II бөлим

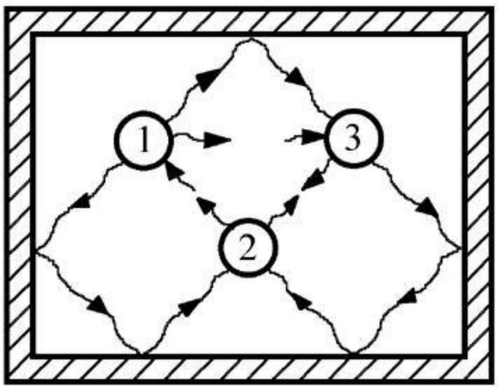
Квантлық физиканың тийкарлары

2-1-1. Жыллылық нурланыўы нызамлары

Жыллылық нурланыўы. Қыздырылған денелерде ишки энергияның бир бөлеги нурланыў энергиясына айлана алады. Сонлықтан қыздырылған денелер жийиликлердиң үлкен диапазонындағы электромагнит толқынларының дереги болып табылады. Бундай нурланыўды жыллылық нурланыўы деп атайды.

Экспериментлер жыллылық нурланыўының үзликсиз спектрге ийе екенлигин көрсетеди. Бул қыздырылған денениң жийиликлер ямаса толқын узынлықларының қәлеген диапазонында базы бир муғдардағы нурланыў энергиясын нурландыратуғынлығын аңлатады. Денениң нурланыў энергиясының спектр бойынша тарқалыўы температурадан ғәрезли. Барлық денелер ушын температураның жоқарылаўы менен нурланыў энергиясының максимумы спектрдиң қысқа толқынлы участкасына қарай жылжыйды ҳәм нурланыўдың улыўмалық энергиясының мәниси үлкейеди. Мысалы орайлық жылытыў тармағына тутастырылған батареялар (температурасы $T \approx 350$ K) көзге көринбейтуғын инфрақызыл участкада энергияның пигине ийе болатуғын болса, Қуяштың бети ($T \approx 6 \cdot 10^3$ K) энергиясының тийкарғы 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 пүткиллей өткермейтуғын қабық пенен (қуты менен) қапласақ (1-сүўрет), онда бир қанша ўақыт өткеннен кейин "нурландырыўшы денелер + қуўыслықтағы (қутыдағы) нурланыў" арасында термодинамикалық тең салмақлық орнайды. Бундай жағдайда барлық денелердиң температуралары теңлеседи, ал денелер ҳәм нурланыў арасындағы энергияның тарқалыўы ўақыттың өзгериўи менен өзгериссиз қалады. Системаның усындай 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 қәлеген материалдан соғылыўы мүмкин ҳәм оның температурасы өзгериссиз етип услап турылады.



1-сүўрет.

Жыллылық нурланыўының нурланып атырған дене менен тең салмақлықта тура алыў қәбилетлиги денелердиң басқа жыллылық нурланыўынан айырмашылыққа ийе. Сонлықтан нурландырыўшы дене менен тең салмақлықта туратуғын нурланыў тең салмақлық нурланыў деп аталады.

Тең салмақлық нурланыўға усы нурланыў менен тең салмақлықта турған дениниң температурасын белгилеў мүмкин. Бундай жағдайда тең салмақлық термодинамиканың нызамларын жыллылық нурланыўына да пайдаланыў мүмкиншилиги пайда болады. Бул өз гезегинде тең салмақлық жыллылық нурланыўы ушын ўақытқа байланыслы өзгермейтуғын ишки энергия, басым, энтропия ҳәм басқа да термодинамикалық характеристикаларды анықлаў ҳәм есаплаў мүмкин дегенди билдиреди.

Тең салмақлық жыллылық нурланыўы бир текли, яғный оның энергиясының тығызлығы қуўыслықтың барлық ноқатларында бирдей. Бундай нурланыў изотроп ҳәм поляризацияланған емес – бундай нурланыў барлық тәреплерге бирдей болып тарқалады, E ҳәм H векторларының тербелиў бағытлары да ҳәр қыйлы.

Жыллылық нурланыўының характеристикалары. Жыллылық нурланыўының спектраллық қурамын тәриплеў ушын қыздырылған дениниң бетиниң бир бирлиги тәрепинен бир ўақыт бирлиги ишинде нурланатуғын жийиликлердиң киши диапазоны болған ω шамасынан ω + dω шамасы арасындағы нурланыў энергиясын қараймыз. Дениниң бир бирлик майданынан барлық тәреплерге қарай нурланып атырған нур энергиясының ағымы dR шамасының мәниси спектраллық диапазонның кеңлигине пропорционал, яғный dR = rdω. Жийиликлердиң бир бирлик диапазонына сәйкес келиўши r энергиясын дениниң спектраллық шығарыўшылық қәбилетлиги ямаса жарқынлықтың энергиялық спектраллық тығызлығы деп атайды. Тәжирийбелер ҳәр бир дене ушын спектраллық шығарыўшылық қәбилетликтиң жийиликтиң белгили бир функциясы екенлиги көрсетеди. Бул функцияның түри дениниң температурасы T өзгергенде өзгереди. Буннан кейин берилген температурада жийликтиң базы бир функциясы болған усындай функционаллық ғәрезлик r = r(ω,T) түриндеги ғәрезлигиниң орнына жыллылық нурланыўы теориясында қабыл етилген $r(\omega,T) \equiv r_{\omega,T}$ белгилеўин пайдаланамыз.

Дениниң майдан бирлигинен жийиликлер диапазонының барлығынан нурланатығын энергияның улыўмалық ағысы

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

формуласының жәрдеминде бериледи ҳәм бул шаманы дениниң интеграллық шығарыўшылық (нурландырыўшылық) қәбилетлиги ямаса оның энергиялық жарқынлығы деп атайды. SI бирликлер системасында энергиялық жарқынлық Вт/м^2 бирликлеринде, ал спектраллық шығарыўшылық қәбилетлик Дж/м^2 бирликлерине ийе.

Дениниң шығарыўшылық (нурланыдырыўшылық) қәбилетлигин нурланыў ушын толқын узынлығы болған λ шамасының функциясы деп қараў мүмкин. λ менен жийилик ω жақтылықтың ваккумдеги тезлиги c арқалы былайынша байланысқан: λ = 2πc/ω. Бундай жағдайда төмендегидей теңликке ийе боламыз:

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

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

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

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

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

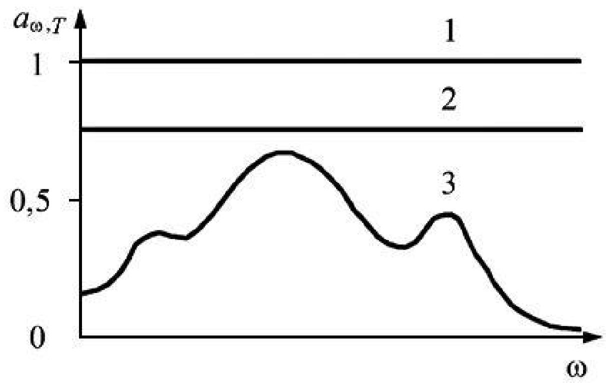
$$a_{\omega,T} = d\Phi_\omega'/\,d\Phi_\omega. \qquad (2.1.4)$$

Бул шама жийилиги ω шамасына тең келип түсиўши нурланыўдың жутылған үлесин береди.

Тәжирийбелер қәлеген дененің темпертурасына байланыслы ҳәр қыйлы жийиликтеги нурларды ҳәр қыйлы етип жутатуғынлығын көрсетеди. Сонлықтан дененің жутыўшылық қәбилетлиги $a_{\omega,T}$ жийлик ω ның функциясы болып табылады. Ал бул функцияның түри дененің температурасы А ның өзгериўи менен өзгериске ушырайды.

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

Жыллылық нурланыўы теориясында абсолют қара дене айрықша орынды ийелейди. Абсолют қара дене деп барлық жийиликлерде ҳәм барлық температураларда жутыўшылық қәбилетлиги бирге тең денени Г.Кирхгоф абсолют қара дене деп атаўды усынды. Ҳақыйқый денелер болса өзлерине келип түскен нурланыўдың тек бир бөлимин ғана шағылыстырады (2.1.2-сүўрет). Ҳәтте қара күйе де өзиниң қәсийетлери бойынша абсолют қара денеге тек оптикалық диапазонда ғана жақынлайды.

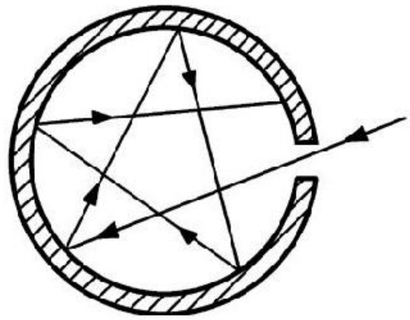


1.2-сүўрет.
Ҳәр қыйлы денелердиң жутыўшылық қәбилетлиги.
1 – абсолют қара дене;
2 – сур дене;
3 – ҳақыйқый дене.

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

Абсолют қара дененің усындай моделин жабық қуўыслық түринде соғып алыўға болады (2.1.3-сүўрет). Бул қуўыслық диаметри усы қуўыслықтың диаметринен әдеўир киши болған кишкене тесикшеге ийе. Усының менен бир қатарда қуўыслықтың қәлеген формаға ийе ҳәм қәлеген материалдан исленген болыўы мүмкин.

Киши тесикше оған келип түсиўши нурланыўдың дерлик толық жутылыўына алып келеди. Тесикшениң диаметри қаншама киши болған сайын оның жутыўшылық қәбилетлиги бирге умтылады. Ҳақыйқатында да тесикше арқалы қуўыслыққа кирген нурланыў қуўыслықтың дийўалларына келип түседи ҳәм бул дийўалларда шалама-шекки жутылады. Егер тесикшениң диаметри киши болса нурланыў усы тесикшеден шығаман дегенше ишки дийўалларда көп санлы шағылысыўларға ушырайды. Усының нәтийжесинде келип түсиўши нурлар дерлик толығы менен жутылады.

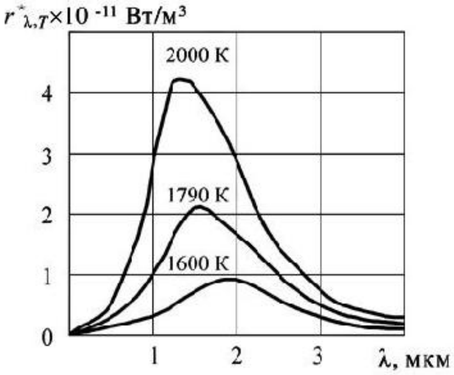


1.3-сүўрет.

Аболют қара дененің модели.

Биз жоқарыда қарап өткен моделде тесик арқалы ишке кириўши толқынды қайтып шықпайды ҳәм сонлықтан келип түскен нурлар толығы менен жутылады деп есаплай аламыз. Сонлықтан киши тесикшеге абсолют қара дененің қәсийетлери бериледи.

Егер қуўыслықтың ишки дийўалларын T температурада услап турсақ, онда тесикше нурланады. Бул нурланыўды температурасы T ға тең болған абсолют қара дененің нурланыўы деп есаплаўға болады. Бул нурланыў энергиясының спектр бойынша тарқалыўын изертлеў арқалы абсолют қара дененің нур шығарыўшылық уқыплығы болған $r^*_{\omega,T}$ ҳәм $r^*_{\lambda,T}$ шамаларын экспериментте анықлаў мүмкин (Ленгли, Э.Прингсгейм, О.Люммер, Ф.Курлбаум ҳәм басқалар). Ҳәр қыйлы температураларда өткерилген усындай экспериментлердиң нәтийжелери 1.4-сүўретте келтирилген.



1.4-сүўрет.
Абслют қара дене ушын нур шығарыўшылық уқыплығы $r^*_{\lambda,T}$ шамасының температурадан ғәрезлиги.

Кирхгоф нызамы. Қәлеген дененің нур шығарыўшылық уқыплығы менен жутыў уқыплығы арасында байланыстың орын алыўы керек. Себеби тең салмақлық нурланыў менен өткерилген тәжирийбелерде (2.1.1-сүўрет) системадағы тең салмақлық егер ҳәр бир дене ўақыт бирлигинде қанша энергияны нурландыратуғын болса, тап сондай энергияны жутатуғынлығынлығын 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 салмақлық принципи деп атаймыз (принцип детального равновесия).

Толық тең салмақлық принципине сәйкес тәбияттағы барлық денелер ушын (соның ишинде абсолют қара дене 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 салмақлықта туратуғын системалардың термодинамикалық нызамлықларын үйрениўдиң барысында Г.Кирхгоф тәрепинен ашылған бул нызамды былайынша жазамыз:

$$\left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_1 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_2 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}}\right)_3 = \ldots = \frac{r^*_{\omega,T}}{1} = f(\omega,T) \qquad (2.1.5)$$

ямаса

$$\left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}}\right)_1 = \left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}}\right)_2 = \left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}}\right)_3 = \ldots = \frac{r^*_{\lambda,T}}{1} = \varphi(\lambda,T) \qquad (2.1.6)$$

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

Кирхгоф нызамынан f(ω,T) ҳәм φ(λ,T) универсаллық функцияларының сәйкес жийиликлер шкаласындағы ҳәм толқын узынлықлары бойынша абсолют қара денениң спектраллық нур шығарыўшылық қәбилетлиги $r^*_{\omega,T}$ ҳәм $r^*_{\lambda,T}$ екенлиги келип шығады. Сонлықтан олар арасындағы байланыс (2.1.3)-формула менен анықланады.

Жыллылық нурланыўы теориясында абсолют қара дененің нурланыўы универсаллық характерге ийе. Ҳақыйқый денелер барлық ўақытта да қәлеген температурада нурды абсолют қара денеге салыстырғанда кемирек нурландырады. Абсолют қара денениң нур шығарыўшылық қәбилетлигин (яғный Кирхгофтың универсаллық функциясын) ҳәм ҳақыйқый денениң жутыўшылық қәбилетлигин билген ҳалда Кирхгоф нызамы бойынша дене тәрепинен жийиликлердиң ямаса толқын узынлықларының қәлеген диапазонында нурландырылатуғын энергияның мәнисин анықлаў мүмкин.

Стефан-Больцман нызамы. Й.Стефанның 1879-жылы өткерген экспериментлери ҳәм Л.Больцманның 1884-жылы орынланған теориялық изертлеўлери абсолют қара дененің жыллылық нурланыўының әҳмийетли нызамын дәлиллеўге мүмкиншилик берди. Бул нызам бойынша абсолют қара дененің энергиялық жарқынлығы оның абсолют температурасының төртинши дәрежесине туўры пропорционал. Оны былайынша жазамыз

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

Ескертиў: Ендигиден былай жулдызша белгиси менен абсолют қара дененің жыллылық нурланыўының характеристикаларын белгилеймиз.

Ҳәзирги ўақытлары өткерилген өлшеўлер Стефан-Больцман турақлысы ушын $\sigma = 5{,}6686\cdot10^{-8}$ Вт/(м^2(К^4) шамасын береди.

Ҳақыйқый денелер ушын Стефан-Больцман нызамы тек сапалық жақтан орынланады. Олар ушын температураның жоқарылаўы менен энергиялық жарқынлық үлкейеди. Бирақ ҳақыйқый денелер ушын энергиялық жарқынлықтың температурадан ғәрезлиги әпиўайы болған (2.1.7)-аңлатпа менен тәрипленбейди, ал төмендегидей түрге ийе болады

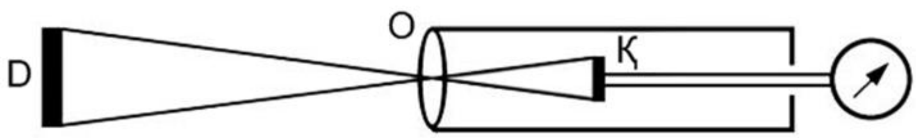
$$R = A_T R^* = A_T \sigma T^4 \qquad (2.1.8)$$

(2.1.8)-аңлатпадағы A_T коэффициентиниң мәниси барлық ўақытта да 1 ден киши ҳәм оны дениниң интеграллық жутыў қәбилетлиги деп атаймыз. A_T ның мәнислери улыўма жағдайда температурадан ғәрезли ҳәм техникалық жақтан әҳмийетли болған көп санлы материаллар ушын белгили. Мысалы, температуның жеткиликли дәрежедеги кең интервалында металлар ушын $A_T = 0{,}1 \div 0{,}4$, ал көмир менен металлардың окислери ушын $A_T = 0{,}5 \div 0{,}9$ ға тең.

Ҳақыйқый қара емес денелер ушын эффективли радиациялық температура T_p түсинигин киргизиў мүмкин. Тап усындай T_p температурадағы абсолют қара дене ҳақыйқый денедей энергиялық жарқынлыққа ийе болады. Радиациялық температура T_p ның мәниси барлық ўақытта да ҳақыйқый температура T ның мәнисинен киши. Ҳақыйқатында да әтирапымызда бар денелер ушын $R = \sigma T_p^4 = A_T \sigma T^4$. Буннан $T_p = T\sqrt[4]{A_T}$ екенлигине, яғный $T_p < T$ теңсизлигиниң орынланатуғынына ийе боламыз. Себеби әдеттеги денелер ушын $A_T < 1$ теңсизлигиниң орынланатуғынлығы бәршеге түсиникли.

Күшли қыздырылған денелердиң радиациялық температурасын радиациялық пирометрдиң жәрдеминде анықлаў мүмкин (2.1.5-сүўрет). Бундай әсбапта (пирометрде) алыстағы қыздырылған дерек D ның сүўрети O объективиниң жәрдеминде қабыллағыш Қ ға нурландырғыштың сүўрети усы қабыллағыштың сүўретиниң үстине түсетуғындай етип проекцияланады. Қабыллағышқа жақтысы түсетуғын нурланыў энергиясының мәнисин баҳалаў ушын әдетте металл ямаса ярым өткизгиш болометрлер яки термоэлементлер қолланылады. Болометрлердиң жумыс ислеў принципи келип түсиўши нурланыў ағысын жутыўдың салдарынан металдың ямаса ярым өткизгиштиң электрлик қарсылығының өзгериўине тийкарланған. Термоэлементлердиң келип түскен нурларды жутыўшы бетиниң температурасының өзгериўи оларда термоэлектр қозғаўшы күшиниң пайда болыўына алып келеди.

Болометр ямаса термоэлементке тутастырылған әсбаптың көрсетиўи пирометрдиң қабыллағышына келип түскен нурланыў энергиясына пропорционал болады. Пирометрди ҳәр қыйлы температуралардағы абсолют қара дене эталонының нурланыўы бойынша градуировкалап, усы әсбаптың шкаласы бойынша қыздырылған денелердиң радиациялық температураларын анықлаў мүмкин.



1.5-сүўрет. Оптикалық пирометрдиң принципиаллық схемасы.

Нурландырыўшының 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 жәрдеминде есаплап аныҡлай аламыз. Мысалы егер вольфрам нырландырғыштың қыздырылған бетин бақлағанда радиациялық пирометр T_p = 933 К температураны көрсететуғны болса¸онда оның ҳақыйқый температурасы Т = 1500 К шамасына тең болады (вольфрам ушын А = 0,15)

Винниң аўысыў нызамы. 1893-жылы немис физиги В.Вин иш тәрепинде идеал шашыратыўшы айналық диййаллары бар қуўыслықтың ишиндеги нурланыўды қысыў менен байланыслы болған термодинамикалық процессти теориялық жақтан қарап шықты. Қозғалыўшы айнада нурлар шашырағандағы Допплер эффектиниң есабынан жийиликтиң өзгериўин есапқа алып Вин абсолют қара дененің нур шығарыўшылық қәбитлетлигиниң

$$r^*_{\omega,T} = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right) \tag{2.1.9}$$

түрине ийе екенлигин көрсетти. Бул жерде f арқалы қандай түрге ийе екенлигин термодинамикалық усыллар менен анықлаўға болмайтуғын базы бир функция белгиленген.

Винниң бул формуласындағы жийиликтен (2.1.3)-формулаға сәйкес толқын узынлығына өтсек

$$r^*_{\lambda,T} = \frac{(2\pi c)^4}{\lambda^5} f\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right) \tag{2.1.10}$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада нур шығарыўшылық уқыплығы $r^*_{\lambda,T}$ ушын температура Т ның тек λТ көбеймеси түринде ғана киретуғынлығы көринип тур. Бул жағдай $r^*_{\lambda,T}$ функциясының базы бир өзгешеликлерин болжап айтыўға мүмкиншилик береди. Мысалы бул функция белгили бир λ_m толқын узынлығында максимумға ийе болады. Соның менен бирге бул толқын узынлығының мәниси температуры өзгергенде $\lambda_m T$ = const шәрти орынланатуғын шамаларға өзгереди.

Солай етип В.Вин жыллылық нурланыўы нызамын ашты. Бул нызам бойынша абсолют қара дененің нур шығарыўшылық қәбилетлигиниң максимумы сәйкес келетуғын толқын узынлығы λ_m оның абсолют температурасына кери пропорционал өзгереди. В.Винниң жыллылық нурланыўы нызамын былайынша жазамыз:

$$\lambda_m = \frac{b}{T}. \tag{2.1.11}$$

Экспериментлерде анықланған бул нызамдағы турақлы шаманың мәниси b = $2{,}898\cdot10^{-3}$ мК шамасына тең болып шықты.

Винниң нызамын әдетте аўысыў нызамы деп атайды. Гәп "аўысыў нызамы" ҳаққында айтылғанда абсолют қара дененің температурасы жоқарылағанда оның нур шығарыўшылығының максимумының ийелеген орнының қысқа толқынлар областына аўысатуғынлығы нәзерде тутылады. 1.4-сүўретте келтирилген экспериментлердиң нәтийжелери бул жуўмақтың тек сапалық жақтан дурыс екенлигин көрсетип ғана қоймай (2.1.11)-формулаға сәйкес санлық жақтан да нызамның дурыслығын тастыйықлайды.

Ҳақыйқый денелер ушын Винниң аўысыў нызамы тек сапалық жақтан ғана орынланады. Қәлеген дене ушын температураның жоқарылаўы менен дене энергияны ең көп нурландыратуғын толқын узынлығы қысқа толқын тәрепке қарай жылысады. Бирақ бул жылысыў әпиўайы (2.1.11)-формула менен тәрипленбейди. Сонлықтан бул формуланы ҳақыйқый денелердиң нурланыўы ушын санлық шамалардың мәнисин сапалық жақтан баҳалаў ушын ғана қолланыўға болады.

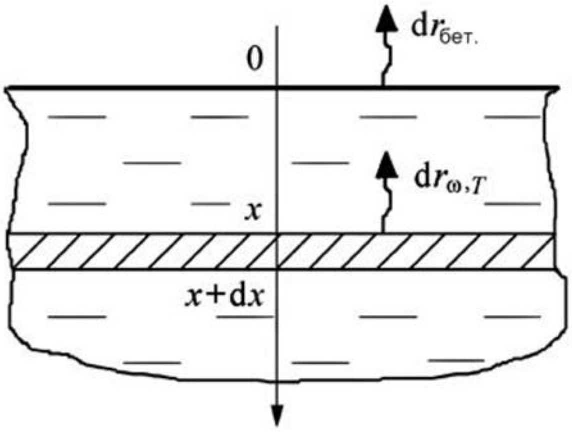
Түнде көриў (қараңғыда көриў). Түнги ўақытлары (ямаса қараңғыда) адам әтирапындағы затларды көре алмайды. Бирақ сол затлардың барлығы да ноллик емес температураға ийе ҳәм сонлықтан олар түнде де электромагнитлик жыллылық нурланыўын нурландырады. Винниң аўысыў нызамы болған (2.1.11)-формуланың жәрдеминде температурасы белгили болған денениң нур шығарыўшылық қәбилетлигиниң максимумына сәйкес келиўши толқын узынлығының шамасын баҳалаў мүмкин. Баҳалаўлар орташа температура 300 К болған жағдайда жыллылық нурланыўының тийкарғы бөлиминиң узынлығы шама менен 10 мкм болған инфрақызыл нурланыўға сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Спектрдиң көзге көринетуғын областындағы нурланыў ($0{,}4 < \lambda < 0{,}7$ мкм) бундай температураларда жүдә киши энергияға ийе болып, қуралланбаған көзге пүткиллей көринбейди.

Аспан тәрепке қарай жер денелериниң системасы туйық емес. Сонлықтан Жердиң бетиндеги денелер ҳәм олардың нурланыўы арасында тең салмақлық ҳалы жүзеге келмейди. Сонлықтан температурасы Жердиң бетиниң температурасынан жоқары болған денелер нурландыратуғын объектлер сыпатында микротолқынлық диапазонда бақлана алады. Инфрақызыл нурлардың усындай дереклерин тек арнаўлы әсбаплардың жәрдеминде көриў мүмкин. Бундай әсбапларда адам көзине көринбейтуғын микротолқынлық нурлар инфрақызыл нурлардың арнаўлы датчиклери тәрепинен электр сигналларына түрлендириледи. Бул сигналлар кинескоплардағы электронлық дәстелерди басқарады ҳәм оның экранында қуралланбаған көз бенен көринбейтуғын денелердиң сүўретин пайда етеди.

XX әсирдиң ақырында түнде көриў техникасының раўажланыўында үлкен өзгерислер жүз берди. Жаңа типтеги электронлық-оптикалық түрлендиргишлер дөретилди. Ҳәзирги ўақытлардағы биноклрдиң, түнде нышанаға алыўға мүмкиншилик беретуғын дүзилислердиң жәрдеминде бақлаўшы бир неше жүз метр қашықлықтағы адамның, бир неше километр қашықлықтағы қозғалып баратырған танктиң анық сүўретин көре алады. Ал түнде көриўге мүмкиншилик беретуғын пилотажлық көз әйнеклер вертолётларды қуралланбаған көз бенен көриў шекленген шараятларда да күни түни эксплуатациялаўға мүмкиншилик береди.

1.1-мәселе. Көлеми жеткиликли дәрежеде үлкен болған қәлеген затты алайық. Оның қалыңлығының бир бирлигине $E_{\omega,T}$ 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 шекленилсин.

Шешими: Мейли $x > 0$ ярым кеңислигин ийелеп турған заттың қатламының температурасы T болсын (2.1.6-сүўрет). Бул затта координаталары x ҳәм $x + dx$ болған жуқа қатламды айырып алып қараймыз. Бул жуқа қатламның бетиниң бир бирлиги бетке қарай бағытланған, ω жийилигиндеги $dr_{\omega,T} = E_{\omega,T}dx$ шамасындағы энергияны нурландырады.



1.6-сүўрет.

1.1-мәселени шешиў ушын арналған сүўрет.

Қатламның бетинен шығаман дегенше бул нурлар қалықлығы x болған жутыўшы дененин қатламы арқалы өтеди. Усының нәтийжесинде Бургер нызамы бойынша нурланыў энергиясының ағымы экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди ҳәм x = 0 болған беттен өткенде энергияның мәниси

$$dr_{пов} = dr_{\omega,T}\exp(-A_{\omega,T}x) = E_{\omega,T}\exp(-A_{\omega,T}x)\,dx$$

шамасына тең болады. Барлық қатламлар бойынша нурланыўды қосып (суммалап) қатламның бетиниң нур шығарыўшылық уқыплылығын табамыз:

$$r_{пов} = \int_0^\infty E_{\omega,T}\exp(-A_{\omega,T}x)\,dx = \frac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}}\int_0^\infty \exp(-\xi)\,d\xi = \frac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}}.$$

Бирақ Кирхгоф нызамы бойынша $E_{\omega,T}/A_{\omega,T} = r^*_{\omega,T}$. Бул аңлатпада $r^*_{\omega,T}$ арқалы абсолют қара дененин нур шығарыўшылық уқыплығы белгиленген. Сонлықтан $r_{бет} = r^*_{\omega,T}$ ҳәм усының менен биз қатламның бетиниң абсолют қара денедей болып нурландыратуғынлығын дәлилледик.

Бул әҳмийетли жуўмақ (биз буны мысал ретинде келтиремиз) үлкен көлемге ийе жоқары температуралы плазманың бетинен (мысалы Қуяштың бетинен) нурланатуғын электромагнит толқынлардың спектрлик қурамы бойынша абсолют қара дененин нурланыўына неликтен жүдә жақын екенлигин көрсетеди.

1.2-**мәселе**. Қуяштың нур шығарыў қәбилетлигиниң максимумы λ_m = 0,48 мкм ге сәйкес келеди. Қуяштың нурланыўын абсолют қара дененин нурланыўына жақын деп қарап Жер дөгерегинде қозғалыўшы орбиталық станцияның қуўатлығы P = 10 квт болған Қуяш батареяларының панеллериниң майданларының қосындысының мәнисин баҳалаңыз. Қуяш батареясының пайдалы тәсир коэффициентин η = 20 % деп есаплаңыз. Астрономиялық шамалардың мәнислерин кестелерден алыў керек.

Шешими: Винниң аўысыў нызамынан (2.1.11)-формула бойынша Қуяштың бетиниң температурасын есаплаймыз

$$T = b/\lambda_m = (2{,}9\cdot10^{-3})/(0{,}48\cdot10^{-6}) \approx 6000\ K.$$

Енди $R = \sigma T^4$ Стефан-Больцман нызамы бойынша Қуяштың энергиялық жарқынлығын ҳәм оның бетиндеги нурланыўдың қуўаты болған W шамасын табамыз

$$W = R\cdot 4\pi R_Қ^2 = 4\pi\sigma T^4 R_Қ^2.$$

Бул аңлатпадағы $R_{Қ}^{2}$ Қуяштың радиусы болып табылады.

Қуяш барлық тәреплерге изотроп түрде энергияны нурландырады деп есаплаймыз ҳәм усы тийкарда Қуяш турақлысы болған С шамасының мәнисин табамыз. Бул шама радиусы Жер менен Қуяш арасындағы қашықлыққа ($R_{ҚЖ}$ шамасына) тең болған орайында Қуяш турған сфералық беттиң бир бирлик майданынан өтетуғын нурланыў энергиясының ағысына тең. $R_{ҚЖ} = 1{,}49\cdot10^{11}$ м. Бундай жағдайда

$$C = \frac{W}{4\pi R_{СЗ}^{2}} = \sigma T^{4}\cdot\left(\frac{R_{С}}{R_{СЗ}}\right)^{2} = 1{,}6\cdot10^{3}\ \frac{\text{Вт}}{\text{м}^{2}}.$$

Солай етип Жердиң 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 қуўатын табамыз

$$P = \eta CS.$$

Буннан Қуяш батареясының панелиниң майданын табамыз

$$S = P/(\eta C) = 10^{4}/(0{,}2\cdot1{,}6\cdot10^{3}) = 31{,}2\ \text{м}^{2}.$$

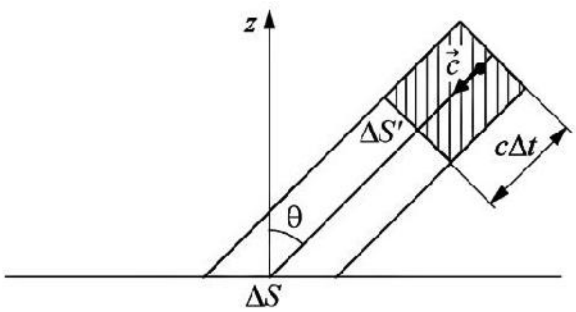
2-1-2. Нурланыўдың квантлық теориясы

Тең салмақлық нурланыў энергиясының көлемлик тығызлығы. Тең салмақлық жыллылық нурланыўы теориясының тийкарғы мәнисин қарап шығамыз. Буның ушын идеал түрдеги шағылыстырыўшы дийўалларға ийе қуўыслық қабырғасының узынлығы l ге тең куб формасына ийе деп есаплаймыз. Бул әпиўайыластырылған жағдай болса да алатуғын жуўмақлар улыўмалық характерге ийе болады. Бул қуўыслыққа температурасы Т ға тең болған өлшемлери бойынша киши абсолют қара денени жайластырамыз. Бул дене тәрепинен электромагнит толқынларды шығарыў ҳәм жутыўдың есабынан қуўыслық тең салмақлық жыллылық нурланыўы менен толады. Оның энергиясының тығызлығын $u(T)$ арқалы белгилеймиз ҳәм бул функцияның абсолют температура Т ға байланыслы екенлигин атап өтемиз. Жыллылық нурланыўының энергиясының бул көлемлик тығызлығын жийиликлер спектри бойынша жайыў мүмкин. Бул математикалық аңлатпа төмендегидей түрге ийе болады:

$$u(T) = \int_{0}^{\infty} u_{\omega,T}\, d\omega. \qquad (2.1.12)$$

Бул жерде $u_{\omega,T} \equiv u(\omega,T)$ функциясы ω жийилиги жанындағы жийиликтиң бир бирлигине сәйкес келиўши нурланыў энергиясының көлемлик тыгызлығын анықлайды. Бул функцияны Т температурадағы жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық тығызлығы деп атаймыз.

Әлбетте, жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық тығызлығы усы нурланыў менен тең салмақлықта турған абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыплығы менен байланыслы. Бул байланысты абсолют қара денениң бетинде алынған ΔS элементар майданның қасындағы нурланыўды қараў арқалы анықлаўға болады (2.1.7-сүўрет).



1.7-сүўрет.

