	7,886	11,018	14,155
$\frac{1}{2}$	1,835	4,816	7,917	11,040	14,171
1	2,023	4,925	7,979	11,085	14,208
2	2,282	5,091	8,097	11,173	14,276
4	2,568	5,361	8,305	11,335	14,408
10	2,866	5,763	8,711	11,704	14,734
$\infty$	3,142	6,283	9,425	12,566	15,708

Усындај жоллар менен алынған қәддилер 3-сүүретте көрсетилген. Бул сүүретте тутас сыйықлар оң жуплыққа ийе ҳалларға, ал пунктир сыйықлар терис мәнисли жуплыққа ийе ҳалларға тийисли. Бул сүүреттин шеп тәрепиндеги ең шетки қәддилер дийўал пүткіллей мөлдир болған ( $\Omega = 0$ ) жағдай ушын алынған. Бул жағдай 18-мәселеде соғылған сүүретке сәйкес келеди. Дийўал қанша мөлдир болған сайын, яғни сүүреттин оң шетине жақынлаған сайын оң жуплыққа ийе қәддилер жоқары көтериледи, ал терис мәнисли жуплыққа жуўап беретуғын қәддилер өзлериниң дәслепки ийелеген орынларында қалады. Бул жағдай жуп толқын функцияларының қәсийетлеринде де сәүлеленген. Мысал ретинде  $n = 1$  ушын бир усындај функция 4-сүүретте келтирилген (толқын функциялары нормировкаланбаған). Өткермейтуғын дийўал жағдайында ( $\Omega \rightarrow \infty$ ) ол  $x = 0$  ноқатында нолге айланады ҳәм қутының еки тәреши бир бириңен ғәрзесиз болады. Егер белгисине итибар бермесек қутының шеп тәрепинде бул функция бириңиң тақ меншикли функцияға сәйкес келеди (4-сүүреттиң төменги бөлімінде көрсетилген). Солай етип  $\Omega \rightarrow \infty$  шегинде энергия қәддилери айныйды (3-сүүреттеги шетки оң жолақ).



3-сүйрет.  
Дийўалдың өткизбеўшилик  
коэффициентиниң ҳәр  
қыйлы мәнислериндеги  
қәддилердин  
жайласыўлары.

Тутас сзықлар оң  
жуплыққа ийе ҳаллар, ал  
пунктирлик сзықлар терис  
мәнисли жуплыққа ийе  
қәддилер ушын.



4-сүйрет.

Дийўалдың өткізбейшилик коэффициентиниң ҳәр қыйлы мәнислеридеги биринши еки стационар ҳаллардың толқын функциялары.

Жоқарысында  $1^+$  ҳалы, төменде  $1^-$  ҳалы.

## 20-мәселе. $\delta$ -тәризли потенциал барьердин ярым өткігизгиш дийўалы

19-мәселедеги потенциал дийўалды Дирактың  $\delta$ -функциясының жәрдеминде де тәрийиплеу мүмкін. Бул жағдайда потенциалды

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x) \quad (20.1)$$

түрине ииे деп болжаймыз. Буның дұрыс екенligин дәлиллеңиз ҳәм усындаған дийўалға байланыслы келип шығатуғын шегаралық шәртлерди таллаңыз.

**Шешими.** Бизге

$$u'' + [k^2 - 2\Omega\delta(x)] u = 0 \quad (20.2)$$

Шредингер теңлемесин шешиү керек. Ең дәслеп (20.2)-дифференциал теңлеме де,  $u(\pm a) = 0$  шегаралық шәрти де  $x \rightarrow -x$  инверсиясына қарата инвариант екенligин көремиз. Демек дифференциал теңлеме ҳәм шегаралық шәртлер менен анықланатуғын бул мәселениң шешимлери жуплық операторының меншикли

функциялары ғана бола алады (жуплық операторы  $x$  шамасын —  $x$  шамасына айландырады). Буның дурыслығына байлайынша исениүге болады. Қәлеген  $u(x)$  функциясын еки бөлекке бөлиүге болады: жуп  $f(x) = f(-x)$  ҳәм тақ  $g(x) = -g(-x)$ . Сонлықтан

$$\begin{aligned} u(x) &= Af(x) + Bg(x), \\ u(-x) &= Af(x) - Bg(x). \end{aligned}$$

Егер  $u(x)$  функциясы бизиң мәселемиздиң шешими болатуғын болса,  $u(-x)$  шешими де бизиң мәселемиздиң шешими болады. Ал айныў (вырождение) болмайтуғын болғанлықтан шешим мультиплектив туралы дәллигине шекем (мысалы  $\alpha$  ге шекем) бир мәнисли болады. Демек

$$u(-x) = \alpha u(x)$$

ямаса

$$Af(x) - Bg(x) = \alpha [Af(x) + Bg(x)].$$

$f$  пенен  $g$  бир бирине сыйықлы ғәрэзсиз. Бул жағдайдың орын алышы ушын  $A = \alpha A$  ҳәм  $B = -\alpha B$  теңликлериниң орынланыўы шәрт. Демек  $\alpha = 1$ ,  $B = 0$ , сонлықтан  $u(x)$  функциясы жуп функция болып табылады. Егер  $\alpha = -1$  болса  $A = 0$  ҳәм  $u(x)$  тақ функция болады.

Енди потенциал дийўал қасындағы жағдайларды үйренемиз. (20.2)-теңлемени дийўалдың тиккелей қасы областында интеграллағанда [ $u(x)$  функциясын үзлиksiz деп есаптаймыз]

$$u'(+0) - u'(-0) = 2\Omega u(0) \quad (20.3)$$

теңлемесине ийе боламыз. Басқа сөз бенен айтқанда

$$L(x) = \frac{u'(x)}{u(x)} \quad (20.4)$$

логарифмлик туўындысы дийўалда  $2\Omega$  шамасына тең секириүге ушырайды:

$$L(+0) - L(-0) = 2\Omega. \quad (20.5)$$

Солай етип 19-мәселеде пайдаланылған жеткиликли дәрежедеги қыйын процедураны потенциал дийўалдағы белгили дәрежедеги жасалма, бирақ жүдә апиўайы шегаралық шәрт пенен алмастырыўға болады екен. Бул шегаралық шәртті алышымыздың себеби биз дифференциал теңлемениң потенциал дийўалдың тиккелей қасындағы қәсийетлерин ғана есапқа алышы болып табылады. Сонлықтан егер қосымша  $V(x)$  сингулярлық емес потенциал болған жағдайда да, басқа қәлеген орында қойылған шегаралық шәртлерде де бул теңлемени қанаатландыратуғынлығын атап өтемиз.

Енди меншикли функциялар ҳаққындағы мәселеге дыққат аўдарамыз. Егер  $u_n(x)$  тақ шешимлерине итибар беретуғын болсақ, онда ол потенциал дийўалда нолге айланады, яғни  $u_n(0) = 0$ . Бирақ бул жағдайды (20.3)-теңликке байланыссыз түүйнде ҳеш қандай секирмелі өзгериске ушырамайды, ал ол үзлиksiz болады. Солай етип дийўалдың болышы өткізбейшилик коэффициентиниң қандай болышына байланыссыз тақ шешимлерге тәсир етпейди екен. Бул жағдай 19-

мәселедеги алынған нәтийжелерге толық сәйкес келеди [(19.7а) — тәңликтің қарашызы].

Екинши тәрептен зәрүрлік бойынша жуп шешимлер төмендегидей түрге ийе болыўы керек:

$$u_n^+(x) = \begin{cases} -A \sin k_n^+ (x+a), & -a \leq x < 0, \\ +A \sin k_n^+ (x-a), & 0 < x \leq a. \end{cases} \quad (20.6)$$

Буннан

$$L(+0) = -k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a, \quad L(-0) = k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a$$

Хәм сонлықтан (20.5)-шәрттиң күшине хәм (19.6а)-тәңлемеге сәйкес

$$k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a = -\Omega.$$

Солай етип буннан кейинги таллаўлар 19-мәселениң таллаўын толық қайталайды.

## 21-мәселе. δ тәризли потенциал барьердеги шашырау

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x) \quad (21.1)$$

потенциал барьерине шеп тәрептен энергиясы  $E$  шамасына тең болған бөлекшелер ағысы келип түссин. Барьердин бар болыўының бул барьердин еки тәреңинен де «шағылышып» еки тәреңке қарай тарқалатуғын толқынлардың пайда болыўына алып келетуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими.**  $x=0$  болған ноқаттың тиккелей қасынан басқа барлық орынларда Шердингер тәңлемесиниң улыўмалық шешимин былайынша жазамыз

$$u(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k > 0. \quad (21.2)$$

Бул тәңлемеде  $A$  хәм  $B$  лар арқалы  $x < 0$  хәм  $x > 0$  областларында ҳәр қылыш мәнислерге ийе константалар белгиленген. Бул константалардың мәнислерин сайлап алыў жолы менен (21.2)-шешиминиң шегаралық шәртти қанаатландыратуғын жағдайға алып келиў мүмкін. Егер барьерге келип түсіүши толқынның амплитудасын 1 ге тең деп есапладап нормировканы сайлап алсақ, онда бизиң шешимимизди басқаша жазыў мүмкін

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x < 0, \\ (1+F) e^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (21.3)$$

Бул аңлатпаларда  $B$  хәм  $F$  сәйкес арқалы алдыға қарай хәм кейинге қарай шашыраған толқынлардың амплитудалары белгиленген.

(20.3)-тәңлик бойынша  $x=0$  ноқатында  $u(x)$  функциясының қәсийетлері

$$u(+0) = u'(-0) \quad \text{и} \quad u'(+0) - u'(-0) = 2\Omega u(0) \quad (21.4)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул қатнаслар  $B=F$  хәм

$$ik(1+F) - ik(1-B) = 2\Omega(1+B)$$

қатнасын береди. Соныңтан ең ақырында

$$B = F = \frac{\Omega}{ik - \Omega} \quad (21.5)$$

формуласын аламыз.

~~(21.3)-шенимде үш толқынды бир бириңен айырыу мүмкін:~~ интенсивлиги 1 ге тең келип түсіүши толқын, интенсивлиги  $|B|^2$  қа тең шашыраған толқын ҳәм интенсивлиги  $|1+F|^2$  қа тең барьерден өткен толқын. (21.5)-қатнастан

$$|B|^2 = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + k^2}, \quad |1+F|^2 = \frac{k^2}{\Omega^2 + k^2} \quad (21.6)$$

екенлиги келип шығады. Бул

$$1 = |B|^2 + |1+F|^2 \quad (21.7)$$

сақланыў нызамына (үзлиksизлик теңлемесине) алып келеди. Бул нызам бойынша өткен ҳәм шашыраған толқынлардың интенсивликтериниң қосындысы келип түсіүши толқынның интенсивлигиге тең.

Егер потенциал барьер дерлик өткермейтуғын болса ( $\Omega \rightarrow \infty$ ), онда (21.5) ке байланыслы  $B \approx -1$  ҳәм  $1+F \approx 0$ . Соныңтан биз толық шағылышыға ийе боламыз. Егер потенциал барьер дерлик мөлдир болса ( $\Omega = \infty$ )

$$B = F \approx \frac{\Omega}{ik}$$

ҳәм шашыраған толқынның интенсивлиги бөлекшениң энергиясына кери пропорционал болып шығады. Әлбетте, бул жағдай бөлекшениң энергиясы жүдә үлкен болған шеклерде орын алады ҳәм бөлекшениң энергиясы киши болғанда ( $k \ll \Omega$ ) бундай жағдай орын алмайды. Бизлер бул жерде Борнның бириңи жақынласыўының дара жағдайын көремиз. Бул жақынласыў тек жоқары энергиялардаған дұрыс. Бирақ анықлық ушын мына жағдайды атап өтийимиз керек: кинетикалық энергияның  $V(x)$  потенциал энергияға салыстырғанда үлкен болыўы пүткиллей талап етилмейди (гейде усындаған талап қойылады). Ҳақырқатында да, биз келтирген мысалда  $x=0$  ноқатында ҳәтте шексиз үлкен мәниске ийе болады.

Алға қарай ҳәм артқа (кейинге) қарай бағытланған толқынлар ушын шашыраў амплитудаларының теңлиги (21.1)-потенциалдың өзине тән белгиси болып табылады

## 22-мәселе. Симметриялы потенциал барьердеги шашыраў

Энергиясы  $E$  болған бөлекшелер ағысы  $-a \leq x \leq a$  обlastында шекленген потенциальный барьерге келип түседи. Потенциал  $x$  тың тәмендегидей жуп функциясы болсын:

$$V(x) = V(-x) \quad (22.1)$$

$x = \pm a$  ноқаттарында алға ҳәм кейинге шашыраған толқынлардың

амплитудасын толқын функциясының логарифмлик тууындысы арқалы көрсетиүй талап етиледи.