Биз сайлап алған майданның қасындағы қәлеген ноқатта жыллылық нурланыўы 4π денелик мүйеши шеклеринде мүмкин болған барлық бағытларда бирдей болып тарқалған. Сонлықтан dΩ = Sinθdθdφ денелик мүйешине сәйкес келиўши нурланыў энергиясының тығызлығын (яғный ΔS майданына оған түсирилген нормалға θ мүйеши бағытында түсетуғын энергияның тығызлығын) былайынша жаза аламыз:

$$dw = u(T)\frac{d\Omega}{4\pi}. \qquad (2.1.13)$$

Бирақ, егер энергиясының тығызлығы усындай болған нурланыў вакуумде жақтылықтың тезлиги с менен ΔS бетине θ мүйеши менен келип түсетуғын болса, онда Δt ўақыты ишинде усы майданға 1.7-сүўретте штрихланған көлемдеги барлық нурланыў энергиясы келип түседи. Оның санлық шамасы мынаған тең:

$$dW = dw\,c\Delta t\Delta S' = dw\,c\Delta t\Delta S\cos\theta = \frac{c}{4\pi}u(T)\cos\theta\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\,\Delta S\Delta t. \qquad (2.1.14)$$

Мүмкин болған барлық мүйешлерде түсетуғын нурланыў энергиясын суммаласақ ўақыттың бир бирлиги ишинде беттиң бир бирлик майданына түсетуғын нурланыў энергиясының ағысы болған Ф шамасын табамыз:

$$\Phi = \frac{c}{4\pi}u(T)\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi/2}\cos\theta\cdot\sin\theta\,d\theta = \frac{c}{4}u(T). \qquad (2.1.15)$$

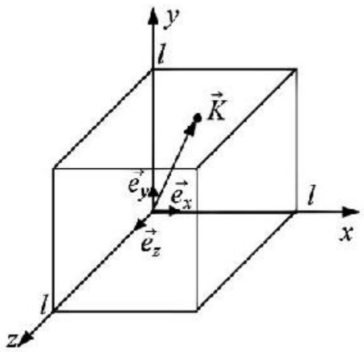
Термодинамикалық тең салмақлық ҳалында тап усындай Ф ағысы абсолют қара денениң бир бирлик бетинен де нурланыўы керек. Бирақ, анықлама бойынша энергияның усындай ағысы абсолют қара денениң жарқынлығы болып табылады. Сонлықтан

$$R^* = \frac{c}{4}u(T) \text{ ямаса } u(T) = \frac{4}{c}R^*. \qquad (2.1.16)$$

Жоқарыда айтылған барлық гәплер ω жийилигиндеги нурланыўдың барлық спектраллық қураўшысы ушын да орынлы болады. Сонлықтан тап сондай аңлатпа менен абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыплылығы $r_{\omega,T}^{*}$ менен тең салмақлық жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық көлемлик тығызлығы $u_{\omega,T}$ шамасы да байланысқан:

$$r_{\omega,T}^{*} = \frac{c}{4} u_{\omega,T} \text{ ямаса } u_{\omega,T} = \frac{4}{c} r_{\omega,T}^{*}. \qquad (2.1.17)$$

Рэлей-Джинс формуласы. Жоқарыда қарап өтилген дийўаллары идеал шағылыстыратуғын кублық формасындағы қуўыслықта электромагнит майданы тек туўры ҳәм шашыраған толқынлардың суперпозициясы түринде жасайды. Басқа сөз бенен айтқанда қуўыслықтың ишинде электромагнит майданы қуўыслықтың дийўалларында түйинлерге ийе турғын электромагнит майданлары түринде болады.



1.8-сүўрет.

Декарт координаталар системасының көшерлерин кублық қуўыслықтың үш өз-ара перпендикуляр қабырғасы бойлап түсиремиз (2.1.8-сүўрет) ҳәм $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$ және $\vec{e}_z$ арқалы сәйкес координата көшерлери бағытында түсирилген бирлик ортларды белгилеймиз. Бундай жағдайда x көшери бағытында тарқалатуғын толқын ушын турғын толқынның пайда болыўы ушын

$$l = n_1 \frac{\lambda}{2}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \ldots \qquad (2.1.18)$$

шәртиниң 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 $k_x = \frac{2\pi}{\lambda}$) x бағытында турғын толқынлардың пайда болыўы шәртин толқынлық санға қойылатуғын шәрт сыпатында жаза аламыз:

$$k_x = n_1 \frac{\pi}{l}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \ldots \qquad (2.1.19)$$

Тап усындай талқылаўларды y ҳәм z 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 ықтыярлы

$$\vec{k} = k_x\vec{e}_x + k_y\vec{e}_y + k_z\vec{e}_z$$

толқын векторына ийе турғын толқын ушын

$$\mathbf{k}_x = n_1\frac{\pi}{l},\ \mathbf{k}_y = n_2\frac{\pi}{l},\ \mathbf{k}_z = n_3\frac{\pi}{l}. \qquad (2.1.20)$$

шәртиниң орынланыўы керек болады. Бул аңлатпада n_1, n_2 ҳәм n_3 арқалы бир биринен ғәрезсиз 0, 1, 2,… мәнислерин қабыл ететуғын пүтин санлар белгиленген.

(2.1.20) шәртлерин қуўыслық ишиндеги тоқынлардың толқынлық санына қойылатуғын шәрт сыпатында жаза аламыз

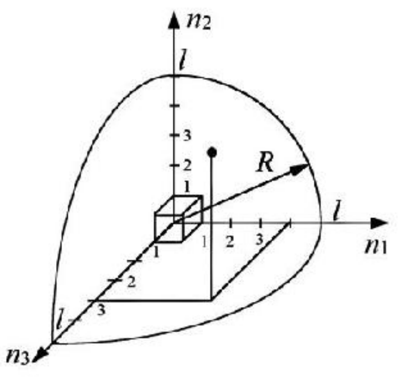
$$\mathrm{k} = |\vec{\mathrm{k}}| = \sqrt{\mathrm{k}_x^2 + \mathrm{k}_y^2 + \mathrm{k}_z^2} = \frac{\pi}{l}\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}. \qquad (2.1.21)$$

Бул формулада да n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, … $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$ болғанлықтан биз қарап атырған кублық формаға ийе қуўыслықтағы тең салмақлық жыллылық нурланыўын ҳәр қыйлы жийиликлерге ийе турғын электромагнит толқынларының жыйнағы деп қарай аламыз. Бул жийиликлердиң мәнислери

$$\omega = \frac{\pi c}{l}\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2},\quad n_1, n_2, n_3 = 0,\ 1,\ 2,\ldots \qquad (2.1.22)$$

аңлатпасының жәрдеминде есапланады. Терис мәниске ийе болмайтуғын n_1, n_2, n_3 санларының ҳәр бир үшеўине бир турғын толқын сәйкес келеди. Усындай турғын толқынлардың улыўмалық саны шексиз үлкен.

Қуўыслықтың ишиндеги жийилиги берилген ω мәнисинен үлкен болмаған турғын электромагнит толқынларының санын анықлаймыз. Буның ушын дискрет болған үш өлшемли Z^3 кеңислигин қараймыз (2.1.9-сүўрет.). 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 көлеми бир бирликке тең болған қутышаларға бөледи.



1.9-сүўрет.
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 көлеми бир бирликке тең болған қутышаларға бөледи.

Енди (2.1.22) шәртин Z^3 кеңислигиндеги сфералық беттиң теңлемеси сыпатында жазамыз

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2. \tag{2.1.23}$$

Бул аңлатпада $R = \omega l/\pi c$ арқалы сфераның радиусы белгиленген.

Енди жийиликлериниң мәниси ω шамасынан үлкен болмаған турғын толқынлардың саны болған $\widetilde{N}$ шамасын анықлаўға болады. Буның ушын Z^3 кеңислигиндеги радиусы R ге тең болған шардың оң октанты ишиндеги ноқатлардың санын есаплаймыз. Z^3 кеңислигиндеги ҳәр бир ноқат пенен бир бирлик көлемге ийе қутыша байланысқа болғанлықтан радиусы R ге тең болған шардың 1/8 бөлегиниң көлеми биз излеп атырған ноқатлар санын (турғын толқынлар санын) анықлайды. Сонлықтан

$$\widetilde{N} = \frac{1}{8}\cdot\frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{1}{6}\frac{\omega^3 l^3}{\pi^2 c^2} = \frac{1}{6}\frac{\omega^3}{\pi^2 c^3}\cdot V. \tag{2.1.24}$$

Бул жерде $V = l^3$ арқалы биз қарап атырған тең салмақлы жыллылық нурланыўы жайласқан көлем белгиленген.

Электромагнит толқынларының көлденең толқын екенлигин атап өтемиз. Сонлықтан қуўыслық ишинде $\vec{k}$ шамасының ҳәр бир бағытында улыўма жағдайда өз-ара перпендикуляр тегисликлерде поляризацияланған еки толқын тарқала алады. Сонлықтан жийилиги ω дан үлкен болмаған турғын толқынлардың улыўмалық санын былайынша анықлаў керек

$$N = 2\widetilde{N} = \frac{1}{3}\frac{\omega^3}{\pi^2 c^3}V. \tag{2.1.25}$$

(2.1.25) ти жийилик бойынша дифференциаллап қуўыслықтағы жийиликлери ω дан dω ға шекемги турғын толқынларды табамыз:

$$dN = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}V. \tag{2.1.26}$$

Егер енди $\langle\varepsilon\rangle$ арқалы жийилиги ω болған турғын электромагнит толқынның орташа энергиясын белгилесек, онда тең салмақлық жыллылық нурланыўының спектраллық тығызлыгының анықламасы бойынша

$$u_{\omega,T}\cdot d\omega = \frac{dN\langle\varepsilon\rangle}{V}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Буннан (2.1.26)-аңлатпаны есапқа алып

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\langle\varepsilon\rangle \tag{2.1.27}$$

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 сыпатында қараўды усынды. Олардың биреўи электрлик, екиншиси магнитлик.

Энергияның еркинлик дәрежелери бойынша тең өлшеўли тарқалыўы ҳаққындағы классикалық теоремаға муўапық термодинамикалық тең салмақлық ҳалында системаның ҳәр бир еркинлик дәрежесине ½kT шамасына тең энергия сәйкес келеди. Бул аңлатпада k = 1,38·10^{-23} Дж/К арқалы Больцман турақлысы белгиленген. Сонлықтан T температурасындағы тең салмақлық жыллылық нурланыўында жийилиги ω болған ҳәр бир турғын толқынға орташа

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2}kT + \frac{1}{2}kT = kT \qquad (2.1.28)$$

энергиясы сәйкес келеди. Бундай жағдайда (1.27)-аңлатпадан

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \qquad (2.1.29)$$

аңлатпасын келтирип шығарамыз. (2.1.17)-аңлатпаларының жәрдеминде тең салмақлық жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық тығызлығы ушын алынған бул формуланы абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыплығы ушын жазылған Рэлей-Джин формуласына түрлендириў мүмкин:

$$r^*_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT \qquad (2.1.30)$$

Рэлей-Джинс формуласы абсолют қара денениң нурланыўы бойынша алынған эксперименталлық мағлыўматларға киши жийиликлер ямаса үлкен толқын узынлықлары 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) бенен (2.1.30) ды барлық жийиликлер бойынша интеграллласақ тең салмақлық нурланыўының энергиясының интеграллық тығызлығы u(T) ҳәм абсолют қара денениң энергетикалық жарқынлығы R^* ушын шексиз үлкен мәнис аламыз. Ҳақыйқатында да

$$u(T) = \frac{4}{c}R^* = \int_0^\infty u_{\omega,T}\,\mathrm{d}\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3}\int_0^\infty \omega^2\,\mathrm{d}\omega \to \infty.$$

Буннан жыллылық нурланыўының классикалық теориясы бойынша нурланыў энергиясының шекли мәнислеринде зат пенен нурланыў арасында тең салмақлықтың орын алыўы мүмкин емес деген жуўмақ шығады. Бул жуўмақ тәжирийбе нәтийжелерине пүткиллей қайшы келеди.

Рэлей-Джинстың формуласындағы усындай қарама-қарсылықлы нәтийжени П.С.Эренфест "ультрафиолет катастрофа" деп атады. Ал классикалық теория бойынша Рэлей-Джинстың формуласы дурыс келтирилип шығарылған.

Квантлар ҳаққындағы гипотеза. Планк формуласы. "Ультрафиолет катастрофа" классикалық физиканың бир қатар принципиаллық ишки қарама-қарсылықларға ийе екенлигин айқын көрсетти. Сонлықтан жыллылық нурланыўы теориясында пайда болған машқалаларды шешиў ушын пүткиллей жаңа идеялардың керек екенлиги айқын болды.

Бундай физикалық идея 1900-жылы М.Планк тәрепинен квантлар ҳаққындағы гипотеза түринде усынылды. Бул гипотеза бойынша затлар тәрепинен нурлар үзликсиз нурландырылмайды ямаса жутылмайды, ал порциялар түринде нурландырылады ямаса жутылады. Энергияның шекли порцияларын М.Планк энергияның квантлары деп атады. Квантлық энергияның мәниси нурланыўдың жийилигинен ғәрезли ҳәм

$$E = h\nu \text{ ямаса } E = \hbar\omega \qquad (2.1.31)$$

формулаларының жәрдеминде бериледи. Бул жерде $h = 2\pi\hbar$ арқалы жаңа фундаменталлық турақлы шама берилген. Бул турақлы шаманы Планк турақлысы деп атайды. Ҳәзирги ўақытлардағы мағлыўматлар бойынша

$$h = (6{,}62618 \pm 0{,}00004)\cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}.$$

Бул турақлының өлшем бирлиги ""энергия × ўақыт" физикадағы "тәсир" ("действие") деп аталатуғын шаманың өлшемине сәйкес келеди. Сонлықтан Планк турақлысын тәсир кванты деп те атайды.

Классикалық физика бойынша қәлеген физикалық шама, соның ишинде энергия да үзликсиз өзгереди. Оның шексиз киши ўақыт ишиндеги өсими де шексиз киши шама. Тап усындай жағдай орын алып атырған ўақытта усынылған квантлар ҳаққындағы гипотеза физиканың буннан былай раўажланыўы ушын оғада үлкен тәсирин тийгизди. XX әсирдиң басында усынылған Планктиң квантлар ҳаққындағы гипотезасы квантлық механиканың дөретилиўине алып келди. Ҳәзирги заман физикалық теория болып табылатуғын квантлық механикада квантланыў идеясы ямаса дискретлик системаның ҳалын характерлеўши ҳәр қыйлы физикалық шамаларға тарқатылады. Тап усындай көз-қараста 1900-жылды квантлық физиканың туўылған жылы деп атаў мүмкин. Бул теория келеси 100 жыл даўамында ҳәр тәреплеме ҳәм жоқары тезликлер менен раўажланып, физиклерге атомлық қубылыслар қәддиндеги микродүньяның тамамланған ҳәм қарама-қарсылықсыз теориясын дөретиўге мүмкиншилик берди.

Биринши этапта нурланыў энергиясының квантланыўы ҳаққындағы гипотезаның жәрдеминде Планк тең салмақлық жыллылық нурланыўының толық теориялық тәриплемесин берди ҳәм классикалық теорияның қарама-қарсылықларын ақырына шекем қалдырмай шешти.

Нурланыўдың квантлық теорияның классикалық теориядан парқы ω жийилигиндеги нурланыўдың орташа энергиясын есаплаўда айқын көринеди. Планк гипотезасын есапқа алған ҳалда нурланыўдың орташа энергиясы

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P_n \varepsilon_n \qquad (2.1.32)$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул формулада $\varepsilon_n = n\hbar\omega$ арқалы нурланыў энергиясының мумкин болған мәниси, ал P_n арқалы термодинамикалық тең салмақлық ҳалында Т температрада нурланыўдың ε_n энергиясына ийе болыў итималлығы белгиленген. Итималлықтың бул мәнисин Больцман тарқалыўының жәрдеминде анықлаў мүмкин. Бул итималлықты базы бир константа дәллигинде

$$P_n = Ae^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}} \tag{2.1.33}$$

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 терияндa жийилиги ω болған нурланыўдың орташа энергиясы мына аңлатпаның жәрдеминде бериледи екен:

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}} = \hbar\omega\frac{\sum_{n=0}^{\infty} ne^{-n\xi}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\xi}}. \tag{2.1.34}$$

Бул формуладағы $\xi = \frac{\hbar\omega}{kT}$. Бул формуланың бөлиминде турған сумманы геометриялық прогрессияның жәрдеминде анықлаймыз

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\xi} = \frac{1}{1-e^{-\xi}}. \tag{2.1.35}$$

Бул қатнасты ξ бойынша дифференциаллап (2.1.34)-формуланың бөлиминде турған қатардың суммасын табамыз:

$$\sum_{n=0}^{\infty} ne^{-n\xi} = -\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}\xi} = \frac{e^{-\xi}}{\left(1-e^{-\xi}\right)^2}. \tag{2.1.36}$$

Сумманың табылған мәнисин (2.1.34)-аңлатпаға қойып жийилиги ω шамасына тең болған нурланыўдың орташа мәниси ушын ақырғы аңлатпаны аламыз

$$\langle\varepsilon\rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}. \tag{2.1.37}$$

Киши жийиликлерде $\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1$ ҳәм $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}$. Сонлықтан (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 пүткиллей ҳәр қыйлы мәнислерге ийе болады. Ал тап усындай жийиликлер областында классикалық теория "ультрафиолет катастрофаға" алып келетуғын еди. Нурланыўдың квантлық теориясы эксперимент пенен теория арасындағы бул қарама-қарсылықты сапластырады. Ҳақыйқатында да(2.1.37) ни (2.1.27) ге қойып тең салмақты жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық тығызлығы ушын Планктиң белгили формуласын аламыз:

$$u_{\omega,T} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2}\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \qquad (2.1.38)$$

Байланыс формуласы (2.1.17) абсолют қара дeneниң жийиликлердиң барлық диапазонындағы нур шығарыўшылығын тәриплейтуғын Планк функциясын

$$r_{\omega,T} = f(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2}\cdot\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \qquad (2.1.39)$$

түринде жазыўға мүмкиншилик 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 $\hbar\omega >> kT$, $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \gg 1$ теңсизликлери орынланатуғын жоқары жийиликлерде (2.1.39)-формула

$$f(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \qquad (2.1.40)$$

формуласына айланады. Бул формуланың қурылысын В.Вин 1893-жылы болжаған еди.

Жоқарыда баян етилген Планк формуласын келтирип шығарыў усылы тарийхый жақтан ең биринши 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 турақлысының мәнисин есаплаңыз.

Шешими: (2.1.39)-Планк функциясын барлық жийиликлер бойынша интеграллап абсолют қара денениң энергетикалық жарқынлығын табамыз. Интеграллаўдың нәтийжесинде

$$R^* = \int_0^\infty r_{\omega,T}\, d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2}\int_0^\infty \frac{\omega^3\, d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} = \frac{k^4 T^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3}\int_0^\infty \frac{x^3\, dx}{e^x - 1}$$

аңлатпасын аламыз. Алынған нәтийже $R^* = \sigma T^4$ түринде жазылатуғын Стефан-Больцман нызамына сәйкес келеди. Бул аңлатпадағы турақлы

$$\sigma = \frac{k^4}{4\pi^2 c^2 \hbar^3}\int_0^\infty \frac{x^3\,dx}{e^x - 1}$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

Меншикли емес

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1}dx$$

интегралының мәнисин Mathematica 8.0 программалаў тилиниң жәрдеминде есаплаймыз ҳәм $\frac{\pi^4}{15}$ нәтийжесин аламыз. Сонлықтан Стефан-Больцман турақлысы 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 σ турықлысының мәнисин пайдаланған ҳәм жоқарыдағы формула бойынша $\hbar$ тың мәнисин есаплаған.

1.4-мәселе. Абсолют қара дененің нур шығарыўшылық уқыплығы ушын жазылған Планк функциясының жәрдеминде жыллылық нурланыўы ушын Винниң $\lambda_m T = b$ нызамындағы b турақлысының мәнисин есаплаңыз.

Шешими: (2.1.3)-формула бойынша $\omega = 2\pi c/\lambda$ өзгериўшисин алмастырып, (2.1.39)- Планк функциясын түрлендириўдиң жәрдеминде абсолют қара дененің нур шығарыў уқыплығын толқын узынлығының функциясы түринде табамыз:

$$r^*_{\lambda,T} \equiv \varphi(\lambda, T) = \frac{4\pi^2 c^2 \hbar}{\lambda^5}\cdot\frac{1}{\left\{\exp\left(\frac{2\pi c\hbar}{\lambda k T}\right) - 1\right\}}.$$

$z = 2\pi c\hbar/(\lambda kT)$ белгилеўин пайдаланып φ функциясын

$$\varphi = A\frac{z^5}{\left(e^z - 1\right)},\quad A = \text{const}$$

түринде жазамыз. φ функциясының қандай $z = z_m$ мәнисинде максимумға ийе болатуғынлығын табамыз. Буның ушын

$$\frac{d\varphi}{dz} = A\frac{5z^4\left(e^z - 1\right) - z^5 e^z}{\left(e^z - 1\right)^2}$$

туўындысын алып, оны нолге теңеймиз ҳәм $z = z_m$ экстремаллық мәниси ушын

$$5\left(e^{z_m} - 1\right) - z_m e^{z_m} = 0$$

трансцендент теңлемесин ямаса

$$z_m = 5\left[1 - e^{-z_m}\right].$$

формуласын аламыз. Бул мәселени Mathematica 8.0 тилинде де шешиў мүмкин. Бундай жағдайда Solve$[\frac{5z^4(e^z-1)-z^5e^z}{(e^z-1)^2} == 0, z]$ аңлатпасының шешими ретинде $z \to 5 + \text{ProductLog}[-\frac{5}{e^5}]$ шешимине ийе боламыз (биз бул жерде m индексин жазбадық). $N[z \to 5 + \text{ProductLog}[-\frac{5}{e^5}]]$ аңлатпасы бойынша жүргизилген есаплаўлар $z \to 4.965114231744276$ нәтийжесин, яғный $z_m = 4{,}965$ 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 қәсийетлери

Нурланыўдың фотонлық теориясы. М.Планктың квантлар ҳаққындағы гипотезасын раўажландырып А.Эйнштейн 1905-жылы нурланыўдың (жақтылықтың) квантлық қәсийетлери оның тек затлардан шығарылғанында ҳәм затларда жутылғанында ғана емес, ал нурлардың кеңисликте тарқалғанында да көринеди деп болжады. Ньютон тәрепинен XVIII әсирдиң басында усынылған жақтылықтың корпускулалық теориясын қайтадан тиклеп нурланыўды көп сандағы бөлекшелерден турады, бул бөлекшелердиң ҳәр қайсысы энергия квантына ийе болып кеңисликте жақтылықтың вакуумдағы тезлигиндей тезлик $c = 3 \cdot 10^8$ м/с пенен қозғалады деген гипотезаны усынды. Усындай бөлекшелердиң қәсийетлерин қарап шығамыз.

Фотон деп аталатуғын нурланыўдың бөлекшеси ультрарелятивистлик деп аталатуғын зарядланбаған бөлекше болып табылады. Фотонның қәсийетлери арнаўлы салыстырмалық теориясының тийкарғы қатнасларының жәрдеминде ғана тәриплениўи мүмкин. Мысалы бул теориядан фотонның массасы нолге тең болған элементар бөлекше екенлиги келип шығады. Бул жағдай фотонның барлық ўақытта c тезлиги менен қозғалатуғынлығын ҳәм тынышлық ҳалында тура алмайтуғынлығын көрсетеди. Егер фотон басқа элементар бөлекше менен соқлығысыўдың ақыбетинде "тоқтайтуғын" болса, онда ол энергиясын соқлығысқан бөлекшеге берип жоқ болады.

Фотонның энергиясы

$$\varepsilon_ф = h\nu = hc/\lambda \qquad (2.1.41)$$

жақтылық ушын ($\lambda \sim 500$ нм) бир неше электронвольттен өткир гамма-нурлары ушын ($\lambda = 10^{-3}$ нм) миллионлаған электронвольтке шекемги кең диапазонда жатады.

с тезлиги менен қозғалыўшы фотон импульске ийе болады. Оның импульси менен энергиясы арасында $p_ф c = \varepsilon_ф$ түриндеги релятивистлик қатнас орын алады. (2.1.32)-аңлатпаны есапқа алып

$$p_ф = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \qquad (2.1.43)$$

теңлигин жаза аламыз.

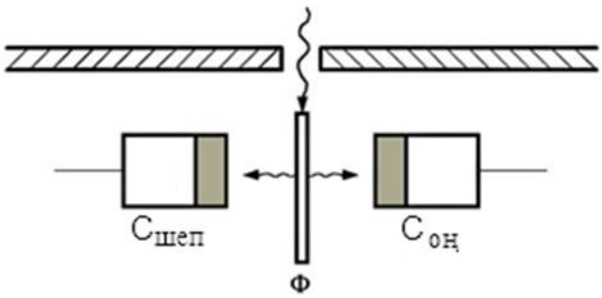
Фотон ушын модули $k = 2\pi/\lambda$ шамасына тең, ал тарқалыў бағыты $\vec{k}$ векторы жәрдеминде анықланатуғын нурланыў ушын (2.1.43)-формуланы төмендегидей векторлық түрде жазыў мүмкин

$$\vec{p}_ф = \hbar \vec{k}. \qquad (2.1.44)$$

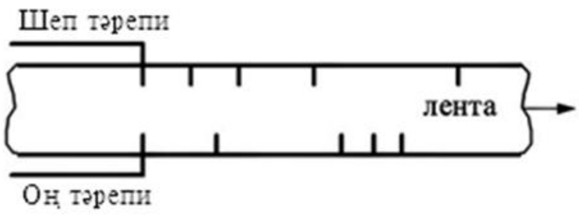
Боте тәжирийбеси. Экспериментте нурланыўға тийисли болған айырым фотонды табыўға бола ма? деген сораў бериледи. Егер фотон үлкен массаға ҳәм үлкен энергияға ийе болғанда бул сораўға аңсат жуўап бериўге болар еди. (2.1.42)- ҳәм (2.1.43)-аңлатпалардан бундай фотонның қысқа толқынлы электромагнит нурланыўда (мысалы рентген нурларында) болатуғынлығын аңлаўға болады.

Рентген нурларының фотонын табыў ушын В.Боте 1925-жылы орынлады. Бул экспериментте жуқа металл фольга Ф (2.1.10-а сүўрет) 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 есаплағышлар бир ўақытта бирдей шамаларды көрсеткен болар еди. Соның менен бирге усындай жағдайларда шептеги ҳәм оң тәрептеги есаплаўшы дүзилислер менен тутастырылған жазып алыўшы әсбаплар қозғалыўшы қағаз лентада бирдей тамғаларды қойған болар еди (2.1.10-б сүўрет).



1.10-а сүўрет.



1.10-б сүўрет.

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 қозғалыўшы қағаз лентаға түсирилген тамғалар бир бирине сәйкес келмей қалады.

Тәжирийбе (2.1.10-б сүўрет) нурланыўдың фотон теориясының жуўмағын тастыйықлады ҳәм усының менен бирге фотонның бар екенлиги экспериментте дәлилленди

С.И.Вавиловтың басшылығында өткерилген экспериментлер көзге бир секундтың ишинде бир неше жүз фотон келип түскенде адамның көзиниң жақтылықты сезетуғынлығын көрсетти. Сонлықтан әззи жақтылық дәстеси бар болған жағдайда нурландырылатуғын фотонлардың санының өзгерислери менен байланыслы болған флуктуацияларды көз бенен де аңғарыў мүмкин.

Энергиясы 0,1 эВ болған инфрақызыл нурланыў областында жалғыз фотонды да сезетуғын детектор ислеп шығылған. Бул детектор аса өткизгиш ниобий нитридинен соғылған.

Фотон газының ҳал теңлемеси. Фотонлық теорияның көз-қарасы бойынша тең салмақлы жыллылық нурланыўын қуўыслықты толтырып турған фотон газы деп қараўға болады. Бул газдиң барлық бөлекшелери пүткиллей тәртипсиз қозғалады ҳәм сонлықтан сол қозғалыслар барлық бағытлар бойынша теңдей итималлыққа ийе.

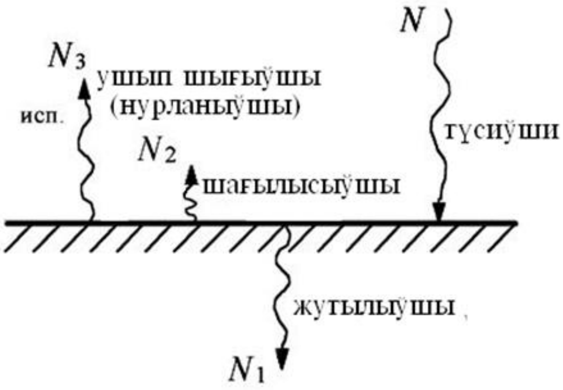
Әлбетте фотонлар газын классикалық идеал газдай болып таллаўға болмайды. Фотон газының бөлекшелери (фотонлар) тезликлер бойынша тарқалыўға ийе емес, ал олардың энергия бойынша тарқалыўын классикалық Максвелл-Больцман тарқалыўы менен тәриплеўге болмайды. Фотонлардың энергиялар бойынша тарқалыўын квантлық статистиканың жәрдеминде келтирип шығарыў мүмкин (усы қолланбаның 6.5 бөлимин қараңыз). Буның ушын дәслеп бир биринен парқы жоқ бөлекшелерден туратуғын системалардың квантлық теориясын талқылап алыў керек болады. Ҳәзир болса биз улыўмалық термодинамикалық нызамлар ҳәм тең салмақлық жыллылық 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 параметрлери болған басымды, көлемди ҳәм температураны бир бири менен байланыстырады. Газлердиң молекулалық-кинетикалық теориясындағыдай жоллар менен фотон газының қуўыслықтың дийўалларына түсиретуғын басымын есаплаймыз ҳәм келип түсиўши фотонлардың импульслериниң ыдыстың дийўалларына берилиўиниң салдарынан басымның пайда болатуғынлығын еске түсиремиз

Барлық фотонлардың ишинен биз дәслеп ω жийилигиндеги нурланыўға сәйкес келиўши фотонларды бөлип аламыз ҳәм оның көлемлик концентрациясын n_ω арқалы белгилеймиз. Бирдей ҳуқыққа ийе болғанлықтан бир бирине перпендикуляр ҳәм ыдыстың дийўалларына да перпендикуляр болған бағытларды қараймыз. Ҳәр бир дийўалға қарай барлық фотонлардың үштен бири қозғалады деп есаплаймыз. Олардың да тек ярымы ғана дийўалға қарай, ал қалған ярымы дийўалға қарама-қарсы бағытта қозғалады. Фотонлар c 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 шағылысады. $N_1 + N_2 = N$ екенлиги өз-өзинен түсиникли (2.1.11-сүўрет).



1.11-сүўрет.
Дийўалдың бетине келип түсиўши, беттен шағылысыўшы ҳәм беттен нурланыўшы фотонлардың санын есаплаў ушын керекли болған сүўрет.

"Зат – нурланыў" системасындағы термодинамикалық тең салмақлық шәрти беттен нурландырылатуғын (ушып шығыўшы) фотонлардың саны N_3 (яғный 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 дененең ишки энергиясы ўақыттың өтиўи менен өзгериссиз қалады. Соның менен бирге ўақыттың өтиўи менен нурланыў энергиясы да өзгермейди.

Қәлеген жутылған ҳәм шығарылған фотон дийўал $p_ф$ импульсин береди. Оның шамасы (2.1.43)-формуланың жәрдеминде есапланады. Шағылысқан фотон өзиниң дәслепки бағытын қарама-қарсы бағытқа өзгертеди. Сонлықтан дийўалға $2p_ф$ импульсин береди. Демек бир ўақыт бирлигинде дийўалдың майданының бир бирлигине

$$N_1 p_ф + N_2 2p_ф + N_3 p_ф = 2(N_1 + N_2)p_ф = 2Np_ф$$

шамасына тең импульс бериледи. Ньютонның екинши нызамы бойынша дийўалға берилген бул импульс жийилиги ω болған нурланыўдың дийўалға түсирген басымы P_ω ны анықлайды. Демек

$$P_\omega = 2Np_ф = \frac{1}{3}n_\omega c p_ф = \frac{1}{3}n_\omega \varepsilon_ф = \frac{1}{3}u_\omega. \qquad (2.1.45)$$

Бул аңлатпада u_ω арқалы жийилиги ω болған нурланыўдың энергиясының тығызлығы белгиленген.

Ҳәр қыйлы жийиликтеги нурланыўдың фотонларының дийўалға түсиретуғын басымын суммалап T температурасында тең салмақлықта турған фотон газының улыўмалық басымын

$$P = \frac{1}{3}\int_0^\infty u_{\omega,T}\, d\omega = \frac{1}{3}u(T) \qquad (2.1.46)$$

түринде табамыз. Бул аңлатпада u(T) арқалы мүмкин болған барлық жийиликлердеги нурланыў энергиясының интегралльқ тығызлығы белгиленген. (2.1.7) ҳәм (2.1.16) ларды есапқа алсақ

$$u(T) = \frac{4}{c}R^* = \frac{4\sigma}{c}T^4, \qquad (2.1.47)$$

аңлатпасына ийе боламыз, сонлықтан фотон газының басымы ушын төмендеги формуланы аламыз

$$P = \frac{4\sigma}{3c}T^4. \qquad (2.1.48)$$

Бул аңлатпада σ арқалы Стефан-Больцман турақлысы, с арқалы жақтылықтың вакуумдағы тезлиги белгиленген.

Солай етип фотон газы түсиретуғын басымның шамасы оның абсолют температурасының төртинши дәрежесине пропорционал, фотон газы жайласқан қуўыслықтың көлеминен ғәрезсиз екен. Мысалы Т = 10^3 К шамасын (2.1.48)-формулаға қойсақ Р = $2{,}5\cdot10^4$ Па басымын аламыз. Температураның артыўы менен фотон газының басымы кескин түрде артады ҳәм Т = 10^8 К де Р = $2{,}5\cdot10^{16}$ Па = $2{,}5\cdot10^{11}$ атм ға жетеди.

Фотон газының термодинамикалық характеристикалары. Енди көлеми V, температурасы Т болған қуўыслықты толтырып турған фотон газының ишки энергиясын есаплаймыз. (2.1.47)-формуланы есапқа алсақ

$$U = u(T)V = \frac{4\sigma}{c}T^4V \qquad (2.1.49)$$

екенлигин табамыз. Сонлықтан турақлы V көлемин ийелеп турған фотон газының жыллылық сыйымлығы ушын

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V=\text{const}} = \frac{16\sigma}{c}T^3V \qquad (2.1.50)$$

аңлатпасын аламыз.

Классикалық идеал газдиң жыллылық сыйымлығы температурадан ғәрезсиз шама еди. Фотон газының жыллылық сыйымлығы болса оның абсолют темпетарурасының 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

$$dS = \frac{dU + P\,dV}{T} = \frac{16\sigma}{c}T^2V\,dT + \frac{16\sigma}{3c}T^3\,dV = d\left(\frac{16\sigma}{3c}T^3V\right)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Буннан абсолют температура нолге умтылғанда (Т → 0) энтропия S тиң де нолге умтылатуғынлығын (яғный S → 0) есапқа алсақ, онда фотон газының энтропиясын табамыз:

$$S = \frac{16\sigma}{3c}T^3V. \qquad (2.1.51)$$

алынған термодинамикалық аңлатпалар фотон газы қатнасатуғын ҳәр қыйлы процесслерди қарап шығыўға мүмкиншилик береди. Мысалы (2.1.48) ден изотермалық процесстиң (Т = const) изобаралық та процесс (Р = const) екенлигин көриўге болады.