**Шешими.** (22.1)-симметрия шәртинен әхмийетли нәтийже келип шығады: энергия  $E$  ниң қалеген мәнисинде Шредингер теңлемеси жуп

$$u_+(x) = u_+(-x), \quad u'_+(x) = -u'_+(-x) \quad (22.2a)$$

шешимине де, тақ

$$u_-(x) = -u_-(-x), \quad u'_-(x) = u'_-(-x) \quad (22.2b)$$

шешимине де ийе болады. Бул шешимлер сыйықлы ғәрэзсиз емес, сонлықтан улыўмалық шешимди ықтаярлы сыйықлы комбинация сыйпатында жазыў мүмкін.  $-a \leq x \leq a$  интервалында  $u_+$  пенен  $u_-$  дара шешимлерин  $x=0$  ноқатта

$$u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0$$

хәм

$$u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1$$

деп есапладап санлы усыллардың жәрдеминде де анықлаў мүмкін. Әлбетте, бундай жағдайларда базислик шешимлердин нормировкасы жеткиликли дәрежеде ықтаярлы түрде әмелге асырылады. Солай етип биз  $x=a$  ноқаттағы олардың логарифмлик тууындыларын есаплаўымыз мүмкін. Бул тууындыларды өлшем бирликтікке ҳәм салыстырмалы нормировкаға ғәрэзли емес түрде былайынша жаза аламыз

$$au'_+(a)/u_+(a) = L_+, \quad au'_-(a)/u_-(a) = L_-. \quad (22.3)$$

$x=-a$  ноқатында логарифмлик тууындылар  $au'_\pm(-a)/u_\pm(-a)$  (22.2)-аңлатпаға сәйкес  $-L_+$  ҳәм  $-L_-$  ге тең болады.

Шеп тәрептен келип түсетеуғын, амплитудасы 1 ге тең толқын ушын шешимына түрге ийе болады:

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & -\infty < x \leq -a, \\ C_1 u_+(x) + C_2 u_-(x), & -a \leq x \leq a, \\ (1+F) e^{ikx}, & a \leq x < \infty. \end{cases} \quad (22.4)$$

$x=\pm a$  ноқатларындағы  $u(x)$  ҳәм  $u'(x)$  функцияларының үзликсизлиги төмендегидей төрт шәртті береди:

$$e^{-ika} + Be^{ika} = C_1 u_+(a) - C_2 u_-(a), \quad (22.5a)$$

$$ik(e^{-ika} - Be^{ika}) = -C_1 u'_+(a) + C_2 u'_-(a), \quad (22.5b)$$

$$(1+F) e^{ika} = C_1 u_+(a) + C_2 u_-(a), \quad (22.5c)$$

$$ik(1+F) e^{ika} = C_1 u'_+(a) + C_2 u'_-(a). \quad (22.5d)$$

(22.5а)- ҳәм (22.5в)-теңликлерин қосып ҳәм (22.56)-теңликтен (22.5г)-теңликти алсақ оң тәрепте сәйкес  $2C_1u_+(a)$  ҳәм  $2C_1u'_+(a)$  функцияларын аламыз. Енди олардың қатнасларын алсақ

$$L_+ = ika \frac{-e^{-ika} + (1+F+B)e^{ika}}{e^{-ika} + (1+F+B)e^{ika}} \quad (22.6a)$$

аңлатпасын аламыз. Тап сол сыйқлы, бирақ белгилерин өзгертип исленген процедура

$$L_- = ika \frac{e^{-ika} + (1+F-B)e^{ika}}{-e^{-ika} + (1+F-B)e^{ika}} \quad (22.6b)$$

аңлатпасын береди. (22.6а)- ҳәм (22.6б)-теңлемелерин  $1+F \pm B$  шамасына қарата шешсек ҳәм әпиүйайлық ушын

$$ka = q \quad (22.7)$$

амплитудалар ушын төмендегидей аңлатпаларды аламыз:

$$B = -\frac{1}{2} e^{-2iq} \left[ \frac{L_+ + iq}{L_+ - iq} + \frac{L_- + iq}{L_- - iq} \right], \quad (22.8a)$$

$$1+F = -\frac{1}{2} e^{-2iq} \left[ \frac{L_+ + iq}{L_+ - iq} - \frac{L_- + iq}{L_- - iq} \right]. \quad (22.8b)$$

Үзлиksизлик теңлемеси тийкарында өткен ҳәм шағылысқан толқынлардың интенсивликleri келип түсүүши толқынның интенсивлигине тең болыуы керек екенлигин күтий шәрт. Ҳақыйқатында да (22.8а)- ҳәм (22.8б)-қатнаслардан

$$|B|^2 = \frac{(L_+L_- + q^2)^2}{(L_+L_- + q^2)^2 + q^2(L_+ - L_-)^2}, \quad (22.9a)$$

$$|1+F|^2 = \frac{q^2(L_+ - L_-)^2}{(L_+L_- + q^2)^2 + q^2(L_+ - L_-)^2} \quad (22.9b)$$

формулалары келип шығады. Солай етип биз күтип атырған

$$|B|^2 + |1+F|^2 = 1 \quad (22.10)$$

қатнасы сөзсиз орынланады.

Солай етип алға ҳәр артқа қарай шашыраған толқынлардың амплитудасын табыў проблемасы  $x=a$  ноқатындағы жуп ҳәм тақ толқын функцияларының (22.3)-логарифмик тууындыларын табыўға алып келинеди екен. Әлбетте бул соңғы мәселени (22.1)-потенциал анық түрде берилмеген жағдайда шешиүге болмайды

21-мәселениң нәтийжесинде гидей бул жағдайда  $B=F$  теңлиги ушын орын жоқ. Егер

$$q|L_+ - L_-| > |L_+L_- + q^2|$$

теңсизлиги орынланатуғын болса алға қарай шашыраған толқын, ал қарама-қарсы жағдайда кейин қайтқан толқынның интенсивлиги жоқары болады.

## 23-мәселе. Туўры мүйешли барьерден шағылышыў

22-мәселеде алынған улыўма формуланы

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(x) = k_0^2, \quad |x| \leq a \quad (23.)$$

түриндеги потенциаллық барьерге ҳәм бул интервалдың сыртындағы  $V=0$  потенциалына қолланыңыз. Өтиў коэффициентин есаплаңыз.

**Шешими.** Барьердин ишинде Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$u'' + (k^2 - k_0^2) u = 0. \quad (23.2)$$

Бул теңлеме еки типтеги шешимге ийе болады: табалдырықтан киши болған потенциал энергия ушын ( $k < k_0$ ) ҳәм табалдырықтан жоқары болған кинетикалық энергия ушын ( $k > k_0$ ). Биз биринши жағдайдан баслаймыз.

$$k_0^2 - k^2 = \kappa^2. \quad (23.3)$$

Бундай жағдайда

$$u'' - \kappa^2 u = 0.$$

Сонлықтан жуп ҳәм тақ шешимлер ушын сәйкес

$$u_+(x) = \cosh \kappa x, \quad u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0 \quad (23.4a)$$

ҳәм

$$u_-(x) = \frac{1}{\kappa} \sinh \kappa x, \quad u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1 \quad (23.4b)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Демек

$$L_+ = a u'_+(a) / u_+(a) = \kappa a \tanh \kappa a, \quad (23.5a)$$

$$L_- = a u'_-(a) / u_-(a) = \kappa a \coth \kappa a. \quad (23.5b)$$

(22.9б) формуласының жәрдеминде элементар түрлендириўлерден кейин өтиў коэффициенти ушын

$$T \equiv |1 + F|^2 = \frac{1}{1 + \left( \frac{k_0^2}{2\kappa} \right)^2 \sinh^2 2\kappa a} \quad (23.6)$$

формуласын аламыз.

Шағылышыў коэффициенти болса (22.10)-формуланың жәрдеминде алынады:

$$R \equiv |B|^2 = 1 - T. \quad (23.7)$$

Классикалық механикада келип түсіүши ағыс барьерде толық шағылысқан болар еди ҳәм биз  $|B|^2 = 1$  ҳәм  $|1 + F|^2 = 0$  теңліклерине ийе болған болар едик. (23.6)-формулаға сәйкес бол  $\kappa a \rightarrow \infty$  шартты орынланғанда ғана, яғни өткізу мүмкін болғандың өзінде бийик "потенциал тау" пайдасы болғанда ғана жүзеге келген болар еди. Бул жағдайда өтиў коэффициенти жұдә киши шамаға, бирақ шекли мәниске ийе болған болар еди („туннель эффекті“). Оны жууық түрде белгилі болғанда жазыў мүмкін

$$T = \frac{16k^2\kappa^2}{k_0^4} e^{-4\kappa a}. \quad (23.8)$$

Өтиў коэффициентиниң шамасының тәртиби тиімдіктеринан экспоненциаллық қебейтиўши тәрепинен анықланады.

Ескертиў ретинде: Буннан белгілі болғанда потенциалының көрсеткиши ушын ықтыйрылған  $V(x)$  потенциалында биз интеграл түріндеги улыўма аңлатпа аламыз (16-мәселениң қарашызы):

$$4\kappa a = 2 \int_{-a}^{+a} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V - E)} dx.$$

Белекшениң кинетикалық энергиясының мәниси потенциал барьердин бийиклигинен жоқары болса (23.3)-аңлатпаның жәрдемінде анықланған  $\kappa$  шамасы жорнал шамаға айланады. Қолайлыштырылғанда

$$K^2 = k^2 - k_0^2 = -\kappa^2 \quad (23.9)$$

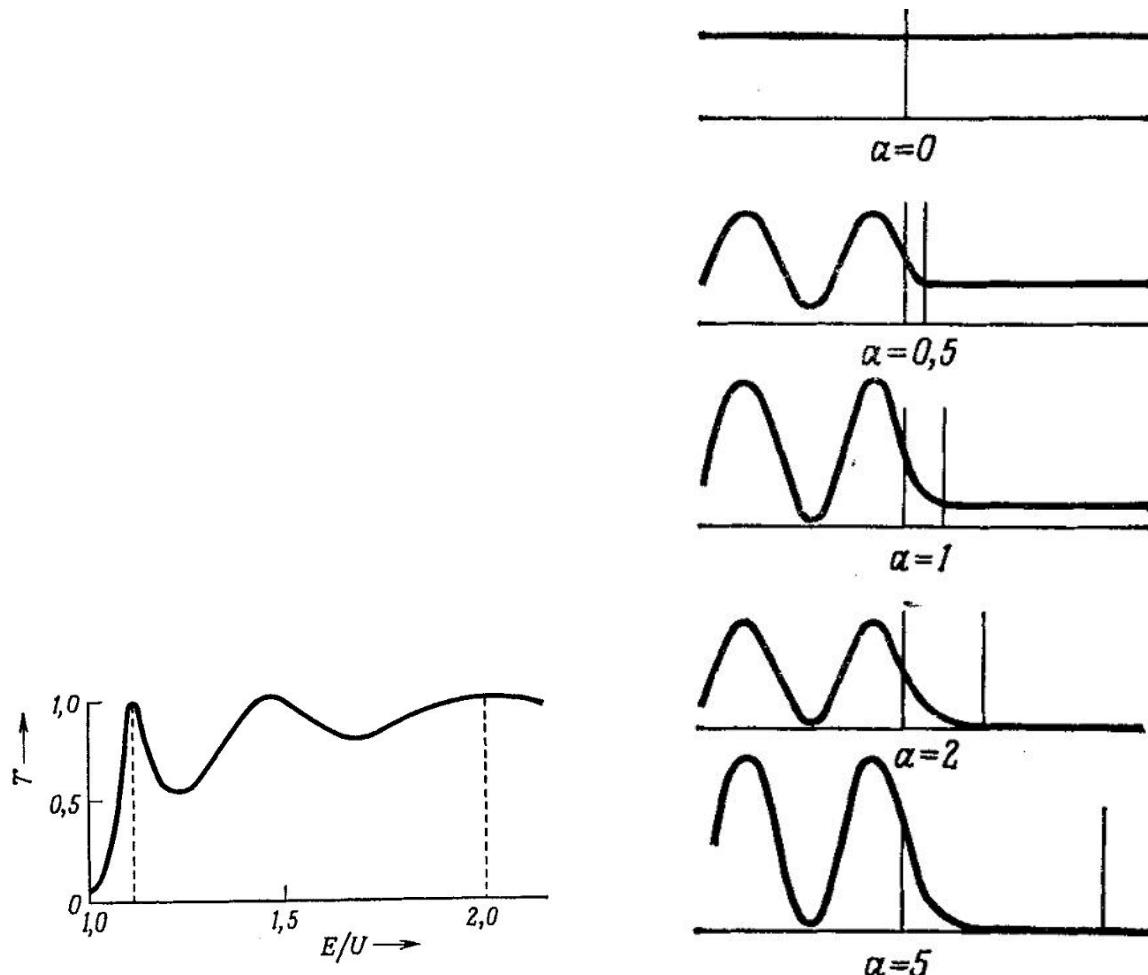
белгилеўин киргизип биз енди (23.6)-аңлатпаның орнына

$$T = \frac{1}{1 + \left( \frac{k_0^2}{2kK} \right)^2 \sin^2 2Ka} \quad (23.10)$$

аңлатпасын жаза аламыз. Биз қарап атырған энергияларды классикалық механикада  $T = 1$  ҳәм  $R = 0$ , (23.10)-формула бойынша анықланған өтиў коэффициенти болса  $T = 1$  болған жағдайда тек  $2Ka = n\pi$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) болған жағдайда максимум мәнисине жеткен болар еди. Усындағы максимумлар арасында  $2Ka = (n + 1/2)\pi$  ноқаттарында минимумлар жайласады. (23.10)-формуладағы синустағы қебейтиўши қанша киши болса бол  $T = 1$  мәнисине жақын жайласады (басқа сөз бенен айтқанда потенциал барьердин бийиклигине салыстырылғанда белекшениң энергиясы қаншама үлкен болса).

Өтиў коэффициенти  $T$  шамасының энергияның барьердин бийиклигине қатнасынан ғәрзесінде (айтайық  $U$  шамасынан) 5-сүйретте келтирілген. Бул сүйретте  $2k_0a = 3\pi$  болған жағдай ушын  $T(E/U)$  функциясының графиги келтирілген. 6-сүйретте толқын функциясының қалайынша өзгеретуғынлығы көрсетілген: бол  $\sin^2 2Ka$  итималлық тығыздығы  $|u|^2$  шамасының координата  $x$  тан ғәрзесінде сүйретте келтирілген. Барьердин оң тәрепинде  $|u|^2 = |1 + F|^2$ , яғни итималлықтың тығыздығы турақты шама, барьердин шеп тәрепинде болса келип түсін толқын менен шашыраған толқынлардың интерференциясы орын алады. 6-сүйретте ҳәр қылыштың кеңликке ийе барьерлер ушын  $k^2 = \kappa^2 = 1/2k_0^2$  болған жағдай сүйретленген. Барьер қаншама кең болса өткен толқынның интенсивлигі соншама киши ҳәм

интерференция қубылышы анық көринеди.



5-сүйрет. Өтий коэффициенти  $T$  менен энергияның барьердин бийиклигине қатнасы арасындағы байланыс ( $E > U$  болған жағдай ушын)

6-сүйрет.  $E < U$  болған жағдайды шеп тәрептен туры мүйешли барьерге келип түсетуғын белекшелер ағысы ушын  $|u|^2$  шамасының  $x$  координатасынан ғәрэзлиги.

Вертикаль жайласқан сзығулар жубы жәрдеминде барьердин кеңлиги  $a$  белгиленген. Барьердин шеп тәрепиндеги осцилляция келип түсиүши ҳәм шашыраған толқынлардың интерференциясынан пайда болған.

## 24-мәселе. Шағылышы ў инверсиясы

Мейли  $0 < x < a$  областта  $V(x) > 0$  потенциал барьер түриндеги тосқынлыққа шеп тәрепинен толқын келип түсетуғын болсын. Потенциалдың формасынан ғәрэзсиз толқын оң тәрептен келип түсетуғын болса да шашыратыў коэффициентиниң тап сондай мәниске ийе болатуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими.** Мейли  $u(x)$  пенен  $v(x)$  функциялары  $0 < x < a$  области ушын вронскианы

$$uv' - vu' = 1 \quad (24.1)$$

болған Шредингер теңлемесиниң бир биринен ғәрзесиз еки ҳақыйқый шешими болсын. Шеп тәрептен келип түсетуғын толқын ушын толқын функциясы

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0, \\ Au(x) + Bv(x), & 0 < x < a \\ Ce^{ik(x-a)}, & x > a, \end{cases} \quad (24.2)$$

түрине ийе болады ҳәм  $x=0$  менен  $x=a$  нөқатларындағы  $\psi$  ҳәм  $\psi'$  функцияларының ұзлиksизлиги

$$\begin{aligned} 1+R &= Au(0) + Bv(0), \\ ik(1-R) &= Au'(0) + Bv'(0), \\ Au(a) + Bv(a) &= C, \\ Au'(a) + Bv'(a) &= ikC \end{aligned} \quad (24.3)$$

аңлатпаларын береди. (24.1)-аңлатпаның жәрдеминде соңғы еки теңлемелер жубынан

$$\begin{aligned} A &= C [v'(a) - ikv(a)], \\ B &= -C [u'(a) - iku(a)] \end{aligned} \quad (24.4)$$

аңлатпаларын табамыз.  $A$  ҳәм  $B$  ушын табылған аңлатпаларды (24.3)-теңлемелер системасының бириńши жубына қойсақ

$$1+R = (p_{0a} - iq)C, \quad 1-R = (p_{a0} - ir)C \quad (24.5)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Бул аңлатпаларда жазыўды қысқарттыў ушын мынадай белгилеўлер қабыл етилген:

$$\begin{aligned} p_{0a} &= u(0)v'(a) - v(0)u'(a), \\ p_{a0} &= u(a)v'(0) - v(a)u'(0), \\ q &= k[u(0)v(a) - v(0)u(a)], \\ r &= \frac{1}{k}[u'(0)v'(a) - v'(0)u'(a)]. \end{aligned} \quad (24.6)$$

(24.5)-қатнастың жәрдеминде ең ақырында мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

$$R = \frac{(p_{0a} - p_{a0}) - i(q - r)}{(p_{0a} + p_{a0}) - i(q + r)}. \quad (24.7)$$

Сонлықтан шағылыстырыў коэффициенти ушын

$$|R|^2 = \frac{(p_{0a} - p_{a0})^2 + (q - r)^2}{(p_{0a} + p_{a0})^2 + (q + r)^2} \quad (24.8)$$

түриндеги аңлатпаны аламыз.

Енди келип түсиўши толқын барьерге оң тәрептен келип түсетуғын болсын. Буның ушын (24.2) толқын функциясын

$$\tilde{\psi} = \begin{cases} \tilde{C}e^{-ikx}, & x < 0, \\ \tilde{A}u(x) + \tilde{B}v(x), & 0 < x < a, \\ e^{-ik(x-a)} + \tilde{R}e^{ik(x-a)}, & x > a \end{cases} \quad (24.9)$$

аңлатпасы менен алмастырыў жеткилики. Енди үзлиksизлик шәрти мынаны береди:

$$\begin{aligned} 1 + \tilde{R} &= \tilde{A}u(a) + \tilde{B}v(a), \\ -ik(1 - \tilde{R}) &= \tilde{A}u'(a) + \tilde{B}v'(a), \\ \tilde{A}u(0) + \tilde{B}v(0) &= \tilde{C}, \\ \tilde{A}u'(0) + \tilde{B}v'(0) &= -ik\tilde{C}. \end{aligned} \quad (24.10)$$

Бул теңлемелердин структурасы (24.3)-теңлемелердин структурасы менен бирдей. (24.10)-теңлемелерди (24.3)-теңлемелерден  $k$  ны  $-k$  ға алмастырыў ҳәм  $a$  аргументи менен 0 ди орын алмастырыў жолы менен алыў мүмкін. Бундай түрлендириўлерди (24.6)-қатнасларға қоллансақ

$$p_{0a} \rightarrow p_{a0}, \quad p_{a0} \rightarrow p_{0a}, \quad q \rightarrow q, \quad r \rightarrow r \quad (24.11)$$

өзгерислерин береди. Солай етип ең ақырғы формулалар (24.7) менен (24.8) дән тек  $p_{0a}$  менен  $p_{a0}$  дин орынларының алмасқанлығы менен ғана айрылады екен. (24.8)-аңлатпа  $p_{0a}$  менен  $p_{a0}$  шамаларына қарата симметриялы болғанлықтан шағылыстырыў коэффициенти

$$|\tilde{R}|^2 = |R|^2 \quad (24.12)$$

шеп тәрептен келип түсетеуғын толқын ушын да, оң тәрептен келип түсетеуғын толқын ушын да бирдей мәниске ийе болады. Бирақ бул  $R$  амплитудасы ушын мәниске ийе болмайды. Ҳақыйқатында да (24.7)-теңлик  $\alpha$  ҳәм  $\beta$  комплексли санларының  $R = \alpha/\beta$  қатнасы түринде жазылғанда (24.11)-қатнасқа сәйкес  $\tilde{R} = -\alpha^*\beta$  түрине түрленеди.

## 25-мәселе. Туўры мүйешли потенциал шуқыр

$$V(x) = \begin{cases} -U, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a \end{cases} \quad (25.1)$$

туўры мүйешли потенциал шуқыр бар болған жағдай ушын байланысқан ҳалларды ҳәм усындаи ҳаллар менен байланыслы болған меншикли мәнислерди табыңыз.

**Шешими. Буннан бурын** қарап шығылған еки мәселениң нәтийжелери оң мәнисли энергияға ийе ҳаллардың қәсиетлерин қыйыншылықсыз үйрениүге мүмкіншилик береди. Сонықтан бизге байланысқан ҳалларға сәйкес келиүши терис энергиялар жағдайын қарап шығыў жеткилики.

Потенциал  $V(x) = V(-x)$  инверсиясына қарата инвариант. Сонықтан шешимлердин жуп ямаса тақ болыўы шәрт (20-мәселеге қараңыз).

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad U = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}, \quad k^2 = k_0^2 - \kappa^2 \quad (25.2)$$

деп есаплап бул шешимлерди былайынша жазыўға болады:

Жуп шешимлер:

$$\begin{aligned} u_+(x) &= \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \cos kae^{\kappa(a-x)}, & x > a, \end{cases} \\ u_+(-x) &= u_+(x), \\ \frac{1}{A_+^2} &= \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \frac{1}{\kappa} \cos^2 ka; \end{aligned} \quad (25.3a)$$

Тақ шешимлер:

$$\begin{aligned} u_-(x) &= \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \sin kae^{\kappa(a-x)}, & x > a, \end{cases} \\ u_-(-x) &= -u_-(x), \\ \frac{1}{A_-^2} &= \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \frac{1}{\kappa} \sin^2 ka. \end{aligned} \quad (25.3b)$$

Жоқарыда потенциал шуқырдың ишиндеги ҳәм сыртындағы амплитудалардың мәниси  $u(x)$  функциясы  $x=a$  нөқатында үзлиksiz болатуғында етип сайлаңған. Нормировкалаушы турақлы

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u|^2 dx = 1$$

шәртинин жәрдеминде анықланған еди.  $u'$  дың  $x=a$  нөқатында үзлиksiz болыўы талабы және бир шәртти береди:

Жуп

$$-k \sin ka = -\kappa \cos ka \quad (25.4a)$$

яmasa

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k}; \quad (25.4b)$$

Тақ

$$k \cos ka = -\kappa \sin ka \quad (25.5a)$$

яmasa

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{k}{\kappa}. \quad (25.5b)$$

(25.4)- ҳәм (25.2)-аңлатпалардың жәрдеминде нормировкаланған турақлылар ушын келтирип шығарылған аңлатпаларды еки жағдайда да бирдей теңлик алғынатуғында етип әпиүайыластырыў мүмкін:

$$\frac{1}{A_{\pm}^2} = a + \frac{1}{\kappa}. \quad (25.5)$$

(25.4)-теңлемелерден меншикли мәнислерди табыў ушын бул теңлемелердин оң тәрепиндеги шаманы (25.2)-аңлатпа менен алмастырамыз ҳәм

$$C = k_0 a \quad (25.6)$$

белгилеүин киргиземиз. Нәтийжеде төмөндегилерди аламыз:

Жуп:

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}{ka} \quad (25.7a)$$

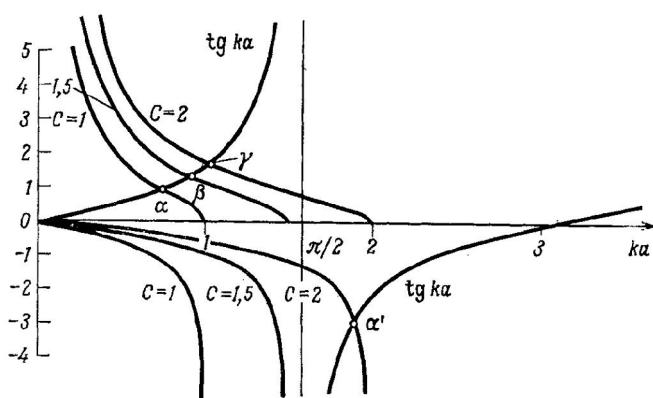
Хәм так:

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{ka}{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}. \quad (25.7b)$$

Потенциалдың берилген мәнисинде  $C$  шамасы турақты, оның мәниси шуқырдың өлшемлеринен ( $C^2 \sim Ua^2$ ) ғана ғәрэзли. Ал (25.7a)- хәм (25.7b) теңлемелери  $ka$  ның барлық мәнислерин, соның менен бирге энергияның берилген өлшемлердеги шуқырда жүзеге келетуғын барлық

$$E = -U \left[ 1 - \left( \frac{ka}{C} \right)^2 \right] \quad (25.)$$

мәнислерин анықлауға мүмкіншилик береди.



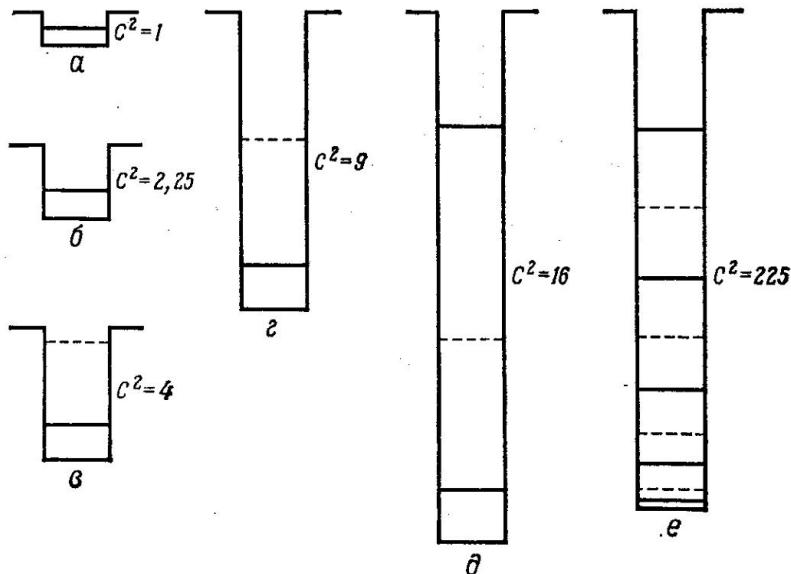
7-сүйрет.