Егер фотон газын кеңейткенде ямаса қысқанда оның энтропиясы өзгермейтуғын болса ($S = \mathrm{const}$), онда бундай процессте фотон газының қоршаған орталық пенен энергия алмаспайтуғынлығын көриўге болады ($dQ = 0$). Бундай процессти адиабаталық процесс деп атайды. (2.1.51) ден фотон газы ушын адиабаталық процесстиң теңлемесиниң

$$T^3V = \mathrm{const} \qquad (2.1.52)$$

түрине ийе болатуғынлығын көремиз. (2.1.48)-аңлатпаны есапқа алсақ бул формула

$$pV^{4/3} = \mathrm{const} \qquad (2.1.53)$$

түрине келеди.

Әлемниң жыллылық нурланыўы. Жоқарыда келтирилген мағлыўматлар нурланыў энергиясының жоқары температураларда системаның ишки 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 ҳуқықлы элементи сыпатында есапқа алыныўы шәрт. Жоқары температуралы плазманың көплеген қәсийетлери фотон газының бөлекшелер газы менен тәсирлесиўи тийкарында түсиндириледи.

Усындай тәсирлесиўге қызықлы болған мысалды Әлемниң эволюциясының ең басланғыш дәўирлерин тәриплейтуғын ҳәзирги заман космологиялық теориясында да табыўға болады. Бул теория бойынша бизиң Әлемимиз буннан 13-14 млрд жыл бурын Үлкен партланыўдың салдарынан пайда болған.

Партланыўдың ақыбетинде жүдә киши көлемде жүдә жоқары температурада ҳәм жүдә жоқары тығызлықларда Әлемниң барлық затлары жайласқан. Г.Гамовтың берген мағлыўматлары бойынша партланыўдан 100 секунд өткеннен кейин заттың тығызлығы суўдың тығызлығынан мыңлаған есе үлкен, ал температура болса термоядролық партланыўдың орайында пайда болатуғын температурадан ($T \sim 10^9$ K) салыстырмас 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-жылы дөретилген А.А.Фридманның теориясына сәйкес партланыўдан кейин Әлем үлкен тезликлер менен кеңейе баслаған. Кеңейиўдиң 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^3 шамасына шекем киширейген. Бундай шараятларда электронлар, протонлар ҳәм нейтронлар биригеди ҳәм водород, гелий ҳәм басқа да жеңил элементлердиң атомлары пайда болады. Бундай нейтрал атомлардан туратуғын орталық нурланыў ушын мөлдир болады ҳәм нәтийжеде нурланыў затлардан "айрылып шығады". Усы дәўирлерден баслап фотон газы Әлемниң барлық көлемин ийелейди ҳәм Әлем менен бирге кеңейеди. Фотон газының бундай кеңейиўин адиабаталық кеңейиў деп атаўға болады

(2.1.52)-аңлатпадан Әлемниң көлеми үлкейген сайын оны толтырып турған фотон газының температурасы да төменлейди. Әпиўайы есаплаўлар (бундай есаплаўлар 1.6-мәселеде келтирилген) усындай кеңейиў процессиниң салдарынан пүткил Әлем ҳәзирги ўақытлары температурасы шама менен 3 К шамасындағы тең салмақлық нурлар менен толған болыўы керек. Ондай электромагнитлик нурларды микротолқынлық нурлар деп атайды. Әлемниң эволюциясының ең басланғыш моментлеринде пайда болған бул космослық жыллылық 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 таярлаўдың барысында әззи фонлық радиошаўқымның бар екенлигин тапты. Олар өткерген изертлеўлер бундай радиотолқынлардың космос кеңлигиниң барлық тәреплеринен бирдей интенсивликте келетуғынлығын ҳәм бул толқынлардың энергиясының максимумы λ_m = 0,96 мм ге сәйкес келетуғынлығын көрсетти. Винниң аўысыў нызамы болған (2.1.11) аңлатпасынан усындай толқын узынлығы ушын тең салмақлық жыллылық нурланыўының энергиясының максимумының сәйкес келетуғынлығын нурланыўдың температурасының Т = 2,7 К екенлиги келип шығады. Солай етип радиоинженерлер тәрепинен дерлик тосыннан Әлемде жүдә ертеде болып өткен физикалық процесслердиң излери табылды.

1978-жылы физика бойынша халық аралық Нобель сыйлығы берилген реликтлик нурланыўдың ашылыўы ҳәзирги заман илиминиң әҳмийетли жетискенлериниң бири болып есапланады. Бул ашылыў Әлемниң он миллиард жылдан да көбирек ўақыт ишиндеги эволюциясын тәрийиплейтуғын "ыссы" кеңейиўши Әлем теориясының дурыс екенлигин тастыйықлады. Бул теориядан өзиниң раўажланыўының басланғыш дәўирлеринде Әлемниң ҳәзирги дәўирлердеги Әлемге пүткиллей усамағанлығын көрсетеди. Бул теориядан сол ўақытлары Әлемниң үлкен партланыўдың ақыбетинде пайда болған аса тығыз плазмадан ҳәм жүдә жоқары температурадағы нурланыўдан турғанлығы келип шығады. Бул жерде биз Жердеги шараятларда ашылған нызамлардың космослық масштаблардағы физикалық қубылыслар ушын да дурыс екенлигин көремиз. Усы жуўмағымыздың әҳмийети жүдә уллы.

1.5-мәселе. Т температурасындағы тең салмақлық жыллылық нурланыўы менен толған кеңисликтиң көлеминиң бир бирлигиндеги фотонлардың санын анықлаңыз ҳәм фотонлардың концентрациясының температурадан ғәрезлигиниң графигин сызыңыз.

Шешими: Жийиликлери ω дан $\omega + d\omega$ ға шекемги жийиликлер интервалындағы фотонлар ушын көлемлик концентрация n_ω түсинигин киргизсек, онда барлық жийиликлердеги биз излеп атырған фотонлардың концентрациясы

$$n_ф = \int_0^{\infty} n_\omega \, d\omega$$

түринде анықланады. Анықлама бойынша нурланыў энергиясының спектраллық тығызлығы $u_{\omega,T} = \hbar\omega n_\omega$ шамасына тең. Сонлықтан (2.1.38) Планк формуласын есапқа алып

$$n_ф = \int_0^{\infty} \frac{u_{\omega,T}}{\hbar\omega} d\omega = \frac{1}{\pi^2}\left(\frac{kT}{\hbar c}\right)^3 \int_0^{\infty} \frac{\xi^2 \, d\xi}{\exp\xi - 1} = \frac{1}{\pi^2}\left(\frac{kT}{\hbar\omega}\right)^3 I$$

екенлигин табамыз.

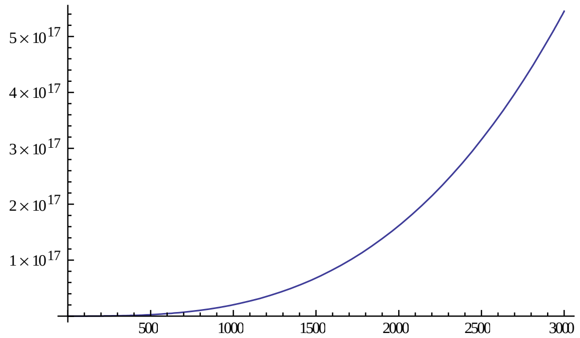
Бул формуладағы меншикли емес интегралдың мәнисин Mathematica 8.0 тилинде $N[\int_0^\infty \frac{\xi^2}{\mathrm{Exp}[\xi]-1} d\xi]$ аңлатпасын жазыў жолы менен шешемиз. Компьютер 2.4041138063191885 шамасын береди. Усыған байланыслы фотонлардың концентрациясын есаплаў ушын

$$n_\Phi = \frac{2{,}4}{\pi^2}\left(\frac{kT}{hc}\right)^3$$

формуласын аламыз. Есаплаўлар төмнедеги нәтийжелерди береди

T, K	n_ϕ, м$^{-3}$
10	$2\cdot10^{10}$
300	$5{,}45\cdot10^{14}$
1000	$2\cdot10^{16}$

Биз n_ϕ шамасының температура T дан ғәрезлигиниң графигин де дүзиўимиз мүмкин. Оның ушын Plot[$\frac{2.4}{\pi^2}(\frac{kT}{hc})^3, \{T, 0{,}3000\}$] аңлатпасын жазамыз (температура T ушын 0 ден 3000 K ге шекемги интервал алынған. Алынған график



түрине ийе болады. Бөлекшелер концентрациясының температурадан тап усындай болған ғәрезлилиги фотон газының өзине тән өзгешелиги болып табылады.

1.6-мәселе. "Ыссы" Әлем теориясында Әлемниң раўажланыўының дәслепки дәўиринде нурланыўдың затлардан "бөлинип шығыўы" T = 3000 K температурада ҳәм $\rho = 10^{-17}$ кг/м^3 тығызлықта жүзеге келди деп есапланады. Ҳәзирги ўақытлары Әлемниң тығызлығының $\rho_0 = 10^{-29}$ г/см^3 = 10^{-26} кг/м^3 екенлигин есапқа алып ҳәзирги ўақыттағы Әлемдеги реликтлик нурлардың температурасының шамасын баҳалаңыз.

Шешими: Әлемди толтырып турған нурланыў (реликтлик нурланыў) Әлем менен бирге адиабаталы түрде кеңейеди деп есаплаймыз. Бундай жағдайда (2.1.52) ни есапқа алған ҳалда

$$T^3V = T_0^3V_0$$

екенлигин табамыз. Бул аңлатпада T_0 арқалы биз излеп атырған температура, V ҳәм V_0 арқалы Әлемниң басланғыш ҳәм ҳәзирги көлемлери белгиленген. Әлемдеги затлардың массасын M арқалы белгилеймиз ҳәм бул шаманы өзгермейди деп есаплаймыз. Бундай жағдайда Әлемниң ертедеги ҳәм ҳәзирги ўақытлардағы тығызлықлары 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. ρ менен ρ0 шамаларының мәнислерин қойып

$$T_0 = 10^{-3} \cdot T = 3\ K$$

екенлигине ийе боламыз.

Усы ўақытларға шекем кеңейиўши Әлемдеги нурланыў тап усындай шамаға шекем төменлеген.

2-1-4. **Квантлық оптика**

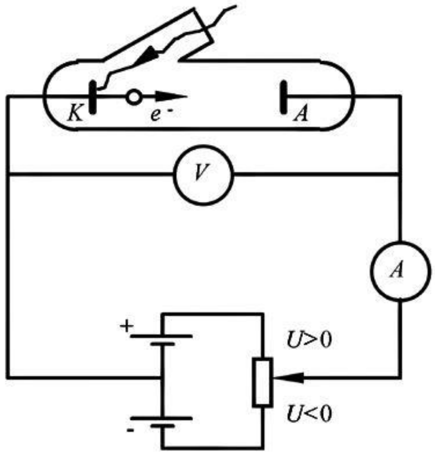
Планк пенен Эйнштейнниң квантлық теорияларының тийкарғы талапларына сәйкес нурланыў, соның ишинде жақтылық та корпускулалық қәсийетлерге ийе болады. Демек белгили бир шараятларда бул қәсийетлер оптикалық экспериментлерде бақланыўы керек.

Оптикалық қубылыслардың бир қатар классын түсиндириў ушын нурланыў энергиясының квантлары ҳәм оларды алып жүриўши фотонлар түсиниги керек болады. Фотонлар түсиниги қолланылатуғын оптикалық қубылыслардың классын квантлық оптикасы деп атайды. Бундай қубылыслар тийкарынан нурланыўдың затлар менен тәсир етисиўи менен байланыслы. Бундай тәсир етисиў ҳаққында гәп еткенимизде затлардың бөлекшелери менен нурланыў бөлекшелериниң (фотонлардың) тәсирлесиўин нәзерде тутыў керек. Квантлық оптиканың усындай еки қубылысын қарап өтемиз

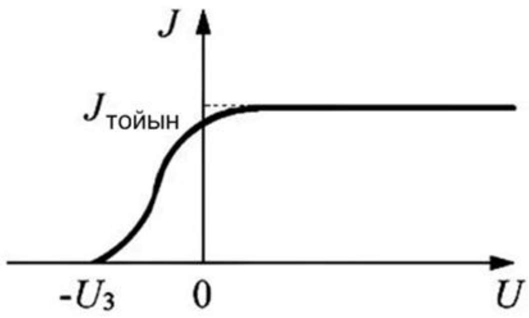
Фотоэффект. Сыртқы фотоэффект деп сыртқы нурланыўдың тәсиринде затлардан электронлардың ушып шығыўына айтамыз. Ең дәслеп фотоэффект 1887-жылы Г.Герц тәрепинен ашылды. Ол еки металл шарик арасындағы газ разрядының пайда болыўын изертледи ҳәм изертлеў барысында шариклердиң биреўин ультрафиолет нурлар менен нурландырғанда еки шарик арасындағы ушқынлы разрядтың әдеўир үлкен интенсивлик пенен пайда болатуғынлығын тапты. Нурланыўдың тәсиринде металдан ушып шығатуғын бөлекшелердиң 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-сүўретте көрсетилгендей еки электродлы вакуумлы лампа түриндеги фотоэлементти пайдаланды. Фотоэлементтеги К катодынан көзге көринетуғын жақтылық ямаса ультрафиолет нурлар менен жақтыландырғанда электронлар ушып шығады. Бундай электронларды фотоэлектронлар деп атайды. Катодтан ушып шыққан электронлар А анодына келип жетип шынжыр арқалы электр тоғының өтиўин тәмийинлейди. Бул тоқтың шамасы гальванометр ямаса миллиамперметр жәрдеминде өлшенеди. Шынжырға тоқ көзин тутастырыўдың арнаўлы схемасы фотоэлементке түсирилген кернеўдиң полярлығын өзгертиўге мүмкиншилик береди.



1.12-сүўрет. А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлементтиң схемасы.



1.13-сүўрет. А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлементтиң вольт-амперлик характеристикасы.

А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлеметтиң келип түсиўши жақтылық ағысы өзгермейтуғын жағдайдағы вольт-амперлик характеристикасының (яғный фототоқтың шамасы J тың кернеў U дан ғәрезлиги) сапалық түри 1.13-сүўретте келтирилген.

Оң кернеў тезлетиўши электр майданына сәйкес келеди. Бундай майданда катодтан ушып шыққан электронлар жайласқан. Сонлықтан оң кернеўлер областында катодтан шығарылған электронлардың барлығы анодқа жетеди ҳәм тойыныў тоғы болған $J_{тойын}$ тоғын пайда етеди.

Тәжирийбелерде бақланатуғны киши оң кернеўлердеги фототоқтың шамасының азмаз кемейиўи анод пенен катод арасындағы контактлы потенциаллар айырмасы менен байланыслы. Биз фотоэффекттиң нызамлықларын үйрениў барысында контактлық потенциаллар айырмасын есапқа алмаймыз.

U < 0 болған кери кернеўлерде катодтан ушып шыққан электронлар тормозлаўшы электр майданына тап болады. Бул майданды басып өтиў ушын ол базы бир муғдардағы кинетикалық энергияға ийе болыўы шәрт. Кинетикалық энергиясы киши болған электрон тормозлаўшы майдан арқалы өтип анодқа барып жете алмайды. Бундай электрон катодқа қайтып келеди ҳәм фототоқтың шамасына үлес қоса алмайды. Сонлықтан кери кернеўлер областындағы фототоқтың әстелик пенен кемейиўи катодтан ушып шығып атырған электронлардың ҳәр қыйлы кинетикалық энергияларға ийе болатуғынлығын көрсетеди.

Кери кернеўдиң базы бир шамасында фототоқтың шамасы нолге тең болады. Кернеўдиң бул мәнисин $U_и$ арқалы белгилеймиз ҳәм оны иркиўши потенциал деп атаймыз. Усы кернеўге сәйкес келиўши тормозлаўшы (иркиўши) электр майданы катодтан ушып шыққан электронлардың барлығын иркеди. Бундай электронлардың ишине кинетикалық энергиясы максимал E_m болған электронлар да киреди.

Иркиўши потенциалдың мәнисин өлшеп

$$E_ж = \frac{1}{2} m_0 v_m^2 = eU_з \qquad (2.1.54)$$

аңлатпасы жәрдеминде фотоэлектронлардың максималлық энергиясын ямаса максималлық тезлиги болған v_m шамасын анықлаймыз.

Экспериментлерде фотоэффекттиң төмендегидей тийкарғы нызамлықлары табылды:

1. Белгили бир узынлықтағы монохроматлық жақтылық ушын тойыныў фототоғының шамасы катодқа келип түсиўши жақтылық ағысына пропорционал
2. Фотоэлектронлардың максималлық кинетикалық энергиясының шамасы жақтылық ағысының шамасына байланыслы емес, ал нурланыўдың жийилигинен ғәрезли.
3. Катодтың ҳәр бир материалы ушын шегаралық жийилик $\nu_ш$ бар болып, жийилиги бул жийиликтен кем болған нурланыў ($\nu < \nu_ш$) фотоэффектти пайда етпейди. Бул шегаралық жийиликти фотоэффекттиң қызыл шегарасының жийилиги деп атайды. Толқын узынлығы шкаласында бул жийиликке қызыл шегараның толқын узынлығы $\lambda_ш$ сәйкес келеди. Берилген металл ушын толқын узынлығы тек $\lambda < \lambda_ш$ теңсизлигин қанаатландыратуғын ғана узынлықтағы нурланыў фотоэффектти жүзеге келтиреди.

Фотоэффекттиң жоқарыда келтирилген нызамлықларын классикалық физика көз-қараслары тәрепинен түсиндириўге умтылыўлар экспериментте алынған нәтийжелер менен қарама-қарсы болған жуўмақларды берди. Ҳақыйқатында да классикалық физика бойынша фотоэлектронлардың максималлық кинетикалық энергиясы катодқа келип түсиўши жақтылықтың ағысына пропорционал болыўы керек. Ал экспериментлер болса максималлық кинетикалық энергияның жақтылықтың ағысына емес, ал жийилигине байланыслы екенлигин көрсетеди. Сонлықтан фотоэффекттиң қызыл шегарасының болыўы толқынлық теорияның болжаўларына қарама-қарсы келеди.

Фотоэффектти үйрениў бойынша өткерилген экспериментлердиң нәтийжелерин түсиндириў ушын 1905-жылы А.Эйнштейн энергия квантын алып жүриўши нурланыў бөлекшелери болған фотонлар концепциясы усынды. Усындай теорияның жәрдеминде металл менен нурланыўдың тәсирлесиўин фотонның металдағы еркин электрон менен серпимли емес тәсирлесиўи сыпатында қарады ҳәм фотоэффекттиң нызамлықларын аңсат түсиндирди. Ҳақыйқатында да бундай процессте металдағы еркин электрон барлық энергияны фотоннан алады. Ал фотонның энергиясы болса жийиликке туўры пропорционал. Металдан жулып алынатуғын электронлардың саны ҳәм соған байланыслы болған тойыныў фототогының мәниси металдың бетине келип түсиўши фотонлардың санына байланыслы. Фотонлардың саны болса нурланыў энергиясының ағысынан анықланады.

Егер усындай моделде электронның металдың ишинде металдың бетине қарай қозғалыўы барысында энергиясын жоғалтатуғынлығын есапқа алмасақ, онда энергияның сақланыў нызамы

$$h\nu = A + E_ж \qquad (2.1.55)$$

аңлатпасын жазыўға мүмкиншилик береди. Бул жерде $E_m = mv^2/2$ арқалы фотоэлектронлардың максималлық кинетикалық энергиясы белгиленген.

Бул теңлемеден фотоэффекттиң екинши ҳәм үшинши нызамлары бирден келип шығады. Ҳақыйқатында да (2.1.55)-теңлемеден фотоэлектронлардың максималлық энергиясының металдың бетине келип түсиўши нурлардың жийилигине байланыслы екенлиги көринип тур. Соның менен бирге $h\nu < A$ болса фотоэффект бақланбайды. Буннан фотоэффекттиң қызыл шегарасы ушын толқын узынлығы менен жийиликтиң мәнисин есаплаўға мүмкиншилик беретуғын әпиўайы формулаларды аламыз

$$\nu_k = A/h \text{ ҳәм } \lambda_k = hc/A. \qquad (2.1.56)$$

Солай етип нурланыўдың квантлық теориясы фотоэффектти түсиндириўде табысқа ериседи екен. Фотоэффектти квантлық түсиндириўде еркин электронның фотонды жута алмайтуғынлығы ҳаққындағы жуўмақ гүман туўдырыўы мүмкин (2.1.7-мысалды қараңыз). Ҳақыйқатында да еркин электрон фотонды жута алмайды. Бундай процесстиң жүриўин энергия менен импульстиң сақланыў нызамлары қадаған етеди. Бирақ электронның кристалдың атомлары менен тәсир ететуғынлығын есапқа алсақ бундай жағдайдан аңсат шығыўдың мүмкиншилиги пайда болады. Сонлықтан электрон тәрепинен фотон жутылғанда фотонның импульсиниң бир бөлеги металдың пәнжересине бериледи.

Фотоэффекттиң әҳмийетли санлық характеристикасы ретинде квантлық шығыў Y ти көрсетиў мүмкин. Бул шама металға келип түсиўши бир фотонның неше электронды ушырып шығаратуғынлығын билдиреди. Көпшилик металлар ушын қызыл шегара қасында квантлық шығыўдың мәниси 10^{-4} электрон/фотон шамасын қурайды. Квантлық шығыўдың мәнисиниң киши екенлиги мына жағдайларға байланыслы: металды таслап шығатуғын электрон өзиниң фотоннан алған энергиясын сақлаўы керек. Сонлықтан бундай электрон металдың бетинен 0,1 мкм ден үлкен емес тереңликлерде жайласқан болыўы керек. Усының менен бир катарда металдың бети нурларды күшли шағылыстырады. Фотонлардың энергиясының мәнисиниң өсиўи менен (яғный фотонлардың жийилигиниң өсиўи менен) квантлық шығыўдың мәниси де үлкейеди ҳәм энергиясы шама менен 1 электрон-вольт болған фотонлар ушын 0,01 ÷ 0,05 электрон/фотон шамасына жетеди. Рентген нурлары ушын (рентген фотонларының энергиясының шамасы 10^3 эВ тың әтирапында) бетке келип түсиўши ҳәр бир он фотонға металдан ушып шығыўшы бир электрон сәйкес келеди.

Комптон эффекти. Фотонлардың энергиясы үлкен болғанда (мысалы өткир рентген нурлары ушын шама менен 0,1 МэВ ти қурайды) заттың электронлары тәрепинен фотонның жутылыўы процессиниң итималлығы кемейеди. Бул жағдайда электромагнит нурланыў затлар менен тәсирлескенде усы нурлардың бағытының өзгериўи менен шашыраўы жүз береди.

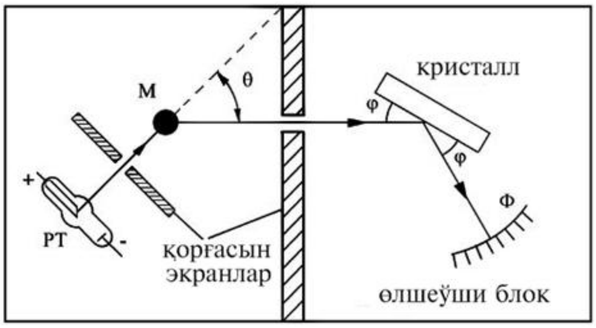
1923-жылы А.Комптон рентген нурларының парафиндеги шашыраўын изертледи ҳәм бул изертлеўлердиң барысында шашыраған толқынлардың толқын узынлығы λ' тың парафинге келип түскен толқынның узынлығы λ ден үлкен екенлигин тапты. Толқынның затларда шашыраўының нәтийжесинде толқын узынлығының өзгериўи кейинирек Комптон эффекти атамасын алды. Квантлық оптиканың бул эффектин ашқаны ҳәм түсиндиргени ушын А.Комптонға 1927-жылы Нобель сыйлығы берилди.

Комптон пайдаланған эксперименталлық дүзилистиң схема түриндеги сүўрети 1.14-сүўретте келтирилген. РТ рентген трубкасы айланыўшы платформаға бекитилген. Бул нышана М ге келип түсиўши θ мүйешиниң мәнисин өзгертиўге мүмкиншилик береди.

Шашыраған толқынның толқын узынлығы усы толқынның кристалдағы дифракциясының жәрдеминде анықланды. Рентген нурларының кристаллардағы дифракциясы теориясы бойынша Вульф-Брэгг шәрти деп аталатуғын

$$2d\sin\varphi = k\lambda', \quad k = 1,2,\ldots, \tag{2.1.58}$$

шәрти орынланғанда (бул аңлатпада d арқалы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлық, φ арқалы рентген нурларының сол кристаллографиялық тегисликлерге түсиў мүйеши, λ' арқалы M нышанасы тәрепинен шашыратылған рентген толқынларының толқын узынлығы белгиленген) келип түскен шашыраған рентген толқынының кристалдағы шағылысыўы (дифракциясы) орын алады. Сонлықтан d, φ, k шамаларын анық билген жағдайда M нышанасында шашыраған толқынның толқын узынлығы болған λ' шамасын анықлаў мүмкин. (2.1.58)-формула бойынша φ мүйеши менен λ' толқын узынлығы арасындағы сәйкеслик тийкарында фотопленкада алынатуғын дақтың мүйешлик координатасы бойынша шашыраған толқынның толқын узынлығын есаплаў мүмкиншилиги туўылады. Комптонның дәслепки тәжирийбелеринде фотопленканың орнына қозғалыўы ионизациялық камера пайдаланылған.



1.14-сүўрет. А.Комптон пайдаланған экспериментallлық дүзилистиң схема түриндеги сүўрети.

1.15-сүўрет. Нурланыўдың фотонлық теориясы Комптон эффектин фотонның электронлардағы серпимли соқлығысыўының нәтийжеси деп түсиндиреди

Комптон өз экспериментлеринде шашыраған рентген толқынларының толқын узынлығының нышанаға келип түскен рентген толқынларының толқын узынлығынан үлкен екенлигин анықлады. Толқын узынлығының өзгерислери нышананың материалынан ғәрезсиз ҳәм шашыраў мүйеши θ ға байланыслы болып шықты. Тәжирийбелерде Комптон

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \Lambda_K\,(1-\cos\theta) \tag{2.1.59}$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын анықлады. Бул формуланы Комптон формуласы деп атайды. Турықлы шама болған Λ_K шамасының $\Lambda_K = 2{,}426\cdot10^{-12}$ м мәнисин Комптонның өзи экспериментлеринде анықлады.

Шашырағанда нурлардың толқын узынлығының үлкейиўин электромагнит толқынларының толқынлық теориясы тийкарында түсиндириў мүмкин емес. Дж.Томсон классикалық теорияда шашыраўды келип түсиўши толқынның электр майданының тәсиринде электрон мәжбүрий тербелетуғын ҳәм усының салдарынан сол электронның өзи антенна сыяқлы электромагнит толқынларын тарқататуғылығын көрсетти. Соның менен бирге шашыраған толқынның жийилиги менен келип түскен толқынның жийилиги бирдей болады.

Солай етип Комптон эффекти квантлық оптиканың қубылыслары қатарына киреди екен. Нурланыўдың фотонлық теориясы болса бул эффектти фотонның затлардың электронларындағы серпимли соқлығысыўының нәтийжеси деп түсиндиреди (2.1.15-сүўрет). Бул жағдайда (2.1.59)-Комптон формуласы фотон менен электронның серпимли соқлығысыў процессиндеги энергия менен импульстиң сақланыў нызамларының нәтийжеси болып табылады.

Ҳақыйқатында да еркин электрон дәслеп тынышлықта турған есаплаў системасында соқлығысыўдан кейинги электронның мүмкин болған тезликлерин есапқа алған ҳалда энергияның сақланыў нызамын былайынша жаза аламыз

$$\frac{hc}{\lambda} + mc^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \qquad (2.1.60)$$

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 белгиленген. Бул формуланы

$$\frac{hc}{\lambda} + mc^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \gamma mc^2$$

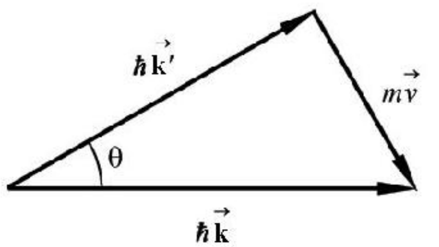
түринде де жаза аламыз. Бул жерде $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$.

Энергияның сақланыў нызамы болған (2.1.60)-аңлатпа Комптон эффектин сапалық жақтан түсиндире алатуғынлығын атап өтемиз. Себеби $mc^2 < \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$. Сонлықтан λ' > λ.

Фотон электрон менен серпимли түрде соқлығысқанда импульстиң сақланыў нызамы да орынланады. Бул нызам (2.1.44)-аңлатпаны есапқа алған ҳалда

$$\hbar\bar{\mathbf{k}} - \hbar\bar{\mathbf{k}}' + m\bar{v} \qquad (2.1.61)$$

түринде жазылады. Бул жерде k = 2π/λ, k'=2π/λ', θ болса k ҳәм k' векторлары арасындағы мүйеш (оны шашыраў мүйеши деп атаймыз).



1.16-сүўрет.
Комптон эффектинде орын алатуғын импульстиң сақланыў нызамының векторлық диаграммасы.

1.16-сүўретте келтирилген векторлық диаграмманың тийкарында импульслер үш мүйешлигинен

$$(mv)^2 = \hbar^2\,\mathbf{k}^2 + \hbar^2\,\mathbf{k}'^2 - 2\hbar^2\,\mathbf{k}\mathbf{k}'\cos\theta$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын табамыз ямаса

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h^2}{\lambda\lambda'}\cos\theta \qquad (2.1.62)$$

(2.1.60) ты

$$\frac{mc}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = mc + \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}$$

түрине келтирип ҳәм бул теңликти квадратқа көтерип

$$\left(\frac{mc}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right)^2 = (mc)^2 + 2mch\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) + \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 \qquad (2.1.63)$$

аңлатпасына ийе боламыз. $\left(\frac{mc}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right)^2 - (mc)^2 = (mv)^2$ екенлигин есапқа алсақ (2.1.63) ти былайынша жазамыз

$$(mv)^2 = 2mch\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) + \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2. \qquad (2.1.64)$$

(2.1.62)- менен (2.1.64)-аңлатпалардан

$$2mch\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = \frac{2h^2}{\lambda\lambda'}(1 - cos\theta) \qquad (2.1.65)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Ал (2.1.65)-аңлатпадан Комптон формуласын аламыз

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - cos\theta) = \Lambda_K(1 - cos\theta). \qquad (2.1.66)$$

$\Lambda_K = \frac{h}{mc}$ шамасын массасы m болған бөлекшениң комптонлық толқын узынлығы деп атайды. Биз қарап атырған жағдайдағы (фотонның электрондағы шашыраўы) $\Lambda_K = 2{,}42 \cdot 10^{-12}$ м шамасын электронның комтонлық толқын узынлығы деп атаймыз.

(2.1.66)-аңлатпа менен (2.1.59)-аңлпаларды бир бири менең салыстырыў нурланыўдың квантлық теорияның нәтийжелери менен эксперименттиң нәтийжелериниң бир бирине дәл сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Бул формулалардан толқын узынлығының максималлық өзгерисиниң $\theta = 180^0$ болған жағдайда орын алатуғынлығы келип шығады. Оның мәниси $\Delta\lambda_m = 2\Lambda_K$. Бирақ Λ_K шамасының киши болатуғынлығының себебинен толқын узынлығының еркин электрондағы шашыраўында өзгерисин әмелде тек қысқа толқынлы рентген ямаса гамма толқынларында бақлаў мүмкин деген жуўмақ шығарамыз.

Затлардағы электронлардың басым көпшилиги еркин емес, ал атомлар менен байланысқан екенлиги атап өтиўимиз шәрт. Егер нурланыў квантының энергиясы электронның байланыс энергиясынан үлкен болса, онда бундай электрондағы шашыраў еркин электрондағы шашыраўдай болады. Бирақ атом менен байланысқан электронда шашыраганда жагдайда фотон атомныӊ тутасы менен энергия алмасады. Бундай шашыраўда формуладагы электронныӊ массасыныӊ орнына атомныӊ массасын қойыў керек болады. Бирақ бул жагдайда толқын узынлыгыныӊ өзгериўи жүдә киши болып, бундай киши шаманы экспериментте бақлаў мүмкиншилиги дерлик жоғалады.

1.7-**мәселе**. Фотон еркин электрон менен серпимли емес соқлыгысқанда электронныӊ фотонды жутыўы сақланыў нызамлары тәрепинен қадаған етилген процесс екенлигин көрсетиӊиз.

Шешими: Фотон менен соқлығыспастан бурын электрон тынышлықта турған есаплаў системасында серпимли емес соқлығысыў орын алатуғын жағдайлар ушын энергияныӊ сақланыў нызамы былайынша жазылады

$$mc^2 + h\nu = \gamma mc^2 \text{ ямаса } E_0 + h\nu = E.$$

Бул жерде E_0 арқалы тынышлықта турған электронныӊ энергиясы, ал E арқалы фотон менен серпимли емес соқлығысқан электронныӊ энергиясы белгиленген. Салыстырмалық теориясы бойынша $E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2}$. Алынған аӊлатпаларда p арқалы фотонды жутқаннан кейин электрон алған импульс белгиленген.

Биз қарап атырған процесс ушын импульстиӊ сақланыў нызамынан

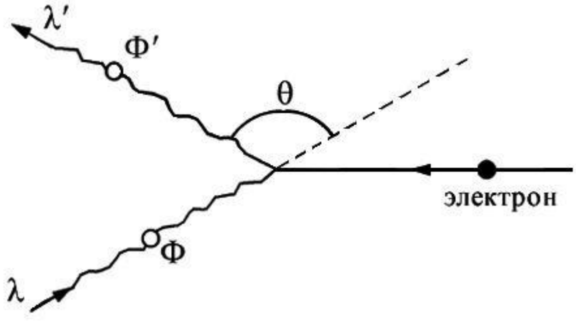
$$p = \frac{h\nu}{c}$$

формуласын аламыз. Алынған формуланы квадратқа көтерип

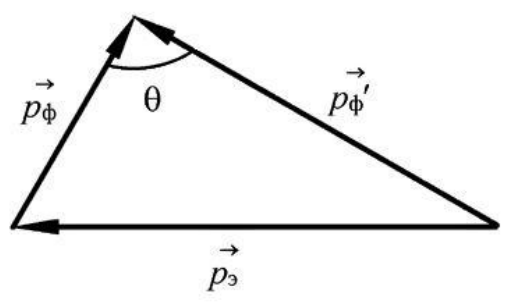
$$2mc^2h\nu + (h\nu)^2 = c^2p^2 \text{ ҳәм } c^2p^2 = (h\nu)^2$$

аӊлатпаларына ийе боламыз. $m \neq 0$ теӊсизлиги орынланатуғын жағдайлар ушын бул теӊликтиӊ орынланыўы мүмкин емес. Буннан еркин электронныӊ фотонды жута алмайтуғынлығы келип шығады. Бундай процесс тек үшинши бөлекшениӊ қатнасыўында ғана орын алыўы мүмкин. Бундай жағдайда үшинши бөлекше фотонныӊ энергиясы менен импульсиниӊ бир бөлегин алыўы шәрт.