(25.7a) хәм (25.7b) теңлемелеринин графикалық шешімими.

Сүйретте теңлемелердин оң тәреплеринин  $C$  параметринің ҳәр қандай мәнислериндеги иймекликлердин тангенсоида  $\operatorname{tg} ka$  менен кесилисіүй ноқатлары көрсетилген. Оң ординаталарға ийе иймекликлер оң ҳалларға, ал терис ординаталарға ийе иймекликлер тақ ҳалларға тийисли.

7-сүйретте  $\operatorname{tg} ka$ , соның менен бирге (25.7a) хәм (25.7b) сүйреттиң оң бөлімлери  $ka$  шамасының функциясы сыпатында көрсетилген. Меншикли мәнислер соңғы еки иймекликтің тангенсоида менен кесилисіүй ноқатының абсолюттасы сыпатында табылады. Бул иймекликлер шуқырдың өлшемлері тәрепинен анықланатуғын  $C$  параметринен ғәрэзли. Мысалы  $C = 1$  мәнисинен баслап биз жуп жағдайда  $\alpha$  арқалы белгиленген бир кесилисіүй ноқатын анықтаймыз. Тақ жағдайында болса биз бир де ноқатты ала алмаймыз. Демек бундай өлшемлерге ийе шуқырда оң жуплыққа ийе тек бир ғана байланысқан ҳал жүзеге келеди екен. Бул шуқыр сәйкес қәдди менен 8,а сүйретте көлтирилген. Үлкен өлшемлерге ийе шуқыр ушын ( $C = 1,5$ ) 7-сүйреттеги иймекликлер  $\beta$  ноқатында кесилиседи. Тап бурынғыдан тек бир оң жуплыққа ийе ҳал болады (8,б сүйрет). Қала берсе  $(ka)_\beta > (ka)_\alpha$  теңсизлиги орынлағанлықтан  $E_\beta < E_\alpha$ . Егер шуқырдың өлшемин және де үлкейтсек (мысалы  $C = 2$  шамасын алсақ), онда  $\gamma$  ноқатындағы кесилисіүй оң жуплыққа ийе еле де төменирек ҳалды береди ( $E_\gamma < E_\beta$ ). Бирақ усы айтылғанлардан басқа оған  $\alpha'$  ноқатындағы кесилисіүгө сәйкес келетуғын тақ жуплыққа ийе ҳал қосылады (8-в сүйрет). Шуқырдың өлшемлеринин буннан былый өсиүи менен оның «сыйдырғышлығы» артады (8 г—е сүйретлер):  $C$

ның өсиүи менен оң ҳәм терис жуплыққа ийе гезеклесип жайласқан ҳаллардың сериясын пайда етип байланысқан ҳаллардың саны да сызықты түрде өседи. Меншикли функциялар болса, олар улыўмалық қағыйдаға бағынады: оларда ноллер қаншама көп болса, онда олардың энергиялар шкаласындағы ийелеген орны соншама жоқары болады. Төрт төменги ҳаллардың толқын функциялары  $C = 5$  болған жағдай ушын 9-сүйретте көрсетилген.



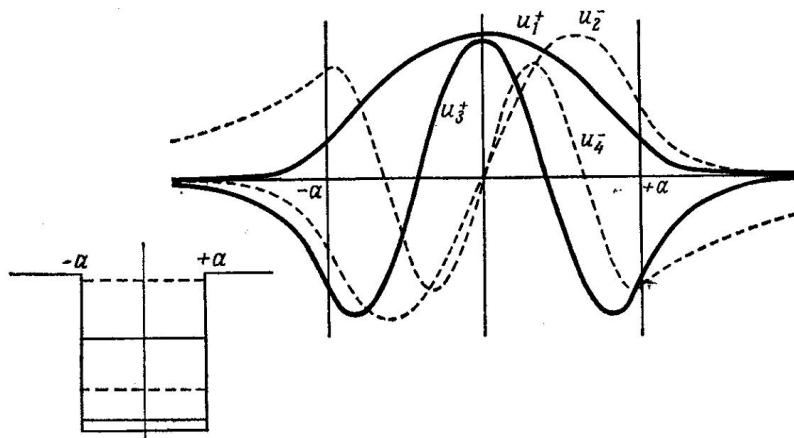
8-сүйрет.  $C$  характеристикалық параметриниң ҳәр қыйлы мәнислеридеги энергия қәддилери ( $a - e$ ).

Тутас сызықтар – оң жуплыққа ийе ҳаллар, пункттир сызықтар – терис жуплыққа ийе ҳаллар.

Классикалық механикада бөлекше шуқырды шеклеп турған дийўаллар арасында ( $x = \pm a$  ноқатлары арасында) энергияның қәлелеген мәнисинде тербеле алған болар еди. Шуқырдың сыртында оның кинетикалық энергиясы терис мәниске ийе болған болар еди. Соңлықтан шуқырдан сырттағы область классикалық жақтан жетиүге болмайтуғын область болып табылады. Кванттық механиканда болса биз бундай қатаң түрде қойылған шеклеүге ийе болмаймыз. Шуқырдың сыртында бөлекшени табыудың итималлығы  $P_i$  бирден (1 ден) киши болады:

$$P_i = \int_{-a}^{+a} |u|^2 dx = 1 - \frac{k^2}{k_0^2(1+\kappa a)}. \quad (25.9)$$

Солай етип бөлекшениң шуқырдың сыртында жайласыўының итималлығы нолге тең емес екен. Шуқырдан сырттағы шекли интервал ушын итималлық бөлекше менен шуқырдың арасындағы қашықлықтың үлкейиўи менен экспоненциал түрде кемейеди.



9-сүйрет.  $C = 5$  болған жағдай ушын энергия қәддилери ҳәм меншикли функциялар. Тутас сзықтар — оң жуплыққа ийе ҳаллар, пункттир сзықтар — тақ жуплыққа ийе ҳаллар.

## 26-мәселе. Еки шексиз дийўаллар арасындағы туўры мүйешли потенциал шуқыр

10-сүйретте келтирилген потенциал ушын Шредингер теңлемесиниң шешимлерин табыңыз.  $l \rightarrow \infty$  шегиндеги оң мәнисли энергияға ийе ҳалларды айрықша түрде қараңыз.

**Шешими.**  $E < 0$  болған «байланысқан» ҳалларды тезлик пенен қараўдан баслаймыз. (25.2)-теңлик пенен анықланған бурынғы  $k^2$ ,  $k_0^2$  ҳәм  $\kappa^2$  ларды ҳәм

$$\int_{-l}^{+l} |u|^2 dx = 1$$

нормировка шәртин пайдаланып толқын функцияларын төмендегидей етип жаза аламызыз:

Жуп:

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\cos ka \operatorname{sh} \kappa(l-x)}{\operatorname{sh} \kappa(l-a)}, & 0 \leq x \leq l, \end{cases} \quad (26.1a)$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \frac{\cos^2 ka}{\kappa} \left[ \operatorname{ctg} \kappa(l-a) - \frac{\kappa(l-a)}{\operatorname{sh}^2 \kappa(l-a)} \right];$$

Тақ:

$$u_- = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \frac{\sin ka \operatorname{sh} \kappa(l-x)}{\operatorname{sh} \kappa(l-a)}, & a \leq x \leq l, \end{cases} \quad (26.1b)$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \frac{\sin^2 ka}{\kappa} \left[ \operatorname{ctg} \kappa(l-a) - \frac{\kappa(l-a)}{\operatorname{sh}^2 \kappa(l-a)} \right].$$

Бул жерде де 25-мәселедегидей  $u(x)$  функциясының  $x=a$  нөкательнадағы үзликсизлигин есапқа алдық. Бирақ бул нөкательнадағы  $u'(x)$  туўындысының үзликсизлиги талабы бизге қосымша шәрт қояды:

Жуп

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k} \operatorname{ctg} \kappa(l-a), \quad (26.2a)$$

так

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\kappa} \operatorname{th} \kappa(l-a). \quad (26.2b)$$

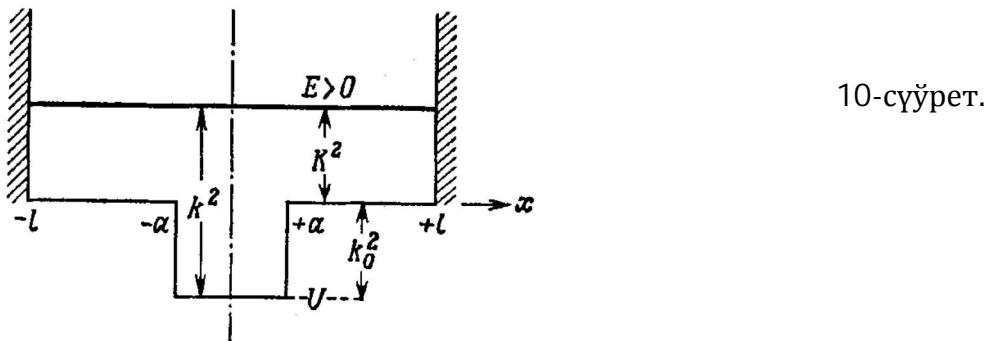
Бул аңлатпалар меншикли мәнислерди есаплауға мүмкіншилик береди. бирақ биз буннан былай майды-шүйделерине тереңлеспеймиз ҳәм

$$\kappa(l-a) \gg 1$$

шәрти орынланғанда гиперболалық функцияның екеүиниң де 1 ге тезден умтылатуғының аңғарамыз. Бундай жағдайда (26.2a) ҳәм (26.2b) теңлемелери алдыңғы мәселениң меншикли мәнислер ушын жазылған (25.4a) ҳәм (25.46) аңлатпаларына, ал  $1/A_{\pm}^2$  ушын (26.1a) ҳәм (26.16) нормировка қатнаслары сәйкес (25.3a) ҳәм (25.36) қатнасларына өтеди. Толқын функцияларының өзлери ушын жазылған (26.1a)- ҳәм (26.16)-аңлатпаларда  $|x| < l$ , бирақ  $\kappa(l-x) \gg 1$  шәрти орынланғанда, яғни тап солай етип (25.3a)- ҳәм (25.36)-толқын функцияларына және де қайтып келип

$$\frac{\sinh \kappa(l-x)}{\sinh \kappa(l-a)} \approx e^{\kappa(a-x)}$$

деп алыуға болады.



Оң мәнисли энергияларға ийе ҳаллар ҳаққындағы мәселе әдеүир кызық мәселе болып табылады. 1 дин шекли мәнислеринде, 1 дин өсиюи менен пайда болатуғын қәддилердин тығыз системасын пайда ететуғын дискрет меншикли мәнислер бар болады. Бул система  $l \rightarrow \infty$  шегинде континуумға өтеди.  $E > 0$  ниң орнына жаңа

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}, \quad K^2 = -\kappa^2 = k^2 - k_0^2 \quad (26.3)$$

еэзгериўшигин киргизип биз толқын функцияларын мына түрде жазыўымыз мүмкін:

Жуп

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\cos ka}{\sin K(l-a)} \sin K(l-x), & a \leq x \leq l, \end{cases} \quad (26.4a)$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] - \frac{\cos^2 ka}{K} \left[ \operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)} \right];$$

Тақ

$$u_- = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \frac{\sin ka}{\sin K(l-a)} \sin K(l-x), & a \leq x \leq l, \end{cases} \quad (26.46)$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] - \frac{\sin^2 ka}{K} \left[ \operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)} \right].$$

Бул аңлатпалар бойынша  $u(x)$  функциясы енди үзликсиз, ал оның туўындысы  $u'(x)$  болған функциясының үзликсизлиги және де шәрт береди:  
жуп

$$\operatorname{tg} ka = \frac{K}{k} \operatorname{ctg} K(l-a), \quad (26.5a)$$

так

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{K} \operatorname{tg} K(l-a). \quad (26.5b)$$

Бул шәртлер меншикли мәнислерди есаплаўға мүмкіншилик береди. Бул шәртти пайдаланып биз  $1/A_{\pm}^2$  шамалары ушын жазылған нормировкалаушы аңлатпалардағы екинши қаўсырмалардағы  $\operatorname{ctg} K(l-a)$  ны алмастыра аламыз. Нәтийжеде мына аңлатпаларды аламыз:

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \quad (26.6a)$$

$$+ (l-a) \left( \cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \sin^2 ka \right) - \frac{k}{K^2} \sin ka \cos ka$$

Хәм

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \quad (26.6b)$$

$$+ (l-a) \left( \sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \cos^2 ka \right) + \frac{k}{K^2} \sin ka \cos ka.$$

Егер  $l \rightarrow \infty$  шәрти орынланатуғын болса, онда бул аңлатпалардағы екинши ағза шексиз үлкейеди. Сонықтан

$$\frac{1}{A_+^2} \approx l \left( \cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \sin^2 ka \right), \quad (26.7)$$

$$\frac{1}{A_-^2} \approx l \left( \sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \cos^2 ka \right).$$

Бирақ усы жағдайға қарамастан шуқырдың сыртындағы амплитуданы (26.4a) ҳәм (26.4б) аңлатпаларынан тикелей алыша болады:

$$\frac{\sin^2 K(l-a)}{A_+^2 \cos^2 ka} \rightarrow l, \quad \frac{\sin^2 K(l-a)}{A_-^2 \sin^2 ka} \rightarrow l. \quad (26.8)$$

Сонықтан  $x > a$  шәрти орынланғанда толқын функциясы

$$u_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{l}} \sin K(l-x) \quad (26.9)$$

турине ийе болады. Бул жерде  $l$  шамасы елеге шекем толқын функциясының фазасына киреди. Бирақ оны меншикли мәнислерди анықтайтуғын (26.5a)- ҳәм (26.56)-теңлемелердин жәрдеминде жоғалтыў мүмкин:

жуп

$$Kl = \operatorname{arctg} \left( \frac{\frac{K}{k} + \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} Ka}{\operatorname{tg} ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg} Ka} \right), \quad (26.9a)$$

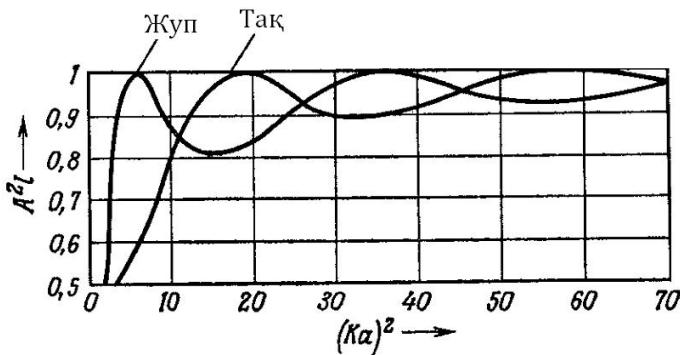
так

$$Kl = \operatorname{arctg} \left( \frac{\operatorname{tg} Ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg} ka}{1 + \frac{K}{k} \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} Ka} \right). \quad (26.9b)$$

Бул толқын функциялар системасының ең көзге тасланатуғын айырмашылығы олардың энергия қәддилеринен ибарат. Энергия қәддилериниң тығыздығын  $l$  дин жүдә ұлкен, бирақ шекли мәнислери ушын (26.5a) ҳәм (26.56) теңлемелерден табыў мүмкин.  $Kl$  өзгериўшиси кеңлиги  $\pi$  ге тең интервалда өзгергенде бул теңлемелердин оң тәрепи ҳақыйқай көшер бойынша  $-\infty$  тен  $+\infty$  ке шекем өзгереди. Теңлемениң екеүиниң де бул интервалда тек бир шешими болады. Сонықтан биз бир бириңен орташа  $\Delta K = \pi/(2l)$  шамасындағы қашықтықта жайласқан гезеклесип жайласқан жуп ҳәм тақ қәддилерге ийе боламыз ( $K$  өзгериўшиси шкаласында). (26.3)-аңлатпаға сәйкес энергия шкаласындағы қәддилер арасындағы орташа қашықтық

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{m} K \frac{\pi}{2l} = \frac{\pi}{l} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m} E} \quad (26.10)$$

шамасына тең. Солай етип избе-из жайласқан қәддилер арасындағы орташа қашықтық тек  $E^{1/2}$  шамасына пропорционал ҳәм нормировкалаушы интервалдың узынлығына кери пропорционал өседи екен. Демек  $l \rightarrow \infty$  шегинде дискрет энергия спектри үзлиksiz спектрге айланады екен.



11-сүйрет.  
Үзлиksiz спектрдеги виртуаллық  
ҳаллар.

$k_0a \equiv C = 2$  болған жағдай ушын амплитуданың өзгериў өзгешелиги 11-сүйретте келтирилген. Өлшем бирлигине ийе емес  $A^2l$  шамасы шуқырдың сыртындағы барлық областта бирдей мәниске ийе, ал  $l$  шамасы ұлкен болғанда шуқырдың ишиндеғи амплитуданың квадратының өлшемин береди. Бул шаманың  $(Ka)^2$  шамасынан ғәрзелигиниң графиги, яғни бирликсиз шамалардағы энергияның мәнисинен ғәрзелиги (26.7)-формуланың жәрдеминде құрылған. Энергияның избе-

из мәнислериниң шексиз көп саны бар. Олар ушын  $A^3l$  шамасы 1 ге тең максималлық мәнисти қабыллайды. Максимумлар арасында энергия үлкен болған сайын ҳәлсиз көринетуғын амплитуданың минимумлары жатады (11-сүйреттеги ордината көшериниң төменги жартысының көрсетилмегендигине итибар беріңиз). Амплитуданың максимумына сәйкес келетуғын энергияларда энергияның мәниси он болса да биз қарап атырған ҳаллар байланысқан ҳаллардың базы бир белгилерин еле де сақлады. Себеби бул ҳалларда шуқыр ийеленген областтағы мүмкін болған толқын функцияларының максималлық концентрациясы алынады. Усындай себепке байланыслы виртуаллық ҳаллар ҳаққында гәп етиледи (терис энергияға ийе «хақыйқый» байланысқан ҳалларға қарама-қарсы мәнисте).

## 28-мәселе. Дәүирли потенциал

Дәүирли потенциал бар болған жағдайдағы толқын функциялары менен энергия спектри арасындағы улыўмалық қатнасларды алыңыз.

**Шешими.** Егер  $V(x)$  арқалы дәүири  $a$  шамасына тең дәүирли функция берилген болса, онда Шредингер теңлемеси  $a$  еселенген барлық трансляцияларға қарата инвариант болады:

$$V(x+a) = V(x), \quad x \rightarrow x+na, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (28.1)$$

$u_1(x)$  ҳәм  $u_2(x)$  арқалы Шредингер теңлемесиниң сызықлы ғәрзесиз шешимлери болсын. Бундай жағдайда  $u_1(x+a)$  ҳәм  $u_2(x+a)$  функциялары да сол теңлемениң шешимлери болады. Қәлеген шешимди  $u_1(x)$  ҳәм  $u_2(x)$  функцияларының сызықлы комбинациясы түринде қарауға болғанлықтан, бул жағдай  $u_1(x+a)$  ҳәм  $u_2(x+a)$  функциялары ушын да орынлы болады:

$$\begin{aligned} u_1(x+a) &= C_{11}u_1(x) + C_{12}u_2(x), \\ u_2(x+a) &= C_{21}u_1(x) + C_{22}u_2(x). \end{aligned} \quad (28.2)$$

Енди усы шешимлердин ишинде бир бири менен

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x) \quad (28.3)$$

аңлатпасының жәрдеминде байланысқан  $\psi_1$  ҳәм  $\psi_2$  шешимлери де бар болатуғынлығын (Флоке теоремасы) дәлиллеўге болады. Бул аңлатпада  $\lambda$  арқалы турақлы көбейтиұши белгиленген. Бул жағдайда

$$\psi(x+na) = \lambda^n\psi(x), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (28.3a)$$

шәртиниң орынланатуғынлығы айқын. Биз излеген дәлиллеў мына түрге ийе болады:

$$\psi(x) = Au_1(x) + Bu_2(x) \quad (28.4)$$

ҳәм (28.2)-аңлатпаға сәйкес

$$\psi(x+a) = (AC_{11} + BC_{21})u_1(x) + (AC_{12} + BC_{22})u_2(x).$$

Егер

$$\begin{aligned} AC_{11} + BC_{21} &= \lambda A, \\ AC_{12} + BC_{22} &= \lambda B \end{aligned} \quad (28.5)$$

теңликлери орынланатуғын болса, онда соңғы аңлатпа  $\lambda\psi(x)$  шамасына тең болады.

$A$  ҳәм  $B$  шамаларына қарата (28.5)- еки бир текли сыйықлы алгебралық теңлемелер системасы тек ғана

$$\begin{vmatrix} C_{11} - \lambda & C_{21} \\ C_{12} & C_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (28.6)$$

детерминанты нолге тең болғанда ғана қурамалы емес шешимлерге ийе болады. Бул  $\lambda$  шамасына қарата квадрат теңлеме болып, оның түбірлери  $\lambda_1$  менен  $\lambda_2$  ге еки  $\psi_1$  ҳәм  $\psi_2$  функциялары сәйкес келеди.

(28.3)-формуладан

$$D = \psi_1 \psi'_2 - \psi_2 \psi'_1$$

Вронский детерминантының (Вронский детерминанты деп  $\psi_1\psi'_2 - \psi_2\psi'_1$  түріндеги детерминантқа айтамыз)

$$D(x+a) = \lambda_1 \lambda_2 D(x)$$

қантасын қанаатландыратуғынлығын көриүге болады. Грин теоремасы бойынша Вранский детерминантты  $x$  тан ғәрэзли емес, сонлықтан

$$\lambda_1 \lambda_2 = 1 \quad (28.7)$$

қатнасы келип шығады.

$\lambda_1$  менен  $\lambda_2$  параметрлері ҳаққында толығырақ мағлыўматларды (28.3a) теңлигин қарап алғыуға болады. Мейли  $|\lambda| > 1$  болсын. Бундай жағдайда толқын функциясы  $\psi$  дин амплитудасы  $x \rightarrow \infty$  та шексиз үлкейеди ҳәм  $x \rightarrow -\infty$  де шексиз кемейеди. Егер  $|\lambda| < 1$  теңсизлиги орынланса қарама-қарсы жағдай орын алады. Бундай шешимлер нормировкаландырылғылар. Сонлықтан физикалық мәнислерге ийе шешимлер тек  $|\lambda| = 1$  теңлиги орынланған жағдайда ғана, яғни

$$\lambda_1 = e^{iKx} \quad \text{хәм} \quad \lambda_2 = e^{-iKx} \quad (28.8)$$

орын алады. Бул аңлатпаларда  $K$  арқалы ҳақыйқый шама белгиленген.  $e^{2\pi ln} = 1$  болғанлықтан  $K$  шамасының

$$-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{2} \quad (28.9)$$

интервалында жатқан мәнислері менен шеклениүге болады. Бул жағдай бизге мүмкін болған барлық толқын функцияларын береди. Солай етип  $\Psi(x)$  тың барлық шекленген шешимлері ушын

$$\Psi(x+na) = e^{InKx} \Psi(x) \quad (28.10)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул жағдай  $\Psi(x)$  функциясы тек

$$\psi(x) = e^{iKx} u_K(x) \quad (28.11)$$

түрге ийе болғанда ғана жүзеге келеди. Бул аңлатпада  $u_K(x)$  арқалы дәүирли функция, яғни

$$u_K(x) = u_K(x+a) \quad (28.12)$$

түриндеги функция белгиленген. Бул нәтийже Блох теоремасының мазмұнын қурайды.

Енди энергия спектри мәселесине келемиз.  $0 \leq x \leq a$  интервалында (28.4) аңлатпасы ушын исленгендей қандай да  $u_1$  ҳәм  $u_2$  шешимлеринен  $\psi$  ушын шешимди жазыўымыз керек. Дәүирлиліктиң қоңсы  $a \leq x \leq 2a$  интервалы ушын (28.10)-формулаға сәйкес

$$\psi(x) = e^{iKa} [Au_1(x-a) + Bu_2(x-a)] \quad (28.13)$$

формуласын аламыз. Бунда аргументтиң  $x-a$  мәниси алдыңғы интервалға түседи. Бул интерваллардың шегарасында, яғни  $x=a$  ноқатында (28.4) ҳәм (28.13) аңлатпалардың өзлери де, олардың туғындылары да бир бирине сәйкес келийи керек:

$$\begin{aligned} Au_1(a) + Bu_2(a) &= e^{iKa} [Au_1(0) + Bu_2(0)], \\ Au'_1(a) + Bu'_2(a) &= e^{iKa} [Au'_1(0) + Bu'_2(0)]. \end{aligned} \quad (28.14)$$

Бул  $A$  ҳәм  $B$  ға қарата бир текли теңлемелер системасы детерминантты нолге тең болған жағдайда ғана шешимге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} u_1(a) - e^{iKa} u_1(0) & u_2(a) - e^{iKa} u_2(0) \\ u'_1(a) - e^{iKa} u'_1(0) & u'_2(a) - e^{iKa} u'_2(0) \end{vmatrix} = 0.$$

Детерминантты ашып биз ең ақырында

$$\cos Ka = \frac{[u_1(0)u'_2(a) + u_1(a)u'_2(0)] - [u_2(0)u'_1(a) + u_2(a)u'_1(0)]}{2(u_1u'_2 - u_2u'_1)} \quad (28.15)$$

қатнасына келемиз. Бул аңлатпаның бөлімінде аргументтиң қәлеген мәнисинен алынған вронскиан тур (вронскиан константа болғанлықтан оның айқын мәнисин көрсетій шәрт емес).

(28.15)-теңлеме меншикли мәнислердиң бар болыўы шәрти болып табылады. Егер теңлемениң оң тәрепиниң абсолют шамасы бирден артық болмаса бул теңлемениң жәрдемінде  $K$  шамасын есаплаўға болады. Бул шәртти қанаатландыратуғын энергияның мәнислериниң көп санлы интерваллары бар. Соның менен бирге бул шәрт қанаатландырылмайтуғын да энергияның көп санлы интерваллары бар. Солай етип энергия спектри айырым қәддилерден турмайды, ал руқсат етилген ҳәм қадаған етилген энергия зоналардың гезеклескен избезлигинен турады. (28.15)-аңлатпаға сәйкес энергия зоналарының шегарасы  $\cos Ka = \pm 1$  қатнасынан анықланады.