1.8-мәселе. Релятивистлик электронлар дәстесинде шашыраған толқынныӊ толқын узынлығыныӊ фотон менен электрон серпимли соқлығысқанда электрон толық тоқтайтуғын жағдайда қанша шамаға өзгеретуғынлығын есаплаӊыз. (2.1.17-сүўрет).



1.17-сүўрет.
1.8-мәселени шешиў ушын арналған



1.18-сүўрет.
1.9-мәселени шешиў ушын арналған

схема. импульслердиң векторлық диаграммасы.

Шешими: Соқлығысқаннан кейин электрон тынышлықта туратуғын есаплаў системасындағы энергияның сақланыў нызамы былайынша жазылады

$$\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} + \frac{hc}{\lambda} = mc^2 = \frac{hc}{\lambda'}.$$

Электрон менен келип түсиўши фотонның импульслериниң қосындысы Ф шашыраған фотонның импульси болған Ф' шамасына тең болыўы керек. Сонлықтан 1.18-сүўретте келтирилген импульслердиң векторлық диаграммасынан

$$p_e^2 = p_\Phi^2 + p_{\Phi'}^2 - 2p_\Phi p_{\Phi'}\cos\theta$$

ямаса

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h^2}{\lambda\lambda'}\cos\theta$$

аңлатпаларын аламыз. Бул аңлатпаларды дыққат пенен талласақ λ шамасын ψ' шамасына алмастырғанда (2.1.60)- ҳәм (2.1.62)-аңлатпаларға өтетуғынлығына көз жеткериўге болады. Сонлықтан таллаўды қайталамай шашыраған толқынның толқын узынлығының өзгериси ушын төмендеги ең ақырғы формуланы

$$\lambda' - \lambda = \Lambda_K(1 - \cos\theta)$$

түринде жазамыз. Бул формуладан электронда шашыраған фотонның толқын узынлығының үлкейгенлигин сезиўге болады. Себеби фотон релятивистлик электрон менен соқлығысқанда электроннан қосымша энергия алады.

Бундай эффектти Комптонның кери эффекти деп атаймыз. Комптонның кери эффекти бойынша космослық объектлердиң рентген нурланыўын түсиндириўге болады.

2-1-5. Жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализми

Жақтылықтың физикалық тәбияты қандай? деген сораўға жуўап бериў қоршаған тәбиятты дурыс түсиниў ушын да, физика илиминиң буннан былай раўажланыўы ушын да оғада уллы әҳмийетке ийе

XIX әсирдиң ақырында жақтылықтың тәбияты ҳаққындағы мәселе толық шешилди ҳәм ол кеңисликте тарқалатуғын электромагнит толқынлары деп есапланды. Усының нәтийжесинде жақтылықтың толқынлық теориясы үлкен пәтлер менен раўажланды. Бул теория жақтылықтың интерференциясы менен дифракциясы, жақтылықтың поляризациясы сыяқлы қубылысларды табыс пенен түсиндирди.

Бирақ XX әсирдиң басында-ақ жақтылықтың затлар менен тәсир етисиўин изертлеўлердиң барысында фотоэффект (фотоэлектрлик эффект), Комптон эффекти, фотохимиялық реакциялар сыяқлы қубылыслар табылды. Бул қубылысларды жақтылықтың толқынлық теориясы түсиндире алмады. Бул теория тийкарында келтирилип шығарылған болжаўлар квантлық оптиканың экспериментлерде анықланған нызамлықларына пүткиллей қайшы келди. Бул қубылысларды түсиндириў ушын А.Эйнштейн 1905-жылы жақтылықтың корпускулалық (бөлекшелик) теориясын усынды. Бул теория Ньютонның жақтылық корпускулалары ҳаққындағы идеяларын раўажландырып жақтылықты фотонлар деп аталатуғын көп санлы бөлекшелердиң ағысы деп қарады. Жақтылықтың фотонлық теориясы квантлық оптиканың қубылысларын сапалық жақтан да, санлық жақтан да жеңил түсиндире алды.

Солай етип бир объектте электромагнит толқынларды ҳәм фотонларды бирлестирип биз жақтылықтың тәбияты ҳаққындағы сораўға жуўап бере аламыз деген пикир пайда болды. Жақтылық дегенимиз толқын да, бөлекше де болып табылады. Бирақ бул жуўыпты тереңирек үйрениў толқынлар менен бөлекшелерди әпиўайы механикалық бирлестириўдиң дурыс емес екенлигин көрсетеди. Себеби электромагнит толқынлары ҳәм бөлекшелердиң ағымы түсиниклери бир бирин бийкарлайды.

Жақтылық толқыны дегенимиз кеңисликте тарқалған локализацияланбаған электромагнит толқыны болып табылады. Толқынның электромагнит энергиясының көлемлик тығызлығы оның амплитудасының квадратына туўры пропорционал ҳәм бул тығызлықтың шамасы қәлеген киши шамаға өзгере алады (яғный үзликсиз өзгереди).

Фотон болса кеңисликтиң базы бир ноқаты қасында локалласқан ҳәм ўақыттың өтиўи менен кеңисликте қозғалады. Бундай моделде жақтылық энергиясы үзликсиз түрде өзгермейди. Жақтылық энергиясының өзгериси дискрет түрде болып, барлық ўақытта энергияның минималлық порциясынан (квантынан) пүтин сан еселенген мәниске ийе болады. Ал энергияның ең минималлық порциясына (квантына) жеке фотон ийе болады.

Бир материаллық объектте бириниң болыўын екиншиси бийкарлайтуғын қәсийетти қалайынша қарама-қарсылықсыз бирлестириў мүмкин? Бул сораўға жуўап уллы философлардың мийнетлеринде бар. Олар тәбияттың материаллық объектлери ишки қарама-қарсылықларға ийе, олар бир бирине салыстырғанда қарама-қарсы болған сапаларды бирлестиреди деген жуўмаққа келди. Мысалы қарама-қарсылықлардың бирлиги ҳәм гүреси идеясы Гегель диалектикасының тийкарғы мазмунын қурайды.

Тап усындай диалектикалық жуўапты ҳәзирги 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 шараятларда, 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 қараўымызға туўры келеди. Базы бир жағдайларда жақтылықтың толқынлық қәсийетин де, корпускулалық қәсийетин де көриў мүмкин. Мысалы Комптон тәжирийбесинде (2.1.14-сүўретке қараңыз) нышанадағы шашыраўдың биринши этапында жақтылық өзин фотонлардың ағысы сыпатында көрсетеди, бирақ өлшеў блогында бул нурланыў электромагнит толқын сыпатында кристалда дифракцияға ушырайды.

Жақтылықтың толқынлық ҳәм корпускулалық теориялары тийкарында сапалық жақтан да, санлық жақтан да түсиндириў мүмкин бир қатар оптикалық қубылыслар да бар. Мысалы еки теория да жақтылықтың затларға түсиретуғын басымын есаплағанда бирдей аңлатпалардың алыныўына алып келеди. Бул жағдай толқынлық моделде де, корпускулалық моделде де жақтылықта энергия, импульс сыяқлы материаллық характеристикалардың бар екенлиги менен байланыслы.

Солай етип жақтылықтың тәбияты ҳаққындағы көз-караслар мәниси бойынша тереңлеген сайын жақтылықтың қарама-қарсылықлы тәбиятқа ийе екенлигине көз жеткеремиз. Бундай жағдайды жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализми деп атаймыз. Базы бир объектлер менен жақтылық толқындай болып тәсир етиседи, ал басқа бир объектлер менен тәсир етискенде жақтылықтың толқын емес, ал материаллық бөлекшелердиң ағысы сыпатында тәсир етиседи. Д.Джинстың жазыўы бойынша "Сол еки картинаның (корпускулалық ҳәм толқынлық картинаның) ҳеш биреўи 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-қарсылықлар карсылық емес, ал бир бирин толықтырыў"

Жақтылықтың толқынлық ҳәм корпускулалық теориялары арасындағы тартыс тәреплердиң биреўиниң жеңисине де, жеңилиўине де алып келген жоқ. Бул тартыстың барысында бул теорияларды бирлестиретуғын жақтылықтың тәбияты ҳаққындағы жаңа түсиниклер пайда болды.

Физика илиминде жақтылық толқынлық қәсийетке де, корпускулалық қәсийетке де ийе биринши объект болып табылады. Биз төменде физиканың раўажланыўының барысында бундай объектлер классының әдеўир 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 толқынының амплитудасының квадраты, яғный интенсивлиги кеңисликтиң ҳәр бир ноқатында фотонды, яғный жақтылық ағысының усы ноқатындағы фотонлардың концентрациясын табыўдың итималлығын береди деп есаплаймыз. Бундай жағдайда еки саңлақ арқалы өтиўши жақтылықтың интерференциясын жақтылықтың корпускулалық тоериясы көз-карасы менен де түсиндириў мүмкиншилиги туўылады. Экранға бир жақтылық нуры 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 объектлердиң корпускулалық ҳәм толқынлық қәсийетлерин бирлестириў усылын таптық. Тап усындай усыл, яғный толқынның жәрдеминде бөлекшелердиң қозғалысын тәриплеў усылы квантлық механиканың тийкарын қурайды. Ал квантлық механиканың тийкарын тәриплеўди биз келеси бапларда баслаймыз.

2-2-1. Де Бройль гипотезасы

Бөлекшелердиң толқынлық қәсийети. Материяның корпускулалық-толқынлық дуализми. Оптикалық қубылыслардағы корпускулалық-толқынлық дуализмниң ашылыўы физиканың буннан былай раўажланыўы ушын уллы әҳмийетке ийе болды. Физикалық объект болған электромагнит нурланыўдың екилик корпускулалық-толқынлық тәбияты анықланды. Бундай екилик тек оптикалық қубылысларға тән болыўы мүмкин емес деген пикирдиң пайда болыўы тәбиийй

1924-жылы 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 нурланыўындағы қатнаслар менен бирдей болады. Биз фотонның энергиясы E менен импульси p ның цикллық жийилик ω ҳәм толқын узынлығы λ менен

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

аңлатпаларының жәрдеминде байланысқанлығын еске түсирип өтемиз. Де Бройль гипотезасы бойынша энергиясы E, импульси p болған қозғалыўшы бөлекшеге жийилиги

$$\omega = \frac{E}{h}, \tag{2.2.1}$$

ал толқын узынлығы

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} \tag{2.2.2}$$

болған толқын сәйкес келеди. Жийилиги ω 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 еркин бөлекшеге

$$\Psi(x,t) = A \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right] \tag{2.2.3}$$

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

$$E = \hbar\omega, \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad (2.2.4)$$

түрине ийе. Бул аңлатпаларда $\vec{p}$ арқалы бөлекшениң импульси, ал $\vec{k}$ арқалы толқын векторы белгиленген. Бул аңлатпаларды де Бройль теңлемелери деп атаймыз.

Де Бройль толқынларының қәсийетлери. Ең дәслеп де Бройль толқынларының материяның толқынлары екенлигин ҳәм бул толқынлардың тарқалыў процессинде әдеттеги толқынлық нызамлар бойынша шағылысыўының, сыныўының, интерференцияға ҳәм дифракцияға ушыраўының мүмкин екенлигин атап өтемиз. Дәслеп де Бройль толқынының фазалық тезлиги болған $v_ф$ шамасын табамыз. Турақлы фазаға ийе толқынның ноқатларының тарқалыў тезлигин фазалық тезлик деп атаймыз. Мейли бөлекше x көшери бағытында қозғалатуғын болсын. Бундай жағдайда (2.2.3) толқынының фазасының турақлы болыў шәрти

$$Et = px = const$$

түринде жазылады. Бул аңлатпаны дифференциаллап

$$v_ф = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p}$$

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 толқынының фазалық тезлиги ушын

$$v_ф = \frac{c^2}{v} \qquad (2.2.5)$$

аңлатпасын аламыз. $v < c^2$ болғанлықтан де Бройль толқынының фазалық тезлиги жақтылықтың вакуумдеги тезлигинен үлкен болып шығады. Бирақ бул жағдай жақтылықтың тезлигинен үлкен тезлик пенен қозғалыўды қадаған ететуғын салыстырмалық теориясының постулатларына қайшы келмейди. Салыстырмалық теориясы тәрепинен қойылатуғын шеклер тек масса ямаса энергияның көшиўлери ушын орынлы. Толқынның фазалық тезлиги болса бул процесслердиң биреўин де тәриплемейди. Сонлықтан фазалық тезликтиң шамасына ҳеш қандай шек қойылмайды.

Енди де Бройль толқынларының $v_{гр}$ группалық тезлигин табамыз. Анықламасы бойынша

$$v_{гр} = \frac{d\omega}{dk}.$$

Бул аңлатпаны түрлендирип

$$v_{гр} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp}$$

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 жазамыз. Биз жазып атырған аңлатпаларда m арқалы бөлекшениң массасы белгиленген. Бул аңлатпаны дифференциаллап

$$2EdE = 2pc^2dp$$

ямаса

$$\frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Солай етип

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{p}{m} = v$$

формуласын аламыз. Буннан де Бройль толқынының группалық тезлигиниң бөлекшениң тезлиги v ға тең болатуғынлығына көз жеткеремиз.

Де Бройль толқынларының узынлығын релятивистлик емес ҳәм релятивистлик бөлекшелер ушын есаплаў. Де Бройль толқынының узынлығын λ_{db} арқалы белгилейик. Кинетикалық энергиясы E_k болған бөлекше ушын де Бройль толқынының узынлығы болған λ_{db} шамасын анықлайтуғын 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 $v \ll c$,

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \text{ ҳәм } p = \sqrt{2mE_k}.$$

Сонлықтан

$$\lambda^{\text{р.е.}} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}}. \qquad (2.2.6)$$

релятивистлик жағдайларда бөлекшениң тезлигиниң мәниси жақтылықтың ваккумдағы тезлигиниң шамасына жақын. Бул жағдайда импульс пенен кинетикалық энергия арасындағы байланыс

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{E_k(E_k + 2mc^2)} = \sqrt{2mE_k}\sqrt{1 + \frac{E_k}{2mc^2}}$$

түрине ийе. Бул аңлатпаны (2.2.2) ге қойсақ релятивистлик жағдай ушын

$$\lambda^{\text{р.}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}\sqrt{1+\frac{E_k}{2mc^2}}} \qquad (2.2.7)$$

формуласын аламыз.

Макро- ҳәм микрообъектлер ушын Де Бройль толқынының узынлығы. Де Бройль толқынының толқын узынлығының шамасын көз алдыға келтириў ушын U тезлендириўши потенциаллар айырмасы арқалы өткен электронның де Бройль толқынының узынлығын табамыз. Анықлық ушын электронды релятивистлик емес деп есаплаймыз. Бундай жағдайда (2.2.6)-аңлатпаға сәйкес

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_K}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}. \qquad (2.2.8)$$

(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} м = 10^{-8} см = 1 Å шамасында болады екен. Бул шаманың физика илими ушын үлкен әҳмийетке ийе екенлигин ескертип өтемиз: атомлардың өлшемлери, қатты денелердеги атомлар ҳәм молекулалар арасындағы қашықлық шамасы жағынан 10^{-10} м әтирапында болады.

Енди макроскопиялық, бирақ жеткиликли дәрежеде кишкене болған объект – массасы $m = 10^{-6}$ г, тезлиги шама менен 1 мм/сек болған шаң бөлекшесиниң де Бройль толқын узынлығын анықлаймыз.

(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 әдеўир киши (атом ядросының диаметри шама менен 10^{-15} м).

Микро ҳәм макрообъектлер арасында принципиаллық айырма жоқ. Усыған байланыслы қандай шараятларда бөлекшениң қәсийетлеринде толқынлық қәсийет тийкарғы орынды ийелейди, ал қандай жағдайларда бөлекшелердиң қәсийетинде толқынлық қәсийет ҳеш қандай орын ийелемейди ҳәм толқынлық қәсийетти есапқа алмаўға болады деген сораў туўылады. Бул сораўға жуўап бериў ушын оптика менен аналогия келтиремиз (оптика менен уқсас мысал келтиремиз). Толқын узынлығы λ шамасы системаның өзиниң характерли өлшемлери болған L шамасы менен барабар болғанда нурлардың толқынлық қәсийетлериниң максимал түрде көринетуғынлығы белгили. Яғный $\lambda \sim L$ болыўы керек. Егер $\lambda << L$ теңсизлиги орынланса нурлардың толқынлық қәсийети сезилмейди ҳәм бундай жағдайларда геометриялық ямаса нур оптикасынан пайдаланыўға болады.

Механикалық ҳәм оптикалық қубылыслар 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 $\lambda_{db} \sim L$. Жоқарыда талқыланған мысаллардың биринширинде электронның де Бройль толқынының узынлығы λ_{db}, атомның өлшемлери, кристаллардағы атомлар арасындағы қашықлықлар шама менен бирдей мәниске ийе. Демек электронлар атомлар менен тәсирлескенде ҳәм электронлар кристаллық денелерде қозғалғанда олардың толқынлық қәсийети максималлық рәўиште көринеди. $\lambda_{db} << L$ болған жағдайларда болса (мысалы жоқарыда қарап өтилген шаң бөлекшеси жағдайында) бөлекшениң толқынлық қәсийетиниң әҳмийети жоқ. Бундай жағдайда усындай объектлердиң қозғалысын тәриплеў ушын классикалық механиканың нызамларынан пайдаланыў керек. Усы мәселени таллаўға 2.5-мәселе бағышланған.

Металлардағы электронлар толқынларының сыныўы. Металлдың ишиндеги электронға кристаллық пәнжерениң түйинлеринде жайласқан оң зарядланған ионлардың электр майданы тәсир ететуғынлығы белгили. Бул майдан кристалдың ишинде дәўирли түрде өзгереди. Металлдың көлеми бойынша орталастырылған усы майданның потенциалы болған φ_0 шамасын металлдың ишки потенциалы деп атайды.

Металлдан электронды жулып алыў ушын шығыў жумысы $A_{шығ}$ шамасына тең энергия жумсаў керек. Шығыў жумысының мәниси менен металдың ишки потенциалы

$$A_{шығ} = e\varphi_0$$

аңлатпасы бойынша байланысқан. Егер металлға сырттан электрон келип түссе оның энергиясы шығыў жумысына тең шамаға артады. Усының салдарынан электронлар толқынының фазалық тезлиги ҳәм де Бройль толқын узынлығы өзгериске ушырайды ҳәм нәтийжеде металдың бетинде электронлар толқынлары сынады.

Мейли электрон вакуумнан келип металлға түсетуғын болсын. Бундай жағдайда сыныў көрсеткиши n_e электронның вакуумдағы фазалық тезлигиниң (оны $n_ф^v$ арқалы белгилеймиз) электронның металлдағы фазалық тезлигине (оны $n_ф^m$ арқалы белгилеймиз) қатнасына тең болады:

$$n_e = \frac{n_ф^v}{n_ф^m}.$$

(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 ийе болған болсын. Металдың ишинде болса электронның кинетикалық энергиясы $E_K + A_{шығ}$ 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 тезлетиўши потенциаллар айырмасы U арқалы, ал шығыў жумысының мәнисин ишки потенциал φ_0 арқалы аңлатсақ, онда электронлық толқынлардың сыныў көрсеткиши ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$n_e = \sqrt{1 + \frac{e\varphi_0}{eU}} = \sqrt{1 + \frac{\varphi_0}{U}}. \qquad (2.2.9)$$

(2.2.9)-формулаға сәйкес сыныў көрсеткиши n_e тек әсте қозғалатуғын электронлар ушын ғана сезилерликтей мәниске ийе болады екен. Бундай электронлар ушын U дың шамасы φ_0 ге салыстырғанда үлкен емес. Жоқары энергияға ийе электронлар ушын (бундай жағдайда $U >> \varphi_0$)

$$n_e \approx 1 + \frac{\varphi_0}{2U}$$

ҳәм 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 ε = 1 % шамасынан көп емес қәтеликке жол қойылады? Мәселени а) электронлар ҳәм б) протонлар ушын шешиңиз.

Шешими: Де Бройль толқынының толқын узынлығын анықлағанда жиберилетуғын салыстырмалы қәтелик ε (2.2.6) менен (2.2.7) ни есапқа алғанда ҳәм релятивистлик емес формула бойынша

$$\varepsilon = \frac{\lambda_{db}^{\text{р.е.}} - \lambda_{db}^{\text{р}}}{\lambda_{db}^{\text{р.е.}}} = 1 - \left(1 + \frac{E_K}{2mc^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

түрине ийе болады. E_K кинетикалық энергиясын ε ниң функциясы сыпатында аңлатсақ

$$E_K = 2mc^2[(1 - \varepsilon)^{\varepsilon} - 1]$$

аңлатпасына ийе боламыз. Мәселениң шәрти бойынша ε = 0,01 << 1 болғанлықтан Тэйлор қатарына жайыўды пайдаланып $(1 - \varepsilon)^{\varepsilon} \approx 1 + 2\varepsilon$ екенлигин табамыз. Бул жағдайды есапқа алсақ

$$E_K(\varepsilon) = 2mc^2 \cdot 2\varepsilon = 4\varepsilon mc^2 = 4\varepsilon E_0$$

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 λ_{db} толқын узынлығын анықлағандағы қәтелик 1 проценттен артық болмайтуғынлығын билдиреди.

Физикалық экспериментлерде зарядланған бөлекшелерди тезлетиў 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 өтиўи керек. U дың киширек мәнислеринде (2.2.6)-формула бойынша есапланған λ_{db} толқын узынлығының мәнисин анықлаўда жиберилетуғын қәтеликтиң 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 қәтеликтиң мәниси 1 проценттен артық болмайтуғын кинетикалық энергияның мәниси E_K = 37,5 МэВ шамасына тең.

2.2-**мәселе**. Сызықлы өлшемлери l болған структураларды изертлеў ушын массасы m болған бөлекшелерге тезлеткиш қандай энергияны бериўи керек? Мәселени $l = 10^{-15}$ м болған жағдай ушын (бул атом ядроларының өзлерине тән сызықлы өлшеми) электронлар ҳәм протонлар ушын шешиў керек.

Шешими: Сызықлы 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. Сонлықтан 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 $\Lambda_\text{K} = \frac{2\pi\hbar}{mc}$ 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 шәртти 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 Комптонлық 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 тастыйықлаў

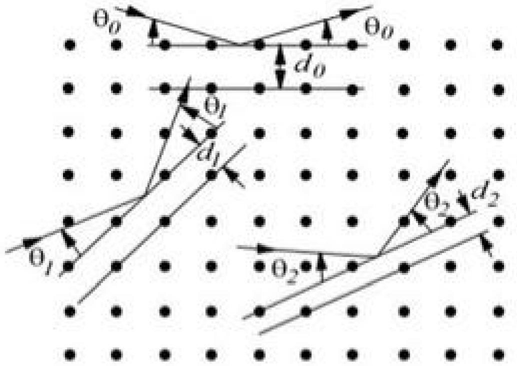
Қәлеген физикалық теорияның дурыс екенлигиниң критерийи барлық ўақытта да эксперимент болып табылады. Де Бройль гипотезасын экспериментте тексерип көриў өз ўақтында жүдә әҳмийетли мәселелердиң бири болды. Бириншиден бул гипотеза материяның терең фундаменталлық қәсийетлерине тийисли еди. Екиншиден бөлекшелерде толқынлық қәсийетлердиң болыўы классикалық физикадағы дәстүрге айланған көз-карасларға сәйкес келмейтуғын еди.

Бөлекшелердиң толқынлық тәбиятын тастыйықлаған биринши экспериментаeasy ллық изертлеўлерди американы физиклер Клинтон Джозеф Дэвиссон менен Лестер Джермерер ҳәм олардан ғәрезсиз англиялы физик Джлордж 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 таллаўдың алдында төмендегидей жағдайларды атап өтемиз.

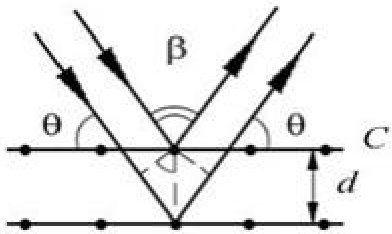
"Электронлардың толқынлық тәбиятын ашқанлығы" ушын 1929-жылы Луи де Броиль, ал "Электронлардың кристаллардағы дифрациясын экспериментте ашқанлығы" ушын К.Дж. Дэвиссон менен Джордж Томсон халық аралық Нобель сыйлықларын алыўға миясар болды.

Жоқарыда айтылып өтилгениндей тезлетиўши потенциаллар айырмасының жүдә жоқары емес мәнислеринде (шама менен 100 вольт болғанда) электронның де Бройль толқынының узынлығы шама менен 10^{-10} метрди қурайды. Бундай шама кристаллардағы атомлық тегисликлер арасындағы қашықлықлар ушын тән. Сонлықтан рентген нурлары жағдайындағыдай, электронлық толқынлар ушын кристаллар дифракциялық пәнжерениң орнын ийелей алады.

Жетилискен кристаллардағы электронлардың дифракциясын қарап өтемиз. Жетилискен кристалл деп қурамында структуралық дефектлер болмаған кристалларға айтамыз. Де Бройль толқынының узынлығы λ_{db} болған электронлар ҳәр қыйлы атомлық тегисликлерде дифракцияға ушырай алады (2.2.1-а сүўрет). Бундай тегисликлерди кристалға келип түсиўши электронлар дәстеси менен шашыратыўшы кристалдың өз-ара ориентациясын сайлап алыў менен жүзеге келтириў мүмкин. Мейли кристалға келип түсиўши электронлар дәстеси менен шашыратыўшы тегисликлер арасындағы мүйеш θ шамасына тең болсын (рентгенографияда, электронографияда ҳәм электрон микроскопиясында бундай мүйешти сырғанаў мүйеши деп атайды, русшасы "угол скольжения"). Әпиўайылық ушын симметриялық жағдайға итибар беремиз (2.2.1-b сүўрет). Бундай жағдайда кристалдың бети C шашыратыўшы тегисликлерге параллель болады (бундай жағдай әмелде көп ушыраспайды). Бундай жағдайда электронлар кристалдың бетине келип түсетуғын мүйеш θ сырғанаў мүйеши болып табылады. Ал $\beta = \pi - 2\theta$ мүйеши кристалға келип түсиўши ҳәм дифракцияға ушыраған электронлар дәстеси арасындағы мүйеш.



2.1-a сүўрет. Де Бройль толқынының узынлығы λ_{db} болған электронлар хәр қыйлы атомлық тегисликлерде дифракцияға ушырай алады.



2.1-b сүўрет. Электронлардың дифракциясы ушын симметриялық жағдай (кристаллардың бети шашыратыўшы кристаллографиялық тегисликлерге параллель).

Кристаллардағы электронлардың дифракциясын теориялық жақтан таллаў рентген нурларының кристаллардағы дифракцияға ушыраўын таллаўға уқсас. Егер θ мүйешиниң мәниси

$$2d_{hkl}sin\theta_{db} = n\lambda_{db} \tag{2.2.10}$$

Вульф-Брэгг шәртин қанаатландыратуғын жағдайда шашыраған толқынның интенсивли дифракциялық максимумы пайда болады. Бул теңлемеде θ_{db} Брэгг мүйеши, d_{hkl} арқалы Миллер индекслери hkl болған шашыратыўшы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлық белгиленген. Ендигиден былай әпиўайылық ушын hkl Миллер индекслерин жазбаймыз. (2.2.10)-формуладағы n шамасы 1, 2, 3, ... мәнислерин қабыл ететуғын пүтин сан (оны дифракциялық максимумның тәртиби деп те атайды).

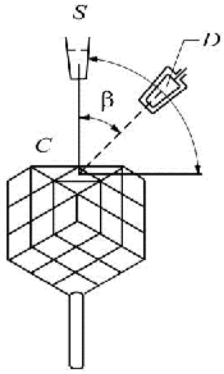
(2.2.10) Вульф-Брэгг шәртиниң физикалық мәниси жүдә әпиўайы: егер қоңысылас атомлық тегисликлерде шашыраған толқынлардың жүрислериниң айырмасы пүтин сан еселенген Де Бройль толқынының узынлығына тең болса дифракциялық максимум орын алады. Усындай жағдайда кристаллографиялық тегисликлерде (дурысы кристаллографиялық тегисликлерде жайласқан атомларда) шашыраған толқынлар бир бирин күшейтеди. Бундай жағдайда конструктивлик интерференция пайда болады деп есаплайды.

(2.2.10)-шәрт электронлар толқынларының кристаллардағы сыныўын есапқа алмаған ҳалда жазылғанлығын атап өтемиз. Егер сыныўды есапқа алатуғын болсақ Вульф-Брэгг шәртин былайынша жазамыз:

$$2d(n_e^2 - cos^2\theta_{db})^2 = n\lambda_{db}. \tag{2.2.11}$$

Бул формулада n_e арқалы электронлар толқыны ушын сыныў көрсеткиши белгиленген (2.2.3-мәселеге қараңыз).

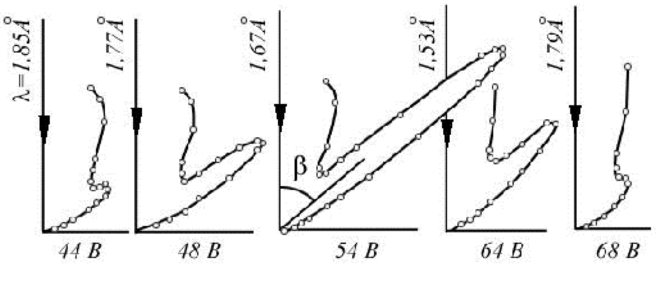
Дэвиссон ҳәм Джермер тәжирийбеси. Дэвиссон ҳәм Джермерлер никель монокристаллындағы электронлардың дифракциясын изертледи. Никельдиң кристаллық структурасы рентген нурларының дифракциясы бойынша өткерилген тәжирийбелерден белгили еди. Олардың экспериментиниң схемасы 2.2-сүўретте келтирилген. Электронлар пушкасынан (электронлар толқынларының дерегин әдетте электронлар пушкасы деп атайды) шыққан электронлар U тезлетиўши потенциаллар айырмасын өтеди ҳәм никель кристаллының шлифовкаланған бети С ға нормал бағытта келип түседи. D детекторының жәрдеминде ҳәр қыйлы U кернеўлеринде ҳәр қыйлы β мүйешлерине шашыраған электронлардың саны изертленди. U дың ҳәр қыйлы мәнислерине (2.2.8)-аңлатпаға муўапық де Бройль толқынларының ҳәр қыйлы узынлықларының сәйкес келетуғынлығын еске салып өтемиз.



2.2-сүўрет. Дэвиссон ҳәм Джермерлер тәрепинен электронлардың дифракциясын изертлеў бойынша өткерилген экспериментиниң схемасы.

Дэвиссон ҳәм Джермердиң тәжирийбесинде кристаллық пәнжере шашыратыўшы дифракциялық пәнжерениң орнын ийеледи. Сонлықтан де Бройль гипотезасының көз-қарасы бойынша (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәрти орынланғанда шашыраған толқынның амплитудасының үлкейиўи электронлардың усындай мүйеш пенен шашыраўының итималлығының ҳәм кристалда шашыраған электронлардың санының үлкейиўин билдиреди.

Дэвиссон ҳәм Джермердиң экспериментаплық изертлеўлериниң нәтийжелери 2.3-сүўретте келтирилген. Бул сүўретте тезлетиўши потенциал U дың бир неше мәнисине сәйкес келиўши шашыраған толқынлардың поляр диаграммалары келтирилген. U = 44 в болғанда (2.2.3-сүўрет) β = 134^0 (θ = $22{,}82^0$) шамасына тең мүйешинде дифракциялық максимум пайда бола баслайды. U = 54 в кернеўинде дифракциялық максимум максималлық интенсивликке ийе. U дың мәнисиниң буннан былай үлкейиўи менен дифракциялық максимум толық жоқ болғанша азаяды.



2.3-сүўрет.
U тезлетиўши потенциалының ҳәр қыйлы мәнислериндеги электронлардың дифракциялық шағылысыўының динамикасы.

Дэвиссон ҳәм Джермердиң тәжирийбелеринде тезлетиўши потенциаллар айырмасы U = 54 в болғанда электронлардың максималлық шағылысыўы бақланды. Бундай потенциаллар айырмасында де Бройль толқынының 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. Сонлықтан Вульф-Брэгг теңлемеси бойынша θ = $22{,}82^0$ шамасы ушын есапланған де Бройль толқынының толқын узынлығы λ_{db} = 0,166 нм болып шығады.

Экспериментте ҳәм есаплаўлар менен алынған λ_{db} шамасының бирдей екенлиги бөлекшелердиң толқынлық қәсийетке ийе екенлиги ҳаққындағы де Бройль гипотезасының дурыс екенлигиниң ең жақсы дәлилиниң бири болып табылады.