**Ескертий:**  $u_1$  ҳәм  $u_2$  шешимлерин сыйықлы ғәрэзсиз болған қәлеген  $v_1$  ҳәм  $v_2$  сыйықлы ғәрэзсиз болған қәлеген шешимлері жубы менен алмастырыўға болатуғын болғанлықтан (28.15)-теңлемени тап сондай табыс пенен  $v$

функциясы арқалы да жазыўға болады. Бирақ ол да тап сол энергия зоналарына алыш келийи керек. Буның дұрыслығына (28.15)-теңлемеге

$$u_1 = c_{11}v_1 + c_{12}v_2, \quad u_2 = c_{21}v_1 + c_{22}v_2$$

аңлатпаларын қойып исениүге болады. Қурамалы емес есаплаўлар  $v$  функциясын пайдаланғанда егер  $\|c_{ik}\|$  детерминанты нолге айланбайтуғын болғанда  $u$  функциясын пайдаланғанда алынған нәтийжелердин алышатуғынлығын көрсетеди.

## 29-мәселе. Дирак потенциал тарағы

Дирактың  $\delta$ -функциясының избе-излигинен туратуғын дәүирли потенциал берилген (қоңсылас айрықша ноқаттар арасындағы интервал тұрақты ҳәм  $a$  шамасына тең):

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na). \quad (29.1)$$

Энергияның руқсат етилген мәнислеринен туратуғын зоналарды анықлаңыз.

**Шешими.**

$$u_1(x) = e^{ikx} \text{ ҳәм } u_2(x) = e^{-ikx} \quad (29.2)$$

түриндеги фундаменталлық шешимлерден баслаймыз.

Егер  $0 \leq x \leq a$  интервалында шешим

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (29.3)$$

түрине ийе болса, онда қоңсылас  $a \leq x \leq 2a$  интервалында шешим (28-мәселеге қараңыз)

$$u(x) = e^{iKa} [Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}] \quad (29.4)$$

түринде болады.  $x = a$  ноқатында

$$\begin{aligned} u(a+0) &= u(a-0), \\ u'(a+0) &= u'(a-0) + 2\Omega u(a) \end{aligned} \quad (29.5)$$

шегаралық шәртлериниң орынланыўы керек. Соныңтан

$$e^{iKa} (A + B) = Ae^{ika} + Be^{-ika} \quad (29.6a)$$

ҳәм

$$ike^{iKa} (A - B) = ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) + 2\Omega(Ae^{ika} + Be^{-ika}). \quad (29.6b)$$

(29.6a) ҳәм (29.6b) теңлемелер  $A$  ҳәм  $B$  шамаларына қарата бир текли сыйықты теңлемелер системасы болып табылады. Оның детерминанты нолге айланыўы керек. Әпиўайы түрлендириўлер

$$\cos Ka = \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka \quad (29.7)$$

теңлигин береди. Демек энергияның руқсат етилген зоналары

$$\left| \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka \right| \leq 1 \quad (29.8)$$

ямаса

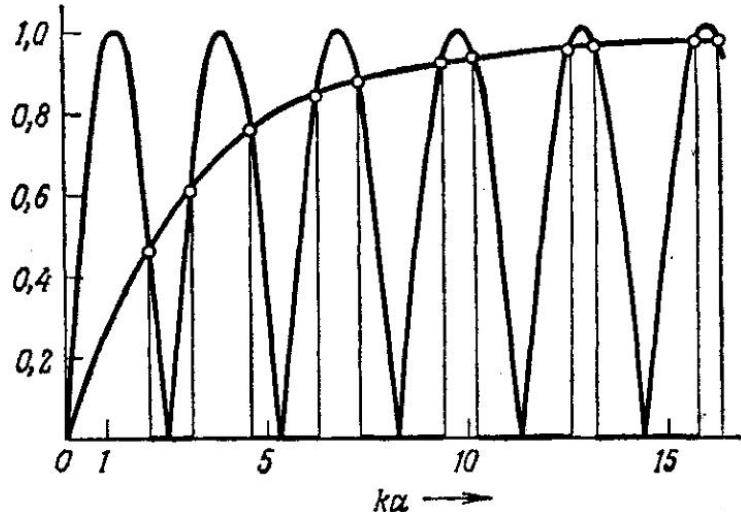
$$\left| \cos \left( ka - \arctg \frac{\Omega a}{ka} \right) \right| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + (\Omega a / ka)^2}} \quad (29.9)$$

теңсизлигинин жәрдемінде, ал энергияның меншикли мәнислери

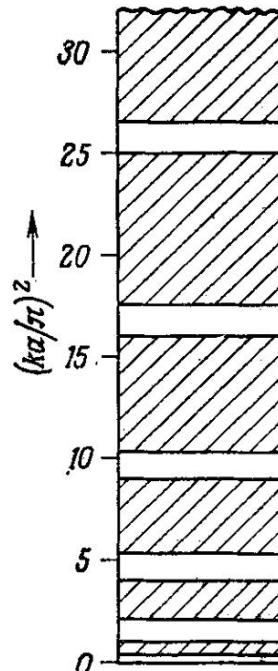
$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (ka)^2 \quad (29.10)$$

формуласының жәрдемінде анықланады.

15—18 сүйретлерде  $\Omega a = 4$  болған жағдай ушын орынланған есаплаўлардың нәтийжелери көлтирилген. (29.9)-теңсизликтиң оң ҳәм шеп тәрепіндегі турған  $ka$  шамасының функциялары 15-сүйретте көрсетилген.

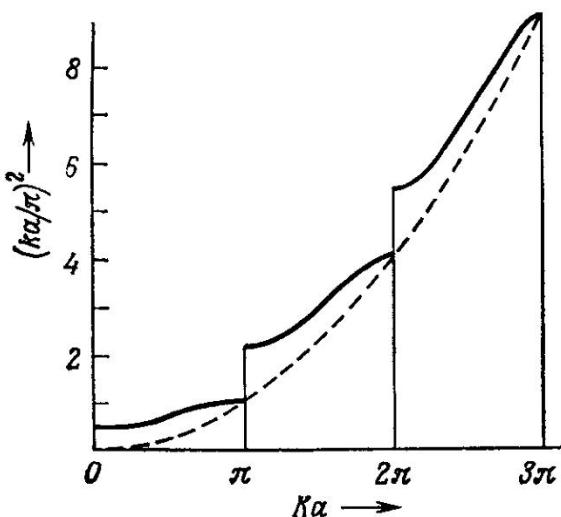


15-сүйрет. Зоналық структуралық графикалық анықлау

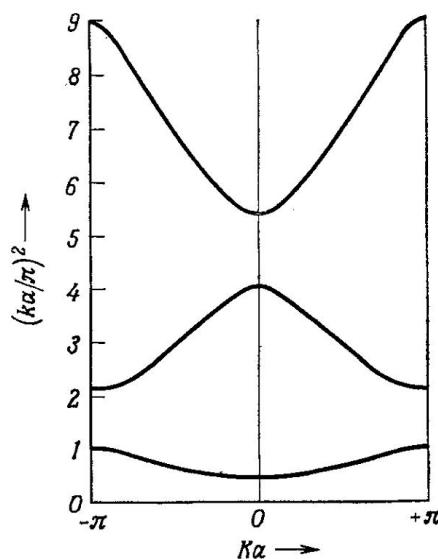


16-сүйрет. Дирак потенциал тарағы орын алғандағы зоналық структура.

Сәйкес иймекликлердин кесилисіүү ноқатлары киши дөңгелеклер менен аңлатылған, ал (29.9)-теңсизлик орынланатуғын интерваллар  $ka$  көшеріндегі жуўансызықтар менен белгиленген.



17-сүүрет. Бириңи үш зона ушын (Бриллюэнниң бир өлшемли зоналары) энергияның  $Ka$  шамасынан ғәрэзлиги. Пунктир сызық пенен еркин бөлекшениң энергиясына жуýап беретуфын парабола белгиленген.



18-сүүрет. Энергияның  $Ka$  өзгериүшисинен ғәрэзлиги.

Зоналардың жоқарғы шегарасында  $\pi$  еселенген ноқатлар сәйкес келеди. (29.7)-теңлемеге сәйкес был ноқатларда  $\cos Ka = \cos ka$ . 15-фигуралық шқалада табылған зоналардың ийелеген орынлары 16-сүүретте келтирилен. Бул сүүретте руқсат етилген энергия зоналары штрихланған. Энергияның артыўы менен руқсатетилген зоналар кеңейеди. Соныңтан энергия спектри үзлиksiz спектрге жақынласады. Бирақ сонда да руқсат етилген зоналар үзлиksiz спектрге толығы менен айланбайды: ҳәтте ең жоқары энергияларда да барлық үақытта жоқарыдан  $ka = n\pi$  ноқатларына тийисетуфын қадаған етилген зоналар болады. 17- ҳәм 18-сүүретлерде бириңи үш зона ушын энергияның (өлшеми жоқ бирликлердеги)  $Ka$  шамасынан ғәрэзлиги көрсетилген. 17-сүүретте  $Ka$  өзгериүшиси бир зонадан екинши зонаға өткенде монотонлы түрде өседи, ал 18-сүүретте болса оның өзгериси  $-\pi \leq Ka \leq \pi$  интервалы менен шекленген. 17-сүүреттеги пунктир сызық руқсат етилген зоналардың жоқарғы шегараларына сәйкес келетуфын ноқатынан өтетуфын  $K = k$  параболасын көрсетеди.

Келтирилген сүүретлердин барлығы да  $\Omega a = 4$  болған жағдайда тийисли. Соныңтан сол сүүретлер бойынша дийўалдың өткизгишлигиниң энергия спектрине тәсири ҳақында ҳеш нәрсе айтыўға болмайды.  $\Omega a$  ның киши мәнислери ушын (29.9)теңсизликтиң оң тәрепи 1 ге тезирек жақынласады ҳәм 15-сүүреттеги сәйкес иймеклик косинусоиданы усы косинусоиданың максимумына жақын ноқатларда кеседи. Бул қадаған етилген зоналардың қалыңлығының кемейетуғынлығын көрсетеди. Руқсат етилген зоналардың жоқарғы шегарасының ийелейтуғын орны ( $ka = n\pi$  ноқатлары)  $\Omega a$  дан ғәрэзсиз болғанлықтан усы шаманың киширейиүи менен 16-сүүретте был зоналардың төменги шегараларының ғана төменге қарай жылжыйтуғынлығы көринип тур.  $\Omega a = 0$  теңлиги орынланғанда қадаған етилген зоналар пүткіллей жоғалады. Усының менен бирге бизиң потенциалымыз да жоғалады. Бул жағдайда биз еркин қозғалысқа ҳәм соған сәйкес үзлиksiz спектрге келемиз. Екинши тәрептен, егер  $\Omega a \rightarrow \infty$  шәрти орынланатуғын болса руқсат етилген зоналар  $ka = n\pi$  дискрет қәддилерге айланады. Бул жағдайда дийўаллар потенциал шуқырларды бир бириңен толығы менен изоляциялайды ҳәм биз қарап атырған спектр 18-мәселениң спектрине айланады. Тек ғана биз ҳәзир

қарап атырған мәселеде дийўаллар арасындағы қашықлық  $a$  шамасына тең, ал 18-мәселеде дийўаллар арасындағы қашықлық  $2a$  да тең еди.

### 30-мәселе. Гармоникалық осциллятор

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (30.1)$$

осцилляторлық потенциалы бар жағдайдағы меншикли мәнислерди ҳәм меншикли функцияларды табыңыз.

**Шешими.**

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{және} \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (30.2)$$

белгилеўлерин киргизиў арқалы Шредингер теңлемесин былайынша жазыўға болады

$$\frac{d^2u}{dx^2} + (k^2 - \lambda^2 x^2) u = 0. \quad (30.3)$$

Бул дифференциаллық теңлемениң шешимлери  $|x| \gg k/\lambda$  шәрти орынланғанда  $\exp(\pm i/\lambda x^2)$  нызамы бойынша өзгереди. Егер

$$u(x) = e^{-i/\lambda x^2} v(x) \quad (30.4)$$

деп есаплап экспонентаны  $u(x)$  функциясынан айырып алатуғын болсақ, онда

$$v'' - 2\lambda x v' + (k^2 - \lambda^2) v = 0 \quad (30.5)$$

теңлемесин қанаатландыратуғын  $v(x)$  функциясы полином болады ямаса  $e^{\lambda x^2}$  функциясына пропорционал болады. (30.5)-теңлемени

$$v(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j \quad (30.6)$$

қатарға жайыўының жәрдеминде шешип

$$a_{j+2} = \frac{\lambda(2j+1) - k^2}{(j+2)(j+1)} a_j \quad (30.7)$$

рекуррентли қатнасын аламыз.