К.Дэвиссон ҳәм Л.Джермер

Дэвиссон ҳәм Джермерлер тәрепинен турақлы β мүйешинде (ямаса турықлы θ сырғанаў мүйешинде) дифракцияға ушыраған электронлар толқынының интенсивлигиниң тезлендириўши потенциаллар айырмасы U дан ғәрезлиги де изертленди. Бул экспериментлердиң нәтийжелери 2.4-сүўретте келтирилген. Экспериментлерде бақланған шашыраў максимумлары бир биринен $\sqrt{U}$ шкаласында бир биринен бирдей қашықлықларда жайласқан болып шықты. Бул жағдай теорияда да орын алады. Ҳақыйқатында да

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}$$

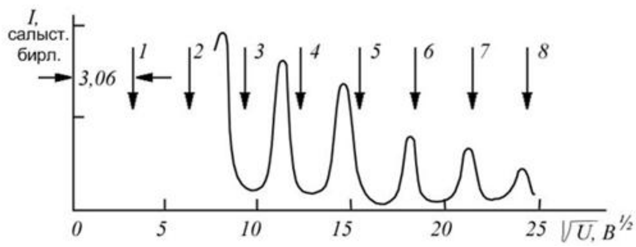
формуласы орын алғанлықтан (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәртинен

$$2d\ Sin[\theta] = n\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}$$

формуласына ийе боламыз. U арқалы тезлендириўши потенциаллар айырмасының шамасы белгиленген (бул ҳаққында жоқарыда айтылды). Солай етип шашыраў тәртиби n менен U арасындағы байланыстың

$$\sqrt{U} = \frac{\pi\hbar}{d\ Sin[\theta]\sqrt{2em}}n = const * n$$

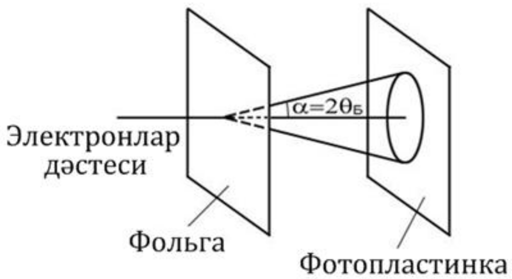
түрине ийе болатуғынлығын көремиз. Бул $\sqrt{U}$ шамасына байланыслы шашыраў максимумларының бир биринен эквидистанциялық жайласыўына (яғный бирдей аралықларда жайласыўына) сәйкес келеди.



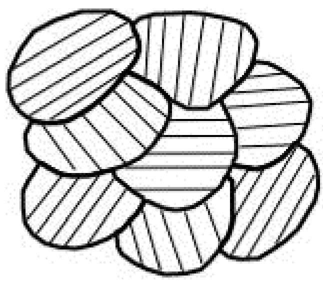
2.4-сүўрет. Турақлы β мүйешинде (ямаса турықлы θ сырғанаў мүйешинде) дифракцияға ушыраған электронлар толқынының интенсивлигиниң тезлетиўши потенциаллар айырмасы U дың ½ дәрежесине ғәрезлиги.

Бул тәжирийбеде теория менен эксперимент арасында толық сәйкеслик орын алмады. Себеби экспериментаsллық дифракциялық максимумлардың орны менен (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәрти тийкарында анықланған дифракциялық максимумлардың орны (олар 2.4-сүўретте вертикал бағытланған стрелкалар менен белгиленген) арасында сезилерликтей айырма болды. Бундай айырма n ниң киши мәнислеринде (яғный 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 электронлар-дың поликристаллық үлгилердеги дифракциясы изертленди. Бирдей энергияға ийе бағытланған (коллиматордан өткерилген) электронлар дәстеси метал поликристал фольғаның бетине нормал бағытта түсирилди (2.2.5-сүўрет). Фольғаның екинши тәрепинде орналастырылған фотопластинкада фольга арқалы өткен электронлар концентрли сақыйналар түриндеги дифракциялық сүўретти пайда етти. Биз дәслеп поликристаллық үлгиде электронлар дифракцияға ушырағанда фотопластинкада неликтен дифракциялық сақыйналардың пайда болатуғынлығын түсиндиремиз.

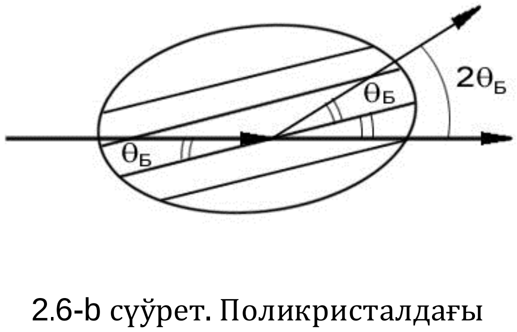


2.5-сүўрет. Электронлардың поликристаллық фольгадағы дифракциясы.



2.6-а сүўрет. Поликристаллық үлгиниң структурасы.

Поликристаллардың көп санлы жүдә майда монокристаллық дәнешелерден туратуғынлығы белгили. Бул дәнешелерди кристаллитлер деп те атайды. Поликристаллардағы кристаллитлер бир бирине салыстырғанда хаотик (тәртипсиз) түрде бағытланған. 2.6-b сүўретте кристаллитлердеги айырып алынған атомлық тегисликлер системасының бағыты параллель сызықлар менен көрсетилген. Бул бағыт бир кристаллиттен екинши кристаллитке өткенде ықтыярлы түрде өзгереди.



2.6-b сүўрет. Поликристалдағы дифракция. Бул жағдайда тек бир кристаллиттеги шағылысыў көрсетилген.

2.7-сүўрет. Гүмис поликристаллындағы дифракциялық тәжирийбелердиң нәтийжеси.

Электронлар дәстеси поликристалға келип түскенде қандай да бир атомлық тегисликлер системасы шашыратыўшы ҳалда, яғный Вульф-Брэгг шәрти орынланатуғын ҳалда жайласқан кристаллитлер табылады.

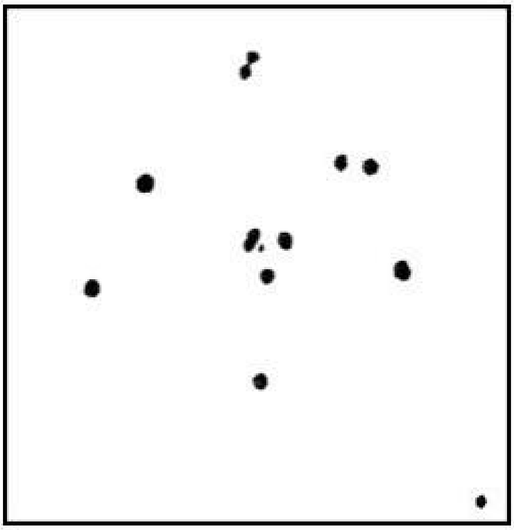
Пәнжере турақлысы (соның менен бирге кристаллографиялық тегисликлер семействосы ушын тегисликлер арасындағы қышықлық d) белгили, шағылысыў тәртиби n де белгили, демек λ_{db} толқын узынлығы да, сырғанаў мүйеши θ_{db} да белгили болған жағдайды қараймыз. Мейли электронлар дәстеси кристаллиттиң атомлық тегислигине θ_{db} мүйеши менен түсетуғын болсын. Бул жағдай 2.6-b сүўретте параллель сызықлар менен көрсетилген. Дифракцияға ушыраған толқынның бағытының поликристалға келип түсиўши толқынның бағытына салыстырғанда $2\theta_{db}$ шамасына бурылғанлығын аңсат түсиниўге болады. Солай етип айырым алынған кристаллиттеги дифракция фотопластинкада ноқатты (қара дақты) береди.

Мәселениң көшерлик симметриясына байланыслы (бул көшердиң бағыты поликристалға келип түсиўши электронлар дәстесиниң бағыты болып табылады) усы көшерге шағылыстырыўшы атомлық тегисликлери θ_{db} мүйешке бурылған кристаллитлер де фотопластинкада дифракциялық ноқатларды береди. Демек поликристалларға электронлар дәстеси келип түскенде белгили бир θ_{db} мүйешиндеги дифракциялық шағылысыў төбесиндеги мүйеши α = $2\theta_{db}$ болған конус бойынша болады дегенди аңғартады. Бул конус фотопластинка тегислиги менен кесискенде шеңберди береди. Кристалдың ҳәр қыйлы атомлық тегисликлери системаларының (яғный ҳәр қыйлы d лар) үлеси, соның менен бирге шағылысыўдың ҳәр қыйлы тәртиплери болған n ди есапқа алыў фотопластинкада орайлары бир ноқатта жайласқан шаңберлер системасының пайда болыўына алып келеди.

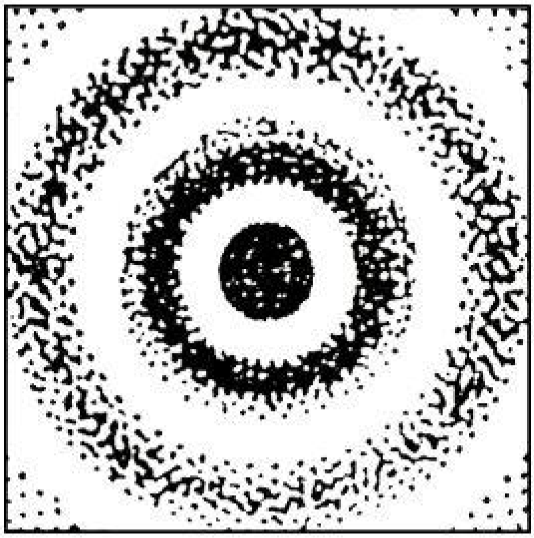
Томсон тәжирийбелеринде энергиясы 17,5 - 56,5 кэВ болған үлкен тезликке ийе электронлар пайдаланылды. Себеби киши тезликлер менен қозғалатуғын электронлар фольга тәрепинен күшли жутылады ҳәм бул жағдай поликристал арқалы өтиўши толқынның интенсивлигиниң жоғалыўына алып келеди. Поликристаллық фольгадағы электронлардың дифракциясын изертлеў бойынша өткерилген экспериментлердиң нәтийжеси 2.7-сүўретте келтирилген.

Электронлардың поликристаллардағы дифракциясын таллаўда төмендегидей жүдә әҳмийетли сораў пайда болды: Электронлар дәстеси келип түскенде поликристалдағы атомлар қозады ҳәм өзлеринен рентген нурларын шығарады. Демек фотопластинкада пайда болған дифракциялық сүўрет сол рентген нурларының поликристалдағы дифракциясының нәтийжеси шығар? Сонлықтан дифракцияға ушыраған бөлекшелердиң (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 өзгертиўи ҳәм усының нәтийжесинде дифракциялық картинаның майысыўы шәрт. Егер рентген нурлары дифракцияға ушыраса, онда рентген нурларына магнит майданы тәсир етпейди ҳәм дифракциялық сүўреттеги сақыйналар системасы өзгериссиз қалады. Магнит майданы менен өткерилген экспериментлер дифракциялық сүўретти электронлардың беретуғынлығын тастыйықлады.

Жеке электронлардың дифракциясы. Жоқарыда қарап өтилген экспериментлер электронлардың жеткиликли дәрежеде интенсивли дәстелери менен өткерилди. Сонлықтан 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 сораўға жуўап бериў ушын 1949-жылы Москва қаласында В.А.Фабриканттың басшылығындағы бир топар физиклер электронлардың оғада әззи 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 тәсирлесиўи толық сапластырылды. Фотопластинкадағы дифракцияға ушыраған электронлардың тарқалыўының сапалық түри 2.8-сүўретте келтирилген. Киши ўақыт аралықларында өткерилген экспериментлерде фотопластинкадағы ноқатлар (яғный фотопластинкаға электронлар келип түскен орынлар) пүткиллей тәртипсиз түрде тарқалған (2.2.8-а сүўрет). Бирақ экспериментлер узақ ўақыт даўамында өткерилсе ноқатлардың жайласыўларында тәртип көрине баслайды (2.2.8-b сүўрет). Фотопластинкада орайлары бир ноқатта жайласқан сақыйналар пайда болады. Солай етип толқынлық қәсийеттиң жеке электронға да тән екенлиги дәлилленди.



2.8-а сүўрет. Жеке электронлар менен қысқа ўақыт ишинде өткерилген эксперименттиң нәтийжеси. Фотопластинкадағы дифракциялық дақлар тәртипсиз түрде жайласқан.



2.8-b сүўрет. Жеке электронлар менен жеткиликли дәрежеде узақ ўақыт өткерилген экспериметтиң нәтийжеси. Фотоплатинкада дифракциялық сақыйналар пайда болған.

Кристалларсыз өткерилген дифракция бойынша тәжирийбелер. Де Бройлдың гипотезасын тастыйықлаў мақсетинде дәслепки экспериментлердиң барлығы да кристалларды пайдаланыў менен өткерилди. Себеби кристаллардың өзи электронлардың дифракциясын бақлаў 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 экспериментлердиң барлығы да электронларда толқынлық қәсийетлердиң бар екенлигин дәлилледи.

Рамзауэр эффекти. 1921-жылы немис физиги К.Рамзауэр аргон атомларындағы электронлардың серпимли шашыраўын изертлеўдиң барысында классикалық физиканың шеклеринде түсиндириўге болмайтуғын қубылысты ашты. Тек бир неше жыллар өткеннен кейин бул қубылыстың электронларда толқынлық қәсийеттиң бар екенлигиниң және бир дәлили екенлиги түсиникли болды. Бул қубылыс оптикада жақсы белгили болған Пуассон дағының электронлық аналогы болып табылады.

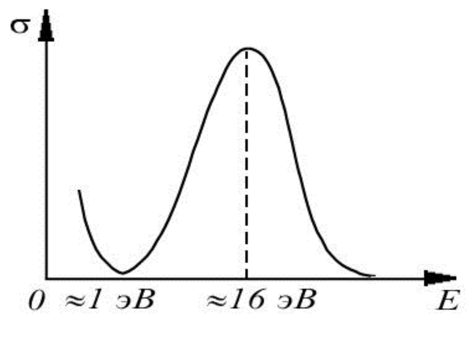
Рамзауэр энергиясы бир неше онлаған электрон-вольтке шекемги электронларды пайдаланды. Ол бундай электронлардың аргон атомларындағы серпимли шашыраўының кесе-кесими σ ны изертледи. Электронлардың серпимли шашыраў кесими

$$\sigma = \frac{N}{nv}$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул формулада N арқалы ўақыт бирлигиндеги аргон атомларындағы электронлардың серпимли шашыраўлар актлериниң саны, n арқалы дәстедеги электронлардың тығызлығы, ал v арқалы олардың тезлиги белгиленген. Серпимли шашыраў кесими σ майданның бирлигине ийе ҳәм оның мәниси атомның әтирапында электрон шашыраўға ушырайтуғын нышананың майданына тең.

Серпимли шашыраў кесими электронлардың энергиясы E ден ғәрезли. Ҳақыйқатында да E қаншама үлкен болса электронның тезлиги де үлкен ҳәм сонлықтан атом менен тәсир етискенде электрон қозғалыс бағытын өзгертиў қыйынырақ болады. Демек электронлардың энергиясы (тезлиги) кемейгенде серпимли шашыраў кесиминиң шамасының киширейиўи керек.

Рамзауэр алған нәтийжелер сапалық түрде 2.9-сүўретте келтирилген. Бул сүўретте 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 σ ның мәниси дерлик нолге тең болады. Электронлардың энергиясы және де киширейгенде σ ның мәниси артады.



2.9-сүўрет.

Электронлардың аргон атомларынан серпимли шашыраў кесиминиң электронлардың энергиясынан ғәрезлиги.

Кесим σ ның нолге айланыўы аргон атомларының электронлар ушын мөлдир болатуғынлығын көрсетеди. Бундай жағдайда электронлар аргон атомларында шашырамайды. Классикалық физиканың көз-қарасларына пүткиллей сәйкес келмейтуғын бул эксперименталлық нәтийже электронның толқынлық тәбиятын есапқа алғанда өзиниң шешимин табады.

Оптикада экранда Пуассон дағы деп аталатуғын дақтың қалайынша пайда болатуғынлығы белгили. Мөлдир емес дисктеги жақтылықтың дифракциясында геометриялық саяның орайында жақтылы дақ пайда болады. Усы дақты Пуассон дағы деп атаймыз. Рамзауэр өткерген тәжирийбелерде усындай 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 усындай қубылыс басқа да инерт газлер болған криптонда да, ксенонда да табылды. Соның менен бирге Рамзауэр эффектиниң тек инерт газлердиң атомларында ғана бақланатуғынлығы мәлим болды. Себеби инерт газлердиң атомлары толық толтырылған сыртқы электронлық қабыққа ийе, олар сфералық симметрияға ҳәм сонлықтан жеткиликли дәрежедеги анық сыртқы шегараға ийе.

Нейтронлар ҳәм басқа да бөлекшелер дәстеси менен исленген тәжирийбелер. Усы ўақытқа шекем биз микробөлекшелердиң толқынлық қәсийетлерин талқылаў барысында тийкарғы дыққатты электронларға аўдардық. Бул тәбийий жағдай. Себеби бөлекшелерде толқынлық қәсийеттиң бар екенлигин тастыйықлаўшы экспериментлер электронлар менен орынланды. Бирақ де Бройль гипотезасына муўапық 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 бөлекшелердиң басым көпшилиги электронларға салыстырғанда мыңлаған есе үлкен массаларға ийе. Де Бройль толқынының узынлығы масса m ге кери пропоционал болғанлықтан $\left(\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{mv}\right)$ бирдей тезликлерге ийе болған жағдайларда де Бройль толқынының узынлығының шамасы электронлардың де Бройль толқын узынлығынан мыңлаған есе киши болады. Үлкен салмаққа ийе болған бөлекшелердиң кристаллардағы дифракциясын бақлаў ушын олардың толқын узынлығының үлкенлиги кристал турақлысының шамасы ($\sim 10^{-10}$ м) менен барабар болыўы керек. Ал бундай бөлекшелердиң кристаллық денелердеги дифракциясын бақлаў тек киши тезликлер менен қозғалыўшы бөлекшелер жағдайында ғана мүмкин.

Эксперимент техникасының жетилисиўиниң нәтийжесинде кристаллардағы водород молекулаларының ҳәм гелий атомларының дифракцияларын бақлаўға мүмкиншилик берди. Дифракцияға ушыраған атомлар менен молекулалар киши тезликлерге ийе болғанлықтан кристалдың бетине келип түсип тереңге өте алмайды. Сонлықтан олар кристалдың атомлары тәрепинен оның бетинде пайда етилген еки өлшемли пәнжереде дифракцияға ушырайды.

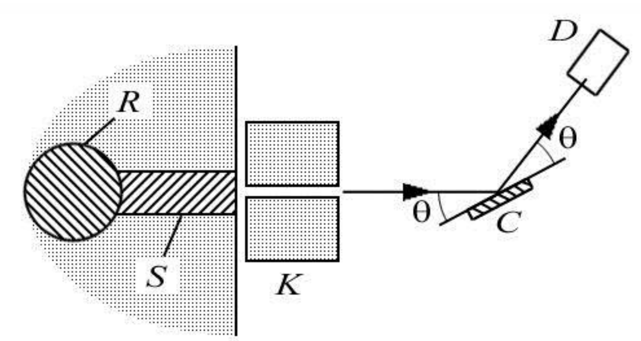
Нейтронлардың кристаллардағы дифракцияға ушыраўы физика ҳәм техника ушын үлкен әҳмийетке ийе болды. Нейтронларда электр заряды жоқ ҳәм сонлықтан олар ҳәтте киши тезликлерде де кристал арқалы тарқала алады ҳәм үш өлшемли кеңисликлик кристаллық пәнжереде дифракцияға ушырайды. Нейтронлардың дереги ядролық реакциялар болып табылады. Сонлықтан дифракциялық экспериментлерди өткериў ушын зәрүрли болған нейтронлар дәстеслерин ядролық реакторлардан ямаса зарядланған бөлекшелерди тезлеткишлерден алыў мүмкин.

Кристалларда дифракцияға тек жыллылық нейтронлары деп аталатуғын нейтронлар ушырай алады. Бундай нейтронлардың энергиясы газ молекулаларының энергиясы менен барабар, яғный өжире температураларындағы ($T \sim 300K$) $E = \frac{3}{2}kT$ шамасына жақын болыўы керек. бундай жыллылық нейтронларының де Бройль толқын узынлығы

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_n kT}} \qquad (2.2.12)$$

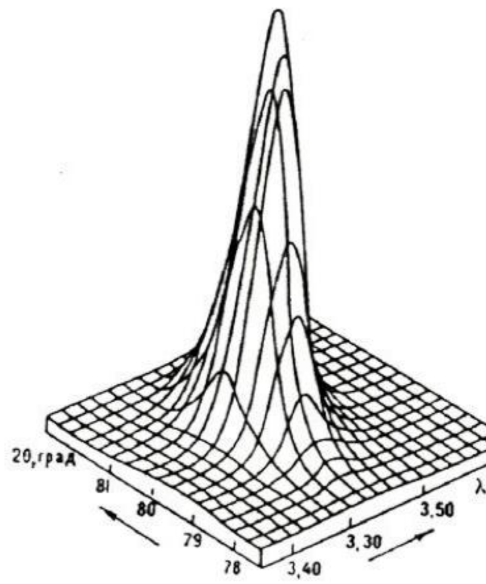
шамасына тең болады. Бул аңлатпада m_n арқалы нейтронның массасы белгиленген. Өжире температураларында λ_{db} ниң шамасы шама менен 10^{-10} м ге тең ҳәм усының салдарынан нейтронлардың кристаллардағы дифракциясын бақлаў мүмкин.

Нейтронлардың дифракциясы биринши рет бақланған экспериментлер 1936-жылы Х.Хальбан, П.Прайсверк ҳәм Д.Митчел тәрепинен орынланды. Олардың экспериментлеринде радийли-бериллийли нейтронлар дереги қолланылды. Бирақ ҳәзирги ўақытларда нейтронлардың дифракциясы бақланатуғын эксперименттлерде нейтронлардың дереги ретинде ядролық реактор қолланылады (2.2.10-сүўрет).

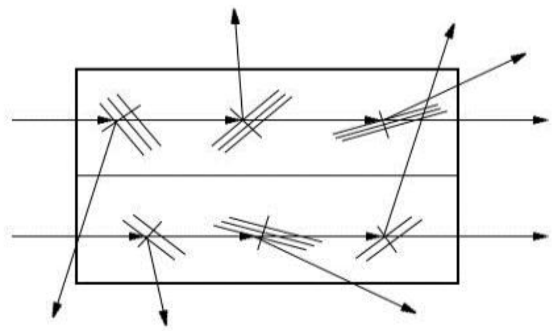


2.10-сүўрет. Нейтронлардың дифракциясын бақлаўға мүмкиншилик беретуғын эксперименталлық дүзилистиң схемасы.

R ядролық реактордан шыққан нейтронлар S әстелеткиши арқалы өтип, бул астелеткиште өзиниң энергиясының бир бөлегин жоғалтады. Буннан кейин нейтронлар коллимациялаўшы система K арқалы өтеди ҳәм бул системада жиңишке дәстеге айланады. Бул дәсте C кристаллына түседи ҳәм кристалда дифракцияға ушырайды. Дифракцияға ушыраған нейтронлар дәстесин D нейтронлар детекторы регистрациялайды (есапқа алады). Экспериментлерде бақланатуғын дифракцияға ушыраған нейтронлардың интенсивлигиниң Брэгг мүйеши θ дан ҳәм де Бройль толқынының узынлығы λ_{db} дан ғәрезлиги 2.11-сүўретте келтирилген.



2.11-сүўрет. $CsHSeO_4$ монокристаллынан шашыраған нейтронлардың



2.12-сүўрет. Поликристал фильтрдиң жәрдеминде интенсивлигиниң дифракциялық максимумы.

нейтронлар дәстесин фильтрлеў схемасы.

Нейтронларды әстелетиўши ретинде ядролары нейтронларды жүдә әззи жутатуғын графиттиң, бериллийдиң ҳәм басқа да элементлердиң 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 нейтрон дәстесиниң спектриниң киши энергияға ийе бөлегиның 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 шағылысыўға қатнасатуғын максималлық узынлыққа ийе де Бройль толқынының узынлығының

$$\lambda^{max} = max\left\{\frac{2d \, Sin\theta}{n}\right\} = 2d$$

шамасына тең болатуғынлығынлығын аңсат түрде көрсетиўге болады. Бул аңлатпадағы $Sin\theta$ ның ең үлкен мәниси 1 ге тең. Сонлықтан $\lambda^{max} = 2d/n$ ҳәм толқын узынлығының максимум мәниске ийе болыўы ушын $n = 1$ шәртиниң орынланыўы керек. Бул λ^{max} толқын узынлығын шегаралық толқын узынлығы деп атаймыз. Бул шәрт $\lambda < \lambda^{max}$ болған тез қозғалыўшы нейтронлардың кристалда дифракцияға ушырайтуғынлығын ҳәм соның салдарынан өзиниң бағытын өзгертетуғынлығын ҳәм әстелеткиш арқалы туўры бағытта өтетуғын дәстеден шығып қалатуғынлығын билдиреди (2.2.12-сүўрет).

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 λ шамасынан ғәрезлиги 2.13-сүўретте көрсетилген. Өткен дәстениң интенсивлигиниң кескин түрде киширейиўи $\lambda \approx 0{,}4$ 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-сүўрет. Поликристалл бериллий фильтри арқалы өткен нейтронлардың спектри.

2.14-сүўрет. Жутыўшы экранның шетинде дифракцияға ушыраған нейтронлар дәстесиниң интенсивлиги.

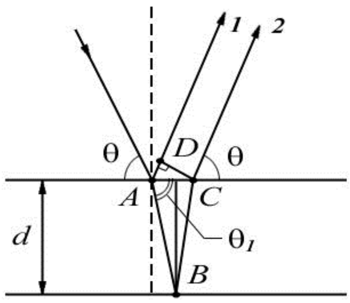
Полкристалллық фильтр арқалы өтетуғын киши энергияға ийе нейтронлар салқын нейтронлар деп аталады. 2.4-мәселеде усындай нейтронлардың неликтен салқын нейтронлар деп аталатуғынлығы түсиндириледи

Нейтронлар ушын да, басқа бөлекшелер ушын да оптикада кеңен белгили болған дифракциялық тәжирийбелерди экспериментлерде бақлаў мүмкин. 2.14-сүўретте мөлдир емес экранның шетиндеги нейтронлардың дифракциясын изертлеў бойынша өткерилген экспериментлердиң нәтийжеси келтирилген. Бул экспериментлерде толқын узынлығы 2 нм болған нейтронлар қолланылған. Графикте x көшери бойынша бир бирлик ени 30 мкм болған детектордың саңлағының 100 мкм ге жылжыўына сәйкес келеди.

Үлкен массаға ийе бөлекшелер (атомлар, молекулалар, нейтронлар) менен өткерилген дифракциялық тәжирийбелер де Бройль гипотезасының универсаллық әҳмийетке ийе екенлигин көрсетти. Барлық бөлекшелер өзлериниң тәбиятына, ишки қурылысына қарамастан толқынлық қәсийетке ийе болады екен.

2.3-**мәселе**. Электронлық толқынлардың металлдағы сыныўын есапқа алып Вульф-Брэгг шәртин жазыңыз.

Шешими: 2.1-бөлимде гәп етилгениндей, электронлар металдың бетине келип түскенде де Бройль толқынларының сыныўы орын алады. Усы сыныўды есапқа алып Вульф-Брэгг шәртин жазамыз.



2.15-сүўрет.

Металлдағы электронлық толқынның сыныўын есапқа алған ҳалдағы электронлардың дифракциясы.

Мейли электронлар атомлық тегисликке θ сырғанаў мүйеши менен түсетуғын болсын. Сынған нур ушын сырғанаў мүйешиниң шамасын λ_1 арқалы белгилеймиз (2.2.15-сүўрет). Әпиўайылық ушын симметриялы жағдайды қараймыз, яғный атомлық тегисликлерди кристалдың бетине параллель деп есаплаймыз. Қоңысылас атомлық тегисликлерде шашыраған толқынлар ушын жүрислер айырмасы Δ ны есапаймыз. Сыныўды есапқа алған ҳалда

$$\Delta = (AB + BC)n_e - AD = 2AB \cdot n_e - AC\, cos\theta = \frac{2dn_e}{sin\theta_1} - \frac{2d}{tg\theta_1}cos\theta$$

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 cosθ ны есаплап ҳәм оны жүрислер айырмасы Δ ға қойсақ

$$\Delta = \frac{2dn_e}{sin\theta_1} - \frac{2dn_e cos^2\theta_1}{sin\theta_1} = 2dn_e sin\theta_1 = 2d\sqrt{n_e^2 - cos\theta}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Солай етип де Бройль толқынының сыныўын есапқа алған ҳалда қоңсылас тегисликлерде шағылысқан толқынлардың бир бирин күшейтиў шәрти, яғный Вульф-Брэгг шәрти

$$2d\sqrt{n_e^2 - cos^2\theta} = n\lambda_{db}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

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 көрсеткишинң шамасы 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 пәнжересиниңң турақлысы d = 0,335 нм. Графит поликристаллы тәрепинен өткерилетуғын ең қысқа узынлықтағы нейтронлар толқының температурасы T ны анықлаңыз.

Шешими: Графит пәнжересиниң турақлысы d белгили болғанлықтан графит тәрепинен өткерилетуғын нейтронлардың шегаралық толқын узынлығы да белгили ҳәм $\lambda_{шег.}$ = 2d = 0,67 нм шамасына тең (бул ҳаққында жоқарыда гәп етилди). Графит арқалы өткерилетуғын ең қысқа нейтронлардың температурасы T ны анықлаў ушын (2.2.12) деги температура T ны λ_{db} шамасының функциясы сыпатында 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

$$T = \frac{(62 \cdot 10^{-34})^2}{3 \cdot 1{,}675 \cdot 10^{-27} \cdot 1{,}38 \cdot (0{,}67 \cdot 10^{-9})^2} = 14 \text{ К}$$

нәтийжесин аламыз. Солай етип поликристалл фильтр арқалы өтиўши нейтронлардың температурасының ҳақыйқатында да жүдә төмен екенлигин көремиз. Бундай нейтронларды салқын нейтронлар деп атайды.

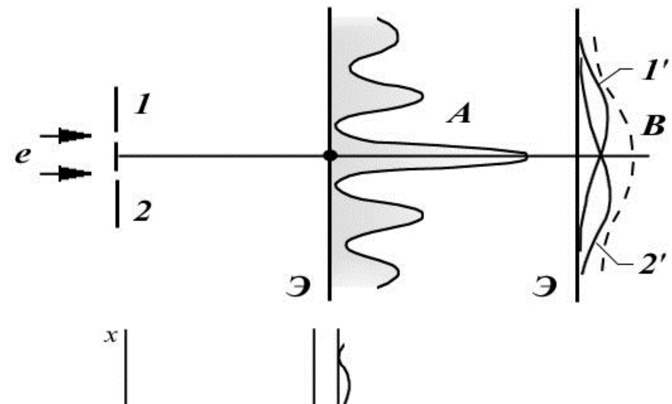
2-2-3. Анықсызлық қатнаслары

Микробөлекшелердиң қәсийетлери. Микробөлекшелердиң толқынлық қәсийетлериниң ашылыўы бизиң принципиаллық жақтан пүткиллей жаңа типтеги объектлер менен жумыс ислесе баслағанымызды көрсетеди. Бир қатар экспериментлерде микробөлекшелер корпускулалық қәсийетти көрсетеди, ал екинши бир экспериментлерде бизлер оларды толқын түринде көремиз. Бирақ ҳақыйқатында олар толқын да, бөлекше де емес. Усы жерде микробөлекшелердиң қәсийетлерин тәриплеў ушын классикалық усыллардың иске аспайтуғынлығы анық көринеди.

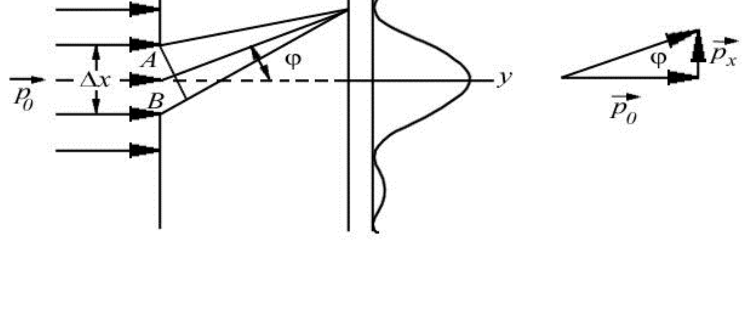
Микробөлекшениң толқыннан айырмасын көп санлы мысаллардың жәрдеминде көрсетиў мүмкин. Мысалы ярым мөлдир айнаны пайдаланып қәлеген толқынды екиге бөлип, олардың ҳәр қайсысын өз алдына изертлеў мүмкин. Микробөлекше болған электронды ямаса нейтронды бөлеклерге бөлиўге болмайды. Усы ўақытқа шекем ҳеш ким ярым электронды, бир ярым протонды ямаса шерек нейтронды көрген жоқ.

Микробөлекшениң классикалық нызамларға бағынатуғын макробөлекшелерден тийкарғы айырмасының бири соннан ибарат, микробөлекшениң қозғалысын сыпатлаў ушын траектория түсинигин қолланыўға болмайды. Бул жағдайды еки саңлақта алынатуғын электронлардың дифракциясы мысалында көрсетемиз. Көп оқыў қолланбаларында бул экспериментти ойымызда өткерилетуғын эксперимент деп атайды. Бирақ еки саңлақтағы электронлардың дифракциясын 1961-жылы Йенсен бақлады.

Мейли моноэнергиялы (бирдей энергияға ийе) электронлардың параллель дәстеси еки саңлағы бар диафрагмаға келип түсетуғын болсын (2.2.16-сүўрет). Электронлар толқынлық қәсийетке ийе болғанлықтан диафрагманың артына қойылған Э экранында интерференциялық сүўрет пайда болады. Интерференциялық сүўреттиң максимумлар менен минимумлардың избе-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 сыяқлы 1-саңлақты жапсақ ҳәм 2-саңлақты ашсақ, онда 2' иймеклиги менен сыпатланатуғын тарқалыўды аламыз. Егер ҳәр бир электрон белгили бир саңлақ арқалы өтетуғын болса (1- ямаса 2-саңлақтан), онда электронлардың тарқалыўы еки саңлақ та ашық турғандағы (яғный В иймеклиги) жағдайдағыдай болып тарқалған болар еди (2.2.16-сүўретте келтирилген 1' ҳәм 2' иймекликлериниң қосындысы пунктир сызық пенен көрсетилген). В иймеклигиниң экспериментте алынған иймекликтен тиккелей айырмасы электрон диафрагма арқалы өткенде еки саңлақты да "көреди" деген жуўмақтың шығарылыўына алып келеди. Электрон диафрагма арқалы өткенде экранда пайда болатуғын интерференциялық сүўрет еки саңлақтың қатнасыўы менен ғана пайда болады деп түсиндириледи. Электрон қандай да бир саңлақ арқалы өтти ҳәм соның салдарынан интерференциялық сүўрет пайда болды деп түсиндиретуғын қәлеген тырысыў интерференциялық сүўреттиң бузылыўына алып келеди. Солай етип интерференциялық сүўретти бузбай электронның саңлақлардың қайсысынан өткенлигин көрсетиў мүмкин емес болып шығады. Демек электронға ямаса қәлеген басқа микробөлекшеге қандай да бир айқын траектория сәйкес келеди деп айтыў мүмкин емес.



2.16-сүўрет. Моноэнергиялы электронлардың параллель дәстеси еки саңлағы бар диафрагмаға келип түсетуғын эксперименттиң схемасы.



2.17-сүўрет. Саңлақтағы электронның дифракциясы.

Микробөлекшениң толқынлық қәсийетке ийе екенлиги классикалық физиканың әҳмийетли түсиниклериниң бири болған траектория түсинигинен 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 мүмкин емес. Квантлық көз қараслар бойынша толқынлық қәсийетлерге ийе болғанлығы себепли бир ўақыт моментинде микробөлекше кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында жайласа алады. Сонлықтан микробөлекшелердиң қозғалысын тәриплеў ушын траектория түсинигинен пайдаланыў пүткиллей мүмкин емес болып табылады.

Классикалық бөлекшелердиң қандай қәсийетлери микродүнья областларында сақланады? Сақланатуғын шамалар қатарына бөлекшениң массасы ҳәм энергия киреди. Қандай да бир микробөлекше басқа денелердиң бөлекшелери менен тәсир етискенде оның энергиясы бөлекше бир ноқатта турған жағдайдағыдай болып сарыпланады.

Анықсызлық қатнаслары. Микробөлекшелердиң корпускулалық-толқынлық тәбияты усы бөлекшениң ҳалын характерлеўши физикалық шамалардың мәнислерин дәл анықлаўға шек қояды. Бул шеклердиң экспериментлердеги өлшеўлердиң дәллиги менен ҳеш қандай байланысы жоқ. Сонлықтан биз айтып атырған айырым физикалық шамалардың мәнислерин дәл анықлаў мүмкиншиликлериниң жоқлығы принципиаллық әҳмийетке ийе. Мысал ретинде электронның саңлақтағы дифракциясын қараймыз.

Мейли электронлар мөлдир емес Э экранына нормал бағытта түсетуғын болсын. Экранда кеңлиги Δx шамасына тең саңлақ болсын (2.2.17-сүўрет).

Интерференциялық сүўрет экраннан соң жайласқан Ф фотопластинкасында регистрацияланатуғын болсын. Экран тегислигиндеги x көшерин саңлаққа перпендикуляр бағытқа қарай бағытлаймыз, ал y 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 сыпатланады

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}_0}{\hbar}.$$

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 пүткиллей белгисиз болған x координатасына ийе болады.

Электрон саңлақ арқалы өткенде ситуация пүткиллей өзгериске ушырайды. x координатасындағы анықсызлық саңлақтың кеңлиги Δx қа тең болады. Бирақ бул жағдайда электронлардың саңлақтағы дифракциясының салдарынан импульстиң мәнисинде Δp_x шамасына тең болған анықсызлық пайда болады. Мәселе соннан ибарат, саңлақ арқалы өткен электронлар экранда енди тегис толқын түринде емес, ал шашыраўшы толқын түринде тәрипленеди. Бундай шашыраўшы толқынның интенсивлиги дифракция нызамларына сәйкес дифракция мүйеши φ ге байланыслы болады. Дифракциялық сүўреттиң сапалық түри 2.17-сүўретте келтирилген.

Саңлақ арқалы өтиўдиң барысында импульстиң x көшерине түсирилген проекциясы p_x та үлкен емес өзгериске ушырайды. Электронлардың дифракциясына муўапық p_x тың қандай шамаға өзгеретуғынлығын баҳалайық.

Саңлақ арқалы өткен электронлардың басым көпшилиги орайлық дифракциялық максимумға барып түседи. Бул максимумның шегаралары φ_1 дифракция мүйешиниң мәниси бойынша табылады. φ_1 мүйеши дифракциялық сүўреттеги интенсивликтиң биринши минимумын береди. Дифракция теориясына сәйкес бул мүйеш

$$\Delta x \sin\varphi_1 = \lambda_{db}$$

шәртинен табылады. Биз барлық ўақытта λ_{db} арқалы электронның де Бройль толқынының толқын узынлығын белгилеп келдик. φ_1 муйешиниң киши екенлигине байланыслы $\varphi_1 \sin\varphi_1 \approx tg\varphi_1$. Демек

$$\frac{\lambda_{db}}{\Delta x} = sin\varphi_1 \approx tg\varphi_1. \qquad (2.2.13)$$

Екинши тәрептен φ_1 мүйешиниң мәнисин электронның p_x ҳәм p_y қураўшылары арқалы да анықлаўға болады:

$$tg\varphi_1 = \frac{p_x}{p_y}.$$

x көшериниң бағытында импульстиң проекциясындағы анықсызлық Δp_x шамасының мәниси p_x тың өзиниң мәниси менен барабар деп есаплап

$$tg\varphi_1 = \frac{\Delta p_x}{p_y}. \qquad (2.2.14)$$

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

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\hbar. \qquad (2.2.15)$$

(2.2.15)-аңлатпаны келтирип шығарыўды базы бир әпиўайыластырыўшы болжаўлар пайдаланылған еди. Сонлықтан $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\hbar$ формуласы жуўық формула болып табылады. 3.7-бөлимде келтирилген қатаң түрдеги жуўмақ

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad (2.2.16)$$

фомуласын береди.

(2.2.16)-формула 1927-жылы немис физиги В.Гейзенберг тәрепинен алынды ҳәм сонлықтан Гейзенбергтиң анықсызлық қатнаслары деп аталады. Бул қатнаслар бойынша биз бөлекшениң координаталарын қаншама дәл тапсақ (яғный Δx шамасының мәниси қаншама киши болса), онда усы координатаға түсирилген импульстиң проекциясының мәнисин тапқанда жиберилетуғын анықсызлықтың мәниси Δp_x соншама үлкен болады (яғный Δx киши болса Δp_x үлкен ҳәм Δx үлкен болса Δp_x киши мәниске ийе болады деген сөз).

Анықсызлық қатнаслары анықсызлық принципиниң математикалық аңлатпасы болып табылады. Бул принцип бойынша координата менен импульстиң усы коодинатаға 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 анаў ямаса мынаў экспериментте пайдаланылатуғын айқын физикалық әсбаптың шаманы өлшегенде жиберетуғын қәтелиги менен ҳеш қандай байланысқа ийе емес. Бул қатнас микробөлекшениң характеристикаларын өлшеўдиң дәллигиниң теориялық шегин береди.

Гейзенбергтиң анықсызлық қатнаслары бөлекшениң координатасының анықсызлығы менен импульсиниң усы координатаға түсирилген проекциясының анықсызлығын байланыстырады. Биз жоқарыда қарап өткен жағдайда x көшери ҳеш бир себеп пенен айырып алынған жоқ еди. Сонлықтан (2.2.16)-қатнас басқа координата көшерлери ушын да орынлы

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \;\; \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда координатаны ҳәм импульстиң басқа координаталарға түсирилген проекцияларын анықлаўға ҳеш қандай шек қойылмайды. Мысалы Δx пенен Δp_y ямаса Δp_z шамаларын анықлаў дәлликлерине ҳеш қандай шек қойылмайды.

Квантлық механикада анықсызлық қатнаслары фундаменталлық әҳмийетке ийе. Бул қатнаслар оғада әҳмийетли физикалық нәтийжелерди алыўға мүмкиншилик береди. Соның менен бирге бул қатнаслар квант-механикалық мәселелерди шешкенде қурамалы болған дәл математикалық есаплаўларды жүргизбей-ақ көп шамалардың мәнислерин жеткиликли дәрежедеги дәлликте алыўға имканят жаратып береди. Мысалы не себепли атомдағы электрон ядроға қулап түспейди, неликтен атом ядросының ишинде электрон жоқ ҳәм басқа да әҳмийетли сораўларға аңсат жуўап бериўге мүмкиншилик береди. Анықсызлық қатнаслары жәрдеминде атомның өлшемлериниң шамасы, атомдағы электронның ең минималлық энергиясы ҳаққындағы мәселелерге айқын жуўап алыўға болады.

Анықсызлық катнасларының атомның орнықлылығы ҳаққында қалай жуўмақ шығаратуғынлығын көрсетемиз. Водород атомын аламыз ҳәм ондағы электрон ядроның (протонның) дөгерегинде радиусы r болған дөңгелек орбитада v тезлиги менен қозғалады деп есаплаймыз. Электронның орбита бойынша қозғалысы Кулон күшиниң тәсиринде жүзеге келетуғын болғанлықтан Ньютонның екинши нызамы бойынша

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \qquad (2.2.17)$$

аңлатпасын жаза аламыз. Енди анықсызлық қатнасларынан пайдаланамыз. Электронның координатасындағы анықсызлық орбитаның радиусы r ге тең. Ал импульстиң анықсызлығы Δp ның шамасы импульс p ның шамасынан артық емес, яғный $\Delta p \approx p = mv$. Бул жағдайда (2.2.16)-аңлатпа мына түрге енеди:

$$rmv \geq \frac{\hbar}{2}. \qquad (2.2.18)$$

(2.2.17) менен (2.2.18) ди бириктирип

$$r > \frac{\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0{,}13 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

шамасын аламыз. Демек электронның орбитасының радиусы, яғный водород атомының радиусы биз тапқан шамадан киши бола алмайды екен. Бул өз гезегинде электронның ядроға қулап түсе алмайтуғынлығын аңлатады. Сонлықтан атом орнықлы система болып табылады.

Анықсызлық қатнаслары классикалық механиканың қолланылыў шеклерин де сызып 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

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \qquad (2.2.19)$$

теңсизлигин аламыз. $\hbar = 1{,}055 \cdot 10^{-34}$ Дж·сек жүдә киши шама болғанлықтан тезликтиң анықсызлығы Δv_x тек массасы жүдә киши ҳәм жүдә киши Δx өлшемлеринде ғана сезилерликтей мәниске ийе болыўы мүмкин.

Мысал ретинде массасы $m = 10^{-6}$ кг болған шаңның бөлекшесин аламыз. Бундай бөлекшениң координатасын анықлаўда жиберилетуғын қәтеликтиң шамасы $\Delta x = 10^{-6}$ метрден артық емес. Бундай жағдайда шаң бөлекшесиниң тезлиги ушын алынатуғын анықсызлықтың шамасы $\Delta v_x \sim 10^{-22}$ м/сек шамасынан артпайды. Бул шама ең жақсы эксперименталлық дүзилислердиң өлшеўлеринде жиберилетуғын қәтеликтиң шамасынан оғада көп есе киши. Солай етип шаң бөлекшеси ушын, сондай-ақ барлық макроскопиялық денелер ушын анықсызлық қатнаслары ҳеш қандай әҳмийетке ийе емес. Олардың қозғалысын изертлегенде квантлық механиканы емес, ал классикалық механиканы қолланыў керек.

Енди атомдағы электрон ушын анықсызлық катнасларының қандай нәтийжелерди беретуғынын көрип 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 эВ шамасында. Бундай энергияға $v = 10^{6}$ м/сек шамасындағы тезлик сәйкес келеди. Солай етип электронның тезлигиндеги анықсызлық Δv_x тың шамасы электронның өзиниң тезлиги v ға барабар екен деген жуўмақ келип шығады. Сонлықтан атомдағы электронның қәсийетин тәриплеў 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. Сондай қатнаслардың ишинде энергияның анықсызлығы ΔE менен ўақыттың анықсызлығы Δt шамасын байланыстыратуғын анықсызлық қатнаслары үлкен әҳмийетке ийе. Бул қатнас мынадай түрге ийе

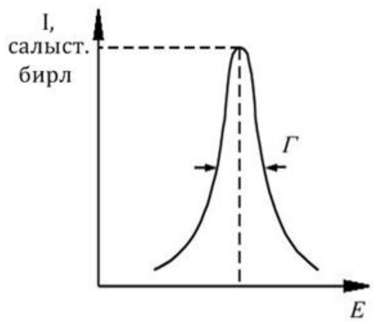
$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \qquad (2.2.20)$$

Бирақ бул жерде базы бир корректировка менен түсиник бериў керек болады. Бул қатнасты толығырақ таллаймыз. Экспериментлерде квантлық ҳалдың толық энергиясы өлшенбейди, ал оның орнына әдетте система бир ҳалдан екинши ҳалға өткенде ҳәр ҳалға сәйкес келетуғын энергиялардың айырмасы өлшенеди. Бул айырма $\Delta E = \Delta(E_1 - E_2) = \Delta E_1 - \Delta E_2$ шамасына тең. Бул аңлатпада E_1 менен E_2 арқалы системаның дәслепки ҳәм ақырғы ҳалларына сәйкес келетуғын энергияның муғдарлары белгиленген. Соның менен бирге ΔE_1 ҳәм ΔE_2 шамаларының белгилери ҳәр қыйлы болыўы мүмкин. Соның ушын (2.2.20)-аңлатпаның оң тәрепин екиге көбейтиўге туўры келеди. Нәтийжеде энергия менен ўақыт ушын анықсызлық қатнасы мынадай түрге ийе болады:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \qquad (2.2.21)$$

Бул анықсызлық қатнасында ўақыттың анықсызлығы Δt шамасын системаның энергиясы E_1 болған қозған ҳалдағы өмириниң узақлығы деп түсиниў керек. Бундай жағдайда ΔE шамасы система энергиясы E_1 болған ҳалдан энергиясы E_2 болған ҳалға өткендеги энергияның мәнисиндеги шашаўлық (разброс) деп есаплаўға болады.

(2.2.21)-анықсызлық қатнасларынан келип шығатуғын нәтийжелерди экспериментте де бақлаўға болады. Бундай экспериментлер қатарына атомлық спектроскопияны көрсетиўге болады. Атомлардың нурланыў спектриниң сызықларының шексиз ушлы (енсиз) екенлиги белгили. Егер спектр сызықлары шексиз енсиз болғанда $\Delta E = 0$ теңлиги орынланған болар еди. Ал бул жағдай нурланған кванттың дәл мәнисине сәйкес келеди. Экспериментте бақланатуғын спектраллық сызықлар болса Г арқалы белгиленетуғын (бул жерде грек ҳәриби жазылған) кеңлигине ийе болады. Буны сызықлардың тәбийий кеңлиги деп атайды. Г ның шамасы жоқарыда айтылып өтилген фотонлардың энергиясының сызықтың ортасына сәйкес келиўши орташа мәнистиң әтирапындағы шашаўлығына сәйкес келеди. (2.2.18-сүўрет).



2.18-сүўрет.

Атомлардың нурланыў спектриндеги сызықтың формасының сапалық сүўрети.

(2.2.21) ден сызықтың кеңлиги атомлық қозған ҳалдағы жасаў ўақыты τ менен былайынша байланысқанлығы келип шығады

$$\Gamma \cdot \tau \approx \hbar. \qquad (2.2.22)$$

Экспериментте спектраллық сызықлардың тәбийий кеңлиги Г шамасын өлшеп (2.2.22)-аңлатпаның жәрдеминде қандай да бир қозған ҳалдағы жасаў ўақытын есаплаў мүмкин. Көзге көринетуғын диапазонда нурланатуғын атомлардың спектраллық сызықларының тәбийий кеңлиги ушын экспериментлерде $\Gamma \sim 10^{-7}$ эВ шамасы алынады. Бул мәнисти (2.2.22) ге қойсақ атомның қозған ҳалдағы жасаў ўақыты ушын $\tau \approx 10^{-8}$ сек мәнисин аламыз. Атомлардың спектраллық сызықларының кеңейиўи ҳаққында биз төмениректе гәп етемиз

Анықсызлық қатнасларынан келип шығатуғын нәтийжелер. Анықсызлық қатнасларынан келип шығатуғын нәтийжелердиң бирин биз жоқарыда талладық ҳәм квантлық механикада бөлекшениң траекториясы ҳаққында гәп етиўдиң мәнисиниң жоқ екенлигин көрдик (себеби толқында траектория болмайды). Классикалық көз-қараслар бойынша (класскалық механиканың нызамлары бойынша) бөлекше ҳәр бир ўақыт моментинде координатаға ҳәм импульске (тезликке) ийе болады. Бул бөлекшениң белгили бир траектория бойынша қозғалатуғынлығын аңлатады. (2.2.16)-(2.2.19)-аңлатпалардан сол шамалардың биреўиниң ғана дәл мәниске ийе болатуғынлығын көремиз. Бөлекшениң координатасының белгили болыўы мүмкин (бул жағдайда $\Delta x = 0$). Бундай жағдайда оның тезлигин анықлаў мүмкин емес (себеби $\Delta v_x \to \infty$ шамасына тең болады). Егер бөлекшениң тезлиги дәл мәниске ийе болса (бундай жағдайда $\Delta v_x = 0$), онда оның координатасы анық мәниске ийе бола алмайды (яғный $\Delta x \to \infty$). Улыўма жағдайда болса корпускулалық-толқынлық дуализмниң салдарынан бөлекшениң координатасы да, импульси де белгили бир анықсызлықларға ийе болады. Бул анықсызлықлар бир бири менен (2.2.16)-аңлатпа арқалы байланысқан.

Ядро физикасында кеңнен қолланылатуғын Вильсон камерасын еске түсиремиз. Вильсон камерасы арқалы өткенде жоқары энергияға ийе зарядланған бөлекшелер треклер деп аталатуғын из қалдырады. Бул көзге анық көринетуғын ямаса сүўретке түсирип алыўға болатуғын из траектория болып табылады. Треклердиң көриниўиндеги бөлекшелердиң толқынлық қәсийетиниң ақыбетинде келип шығатуғын шашалаў (анықлығының төменлеўи) пүткиллей бақланбайды. Мәселе неден ибарат? Жуўаптың мәниси төмендегилерден ибарат.

Вильсон камерасындағы бөлекшелер қалдырған треклер сызықлы өлшемлери $\Delta x \approx 10^{-6}$ м болған думанның майда тамшылардан (тамшылар шынжырынан) турады. Бундай жағдайда импульстиң анықсызлығы (2.2.16) ға сәйкес

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x} \sim 10^{-28} \text{ кг·м/сек}$$

шамасына тең болады. Бул шама p импульстиң мәнисине салыстырғанда жүдә киши. Бул Вильсон камерасындағы бөлекшениң қәсийетлерин тәриплеў ушын классикалық механиканың керек екенлигин билдиреди. Бул жағдайда сезилерликтей қәте жиберместен бөлекшениң траекториясы ҳаққында айта аламыз.

Бундай жуўмақлар жоқары энергиялы бөлекшелер ушын толық тастыйықланады. Ҳақыйқатында да үлкен импульслерге ийе бөлекшелер ушын де Бройль толқынының узынлығы жүдә киши болады. Бундай жоқары энергиялы бөлекшелерди классикалық бөлекшелер деп атаўға болады.

Анықсызлық қатнасларына келип шығатуғын екинши әҳмийетли нәтийжени қараймыз. Биз ҳәзир микробөлекшениң толық тынышлық ҳалының болмайтуғынлығын көрсетемиз.

Ҳақыйқатында да егер бөлекшениң координатасының өзгериў областы шекленген болса, яғный $\Delta x = a$ 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 ҳалында тура алмайды екен.

Енди анықсызлық қатнасларына келип шығатуғын үшинши әҳмийетли нәтийжени қараймыз. Квантлық механикада бөлекшениң толық энергиясын кинетикалық ҳәм потенциал энергияларға бөлиў 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 ўақытта анық мәнислерге ийе болмайтуғын болғанлықтан толық энергия E бир ўақытта дәл анықланған кинетикалық ҳәм потенциал энергиялардың қосындысына тең бола алмайды. Солай етип квантлық механикада кинетикалық энергия E_K менен потенциал энергия U дың бир заматлық мәнислериниң қосындысы толық энергияға тең болыўы мүмкин емес.

Биз төменде бул теңликтиң энергиялардың орташа мәнислери ушын дурыс болатуғынлығын көрсетемиз. Яғный $\langle E \rangle = \langle E_K \rangle + \langle U \rangle$.

2.5-**мәселе**. Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасын пайдаланып характерли сызықлы өлшем L ге ийе кеңисликтиң базы бир областындағы классикалық механиканың қолланылыў шеклерин баҳалаңыз.

Шешими: Биз жоқарыда бөлекшениң қозғалысында траектория түсинигин тек ғана оның координатасының анықсызлығы бөлекше қозғалатуғын областтың характерли өлшемлеринен киши болғанда (яғный $\Delta x \ll L$ теңсизлиги орынланғанда) пайдаланыўға болатығынлығын айтып өткен едик.

(2.2.16)-аңлатпадан пайдаланамыз ҳәм бул аңлатпада $\Delta p_x \approx p$ теңлиги орынланады деп есаплаймыз. 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 тәриплеў ушын классикалық механиканың нызамларын пайдаланыў керек деген жуўмақты шығарамыз.

2.6-**мәселе**. Энергия менен ўақытты анықсызлық қатнасын пайдаланып атомның нурланыўы ушын спектраллық сызықтың тәбийий кеңлиги болған $\Delta\lambda$ шамасын табыңыз. Нурланыўдың толқын узынлығы λ = 500 нм, ал атомның қозған ҳалдағы орташа жасаў ўақыты $\tau = 10^{-8}$ сек деп есаплаңыз.

Шешими: λ толқын узынлығына ийе толқынның энергиясы

$$E = \hbar\omega = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda}$$

шамасына тең. Буннан энергия ΔE менен спектраллық сызықтың толқын узынлықларының анықсызлықларын (яғный ΔE ҳәм $\Delta\lambda$ шамаларының мәнислерин) есаплаймыз:

$$\Delta E = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda^2}\Delta\lambda.$$

$\Delta E = \Gamma$ екенлиги мәлим. Сонлықтан (2.2.22)-аңлатпаны есапқа алып

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2\pi c\tau}$$

формуласын аламыз. Бул формулаға константалардың сан мәнисин қойсақ $\Delta\lambda = 1{,}3 \cdot 10^{-14}$ м шамасын аламыз. Бундай жағдайда спектраллық сызықтың салыстырмалы кеңлиги $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 2{,}6 \cdot 10^{-8}$ шамасындай болады. Биз усы жерде $\Delta\lambda$ киши шамасының атомлардың нурланыўынıдағы монохромлықтың дәрежесин анықлайтуғынын атап өтемиз. Ал экспериментлерде алынатуғын спектраллық сызықлардың кеңлиги (экспериментлерде алынатуғын спектраллық сызықлардың кеңлигин сызықлардың ҳақыйқый кеңлиги деп атаймыз) спектраллық сызықлардың тәбиийий кеңлигинен барлық ўақытта да үлкен болады. Буған атомлардың жыллылық қозғалыслары себепли спектраллық сызықлардың Допплерлик кеңейиўи ҳәм басқа да көп факторлар киреди.

2-2-4. Микробөлекшелерди затлардың структурасын изертлеў ушын қолланыў

Микробөлекшелерди пайдаланыў арқалы затлардың ҳәр қандай қәддидеги қурылысын (ядролық, атомлық, молекулалық, атомлық-кристаллық, кристаллардың дефектлик курылысы ҳәм басқа да қәддилердеги) мүмкин екенлиги ҳәзирги ўақытлары кеңнен белгили. Бул жағдай биринши рет 1911-жылы Англиялы физик Э.Резерфорд ҳәм оның менен бирге ислесиўши хызметкерлер тәрепинен α-бөлекшелердиң атомлардағы шашыраўын изертлеў бойынша өткерилген тәжирийбеде айқын түрде көрсетилди. α-бөлекшелериниң жуқа металл фольгадағы шашыраўын изертлеўдиң нәтийжесинде олар атомлардың планетарлық (ядолық) моделин ашты.

Резерфорд тәжирийбелеринде α-бөлекшелери пайдаланылды, тәжирийбелер шараятларында олардың толқынлық қәсийетлери әҳмийетке ийе болған жоқ. Сонлықтан атом ядроларындағы α-бөлекшелериниң шашыраўын классикалық –көз-қараслар бойынша таллаў мүмкин еди.

Биз төменде микробөлекшелердиң жәрдеминде затлардың қурылысын эксперименталлық изертлеў мүмкиншилигин қарап өтемиз ҳәм бул экспериментлерде олардың толқынлық қәсийетлери тийкарғы орын ийелейтуғын жағдайларды үйренемиз.

Рентген нурларының кристаллардағы дифракциясының ашылыўы қатты денелердиң атомлық-кристаллық қурылысын (структурасын) изертлеўдиң жаңа усылы болған кристаллар рентгенографиясының пайда болыўына алып келди. Тап сол сыяқлы электронлар менен нейтронлардың кристаллардығы дифракциясының ашылыўы да жаңа усыллардың (методлардың) пайда болыўын тәмийинледи. Электронлардың дифракциясына тийкарланған затлардың қурылысын изертлеў методын электронография, ал нейтронлардың дифракциясына тийкарланған методты нетронография деп атайды..

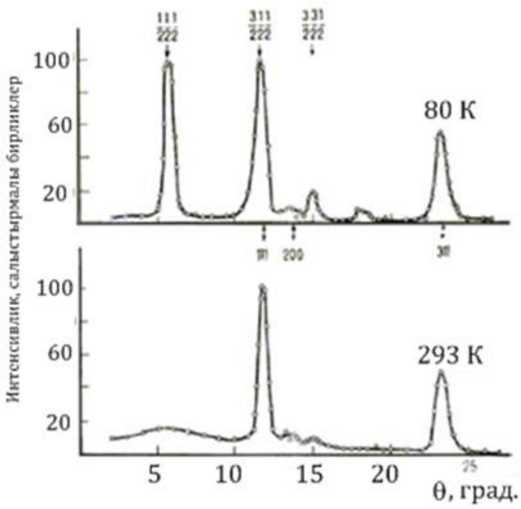
Электронография ҳәзирги ўақытлары кристаллардың, аморф денелердиң, суйықлықлардың, газлер менен пуўлардың молекулаларының курылысын изертлеў ислеринде кеңнен қолланылады. Электронлар затлар тәрепинен күшли жутылатуғын болғанлықтан бул методтың жәрдеминде тек жуқа кристаллар ҳәм кристаллық пленкалар изертлениледи. Ал тәжирийбеде төменги энергияға ийе болған электронларды пайдаланғанда (бундай электронларды әстен қозғалатуғын электронлар деп атайды) олар кристалдың жүдә жуқа бетлик қатламына ғана өте алады. Сонлықтан олар кристалдың жүдә жуқа бетлик қатламы ҳаққында информацияларды бере алады. Әсте қозғалатуғын электронлардың дифракциясы ҳәзирги ўақытлары кристаллық затлардың бетиниң қурылысын изертлеўге мүмкиншилик беретуғын ең информациялы усыллардың бири болып табылады. Бул методы жәрдемиинде кристалдың бетиндеги кристаллық пәнжерениң курылысының өзгерислерин, адсорбсия қубылысларын ҳәм қатты денелердиң кристаллизациясының ең басланғыш дәўирлерин үйрениў мүмкин.

Структуралық изертлеўлерде нейтронографиялық усыллар жүдә кең түрде қолланылады. Жоқарыда айтылып өтилгениндей нейтронлар электр зарядына ийе емес, жоқары өтиў қәбилетликлерине ийе. Бул қәсийетлер затлардың барлық көлеминиң қурылысын изертлеўге мүмкиншилик береди. Жыллылық (әсте қозғалатуғын) нейтронлардың де Бройль толқынларының узынлығы конденсацияланған орталықлардағы атомлар ямаса молекулалар арасындағы қашықлыққа тең болғанлықтан, нейтронлардың дифракциясының жәрдеминде затлардың атомлық-кристаллық қурылысын анықлаў мүмкиншилиги туўылады. Нейтронлардың массасының шамасы атомлардың массасына жақын, ал жыллылық нейтронларының кинетикалық энергиясының шамасы затлардағы атомлар аралық тәсир етисиў энергиясының шамасы менен қатар. Сонлықтан нейтронлардың серпимли емес шашыраўын изертлеўлердиң нәтийжелери бойынша атомлар менен молекулалардың динамикалық қәсийетлерин үйрениў мүмкин.

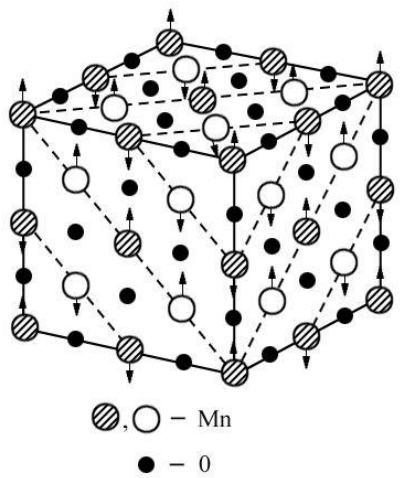
Нейтронларда магнит моментиниң болыўы дифракциялық изертлеўлерде затлардың магнитлик қурылысын, яғный атомлардың магнит моментлериниң шамаларын, олардың өз-ара жайласыўларын, кристаллографиялық көшерлерге салыстырғандағы бағытларын үйрениўге мүмкиншилик береди. Структуралық изертлеўлердиң сәйкес методын магнитлик нейтронография деп атайды. Ҳәзирги ўақытлары бул метод қатты денелердиң магнитлик структурасын тиккелей анықлаўдың бирден бир усылы болып табылады.

2.19-сүўретте MnO кристалларының магнитлик қурылысын нейтронографиялық изертлеўлердиң нәтийжелери келтирилген. Өжире температураларында бул бирикпе парамагнетик болып табылады, ал T_N = 80 K 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 интенсивликлерин салыстырыў (2.2.19-а сүўрет) магнит моментлериниң тәртиплесиўиниң қосымша дифракциялық максимумлардың пайда болыўына алып келетуғынлығын көрсетеди. Қосымша максимумлардың пайда болыўы кристалдың магнитлик элементар қутышасының өлшемлериниң өзгергенлигине сәйкес келеди.

Нейтронографиялық изертлеўлер барысында анықланған MnO кристаллының элементар қутышасындағы магнит моментлериниң тәртиплесиўи 2.19-b сүўретте келтирилген. Бул сүўреттеги қара дөңгелеклер кислород атомларына, ал боялмаған дөңгелеклер марганец атомларын сәйкес келеди. Стрелкалардың жәрдеминде марганец атомларының магнит моментлериниң бағытлары көрсетилген.



2.19-а сүўрет. MnO кристалларының магнитлик структурасын 80 K ҳәм 293 K температураларда нейтронлардың дифракциясының жәрдеминде изертлеў барысында алынған нәтийжелер.



2.19-b сүўрет. MnO кристалларының элементар қутышасындағы марганец атомларының магнит моментлериниң өз-ара жайласыўлары. Стрелкалардың жәрдеминде магнит моментлериниң бағытлары көрсетилген.

Микробөлекшелердиң толқынлық қәсийетлерин пайдаланатуғын және бир изертлеў областы электронлық микроскопия болып табылады. Қәлеген микроскоптың ажырата алыўшылық қәбилетлиги

$$l_{min} = 0{,}61\frac{\lambda}{n\ sin\alpha}$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул "Оптика" курсы бойынша белгили. Жоқарыда келтирилген формулада λ арқалы толқын узынлығы, n арқалы орталықтың сыныў көрсеткиши белгиленген, ал 2α шамасын апертуралық мүйеш деп атайды. l_{min} шамасы микроскоптың жәрдеминде пайда етилетуғын сүўреттеги бир биринен ажыратып көриў мүмкин болған еки ноқат арасындағы қашықлықтың минималлық мәниси. Оптикалық диапазонда $l_{min} \approx 0{,}4\lambda$ шамасын аламыз. Бул шаманың мәниси жүзлеген нанометрге тең.

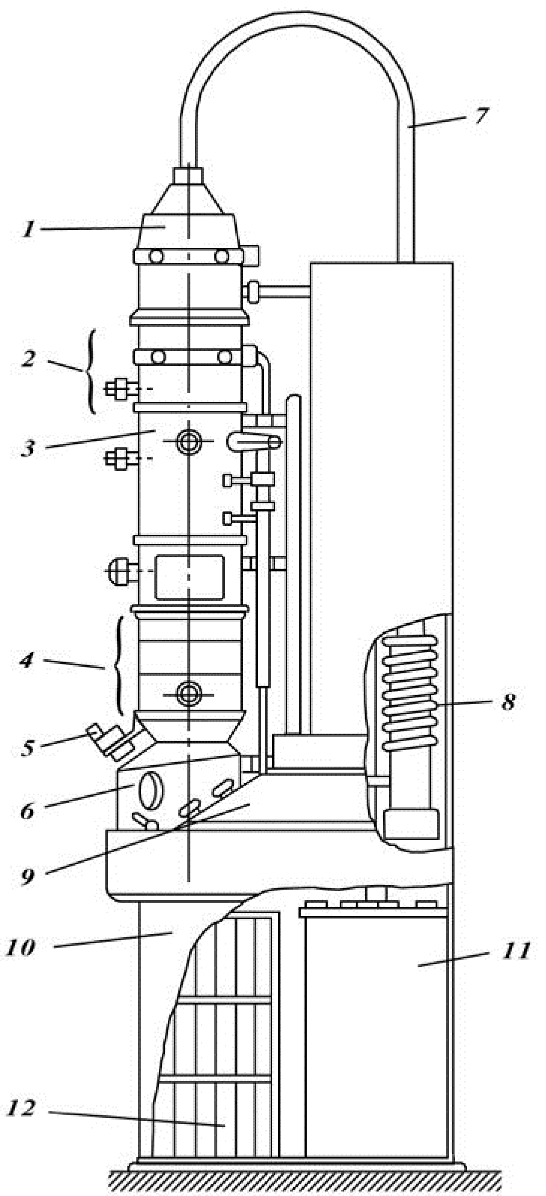
Жақтылық толқынларының орнына электронлар толқынын пайдалансақ микроскоптың ажырата алыўшылық қәбилетлиги мыңлаған есе артады. Бул жағдай электронлардың де Бройль толқынының толқын узынлығының жүдә киши екенлиги менен байланыслы. Ҳақыйқатында да тезлетиўши потенциалдың муғдары U = 10 кв болғанда де Бройль толқынының толқын узынлығы 0,0122 нм шамасына тең болады. Бул шама атомлардың характерли сызықлы өлшемлеринен онлаған есе киши. Бирақ электронлық микроскопларда жүдә жоқары болған ажырата алыўшылықты пайда етиў сәти түсе бермейди. Себеби электрон микроскопындағы электронлар дәстелерин фокуслайтуғын электр ҳәм магнит линзалары әдеўир үлкен оптикалық кемшиликлерге - аберрацияларға ийе болады. Бирақ усы жағдайға қарамастан ҳәзирги ўақыттағы электрон микроскопларының ажырата алыўшылық қәбилетликлери $l_{min} = 0{,}15 - 0{,}30$ нм шамаларын қурайды. Бул изертлениўши объектлердиң атомлық ҳәм молекулалық қурылысларын изертлеў ушын толық жеткиликли.