$j \rightarrow \infty$  шегинде  $e^{\lambda x^2}$  функциясын дәреже бойынша қатарға жайыўға сәйкес келетуғын  $a_{j+2} = (2\lambda/j) a_j$  асимптоталық қатнасы орын алады. Солай етіп егер (30.6)-қатары ең ақырғы ағзада үзилиске түспейтуғын болса (30.4) шешимин нормировкалаўға болмайды екен. Ал (30.6)-қатардың ең ақырғы ағзада үзилиске түсійи  $a_{n+2} = 0$  болғанда, яғни

$$k^2 = \lambda(2n+1)$$

теңлиги орынланғнада орын алады. Бул жағдайда (30.2)-аңлатпаға сәйкес

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (30.8)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

$u_n(x)$  меншикли функцияларын (30.7)-қатнастың жәрдеминде алдыңға ҳәм

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^2(x) dx = 1 \quad (30.9)$$

шәрти менен нормировкалау мүмкін.

Дәслепки меншикли функциялардың бир қаншасы төменде келтирилген:

$$\begin{aligned} u_0 &= C_0 e^{-1/2\lambda x^2}, \\ u_1 &= C_1 x e^{-1/2\lambda x^2}, \\ u_2 &= C_2 (1 - 2\lambda x^2) e^{-1/2\lambda x^2}, \\ u_3 &= C_3 \left( x - \frac{2}{3} \lambda x^3 \right) e^{-1/2\lambda x^2}, \\ u_4 &= C_4 \left( 1 - 4\lambda x^2 + \frac{4}{3} \lambda^2 x^4 \right) e^{-1/2\lambda x^2}, \\ u_5 &= C_5 \left( x - \frac{4}{3} \lambda x^3 + \frac{4}{15} \lambda^2 x^5 \right) e^{-1/2\lambda x^2}, \end{aligned} \quad (30.10)$$

ал сәйкес нормировкалау коэффициентлери төменде келтирилген:

$$\begin{aligned} C_n &= \left( \frac{\lambda}{\pi} \right)^{1/4} c_n, \quad c_0 = 1, \quad c_1 = \sqrt{2\lambda}, \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ c_3 &= \sqrt{3\lambda}, \quad c_4 = \sqrt{\frac{3}{8}}, \quad c_5 = \sqrt{\frac{15\lambda}{4}}. \end{aligned} \quad (30.11)$$

Ең дәслепки уш меншикли функциялар 19-сүйретте көрсетилген.

Меншикли функциялардың анық жуплықта ийе болатуғының аңсат көрийгे болады. Потенциалдың симметрияға ийе болыуының себебинен  $V(-x)=V(x)$  шәрти орныланады, ал  $u_n(-x)$  функциясы  $u_n(x)$  функциясы менен бир қатарда дифференциал теңлемениң тап сол (30.8)-меншикли мәниске сәйкес келетуғын шешими болып табылады. Айның (вырождение) болмағанлықтан сол еки шешим бир биринен тек турақлы  $f$  көбейтиұши менен ғана айрылады. Усының менен бирге нормировка шәртинен  $|f|^2=1$  теңлигине ийемиз.  $x$  тың белгисин және бир рет өзгертсек биз дәслепки шешимге қайтып келемиз, сонықтан  $f^2=1$  ямаса  $f=\pm 1$ . Демек қәлеген меншикли функция я жуп, я тақ болады деген сөз.

Егер (30.5)-теңлемеге  $x$  тың орнына

$$y = \lambda x^2 \quad (30.12)$$

жаңа өзгериүшисин киргизсек бол факттиң дурыслығын тиккелей тексерип көрийгे болады. Бул жағдайда  $v(y)$  функциясы

$$yv'' + \left( \frac{1}{2} - y \right) v' + \left( \frac{k^2}{4\lambda} - \frac{1}{4} \right) v = 0$$

түриндеги айныған гипергеометриялық функция ушын дифференциал теңлемени қанаатландырады. Егер

$$a = \frac{1}{4} - \frac{k^2}{4\lambda} = \frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega} \quad (30.13)$$

түриндеги белгилеўди қабыл етсек бул теңлемениң улыўмалық шешими

$$v = A {}_1F_1\left(a, \frac{1}{2}; y\right) + B y^{1/2} {}_1F_1\left(a + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; y\right) \quad (30.14)$$

түринде болады. Айныған геометриялық қатар (вырожденный геометрический ряд)  ${}_1F_1$  пүтина функция болғанлықтан (30.14)-шешимдеги  $x$  өзгериўшисине қатнасы бойынша биринши қосылыўшы жуп, ал екинши қосылыўшы тақ.  $y \rightarrow \infty$  шегинде еки қосылыўшыда  $e^y y^{a-1/2}$  сыйқлы тарқалады ҳәм егер қатарлар жоғалмаса ҳәм үзилиске түспесе шешимди нормировкалаўға болмайды. Биринши аргументи пүтина терис санға тең болса гипергеометриялық қатар үзиледи. Сонықтан бизде еле де еки мүмкіншилик бар. Егер

$$a = -n \text{ ямаса } E_{2n} = \hbar\omega \left(2n + \frac{1}{2}\right) \quad (30.15a)$$

болса биринши қатар үзиледи ҳәм меншикли функциялар ушын

$$u_{2n}(x) = A {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \lambda x^2\right) e^{-1/4\lambda x^2} \quad (30.16a)$$

функциясын аламыз.

*Егер*

$$a + \frac{1}{2} = -n \text{ ямаса } E_{2n+1} = \hbar\omega \left(2n + \frac{3}{2}\right) \quad (30.15b)$$

болса, онда екинши қатар үзиледи ҳәм меншикли функция мынаған тең болады:

$$u_{2n+1}(x) = B x {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; \lambda x^2\right) e^{-1/4\lambda x^2}. \quad (30.16b)$$

Бул нәтийжелер меншикли мәнислер ушын алынған (30.8)- ҳәм меншикли функциялар ушын алынған (30.10)-формула менен толық сәйкесликке ийе.

(30.16a)- ҳәм (30.16b)-теңликлер менен алынған көп ағзалыларды Эрмит полиномлары деп атайды. Айныған гипергеометриялық функция менен олар

$$\begin{aligned} H_{2n}(\xi) &= (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \xi^2\right), \\ H_{2n+1}(\xi) &= (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2\xi {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; \xi^2\right) \end{aligned} \quad (30.17)$$

қатнаслары менен байланысқан. Усының менен бир қатарда және

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \quad (30.18)$$

формуласы орын алады.

Солай етип улыўма жағдайда нормировкаланған меншикли функциялар [(30.9)-аңлатпаға қараңыз]

$$u_n(x) = \left( \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \right)^{1/2} H_n(\sqrt{\lambda} x) e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \quad (30.19)$$

түрине ийе болады.

(30.19)-формула бойынша нормировканы есаплаў ушын төмендегидей қағыйдадан пайдаланамыз. Меншикли функцияны

$$u_n = C_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi); \quad \xi = \sqrt{\lambda} x$$

түринде жазамыз. Бундай жағдайда (30.9)-шәртке байланыслы

$$C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [H_n(\xi)]^2 d\xi = \sqrt{\lambda}$$

теңлигиниң орынланыўы керек. Енди  $H_n(\xi)$  полиномларының бириң оның (30.18)-аңлатпасы менен алмастырамыз. Буннан кейин алынған

$$(-1)^n C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасын бөлеклерге бөлип  $n$  рет интегралласақ ең ақырында

$$C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} d\xi = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасын аламыз.  $H_n(\xi)$  шамасы  $\xi$  ге қарата  $n$ -дәрежели көп ағзалы болғанлықтан  $n$  рет интеграллағаннан кейин  $\xi$  дин тек ең жоқарғы дәрежесиниң үлеси сақланып қалады:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n + \dots,$$

яғни

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!$$

Хәм (30.19)-формула менен толық сәйкес келетуғын

$$C_n^2 \cdot 2^n n! \sqrt{\pi} = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

### 37-мәселе. Потенциал текше (потенциальная ступенька)

$$V(x) = \frac{1}{2} V_0 \left( 1 + \operatorname{th} \frac{x}{2a} \right) \quad (37.1)$$

потенциал текшесиниң майданындағы шағылыштырыў коэффициентин анықлаңыз.

**Шешими.** Биз қарап атырған потенциал  $x = -\infty$  ноқатында  $V = 0$  деген  $x = +\infty$  ноқатында  $V = V_0$  ге шекем өседи. Усындағы өсиүдің барысында потенциалдың ең күшли өсиёйи  $-2a < x < 2a$  интервалында жүзеге келеди:

$$V(-2a) = 0,119V_0 \text{ жәм } V(+2a) = 0,881V_0. \quad (37.2)$$

Шеп тәрептен келип түсиўши толқынды тәрийиплейтуғын толқын функциясы

$$u = \begin{cases} x \rightarrow -\infty \text{ шегинде } u = e^{ikx} + Re^{-ikx}, \\ Ce^{-Kx}, \text{ егер } x \rightarrow +\infty \text{ шегинде } E < V_0, \\ Ce^{ik'x}, \text{ егер } x \rightarrow +\infty \text{ шегинде } E > V_0 \end{cases} \quad (37.3)$$

асимптоталық түрге ийе болыўы керек.

$|R|^2$  шамасы биз излеп атырған шағылыштырыў коэффициенти болып табылады. Потенциал (37.1) болған

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left[ k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \right] u = 0 \quad (37.4)$$

Шредингер теңлемесин шешиў ушын  $x$  өзгериўшиносиниң орнына жаңа

$$y = (1 + e^{x/a})^{-1} \quad (37.5)$$

өзгериўшиносин пайдаланамыз. Буннан кейин

$$\kappa^2 = k^2 a^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E, \quad \lambda^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 \quad (37.6)$$

белгилеўлерин пайдаланып ҳәм

$$\frac{d}{dx} = -\frac{1}{a} y (1-y) \frac{d}{dy}, \quad 1 + \operatorname{th} \frac{x}{2a} = 2(1-y)$$

екенлигин есапқа алып

$$y(1-y) \frac{d^2u}{dy^2} + (1-2y) \frac{du}{dy} + \left[ \frac{\kappa^2}{y(1-y)} - \frac{\lambda^2}{y} \right] u = 0 \quad (37.6)$$

теңлемесин аламыз.

**Ескертиў:** (37.6) түриндеги теңлемени ҳәзирги заман программаластырыў тиллеринде аналитикалық жоллар менен аңсат шешиў мүмкін. Мысалы Mathematica 7 for students тилин пайдаланғанда шегаралық шәртлерди бермей теңлемени шешиў ушын

$$\text{DSolve}[y * (1 - y) * u''[y] + (1 - 2y) * u'[y] + (\frac{k^2}{y * (1 - y)} - \frac{\lambda^2}{y}) * u[y] == 0, u[y], y]$$

түриндеги аңлатпа жазылады. Ал компьютер мынадай шешимди береди:

$$\begin{aligned} u[y] \rightarrow & -1^{-2} \frac{-k^2 + \lambda^2}{e^{\frac{1}{2}} \text{Log}[-1+y] \text{Log}[y]} -1 + y^{\frac{1}{2} (1-2ik)} y^{1+\frac{1}{2}} {}_{-1-2} \frac{-k^2 + \lambda^2}{C[2]} \\ & \text{Hypergeometric2F1}[-ik - \frac{-k^2 + \lambda^2}{-k^2 + \lambda^2}, 1 - ik - \frac{-k^2 + \lambda^2}{-k^2 + \lambda^2}, 1 - 2 \frac{-k^2 + \lambda^2}{-k^2 + \lambda^2}, y] + \\ & e^{\frac{1}{2} (-\text{Log}[-1+y] - \text{Log}[y])} (-1 + y)^{\frac{1}{2} (1-2ik)} y^{\frac{1}{2} (1+2 \frac{-k^2 + \lambda^2}{-k^2 + \lambda^2})} C[1] \\ & \text{Hypergeometric2F1}[-ik + \frac{-k^2 + \lambda^2}{-k^2 + \lambda^2}, 1 - ik + \frac{-k^2 + \lambda^2}{-k^2 + \lambda^2}, 1 + 2 \frac{-k^2 + \lambda^2}{-k^2 + \lambda^2}, y] \end{aligned}$$

Жоқарыда (37.6) түриндеги теңлемениң шешиминде Hypergeometric функцияның пайда болатуғының көринип тур. Екиншиден ҳәзирги заман компьютерлерин қолланғанда квантлық механиканың мәселелериниң аңсат ҳәм тез шешилетуғының айқын көринеди.

(37.6)-дифференциаллық теңлеме үш айрықша ноқатқа ийе болады:  $y = 0, 1, \infty$  ҳәм сонлықтан оның шешими гипергеометриялық функция арқалы аңлатылады.

$$u(y) = y^v (1-y)^\mu f(y) \quad (37.7)$$

подстановкасының жәрдеминде, бул подстановкада

$$v^2 = \lambda^2 - \kappa^2, \quad \mu^2 = -\kappa^2, \quad (37.8)$$

(37.6)-теңлеме қурамалы емес түрләндіриўлерден кейин стандарт формадағы Гаустың гипергеометриялық теңлемесине алып келинеди:

$$\begin{aligned} y(1-y)f'' + [(2v+1) - (2\mu+2v+2)y]f' - \\ - (\mu+v)(\mu+v+1)f = 0. \end{aligned} \quad (37.9)$$

Биз ҳәзир бул теңлемениң

$$f(y) = C {}_2F_1(\mu+v, \mu+v+1, 2v+1; y) \quad (37.10)$$

дара шешиминиң С коэффициентин сәйкес түрде сайлап алғанда (37.2)-шегаралық шәртти қанаатландыратуғының көрсетемиз.