2.2.20-сүўретте электронлық микроскоптың дүзилиси схема түринде көрсетилген. Бундай микроскоп изертленетуғын объект арқалы өтиўши электрон дәстелеринде ислейди (рус тилинде "электронный микроскоп просвечивающего типа" деп атайды). Жоқары ажырата алыўшылық қәбилетлигине ийе ҳәзирги заман электронлық микроскопларында тезлетиўши кернеўдиң шамасы 100 - 400 кВ. Бундай жағдайларда заттың бир неше онлаған нанометр қалыңлықтағы қатламларын изертлеўге болады. Электрон микроскопының ишинде терең вакуум орнатылыўы керек.

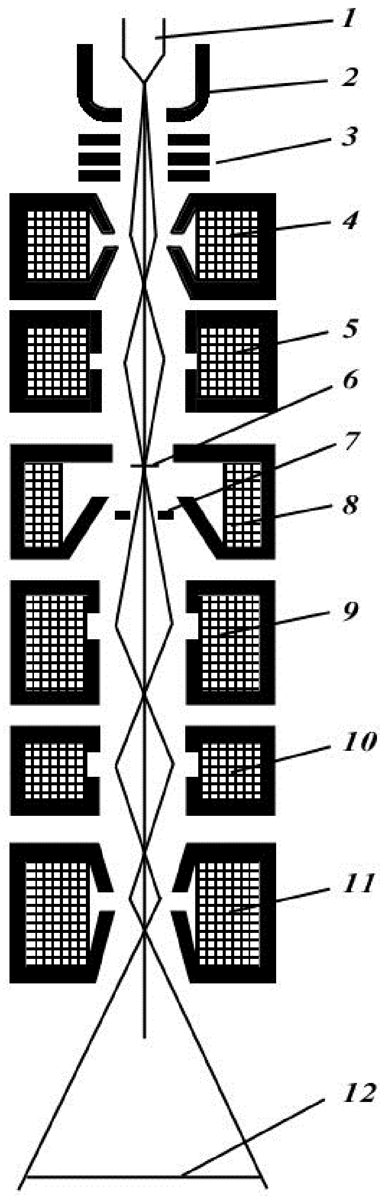
Электронлық микроскоптың ишине орналастырылған электронлар ушын линзаның хызметин атқаратуғын арнаўлы формаларға ийе электромагниттен туратуғын дүзилислерди конденсорлар деп те атайды.

Электрон микроскопында кристаллық объекттиң үлкейтилген сүўретин былайынша алады. Кристалл арқалы туўры 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 алыў мүмкиншилиги бар. Бундай жағдайларда бир электрон дәстесинде көринбейтуғын структуралық дефектлер екинши дәстени пайдаланғанда айқын түрде көринеди.

Электрон микроскопының оптикалық системасының схемасы 2.2.21-сүўретте келтирилген. Биринши ҳәм екинши конденсорлар тәрепинен пайда етилген электронлар дәстеси изертлениўши объектте диаметри киши болған дақ пайда етеди (диаметриниң шамасы 1 ден 20 мкм ға шекем). Объект арқалы өтиўши электронлар дәстеси проекциялық линзалар системасының жәрдеминде катодолюминесцентлик экранда объекттиң сүўретин пайда етеди. Бул экранның астында фотопластинкалар жайластырылған арнаўлы дүзилис орнатылған болады. Бул фотопласникаларға обеъктлердиң сүўрети түсириледи.

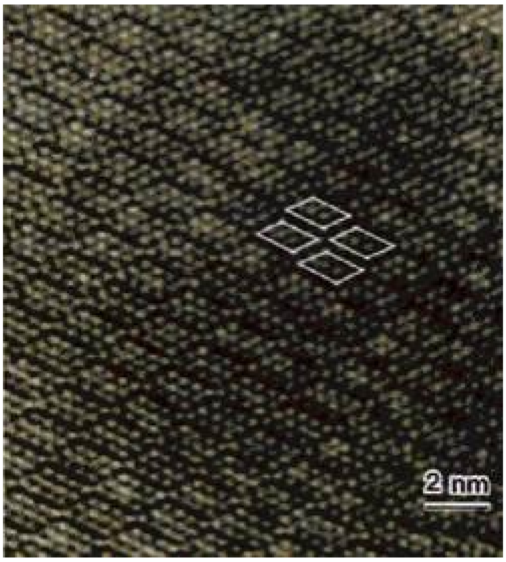


2.2.20-сүўрет. Электронлық микроскоптың дүзилиси: 1 – электрон пушкасы; 2 - конденсорлық линзалар; 3 - объектив линза, 4 - проекциялық линза; 5 – экранда пайда болған сүўретти көз бенен бақлаў ушын арналған оптикалық дүзилис, 6 – көриў айналары; 7 – жоқары вольтли кабель; 8 - вакуум системасы, 9 – басқарыў пульти; 10 - стенд; 11- жоқары кернеў бериўши дүзилис; 12 – линзалар ушын электр тоғы дереги.

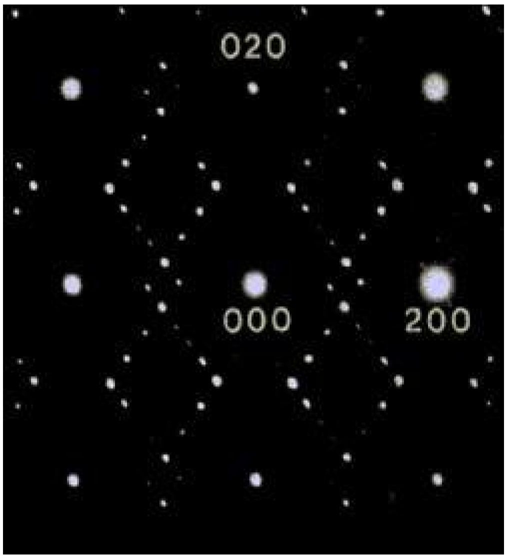


2.2.21-сүўрет. Электрон микроскопының оптикалық схемасы: 1 - катод; 2 – фокуслаўшы цилиндр, 3 – электронлар тезлеткиши; 4 – биринши конденсор (қысқа фокуслы); 5 – екинши конденсор (узын фокуслы); 6 – изертлениўши жуқа объект; 7 – объективтиң апертуралық диафрагмасы; 8 - объектив; 9-11 арқалы проекциялық линзалар белгиленген; 12 - катодолюминесцентли экран.

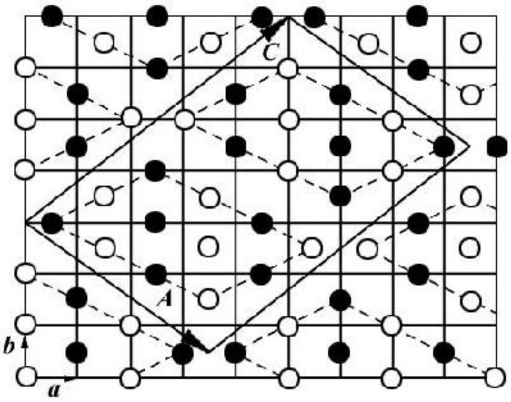
Электрон микроскопының жәрдеминде алынған сүўретлердиң екеўи 2.2.22-сүўретте келтирилген. 2.2.22-a сүўрет жоқары ажырата алыўшылық қәбилетке ийе электрон микроскопының жәрдеминде алынған алтын менен марганецтиң қуймасының жуқа фольгасынан алынған. 2.2.22-b сүўрет изертленип атырған үлгиниң электронлар толқынындағы дифракциялық сүўрети – электронограммасы болып табылады. Усы эксперименталлық мағлыўматлар жәрдеминде алынған қуймадағы атомлардың жайласыў схемасы 2.22 c сүўретте келтирилген.



a)



b)



c

2.2.22-a сүўрет. Электрон микроскопында алтын-марганец қуймасының жуқа фольгасынан изертлеўде алынған нәтийжелер.
a) электрон-микроскопиялық сүўрет,
b) изертленген кристаллық үлгидеги электронлардың дифракциясы (электронограмма),
c) электрон микроскопында алынған эксперименталлық мағлыўматлар тийкарында дүзилген алтын-марганец қуймасының структурасының модели.

2-3-1. Толқын функциясы

Квантлық механикада бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплеўдиң өзгешеликлери. Де Бройль гипотезасына сәйкес қозғалыўшы бөлекше толқынлық қәсийетке ийе болады. Егер бөлекше қозғалатуғын областтың өлшемлери L электронлардың де Бройль толқын узынлығы λ_{db} шамасы менен барабар ямаса оннан үлкен болса толқынлық қәсийетти есапқа алмаўға болмайды. Таллаўлар $\lambda_{db} \geq L$ шәртиниң массасы киши ҳәм атомлардың сызықлы өлшемлериндей областта қозғалатуғын бөлекшелер ушын орынланатуғынлығын көрсетеди. Бундай бөлекшелерди ендигиден былай микробөлекшелер деп атаймыз

Толқынлық қәсийетке ийе бөлекшердиң қозғалысын тәрийиплеў ушын классикалық механиканың усылларынан пайдаланыўға болмайды. Классикалық механикада бөлекшениң ҳалы оның қәлеген ўақыт мометиндеги кеңисликлик координаталарын ҳәм тезлигин (импульсин) бериў менен анықланады. Бундай жағдайда бөлекшениң қозғалысы ўақыттың өтиўи менен оның механикалық халының өзгериўи 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 микробөлекшелердиң қозғалысларын тәрийиплеў ушын қолланыў принципиаллық жақтан мүмкин емес.

Бөлекшениң қозғалысын тәрийиплеўдиң классикалық усылынан бас тартыў көпшиликте гүмән пайда етеди. Қозғалыс траекториясыз бөлекше кеңисликте қалай қозғалады? Мүмкин бизлер траекторияны тәрийиплеў ушын биз бөлекшениң қозғалысы менен байланыслы болған базы бир параментлерди өлшей алмайтуғын шығармыз? Бирақ олай емес екенлигин және бир атап өтемиз. Физиканың раўажланыў тарийхы бөлекшениң қозғалысын тәрийиплейтуғын классикалық усылдан, бөлекшениң траекториясы ҳаққындағы көз-қараслардан бас тартқан жағдайда ғана толқынлық қәсийетлерге ийе микробөлекшелердиң қозғалысын дурыс ҳәм толық тәрийиплеўге болатуғынлығын ҳәм усындай бөлекшелердиң қатнасыўында өткерилетуғын экспериментлердиң нәтийжелерин болжап айтыўға болатуғынлығын көрсетеди.

Толқынлық қәсийетлерге ийе болған бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплейтуғын теорияны дәслепки ўақытлары толқын механикасы деп атады. Бирақ бул атама көп узамай квантлық механика атамасы менен алмастырылды.

Квантлық механика классикалық механикаға салыстырғанда улыўмарақ физикалық теория болып табылады. Бирақ $\lambda_{db} \ll L$ шәрти орынланғанда бөлекшениң толқынлық қәсийетлерин есапқа алмаўға болады ҳәм сонлықтан 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 сыпатында қамтып алыўы шәрт. Сонлықтан ракетаның космослық кеңисликтеги қозғалысын, суў асты кемесиниң океан тереңликлериндеги орын алмастырыўларын, ҳәтте электронның электронлық-нур трубкасындағы қозғалысын тәрийиплеў ушын физика барлық ўақытта денелердиң қозғалысын тәрийиплеўдиң классикалық усылларынан пайдаланады. Тек кеңисликлик масштаблар жүдә киши жағдайларда ғана (яғный атом, атом ядросы масштабларында ғана) квантлық механика микродүньяның қубылысларын тәрийиплеў ушын бирден бир мүмкин болған аппаратқа айланады. Квантлық эффектлер атом системасы қәддинде көринетуғын болса да, бул эффектлер көплеген ҳәзирги заман дүзилислериниң ҳәм әсбап-үскенелериниң жумысларының өзгешеликлерин анықлайды ҳәм алдыңғы технологиялардың тийкарында жатады.

Квантлық механикадағы бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплеўге өтиў алдында теорияның тийкарында жататуғын бир қатар постулатларды келтирип 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 Ψ функциясы үстинде базы бир операциялар ислеўдиң нәтийжесинде микробөлекшениң қозғалысы ҳаққындағы толық информацияларды береди.

Толқын функциясының итималлық мәниси. Қәлеген ўақыт моментиндеги бөлекшениң координаталары менен импульсин көрсетиў ҳәм траекториядан бас тартыў арқалы микробөлекшениң ҳалын бериўдиң мүмкин емеслиги микробөлекшениң қозғалысын итималлық бойынша тәрийиплеў усылына алып келеди. Бул жағдай квантлық механикада бөлекшениң ҳалын анықлағанда берилген ўақыт моментинде кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында усы бөлекшени табыўдың итималлығын анықлаў усылын көрсетиўдиң керек екенлигин аңғартады.

1926-жылы М.Борн квантлық механикадағы толқын функциясының итималлық жақтан мәнисин келтирип шығарды:

$\Psi(x, y, z, t)$ толқын функциясының модулиниң квадраты $t \geq 0$ ўақыт моментинде бөлекшени кеңисликтиң координаталары x, y ҳәм z болған $M = M(x, y, z)$ ноқатында табыўдың итималлығының тығызлығы w ны береди.

Демек

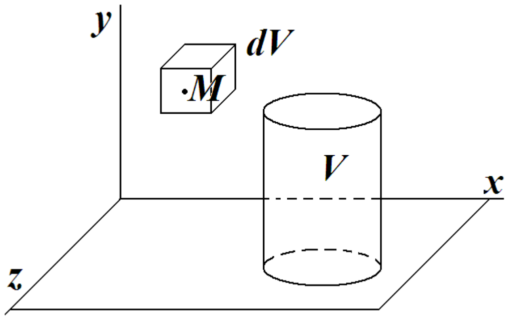
$$\mathrm{w} = \frac{dP}{dV} = |\Psi|^2. \tag{2.3.1}$$

Улыўма жағдайда толқын функциясының комплексли функция болатуғынлығын атап өтемиз. Сонлықтан бул функция ҳақыйқый ҳәм жормал бөлимлерден 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 Ψ ди оның коплексли түйинлес функциясы болған Ψ^* функциясына көбейтеди. $\Psi \cdot \Psi^* = |\Psi|^2$ теңлигиниң дурыс екенлигин комплексли санлар теориясында дәлилленеди.

(2.3.12)-формуланы түрлендирип

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi \cdot \Psi^* dV \tag{2.3.2}$$

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-сүўрет).



3.1-сүўрет.

Бөлекшениң берилген квантлық ҳал ушын оны базы бир ўақыт моментинде M ноқатын қоршап турған dV элементар көлеминде табыўдың итималлығын есаплаў ушын арналған схема.

Бөлекшениң қозғалысын тәрийиплеў ушын N өлшемли (N = 1, 2 ҳәм 3) $\Re^N$ 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 = dxdy, ал үш өлшемли (N = 3) қозғалыс ушын dV = dxdydz. Кеңисликлик симметрияға ийе мәселелерди шешкенде цилиндрлик (r,φ,z), сфералық (r,θ,φ) координаталр системаларын пайдаланыў мүмкин. Бундай жағдайларда толқын функциясын усы координаталар менен ўақыттың функциясы сыпатында анықлайды.

(2.3.2)-формуладан $\Psi(x, y, z, t)$ толқын функциясы жәрдеминде тәрийипленетуғын бөлекшениң берилген квантлық ҳалда бөлекшени шекли V көлеминиң қәлеген областында табыўдың итималлығы P ны есаплаўға болатуғынлығы келип шығады. Ҳақыйқатында да

$$P = \int dP = \int_V wdV$$

болғанлықтан (2.3.1) менен (2.3.2) ден

$$P = \int_V \Psi \cdot \Psi^* dV$$

$$P = \int_V |\Psi|^2 dV \text{ ямаса } P = \int_V \Psi \cdot \Psi^* dV \qquad (2.3.3)$$

теңликлериниң орынланатуғынлығы келип шығады. (2.3.1) – (2.3.3) формулалар квантлық механикадағы толқын функциясының итималлық ямаса статистикалық мәнисиниң бар екенлигин анықлайды.

Толқын функцияларының қәсийетлери. Егер (2.3.3) кеңислиги сыпатында барлық $\Re^N$ кеңислигин алсақ (бул кеңислик ушын $V \to \infty$), онда барлық кеңисликте бөлекшени табыўдың итималлығы 1 ге тең болады. Демес толқын функциясының итималлықлық мәнисинен

$$\int_{V\to\infty} |\Psi|^2 dV = 1 \text{ ямаса } \int_{\Re^N} \Psi \cdot \Psi^* dV \qquad (2.3.4)$$

екенлиги келип шығады. (2.3.4)-шәртти толқын функциясын нормировкалаў шәрти деп атайды, усы шәртти қанаатландыратуғын толқын функциясын нормировкаланған толқын функциясы деп атаймыз.

Квантлық механиканың базы бир мәселелеринде (2.3.4) типиндеги нормировка шәрти орынланбаўы мүмкин. Бундай мәселелерде бөлекше шексизликтен қозғалып келеди ҳәм шексизликке алыслап кетеди. Сонлықтан 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 әҳмийетли емес, ал кеңисликтиң еки ноқатындағы модуллериниң квадратының қатнасы әҳмийетли. Бул қатнас кеңисликтиң усы еки ноқатлары қасында табыўдың итималлықларының қатнасын береди. Нормировкаланбаған толқын функциясы қатнасатуғын мәселелерде нормировка шәртиниң базы бир аналогын итималлықтың ағысының тығызлығын пайдаланыў жолы менен алыў мүмкин. Бул физикалық шаманың анықламасы ҳәм оның толқын функциясы менен байланысы 3.3-параграфта келтирилген.

Толқын функциясының итималлық мәниси квантлық механиканың мәселелериндеги толқын функцияларына базы бир шеклерди ямаса шәртлерди белгилеп береди. Бул стандарт шәртлерди толқын функциясының регулярлық шәртлери деп атайды. Бун шәртлер өз ишине төмендегилерди алады:

1. Толқын функциясының шеклилик шәрти. Толқын функциясы (2.3.3)- ҳәм (2.3.4)-интеграллар тарқалыўшы интеграллар болып кететуғындай 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 нолге умтылыўы 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 лазым. Цилиндрлик ҳәм сфералық коорданаталар системаларын пайдаланатуғын мәселелерде бир мәнислик шәрти мүйешлик параметрлер бойынша толқын функцияларының дәўирлилигиниң пайда болыўына алып келеди.

3. Толқын функциясының үзликсизлик принципи. Ўақыттың қәлеген моментинде толқын функциясы кеңисликлик координаталардың үзликсиз функциясының болыўы шәрт. Соның менен бирге толқын функцияларының дара туўындылары 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 туўындылары тек сийрек ушырасатуғын идеалластырылған күш майданлары бар мәселелерде кеңисликтиң айырым ноқатларында үзилиске түседи. Бул ноқатларда бөлекше қозғалатуғын күш майданын тәрийиплеўши потенциал функция екинши әўлад үзилиске түседи.

Квантлық ҳаллардың суперпозиция принципи. Квантлық ҳалларың ең әҳмийетли қәсийетлериниң бирин келтирип шығарамыз. Бул жағдай толқын функциясы ушын Шредингер теңлемесиниң сызықлылығынан келип шығады (бул ҳаққында толығырақ келеси параграфта айтылады). Теңлемениң сызықлылығынан егер бөлекше Ψ_1 толқын функциясы жәрдеминде тәрийипленетуғын квантлық ҳалда ҳәм Ψ_2 толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын басқа квантлық ҳалда да туратуғын болса, онда бөлекшениң

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 \tag{2.3.5}$$

толқын функциясы менен тәрийипленетуғын квантлық ҳалда да тура алатуғынлығы келип шығады. Бул формулада C_1 менен C_2 арқалы улыўма жағдайда комплексли болатуғын шамалар белгиленген.

Демек қәлеген сандағы квантлық ҳаллардың суперпозициясы (қосындысы) ҳаққында да гәп етиўге болады, яғный

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + \cdots + C_N\Psi_N = \sum_{n=1}^{M} C_n\Psi_n \tag{2.3.6}$$

толқын функциясы менен тәрийипленетуғын квантлық ҳалдың да болатуғынлығы ҳаққында айтыўға болады деген сөз. Бундай ҳалда C_n коэффициентиниң модулиниң квадраты Ψ толқын функциясы менен анықланатуғын система үстинде өлшеўлер өткергенде оның Ψ_n толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалда турғанлығының итималлығына тең. Сонлықтан нормировкаланған толқын функциялары ушын

$$\sum_{n=1}^{N} |C_n|^2 = 1.$$

Ҳаллардың суперпозициясының квантлық механикалық суперпозиция принципи классикалық физикада аналогқа ийе емес. Ҳақыйқатында да классикалық теория бойынша еркин бөлекше ўақыттың берилген моментинде тек бир бағытта ямаса басқа бир бағытта қозғалыўы мүмкин.

Ал ҳалы толқын функциясы менен тәрийипленетуғын квантлық бөлекшениң қай тәрепке қарай қозғалатуғынлығы де Бройлдиң еки тегис толқынының суперпозициясы болып табылады

$$\Psi(x,t) = \left(C_1 e^{\frac{i}{\hbar}px} + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar}px}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}px}.$$

Бундай бөлекше бир ўақытта x көшери бағытында оң тәрепке қарай да, шеп тәрепке қарай да қозғалады. Классикалық механика бойынша бундай аўҳалдың орын алыўы ҳеш бир ақылға сәйкес келмейди. Квантлық механика көз-қараслары бойынша бул жағдай мынаны аңғартады: Усындай ҳалда туратуғын бөлекшениң қозғалыс бағытын анықлаў бойынша тәжирийбелер сериясын өткергенде x көшери бағытында 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.

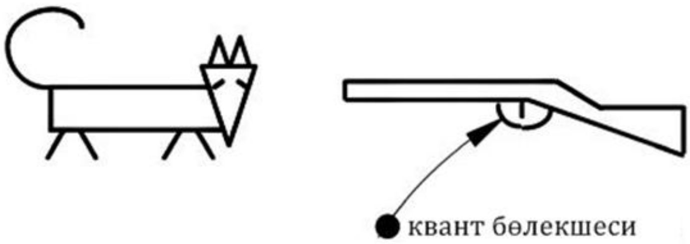
Тап сол сыяқлы x ҳәм y бағытларында тарқалатуғын де Бройль толқынларының суперпозициясы болатуғын ҳалда

$$\Psi(x,y,t) = \left(C_1 e^{\frac{i}{\hbar}px} + C_2 e^{\frac{i}{\hbar}py}\right) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

ҳәм "бөлекше қай бағытта қозғалып баратыр" деген сораўға бир мәнисли жуўап жоқ. Бөлекше x бағытында да, y бағытында да қозғалмақта деген сөз бөлекше x ҳәм y бағытлары ортасындағы биссектриса бағытында қозғалып баратыр деген мәнини бермейди. Бул жағдайда биз тек x бағытында бөлекше қандай да бир итималлық пенен, ал y көшериниң бағытында бөлекше екинши бир итималлық пенен қозғалады деп ғана айта аламыз. Усындай нәтийже бөлекшениң қозғалыс бағытын анықлаў ушын өткерилген өлшеўлер сериясында алынды.

Квантлық механиканың әпиўайы ғана сораўға сондай етип жуўап бериўи теориялық абсотрактлик нәтийже болып табылмайды. Усыған байланыслы квантлық компьютерлерин дөретиў мәселелери бойынша шуғылланып атырған ҳәзирги заман информациялық технологияларда тек еки ҳалға ("0" ҳәм "1") ийе логикалық элементлерди емес, ал нол менен бирдиң базы бир итималлықларға ийе суперпозициясы ҳалларында тура алатуғын логикалық элементлерди дөретиў бойынша жумыслар исленбекте. Бундай элементлер компьютерлердиң жумыс ислеў принциплерин пүткиллей өзгертеди ҳәм информацияны қайта ислеў ямаса физикалық мәселелерди шешиўде есаплаўларды тезлететуғын ҳәм жумыслардың нәтийжелилигин жоқарылататуғын алгоритмлерди дөретиўге имканиятлар туўдырады.

Берилген физикалық шама анық мәниске ийе болатуғын ҳәм ҳаллардың суперпозициясынан алынатуғын ҳаллардың мүмкин болыўы квантлық механиканың өзине тән өзгешеликлериниң бири болып есапланады. Бундай өзгешеликтиң бар екенлигинен квантлық механика классикалық механикадан принципиаллық айырмашылыққа ийе болып шығады. Бир бөлекшениң усындай "араласқан" ҳалын классикалық механиканың тилинде тәрийиплеў мүмкин емес. Сонлықтан бир ўақытта классикалық ҳәм квантлық объектлер болып табылатуғын системаларды үйрениўдиң кереги жоқ. Бундай системаларда шешиў мүмкин емес қарама-қарсылықлар пайда болады. Тап усындай қарама-қарсылықлардың бирин Э.Шредингер тәрепинен усынылған парадокс айқын көрсете алады. Бул парадоксты "пышық парадоксы" деп атайды.



3.2-сүўрет.
Шредингер пышығын демонстрациялайтуғын схема.

Мейли 3.2-сүўретте келтирилген жабық системада иши көринбейтуғын базы бир "қуты" ның ишинде (ямаса қапшықтың) ишине пышық салынған болсын. Пышыққа қарай оқланған мылтық атыўға таяр турсын. Бизиң алдымызда классикалық объектлерден туратуғын система жайласқан. Енди мылтықтың қулағына қарай толқынлық қәсийетке ийе қозғалыўшы микробөлекшени жиберейик. Квантлық бөлекше мылтықтың қулағына келип тийсе мылтық атылады ҳәм пышық өледи.

Мейли бизиң бөлекшемиз Ψ_1 толқын функциясы жәрдеминде тәрийипленетуғын биринши квантлық ҳалда турған ҳәм бул ҳалда мылтықтың қулағының қасында бөлекшени табыўдың итималлығы нолге тең болсын. Демек микробөлекше биринши ҳалда турған болса, онда қутыдағы пышық тири деген сөз.

Ψ_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 калмайтуғынлығы таң қаларлық емес.

Ҳаллардың суперпозициясы принципи бойынша микробөлекше биринши ҳәм екинши ҳаллардың суперпозициясынан туратуғын ҳәм

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_2 \tag{2.3.7}$$

толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалда да тура алады. Бундай ҳалда бөлекше 1-ҳалда да, 2-ҳалда да бирдей итималлық пенен туратуғынлығы өз-өзинен түсиникли. Бирақ бул жерде (2.3.7)-толқын функциясы менен тәрийипленетуғын микробөлекшениң ҳалында пышық тири ме ямаса өли ме? деген қыйын сораўдың пайда болыўы тәбийий нәрсе. Пышық болса ҳәм тири ҳәм өли ҳалда тура алмайды. Солай етип пышық тири ме ямаса өли ме? Егер бир қутыны ашсақ пышықтың тири ямаса өли екенлигин козимиз бенен көремиз. Егер пышық өлген болса, онда ол қашан өлди деген сораў туўылады. Себеби қутыны ашпастан бурын пышық тири ме ямаса өли ме деген сораўға бир мәнисли жуўап жоқ еди. Сонда пышық қутыны ашқан ўақытта өлген болама? Бул сораўлардың ҳеш бирине де жуўап жоқ. Себеби мәселеде классикалық объект пенен квантлық объекти аралысқан корректли емес система талқыланған еди.

3.1-**мәселе**. Сфералық симметрияға ийе болған күш майданында орайдын r қашықлығында 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 белгили болған турақлы, ал E арқалы бөлекшениң ўақыттан ғәрезсиз болған толық энергиясы бегиленген

Анықлаў керек: а) Турақлы көбейтиўши A ның мәнисин;

б) бөлекшениң күш майданының орайынан ең итимал қашықлығын.

Шешими: а) A турақлысының мәнисин (2.3.4)-толқын функциясының нормировка шәртинен анықлаймыз. Буның ушын элеметар 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 есаплап

$$I = \int_0^\infty exp\left(-\frac{2r}{a}\right) r^2 dr = \frac{a^3}{4}$$

нормировка шәртинен

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$$

екенлигине ийе боламыз.

б) Күшлик орайдан бөлекшениң ең итимал қашықлығын биз орайдын r қашықлығында, яғный бөлип алынған шар қатламында бөлекшени табыўдың итималлығын есаплаў арқалы табамыз. Бул итималлық былайынша есапланады

$$dP = |\Psi|^2 4\pi r^2 dr = f(r)dr.$$

Бул жерде

$$f(r) = \frac{4r^2}{a^3} exp\left(-\frac{2r}{a}\right).$$

$\frac{df}{dr}$ туўындысын нолге теңеп $r = a$ экстремаллық ноқатын табамыз. Бул ноқатта $f(r)$ функциясы масимумына жетеди. Орайдан тап сол $r = a$ қашықлығында бөлекшени табыўдың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады. Бул кашықлықтың мәниси ўақыттың өтиўи менен өзгериске ушырамайды.

3.2-**мәселе**. $t = 0$ ўақыт моментинде x көшери бойлап қозғалыўшы 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 бөлиминиң ҳәм б) толқын функциясының модулиниң квадратының x координатасынан ғәрезлигин анықлаңыз.

Шешими: а) Толқын функциясының ҳақыйқый бөлимин 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

$$Re\Psi = \frac{A}{2} exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) cosbx$$

екенлигине ийе боламыз.

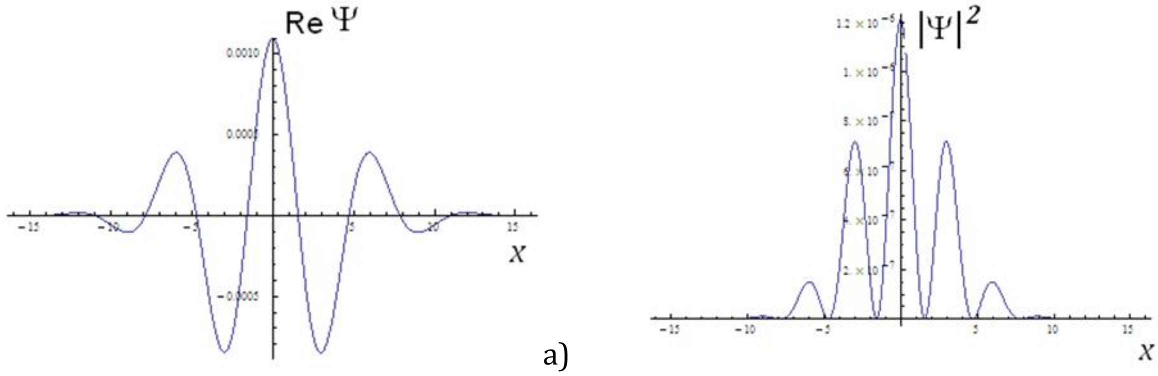
б) Толқын функциясының модулиниң квадратын анықлаймыз:

$$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi = A\, exp\left(-\frac{x^2}{a^2} - i\cdot b\cdot x\right) A\, exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + i\cdot b\cdot x\right).$$

Буннан

$$|\Psi|^2 = A^2 exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right).$$

Табылған ғәрезликлер сапалық түрде 3.3-сүўретте келтирилген.



3.3-сүўрет. 3/2-мәселедеги толқын функциясының хақыйқый бөлегиниң (a) ҳәм модулиниң квадратының x координатасынан ғәрезлиги (b).

2-3-2. **Шредингер теңлемеси**

Бөлекше қозғалатуғын күш майданының структурасын биле отырып бул бөлекшениң квант-механикалық халын тәрийиплеўши толқын функциясын қалай анықлаўға болады? Ўақыттың басланғыш моментиндеги толқын функциясын билип толқын функциясының ўақытқа байланыслы эволюциясын қалай сыпатлаўға болады? Бул сораўларға жуўапты 1926-жылы Э.Шредингер тәрепинен келтирилип шығарылған релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарғы теңлемеси береди. Бундай теңлемени Шредингер теңлемеси деп атаймыз.

Биз ҳәзир скаляр потенциал майдандағы қозғалыўшы массасы m болған бөлекшени қараймыз. Оның потенциал функциясын $U(x, y, z, t)$ арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда бөлекше $F = -gradU$ күш майданында қозғалады ҳәм сәйкес толқын функциясы Ψ арқалы белгилеймиз. Шешими усы толқын функциясы болған Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi. \qquad (2.3.8)$$

Бул теңлемеде i = $\sqrt{-1}$ арқалы жормал бирлик белгиленген, ал $\hbar$ арқалы рационластырылған Планк турақлысы белгиленген. Δ стандарт символы Лапластың дифференциал операторын аңлатады. Бул оператор декарт координаталар системасында былайынша жазылады

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{dx^2} + \frac{\partial^2}{dy^2} + \frac{\partial^2}{dz^2}. \qquad (2.3.9)$$

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 ўақыт 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 тәмийинлейди. Бул шәртлер областлардың шегаралары ушын келтирилип шығарылады. Бул шегараларда потенциал функция U биринши ҳәм екинши әўлад үзилислерге түседи. Усы шәртлерге толқын функциясының кеңисликтиң шексиз алыстағы ноқатларындағы толқын функцияларына қойылатуғын шәртлер де киреди. Бул (2.3.4) нормировкасының орынланыуын тәмийинлейди.

Ньютонның классикалық механикасының нызамлары, термодинамиканың нызамлары, Максвеллдиң электродинамика теңлемелери ҳәм басқа да тийкарғы физикалық теңлемелер сыяқлы Шредингер теңлемеси де басқа қатнаслардан келтирилип шығарылмайды. Оны базы бир илимий қағыйда, нызам сыпатында қабыл етиў керек. Оның дурыслығы Шредингер теңлемеси жәрдеминде орынланған есаплаўлардың экспериментлер нәтийжелери менен сәйкес келиўинен дәлилленеди. Бундай сәйкестиң бар екенлиги келиўшилик атомлық ҳәм ядролық физиканың көпшилик қубылыслары ушын анық дәллилленди. Шредингер теңлемеси жәрдеминде болжап айтылған квантлық эффектлер оғада көп техникалық дүзилислердиң, әсбаплардың, технологиялардың тийкарында жатыр.