$x \rightarrow +\infty$  шегинен баслаймыз. Бундай шекте  $y \approx e^{-x/a} \rightarrow 0$  ҳәм усыған сәйкес (37.10)-шешими  $f(0) = C$  теңлигине умтылады. Сонлықтан

$$u(y) \rightarrow Cy^v \approx Ce^{-vx/a}. \quad (37.11)$$

Енди еки мүмкіншиликті бир биринен айырыў керек.

а)  $\lambda > \kappa$ ,  $v$ -хақыйқый сан ҳәм нольден үлкен. Бул жағдайда (37.11)-аңлатпа экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди ( $E < V_0$  теңсизлиги орынланғанда усында болыўы керек). Солай етип

$$u \rightarrow Ce^{-Kx} \text{ при } K^2 = \frac{v^2}{a^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad (37.12a)$$

екенлигине ийе боламыз.

б)  $\lambda < \nu$ ,  $v = -ik'a$  — таза жормал сан. Бундай жағдайда

$$u \rightarrow Ce^{ik'x} \text{ ҳәм } k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0). \quad (37.126)$$

Екинши тәрептен  $y \rightarrow 1$  шегинде  $x \rightarrow -\infty$  ҳәм  $1-y \approx e^{x/a} \rightarrow 0$  екенлигин есапқа алғанда  $y$  аргументине ийе гипергеометриялық функцияны  $1-y$  аргументине ийе гипергеометриялық функцияға түрлендириудиң жақсы белгили болған қағыйдасын пайдаланыўға болады:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(\mu + v, \mu + v + 1, 2v + 1; y) &= \\ &= \frac{\Gamma(2v+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(v-\mu)\Gamma(v-\mu+1)} {}_2F_1(\mu + v, \mu + v + 1, 2\mu + 1; 1-y) + \\ &+ (1-y)^{-2\mu} \frac{\Gamma(2v+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu+v)\Gamma(\mu+v+1)} {}_2F_1(v-\mu, v-\mu+1, -2\mu+1; 1-y). \end{aligned}$$

$1-y = e^{x/a}$  теңлигин есапқа алсақ бул

$$u \rightarrow C \left\{ \frac{\Gamma(2v+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(v-\mu)\Gamma(v-\mu+1)} e^{\mu x/a} + \frac{\Gamma(2v+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu+v)\Gamma(v+\mu+1)} e^{-\mu x/a} \right\}$$

аңлатпасын береди.

$$\mu = ix, \quad \frac{\mu}{a} = ik \quad (37.13)$$

орнына қойыуынан кейин

$$C = \frac{\Gamma(v-\mu)\Gamma(v-\mu+1)}{\Gamma(2v+1)\Gamma(-2\mu)} \quad (37.14)$$

ҳәм

$$R = \frac{\Gamma(+2\mu)\Gamma(v-\mu)\Gamma(v-\mu+1)}{\Gamma(-2\mu)\Gamma(v+\mu)\Gamma(v+\mu+1)} \quad (37.15)$$

деп қабыл етсек бизиң шешимимиздин формасы бойынша (37.2)-аңлатпа менен сәйкес келетуғынлығын көриүге болады.

Енди және де еки мүмкіншиликті бир бириңен айырыу керек болады:

$$E > V_0 \text{ ҳәм } E < V_0.$$

а)  $E < V_0$ ,  $\mu = ix$  — таза жормал сан,  $v$  ҳақыйқый сан ҳәм нолден үлкен. (37.15) бөлшегиниң алымы да, бөлими де комплексли түйинлес шамалардан ибарат. Сонлықтан

$$|R|^2 = 1,$$

яғни толық шағылышы ўорын алады.

б)  $E > V_0$ ,  $\mu = ix$  ҳәм  $v = -i\sigma$  шамалары таза жормал шамалар. Енди  $\Gamma(\pm 2\mu)$  көбейтиүшилери ғана комплексли түйинлес шамалар болады, олар шағылышы ў (шағылыштырыу) коэффициенти  $|R|^2$  шамасына үлес қоспайды. Бундан

кейин

$$\Gamma(z) = \frac{1}{z} \Gamma(z+1)$$

болғанлықтан

$$|R|^2 = \left| \frac{(\nu + \mu) \Gamma^2(\nu - \mu + 1)}{(\nu - \mu) \Gamma^2(\nu + \mu + 1)} \right|^2 = \left( \frac{\kappa - \sigma}{\kappa + \sigma} \right)^2 \left[ \left| \frac{\Gamma(1 - i(\kappa + \sigma))}{\Gamma(1 + i(\kappa - \sigma))} \right|^2 \right]^2.$$

Енди

$$|\Gamma(1 + i\eta)|^2 = \frac{\pi\eta}{\sinh \pi\eta}$$

элементар формуласынан пайдаланыў мүмкин. Шағылыстырыў (шағылысыў) коэффициенти ушын ең ақырында мынадай формуланы аламыз:

$$|R|^2 = \left[ \frac{\sinh \pi(\kappa - \sigma)}{\sinh \pi(\kappa + \sigma)} \right]^2 \quad (37.16)$$

яmasa

$$|R|^2 = \left[ \frac{\sinh \pi(k - k') a}{\sinh \pi(k + k') a} \right]^2. \quad (37.17)$$

Бул аңлатпаларда  $k$  ҳәм  $k'$  арқалы потенциал текшениң сәйкес шеп ҳәм оң тәреплериндеги толқынлық санлар белгиленген.

### Қосымша мәселелер

Сызықлы оператор деп төмендегидей қәсийетлерге ийе операторларға айтамыз:

1.  $\hat{F}(\psi + \varphi) = \hat{F}\psi + \hat{F}\varphi,$
2.  $\hat{F}(\alpha\psi) = \alpha\hat{F}\psi.$

Мүмкин болған операторлардың айырымларын қараймыз. Квадратқа көтериў операторы:

$$\hat{Q}\psi = \psi^2. \quad (1.2)$$

Дифференциаллаў операторы  $\hat{D} = \frac{d}{dx}$ :

$$\hat{D}\psi(x) = \frac{d}{dx}\psi(x) = \psi'(x). \quad (1.3)$$

Инверсия операторы  $\hat{I}$

$$\hat{I}\psi(x) = \psi(-x). \quad (1.4)$$

Бөлекшениң радиус-векторы операторы  $\hat{\mathbf{r}}$

$$\hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

ал бөлекшениң улыўмаласқан импульси  $\mathbf{p}$  ға  $\hat{\mathbf{p}}$  операторы

$$\hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

бул аңлатпада  $i$  арқалы жормал бирлик,  $\hbar$  арқалы Планк турақтысы,  $\nabla$  арқалы Гамильтонның «набла» деп аталатуғын дифференциаллық операторы белгиленген:

$$\nabla\psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial y}\mathbf{e}_y + \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial z}\mathbf{e}_z.$$

Бул жерде  $x, y, z$  арқалы декарт координаталары, ал  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  арқалы сәйкес  $x, y, z$  көшерлериниң ортлары белгиленген.

**1.1-мәселе.** (1.1)-(1.6) операторларының сыйықты екенлигин тексерип көриңиз. Шешими: Оператордың сыйықты ямаса сыйықты емес екенлигин анықлау ушын

1.  $\hat{F}(\psi + \varphi) = \hat{F}\psi + \hat{F}\varphi,$
2.  $\hat{F}(\alpha\psi) = \alpha\hat{F}\psi.$

шәртлерин қанаатландыратуғынлығын ямаса қанаатландырмайтуғынлығын тексерип көриў зәрүр. Квадратқа көтериў операторының сыйықты екенлигин тексерип көриў ушын  $\hat{Q}$  операторы менен  $\psi$  ҳәм  $\varphi$  функцияларына тәсир етемиз:

$$\hat{Q}(\psi + \varphi) = (\psi + \varphi)^2 = \psi^2 + \varphi^2 + 2\psi\varphi \neq \psi^2 + \varphi^2 = \hat{Q}\psi + \hat{Q}\varphi.$$

Соның ушын бул оператор сыйықты оператор болып табылады.

Басқа операторлардың барлығы да сыйықты. Ҳақыйқатында да

$$\begin{aligned} \hat{D}(\psi + \varphi) &= \frac{d}{dx}\psi + \frac{d}{dx}\varphi = \hat{D}\psi + \hat{D}\varphi, \quad \hat{D}\alpha\psi = \frac{d}{dx}(\alpha\psi) = \alpha\frac{d}{dx}\psi = \alpha\hat{D}\psi; \\ \hat{I}(\psi(x) + \varphi(x)) &= \psi(-x) + \varphi(-x) = \hat{I}\psi(x) + \hat{I}\varphi(x), \quad \hat{I}\alpha\psi(x) = \alpha\psi(-x) = \alpha\hat{I}\psi(x); \\ \hat{\mathbf{r}}(\psi + \varphi) &= \mathbf{r}(\psi + \varphi) = \mathbf{r}\psi + \mathbf{r}\varphi = \hat{\mathbf{r}}\psi + \hat{\mathbf{r}}\varphi, \quad \hat{\mathbf{r}}(\alpha\psi) = \alpha\mathbf{r}\psi = \alpha\hat{\mathbf{r}}\psi; \\ \hat{\mathbf{p}}(\psi + \varphi) &= -i\hbar\nabla(\psi + \varphi) = -i\hbar\nabla\psi - i\hbar\nabla\varphi = \hat{\mathbf{p}}\psi + \hat{\mathbf{p}}\varphi, \\ \hat{\mathbf{p}}(\alpha\psi) &= -i\hbar\nabla(\alpha\psi) = \alpha(-i\hbar\nabla\psi) = \alpha\hat{\mathbf{p}}\psi. \end{aligned}$$

**1.2-мәселе.**  $\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$  теңлигинин дұрыс екенлигин дәлиллеңиз.

Шешими:  $\hat{F}$  ҳәм  $\hat{G}$  операторларының  $\hat{F} + \hat{G}$  суммасы деп  $\psi$  функциясына

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi$$

қағыйдасы бойынша тәсир ететуғын операторға айтамыз. Сонықтан

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi = \hat{G}\psi + \hat{F}\psi = (\hat{G} + \hat{F})\psi$$

теңликлерин аламыз. Буннан  $\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$  екенлигин аламыз.

**1.3-мәселе.** Координата операторларының бир бири менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими:  $[\hat{x}, \hat{y}]$  коомутаторының  $\psi$  функциясына тәсирин көремиз.

$$[\hat{x}, \hat{y}] \psi = \hat{x} \hat{y} \psi - \hat{y} \hat{x} \psi = xy\psi - yx\psi = 0$$

Хәм буннан  $[\hat{x}, \hat{y}] = 0$  екенлиги табамыз.

**1.4-мәселе.** Импульс қураўшылары операторларының бир бири менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими: Мысал ушын  $\hat{p}_x$  хәм  $\hat{p}_y$  операторларын алайық. Бундай жағдайда

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{p}_y] \psi &= (\hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x) \psi = -\hbar^2 \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right) = \\ &= -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} \right). \end{aligned}$$

Аралас  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x}$  хәм тууындылары өз-ара тең болғанлықтан  $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$ .

**1.5-мәселе.** Координата операторы менен басқа координатага түсирилген проекцияның импульси операторы менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими: Мысал ретинде мына жағдайды қараймыз:

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] \psi = \hat{x} \hat{p}_y \psi - \hat{p}_y \hat{x} \psi = -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} (x\psi) \right) = -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial y} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = 0,$$

демек  $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$  екен.

**1.6-мәселе.**  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  коммутаторын табыңыз.

Шешими:  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  операторы менен  $\psi$  функциясына тәсир етип мынаны табамыз:

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

ямаса

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar.$$

**1.7-мәселе.**  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$  теңлигинин дурыс екенлигин дәлиллеңиз.  
Шешими:

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

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} = \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} = \\ &= \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}. \end{aligned}$$

## **Пайдаланылған әдебиятлар дизими**

### **Тийкарғы әдебият**

Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Курс теоретический физики. III том. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е издание. Физматлит. Москва. 2004. 800 с.

А.А.Соколов, И.М.Тернов, В.Ч.Жуковский. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1979. 528 с.

А.С.Давыдов. Квантовая механика. 2-е издание. Издательство «Наука». Москва. 1973. 702 с.

Д.И.Блохинцев. Основы квантовой механики. Издательство «Наука». Москва. 1983. 664 с.

В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. Часть 1. Едиториал УРСС. Москва. 2001. 304 с.

В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. Часть 2. Едиториал УРСС. Москва. 2001. 304 с.

З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 1. Издательство «Мир». Москва. 1974. 342 с.

З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 2. Издательство «Мир». Москва. 1974. 316 с.

А.Қ.Ахметов. Кванттық механикаға кириспе. Алматы. Ғылым баспасы. 2003.

### **Қосымша әдебият**

Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Краткий курс теоретической физики. Книга 2. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1972.

В.А.Фок. Начала квантовой механики. Издательство «Наука» Москва. 1976. 376 с.

Л.А.Головань, Е.А.Константинова, П.А.Форш. Задачи по квантовой механике для химиков. Москва. Физический факультет МГУ. 154 с.

Л.К.Мартинсон, Е.В.Смирнов. Квантовая физика. Москва. Издательство МГТУ имени Н.Э.Баумана. 2004. 496 с.

Қ.Қ.Қайырбаев. Кванттық механика негиздері. Павлодар. 2005.