Шредингер теңлемеси де Бройль гипотезасы ҳәм оннан келип шығатуғын материяның корпускулалық-толқынлық дуализми менен тығыз байланыслы. Ҳақыйқатында да тиккелей тексериўдиң жәрдеминде кинетикалық энергиясы $E = \frac{p^2}{2m}$ болған бөлекше күш майданлары жоқ орында x бағытында қозғалғанда сәйкес

$$i\hbar = \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \qquad (2.3.10)$$

түринде жазылатуғын Шредингер теңлемесиниң шешими

$$\Psi(x, t) = A\, exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right] \qquad (2.3.11)$$

толқын функциясы болып табылады. Бундай толқын функциясы тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди. Бул факт Шредингер теңлемеси толқын теңлемеси болып табылады деп тастыйықлаўға мүмкиншилик береди. Бул теңлемениң сызықлы екенлиги квантлық ҳаллардың суперпозиция принципине муўапық келеди. Ал суперпозиция принципиниң физикалық мазмуны 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. Усындай шеклик түрлендириўлердиң нәтийжесинде Шредингер теңлемеси классикалық механиканың тийкарғы теңлемесине өтиўи 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 узынлықларынан салыстырмалы киши толқын узынлықларына өтиўге сәйкес келеди. Бундай жағдайларда күш майданының ямаса орталықтың оптикалық қәсийетлериниң характерли областының сызықлы өлшемлери L менен салыстырыў керек болады. Бул жуўмақты төмендеги кесте иллюстрациялайды.

Толқынлық оптика	Квантлық механика
$\lambda \geq L$	$\lambda_{db} \geq L$
Геометриялық оптика	Классикалық механика
$\lambda << L$	$\lambda_{db} \ll L$

Жоқарыда келтирилгендей салыстырыўларда классикалық бөлекшениң қозғалыс траекториясы геометриялық оптикадағы жақтылық нурының аналогы болып табылады.

Бөлекше ушын де Бройль толқынының толқын узынлығының киши екенлигин тәсир кванты $\hbar$ ты мәселениң базы бир параметри деп есаплап, усы параметр бойынша $\hbar \to 0$ өтиўи менен тәмийинлеўге болады. Ҳақыйқатында да (2.2) де Бройль формуласында $\hbar \to 0$ шегинде де Бройль толқынының узынлығы да нолге умтылады. Сонлықтан квантлық механиканан классикалық механикаға өтиў ушын шеклик өтиў (2.3.8) Шредингер теңлемесинде $\hbar \to 0$ шәрти орынланғанда әмелге асады. Бундай жағдайда Шредингер теңлемеси классикалық физиканың Гамильтон-Якоби теңлемесине айланады.

Шредингер теңлемесин шешиўдиң нәтийжесинде табылған толқын функцияларының жәрдеминде тек релятивистлик емес бөлекшелердиң квантлық ҳалларды тәрийиплеў мүмкин. Релятивистлик емес бөлекшелер жақтылықтың вакуумдағы тезлигинен көп киши тезликлер менен қозғалады. Квантлық механиканда бөлекшелердиң релятивистлик тезликлерине өтиў 1928-жылы П.Дирак тәрепинен әмелге асырылды. Бундай өтиў релятивистлик бөлекшелердиң 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. **Итималлықлар ағысының тығызлығы векторы**

Шредингер теңлемеси кеңислик пенен ўақыттың симметриясын есапқа алады. Сонлықтан квантлық механиканың тийкарғы 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. Ψ толқын функциясы менен берилген квантлық ҳалда бул көлемде бөлекшени табыўдың итималлығы

$$P = \int_V |\Psi|^2 dV$$

түринде анықланады. Егер бул итималлық ўақыттың өтиўи менен өзгеретуғын болса, онда S бети арқалы итималлықтың ағысы I диң бар екенлигин болжаўға болады. Бул ағыс P итималлығының өзгерисине алып келеди:

$$\frac{dP}{dt} = I. \tag{2.3.12}$$

Итималлық ағысы I ды барлық S бети бойынша тарқалған деп есаплап итималлық ағысының тығызлығы векторы болған $\vec{j}$ векторын киргиземиз. Оның мәнисин былайынша анықлаймыз

$$I = -\oint_S \vec{j}\,\overrightarrow{dS}. \qquad (2.3.13)$$

Бул аңлатпада $\overrightarrow{dS} = d\,S\,\vec{n}$ ҳәм $\vec{n}$ арқалы сыртқы нормалдың бирлик векторы белгиленген. (2.3.13) аңлатпсының оң тәрепиндеги минус белгиси сырттан итималлық ағысы киргенде V көлеминдеги P итималлығының артатуғынлығын, ал итималлық ағысының бағыты V көлеминен сыртқа қарай болғанда P итималлығының кемейетуғынлығын аңлатады.

(2.3.12)- ҳәм (2.3.13)-аңлатпалардан итималлықтың өзгериў тезлиги ушын

$$\frac{dP}{dt} = -\oint_S \vec{j}\,\overrightarrow{ds} \qquad (2.3.14)$$

интеграллық қатнасын аламыз.

$$\oint_S \vec{j}\,\overrightarrow{ds} = \int_V div\,\vec{j}\,dV$$

Остроградский теоремасы бойынша (2.3.14)-аңлатпа төмендегидей түрге түрлендириледи

$$\int_V \left(\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} + div\,\vec{j}\right) dV = 0\,. \qquad (2.3.15)$$

Бул аңлатпадан V көлеминиң ықтыярлы болғанлығынан итималлық майданы ушын үзликсизлик теңлемеси келип шығады. Үзликсизлик теңлемеси былайынша жазылады:

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} + div\,\vec{j} = 0. \qquad (2.3.16)$$

(2.3.16)-аңлатпадағы биринши қосылыўшыны былайынша жазамыз

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,. \qquad (2.3.17)$$

Толқын функциясы Ψ

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi \qquad (2.3.18)$$

Шредингер теңлемесиниң шешими болғанлықтан, онда толқын функциясының комплексли түйинлеси Ψ^*

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + U\Psi^* \tag{2.3.19}$$

теңлемесин қанаатландырады. (2.3.19)-аңлатпаны Ψ^* ге, ал (2.3.19)-аңлатпаны Ψ ге көбейткеннен кейин бириншн аңлатпадан екиншисин алып таслаймыз. Бундай жағдайда

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}(\Psi\Delta\Psi^* - \Psi^*\Delta\Psi) \tag{2.3.20}$$

аңлатпасына ийе боламыз. (2.3.20) ны (2.3.17)-формуланың оң бөлимине қойып

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi\Delta\Psi^* - \Psi^*\Delta\Psi) \tag{2.3.21}$$

аңлатпасын келтирип шығарамыз. Енди векторлық анализдиң белгили болған формулаларын пайдаланыў арқалы төмендегидей еки теңликти жазамыз:

$$div(\Psi\ grad\ \Psi^*) = \ grad\ \Psi^* grad\ \Psi + \Psi\Delta\Psi^*$$

ҳәм

$$div(\Psi^*\ grad\ \Psi) = \ grad\ \Psi^* grad\ \Psi^* + \Psi^*\Delta\Psi.$$

Буннан

$$div(\Psi\ grad\ \Psi^* - \Psi^*\ grad\ \Psi) = \Psi\ \Delta\Psi^* - \Psi^*\Delta\Psi$$

қатнасын аламыз ҳәм бул қатнастың жәрдеминде (2.3.21) ди

$$\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} + div\left[\frac{i\hbar}{2m}(\Psi\ grad\ \Psi^* - \Psi^*\ grad\ \Psi)\right] = 0 \tag{2.3.22}$$

теңлемесине түрлендиремиз. (2.3.22) менен (2.3.16) ны бир бири менен салыстырып итималлықтың ағысы ушын төмендегидей аңлатпа аламыз

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\ grad\ \Psi^* - \Psi^*\ grad\ \Psi). \tag{2.3.23}$$

gradΨ $\equiv \nabla\Psi$ екенлигин есапқа алып (2.3.23) ти компактлырақ (жыйнақлырақ) формада жазамыз

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\ \nabla\Psi^* - \Psi^*\ \nabla\Psi). \tag{2.3.24}$$

Ағыстың тығызлығы нолге тең болмаған жағдайлардағы квантлық механиканың мәселелеринде бөлекшени тап сондай бөлекшелердиң ағысында қозғалады ҳәм олар (бөлекшелер) бир биринен ғәрезсиз күш майданы менен тәсирлеседи деп есаплаўға болады. Усындай интерпретацияны пайдаланғанда $\vec{j}$ векторының ағысын усы векторға перпендикуляр бир бирлик беттен ўақыт бирлигинде өтип атырған бөлекшелердиң ағысы деп қараў мүмкиншилигине ийе боламыз..

Бундай жағдайда (2.3.14)- ҳәм (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 мазмунына ийе болады. Ал (2.3.16)-теңлемениң өзи болса тутас денелер механикасындағы үзликсизлик теңлемесине өтеди

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + div\vec{j}_m = 0. \qquad (2.3.25)$$

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 есаплай аламыз. Сонлықтан (2.3.16)-аңлатпаның еки тәрепин де q шамасына көбейтип электродинамикадағы белгили болған дифференциал формадағы электр зарядының сақланыў нызамын аламыз

$$\frac{\partial \rho_q}{\partial t} + div\vec{j}_q = 0. \qquad (2.3.26)$$

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 градиентлердиң 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 қозғалыўшы еркин бөлекше ушын итималлықтың ағысының тығызлығы де Бройль толқынының амплитудасына пропорционал екен. Буннан еркин бөлекшениң толқын функциясын $j_x = 1$ теңлигиниң жәрдеминде нормировкалаўға болатуғынлығы келип шығады. Бундай жағдайда де Бройль толқынының толқын узынлығы

$$A = \sqrt{\frac{m}{p}} = \sqrt{\frac{1}{\nu}}$$

шамасына тең болады. Бул аңлатпада p арқалы бөлекшениң импульси, ал v арқалы тезлиги белгиленген.

2-3-4. **Физикалық шамаларды операторлардың жәрдеминде бериў**

Толқын функциясын билиў арқалы биз қарап атырған квантлық ҳалда турған бөлекшеге сәйкес келиўши қандай да бир физикалық шаманы өлшегенде алынатуғын нәтийжени қалай болжаўға болады деген сораў келип туўады. Қозғалыўшы 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 тәсириниң 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. Усындай жағдайда квантлық механикандағы операторлар арасындағы қатнаслар классикалық механикадағы сәйкес физикалық шамалар арасындағы қатнаслардай болады.

Бул постулаттың мәнисин ашып көрсетиў ушын бар қатар түсиниклер беремиз. Оператор дегенимиз математикалық қағыйда болып табылады ҳәм бул қағыйда бойынша бир функцияны екинши функцияға түрлендиремиз. Операторды бериў дегенимиз сондай түрлендириўдиң рецептин бериў 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 "^" белгисин қояды. Мысалы $\hat{x}$ арқалы x коодинатасының 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 түсиниледи. Бундай жағдайда $\hat{a}\Psi = \hat{b}\Psi$ теңлиги ушын операторлардың $\hat{a} = \hat{b}$ теңлиги де орынланады.

Квантлық механикандағы тийкарғы физикалық шамалардың операторларын анықлаймыз.

1. **Координата операторы**. Бул оператордың толқын функциясына тәсири толқын функциясын сәйкес координатаға көбейтиўди нәзерде тутады, яғный

$$\hat{x}\Psi = x\Psi,\ \ \hat{y}\Psi = y\Psi,\ \ \hat{z}\Psi = z\Psi.. \qquad (2.3.27)$$

Жазыўдың символлық операторлық формасында бул операцияларды жазыўдың формасы

$$\hat{x} = x,\ \ \hat{y} = y,\ \ \hat{z} = z \qquad (2.3.28)$$

түрине ийе болады. Бул формулаларды бирлестирип классикалық механикадағы $\boldsymbol{r}$ векторына сәйкес келетуғын $\hat{\boldsymbol{r}}$ операторын келтирип шығарыў мумкин. Бундай операторды әдетте қураўшылары $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ болған базы бир вектор сыпатында қарайды. Сонлықтан

$$\hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{i}\hat{x} + \boldsymbol{j}\hat{y} + \boldsymbol{k}\hat{z} \qquad (2.3.29)$$

формуласының жәрдеминде жазыўымыз мүмкин.

2. **Импульс операторы**. Координаталар бойынша дифференциаллаў операцияларының жәрдеминде импульстиң проекцияларының операторларын анықлаймыз. Бул анықлаўды символлық операторлық формада

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \ \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ \ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \qquad (2.3.30)$$

түринде жазамыз. (2.3.30)-формулалардың үшеўин де импульстиң векторлық операторы болған $\hat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{i}\hat{p}_z + \boldsymbol{j}\hat{p}_y + \boldsymbol{k}\hat{p}_z$ векторы түринде жазамыз. Оны былайынша жаза аламыз

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla. \qquad (2.3.31)$$

Бул формулада

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

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

$$\hat{p}^2 = (\hat{p}_x)^2 + (\hat{p}_y)^2 + (\hat{p}_z)^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \qquad (2.3.32)$$

түринде анықлаймыз. Лаплас символын пайдаланып (2.3.32)-операторды компактлырақ түрде көширип жазамыз

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2\Delta. \qquad (2.3.33)$$

3. **Импульс моменти операторы**. Бөлекшениң импульс моментин $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ түринде анықлайтуғын классикалық механиканың формуласы бойынша оның координата көшерлерине түсирилген проекцияларының былайынша жазамыз:

$$L_x = yp_z - zp_y,\ L_y = zp_x - xp_z,\ L_z = xp_y - yp_z.$$

Бул аңлатпаларды импульс моментиниң проекциялары операторларын анықлайтуғын операторлық аңлатпаларға айландырамыз

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \end{aligned} \qquad (2.3.34)$$

Импульс моментиниң квадраты операторы

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x\hat{L}_x + \hat{L}_y\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_z \qquad (2.3.35)$$

қағыйдасы бойынша дүзе аламыз.

Квантлық механиканың сфералық симметрияға ийе болған мәселелерин r, θ ҳәм φ сфералық координаталар системасында шешкен қолайлы. Декарт координаталарынан сфералық координаталар системасына өткенде өзгериўшилерди алмастырыўдың әпиўайы 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)- ҳәм (2.3.35)-формулаларды

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar\left(sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta\,cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \\ \hat{L}_y &= -i\hbar\left(sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta\,cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \\ \hat{L}_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \hat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta\varphi}. \end{aligned} \qquad (2.3.36)$$

түриндеги формулаларға түрлендириў мүмкин. 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 мүйешлик бөлими 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 мүмкиншилик береди. Сонлықтан

$$\hat{E}_K = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta. \tag{2.3.37}$$

Егер бөлекше стационар күш майданында қозғалатуғын болса, онда оның потенциал энергиясы $U = U(x, y, z)$ кеңисликтиң қәлеген ноқатында анықланған. Сонлықтан $\hat{U}$ арқалы белгиленетуғын потенциал энергияның операторы U функциясына көбейтиў операторы сыпатында анықланады, яғный

$$\hat{U} \cdot \Psi = U \cdot \Psi \text{ ямаса } \hat{U} = U. \tag{2.3.38}$$

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. Сонлықтан

$$\hat{H} = \hat{E}_K + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U.$$

(2.3.33)-формула бойынша импульстиң квадраты ушын аңлатпаны ашып толық энергия операторын

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x, y, z) \tag{2.3.39}$$

түринде жаза аламыз.

Классикалық механикада координаталар менен импульс арқалы аңлатылған бөлекшениң толық энергиясын Гамильтон функциясы деп атайтуғын еди. Сонлықтан квантлық механиканда толық энергия операторы болған $\hat{H}$ операторын Гамильтон функциясының операторы ямаса гамильтониан деп атайды.

$\hat{H}$ гамильтониан квантлық механиканың тийкарғы операторы деп аталады. Себеби бөлекшеге тәсир ететуғын күш майданының айқын түрин сайлап алыў арқалы биз математика тилинде квантлық системаның өзине тән барлық өзгешеликлерин жаза аламыз. Сонлықтан релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарғы теңлемеси болған Шредингер теңлемесин де

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{2.3.40}$$

операторлық түрде жазыў мүмкин.

Квантлық механикандағы операторлық усылдың физикалық мазмуны квант-механикалық оператордың мүмкин болған түрлерине базы бир шеклерди қояды. Мейли f физикалық шамасының операторы $\hat{\Phi}$ болсын. Бундай жағдайда қәлеген Ψ_1 ҳәм Ψ_2 функциялары менен ықтыярлы турақлылар C_1 менен C_2 ушын

$$\hat{\Phi}(C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2) = C_1\hat{\Phi}\Psi_1 + C_2\hat{\Phi}\Psi_2 \tag{2.3.41}$$

теңлигиниң орынланыўы керек. Усындай қәсийетке ийе операторларды сызықлы операторлар деп атаймыз. Физикалық шамалардың операторларының сызықлылық қәсийети квантлық ҳаллардың суперпозиция принципи менен тығыз байланысқан. Теорияда сызықлы операторларды пайдаланғанда ғана суперпозиция принципи бузылмайды.

Физикалық шаманың операторы хызметин тек сызықлы өзи өзине түйинлес оператор атқара алады. Бундай операторды Эрмит операторы деп атаймыз. Тек усындай операторға ғана ҳақыйқый (комплексли емес) физикалық шама сәйкес келеди. Өзи өзине түйинлес оператор деп өзиниң түйинлес операторы менен сәйкес келетуғын операторға айтамыз. Бундай жағдайда ықтыярлы Ψ_1 ҳәм Ψ_2 функциялары ушын төмендегидей интеграллық теңлик орынланады

$$\int\limits_{\Re} \Psi_1^*(\hat{\Phi}\Psi_2)dV = \int\limits_{\Re} \Psi_2^*(\hat{\Phi}\Psi_1)dV. \qquad (2.3.42)$$

Солай етип квантлық механиканда ҳәр бир физикалық шамаға белгили бир сызықлы өзи өзине түйинлес оператор жазылады екен. Тиккелей тексерип көриў жолы менен жоқарыда келтирилген операторлардың барлығының да сондай қәсийетлерге ийе екенлигине көз жеткериўге болады.

Квантлық механиканда қолланылатуғын тийкарғы 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×p] $L_x = yp_z - zp_y$, $L_y = zp_x - xp_z$, $L_z = xp_y - yp_z$	$\hat{L} = -i\hbar[\mathbf{r}\times\nabla]$ $\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$, $\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$, $\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$
Толық энергия	$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r})$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x,y,z)$

3.4-**мәселе**. $\hat{p}_x$ импульс проекциясы операторының өзи өзине түйинлес оператор екенлигиниң шәртин 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 интеграллаўдың жәрдеминде

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*(\hat{p}_x\Psi_2)dx = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^*\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial x}\right)dx = \frac{\hbar}{i}\Psi_1^*\Psi_2|_{-\infty}^{\infty} + \int\limits_{-\infty}^{\infty} \Psi_2\left(-i\hbar\frac{\partial\,\Psi_1^*}{\partial x}\right)dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_2 (\hat{p}_x \, \Psi_1)^* dx$$

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 дәлиллледик. (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 операторлдың өзи өзине түйинлес екенлигин дәлиллеўге болады.

2-3-5. Операторлардың меншикли функциялары ҳәм меншикли мәнислери

Меншикли функциялардың тийкарғы қәсийетлери. Квантлық механиканда берилген f физикалық шамасы қабыл ететуғын мәнислерди оның меншикли мәнислери 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, яғный

$$\hat{\Phi}\Psi = f\Psi \qquad (2.3.43)$$

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 мәнислердиң жыйнағын оператордың спектри деп атайды. $\hat{\Phi}$ операторының спектрин дискрет деп атайды, егер спектр n = 1, 2, 3, ... ушын f_n мәнислериниң көплигинен туратуғын болса. Бул мәнислер Ψ_η меншикли функциялардың жыйнағына сәйкес келеди, ал Ψ_n меншикли функциялары болса

$$\hat{\Phi}\Psi_n = f_n \Psi_n, \quad n = 1,2,3, \dots \qquad (2.3.44)$$

түриндеги теңлемелердиң шешимлери болып табылады. Оператордың меншикли мәнислериниң спектри үзликсиз де болыўы мүмкин. Бундай жағдайда (2.3.13)-аңлатпада f тиң мүмкин болған барлық мәнислери қатнасады. f тиң мүмкин болған мәнислери бир қатар интервалларда жататуғын жағдай ушын спектр айырым жолақлардан да турыўы мүмкин.

Бир қатар жағдайларда $\hat{\Phi}$ операторының бир меншикли мәнисине бир емес, ал бир неше Ψ_{n1}, Ψ_{n2}, Ψ_{n3}, ... , Ψ_{nk} меншикли мәнислериниң сәйкес келиўи мүмкин. Бундай жағдайларды айныған жағдайлар (вырждениые случаи), ал k санын айныў саны деп атайды.

(2.3.43)-аңлатпадан меншикли функциялардың базы бир турақлы шама дәллигинде анықланатуғынлығы көринип тур. Бул турақлының мәнисин әдетте меншикли функциялардың нормировка шәртинен анықлайды.

Квантлық механикандағы физикалық шамаларға сәйкес келетуғын операторлардың меншикли мәнислериниң барлық ўақытта да ҳақыйқый сан болып табылатуғынлығын ҳәм бул жағдайдың операторлардың өзи өзине түйинлеслигинен келип шығатуғынлығын дәлиллеймиз. Мейли $\widehat{\Phi}$ операторы өзи өзине түйинлес оператор, ал оның f меншикли мәнисине сәйкес келетуғын Ψ функциясы оның меншикли функциясы болсын. Анықламасы бойынша Ψ функциясы

$$\widehat{\Phi}\Psi = f\Psi \tag{2.3.45}$$

теңлемесиниң шешими болып табылады. Бул жерде комплексли түйинлес операциясын орынлап

$$\left(\widehat{\Phi}\Psi\right)^* = f^*\Psi^* \tag{2.3.46}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Егер (2.3.42)-аңлатпада $\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi$ теңлигин қойсақ, онда

$$\int\limits_{\Re^N} \Psi^*\left(\widehat{\Phi}\Psi\right)^* dV = \int\limits_{\Re^N} \Psi\left(\widehat{\Phi}\Psi\right)^* dV \tag{2.3.47}$$

интеграллық қатнасын аламыз. Бул қатнас (2.3.45) пенен (2.3.46) ны есапқа алғанда

$$f\int\limits_{\Re^N} \Psi^*\Psi dV = f^*\int\limits_{\Re^N} \Psi\Psi^* dV \tag{2.3.48}$$

түрине енеди. Буннан $f = f^*$ екенлигине ийе боламыз. Демек өзине түйинлес операторлардың меншикли мәнислери барлық ўақытта ҳақыйқый шама болып табылады.

Квантлық механикандағы операторлардың меншикли функцияларының әҳмийетли болған ортогоналлық қәсийетин дәлиллеймиз. Егер өзи өзине түйинлес болған $\widehat{\Phi}$ операторының ҳәр қыйлы мәнистеги f_n ҳәм f_m меншикли мәнислерине сәйкес келиўши еки меншикли функциялары Ψ_n ҳәм Ψ_m болса, онда олар төмендеги

$$\widehat{\Phi}\Psi_n = f_n\Psi_n \text{ ҳәм } \widehat{\Phi}\Psi_m = f_m\Psi_m \tag{2.3.49}$$

теңлемелердиң шешими болады.

Ψ_n ҳәм Ψ_m функциялары ушын жазылған $\widehat{\Phi}$ операторының өзи өзине түйинлес болыўының (2.3.42)-шәрти енди

$$\int\limits_{\Re^N} \Psi_n^*\left(\widehat{\Phi}\Psi_m\right) dV = \int\limits_{\Re^N} \Psi_m\left(\widehat{\Phi}\Psi\right)^* dV \tag{2.3.50}$$

түрине енди. (2.3.49) ды есапқа алсақ бул аңлатпадан

$$f_m \int\limits_{\Re^N} \Psi_n^* \, \Psi_m \, dV = f_n^* \int\limits_{\Re^N} \Psi_m \Psi_n^* \, dV \tag{2.3.51}$$

теңлигин аламыз. Өзи өзине түйинлес болған оператор ушын $f_m = f_n$ екенлигин есапқа алсақ, онда (2.3.51)-аңлатпа

$$(f_m - f_n) \int\limits_{\Re^N} \Psi_n^* \, \Psi_m \, dV = 0 \tag{2.3.52}$$

түрине 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

$$\text{Егер } n \neq m \text{ болса } \int_{\Re^N} \Psi_n^* \, \Psi_m \, dV = 0. \tag{2.3.53}$$

Егер Ψ_n ҳәм Ψ_m функциялары бирге нормировкаланған болса, онда (2.3.53) ортогоналлық шәртин ортонормировкаланғанлық шәрти сыпатында жаза аламыз

$$\int\limits_{\Re^N} \Psi_n^* \, \Psi_m \, dV = \delta_{nm}. \tag{2.3.54}$$

Бул аңлатпадағы δ_{nm} шамасы Кронекер символы деп аталады. Егер $n \neq m$ болса $\delta_{nm} = 0$, ал $n = m$ болған жағдайларда $\delta_{nm} = 1$.

Сызықлы өзи өзине түйинлес операторлардың математикалық теориясында квантлық механиканың операторларының меншикли функцияларының системасының функциялардың толық системасы болып табылатуғынлығын дәлиллейди. Бул қәлеген Ψ толқын функциясының өзиниң меншикли функциялары бойынша қатарға жайылатуғынлығын көрсетеди. Бул қатарды былайынша жазамыз

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n \, . \tag{2.3.55}$$

Бул қатардың коэффициентлерин (улыўма жағдайларда бул коэффициентлер комплексли шама болып табылады) меншикли функциялардың ортогоналлығын пайдаланып табыўға болады. Ҳақыйқатында да, (2.3.55)-қатарды Ψ_m^* ге көбейтемиз ҳәм барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз. Бундай жағдайда суммалаў менен интеграллаўдың тәртибин өзгертип

$$\int\limits_{\Re^N} \Psi_m^* \Psi dV = \sum_n C_n \int\limits_{\Re^N} \Psi_m^* \Psi = \sum_n C_n \delta_{nm} = C_m \tag{2.3.56}$$

аңлатпаларын келтирип шығарамыз. Буннан m белгилениўин n ге өзгертип (2.3.55)-қатардағы C_n коэффициентлерин есаплаў формуласын аламыз:

$$C_n = \int\limits_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi dV. \qquad (2.3.57)$$

Егер $\widehat{\Phi}$ операторы F интервалы ишиндеги f меншикли мәнислериниң үзликсиз спектрине ийе болса, онда қәлеген толқын функциясын меншикли функцияларға жайыў интеграллаўға өтеди. Сонлықтан

$$\Psi = \int\limits_F C_f \Psi_f df \qquad (2.3.58)$$

формуласына ийе боламыз ҳәм бундағы C_f коэффициентиниң үзликсиз көплиги

$$C_f = \int\limits_{\Re^N} \Psi_f^* \Psi dV \qquad (2.3.59)$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

Квантлық механиканың операторларының меншикли мәнислериниң спектри. Квантлық механикандағы операторлардың меншикли мәнислерин табыў проблемаларының физикалық мазмуны 3.6-параграфта қарап өтиледи. Бул математикалық мәселедей болып көринетуғын мәселениң квантлық механикандағы оғада үлкен әҳмийетин айқын көрсетеди.

Операторлардың меншикли мәнислериниң спектрин табыў ҳаққындағы мәселелердиң бир қатарын қарап өтемиз.

1. Координата операторы x тың меншикли мәнислериниң спектри үзликсиз спектр болып табылады. Ҳақыйқатында да бул оператордың толқын функциясына тәсири оны координатаға көбейтиўге алып келеди. Сонлықтан $\hat{x}$ операторының меншикли мәнисин табыў бойынша мәселениң -теңлемеси

$$\hat{x}\Psi = x\Psi \qquad (2.3.60)$$

түрине ийе болады. Бул $\hat{x} = x$ операторлық теңликке сәйкес келеди. Бул теңлик координата x тың $x \in (-\infty, +\infty)$ мәниси ушын орынланады. Тап усындай жуўмақларды $\hat{y}$ ҳәм $\hat{z}$ операторлары ушын да аламыз.

2. Импульстиң проекциясы болған $\hat{p}_x$ операторының спектри де үзликсиз спектр болып табылады. Ҳақыйқатында да бундай оператордың меншикли мәнислерин табыў мәселесин шешиў

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \Psi \qquad (2.3.61)$$

биринши тәртипли дифференциал теңлемесин шешиўге алып келинеди. Буннан p_x тың мүмкин болған мәнислерин табыў мүмкин.

p_x тың барлық мәнислери ушын (2.3.61)-теңлемениң шешими

$$\Psi = C\, exp\left(i \frac{p_x x}{\hbar}\right) \qquad (2.3.62)$$

регулярлылықтың стандарт шәртлерин қанаатландыратуғын Ψ функциясын анықлайды. Сонлықтан $\hat{p}_x$ операторының меншикли мәнислери -∞ тен +∞ ке шекемги үзликсиз спектрди пайда етеди. Тап усындай 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 көрсетиў мүмкин. Бул спектрди анықлаў ушын сфералық координаталар системасының поляр координатасын z көшери бағытында жайластырамыз. Бундай жағдайда (3.36)-аңлатпа тийкарында $\hat{L}_z$ операторының меншикли мәнислерин табыў ушын

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} = L_z\Psi \tag{2.3.63}$$

биринши тәртипли дифференциал теңлемесин жазамыз. Бул тенлемениң улыўмалық шешими былайынша жазылады

$$\Psi = C\,exp\left(i\frac{L_z\varphi}{\hbar}\right). \tag{2.3.64}$$

$\hat{L}_z$ операторының меншикли функциялары бир мәнисли функциялар болып табылады. Ал мүйешлик координата φ цикллық өзгериўши болғанлықтан, онда бир мәнислик шәрти оның дәўирлилик шәртине алып келинеди: $\Psi(\varphi + 2\pi) = \Psi(\varphi)$. (2.3.64)-функция ушын бул шәртти орынлап

$$\exp\left[i\frac{L_z(\varphi + 2\pi)}{\hbar}\right] = \exp\left(i\frac{L_z\varphi}{\hbar}\right)$$

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 $m = 0, \pm1, \pm2, \dots$

Солай етип $\hat{L}_z$ операторы ушын меншикли мәнислердиң дискрет спектрин аламыз:

$$L_z = m\hbar, \qquad m = 0, \pm1, \pm 2, \dots \tag{2.3.65}$$

Бул меншикли мәнислер $\hat{L}_z$ операторының

$$\Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi) \tag{2.3.66}$$

меншикли функцияларының бар екенлигин көрсетеди. Бул аңлатпадағы константаның мәниси $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

$$\int_0^{2\pi} \Psi_m^* \Psi dV = 1$$

нормировка шәртинен сайлап алынған.

4. Импульс моментиниң квадраты операторының ($\hat{L}^2$ операторының) меншикли функциялары менен меншикли мәнислерин табыў ушын

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

тенлемесин (3.36)-формуланы есапқа алған ҳалда сфералық координаталар системасында жазыўымыз керек. Бундай жағдайда алынған теңлеме

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] = L^2\Psi \qquad (2.3.67)$$

түрине ийе болады. Бул теңлемени шешиў ушын ҳәзирги заман программалаў тиллерин (мысалы Mathematica 8.0 тилин) ямаса арнаўлы функцияларды пайдаланыў менен әмелге асырылады. Мәселени аналитикалық шешиўдиң 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)-теңлеме тек

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \qquad (2.3.68)$$

мәнислери ушын шешимлерге ийе болады. Бул формулада l = 0, ±1, ±2,...

(2.3.68)-аңлатпада ҳәр бир меншикли мәниске ҳәр қыйлы болған $2l + 1$ дана меншикли функциялар сәйкес келеди. Ол функциялар мәниси $m =$ 0, ±1, ±2, ..., $\pm l$ болған пүтин санларға тең параметрди бериў менен айырылып алынады. Яғный $\hat{L}^2$ операторының ҳәр бир меншикли мәниси $2l + 1$ айныў санына тең деген сөз.

(2.3.67)-теңлемени шешиўден алынған $\hat{L}^2$ операторының меншикли функциялары

$$\Psi_{l,m} = Y_{l,m}(\theta,\varphi) \qquad (2.3.69)$$

түрине ийе болады. $Y_{l,m}$ функциялары арнаўлы функциялар классына киреди 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

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},\quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,cos\theta,\quad Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,sin\theta\exp(\pm i\varphi);$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\,cos^2\theta - 1),\quad Y_{2,\pm1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,cos\theta\sin\theta\,\exp(\pm i\varphi)\,; \qquad (2.3.70)$$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{5}{32\pi}}\,sin^2\theta\,\exp(\pm i2\varphi).$$

5. Толық энергия операторы $\widehat{H}$ операторының меншикли мәнислериниң спектрин табыў ҳаққындағы мәселе бөлекше қозғалатуғын потенциаллық күш майданының айқын түрин бериў менен әмелге асырылады. Бул мәселелердиң бир нешеўи 4-бапта стационар квантлық ҳалларды таллаўдың барысында шешиледи. Бул мәселелерде Шредингер теңлемесиниң шешими $\widehat{H}$ гамильтонианның 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 өлшеўдиң 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 $\widehat{\Phi}$ тың тек меншикли мәнислери ғана алынады деп тастыйықлайды.

Квантлық механиканың бул әҳмийетли нәтийжеси теория менен усы теорияны эксперименталлық тексерип көриўдиң мүмкиншиликлери ҳаққындағы байланысты орнатады. Теорияның математикалық аппараты физикалық шамалар ушын операторларды пайдаланып ҳәр қыйлы квантлық системалардағы физикалық шамаларды өлшеўлердиң нәтийжелерин болжаўға мүмкиншилик береди. Теорияның бул жуўмақларын экспериментте тексерип көриў мүмкин.

Мысалы, жоқарыдағы параграфта табылған $\hat{L}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторларының меншикли мәнислериниң спектрин пайдаланып атомлардың орбиталық импульс моментин өлшегенде

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)},\quad l = 1, 2, 3, \ldots$$

жыйнағының ишинен $L = \sqrt{L^2}$ мәниси алынады деп тастыйықлаўға болады. Ал магнит майданының жәрдеминде белгиленген z бағытындағы импульс моментлериниң проекцияларының мәнислерин өлшегенде

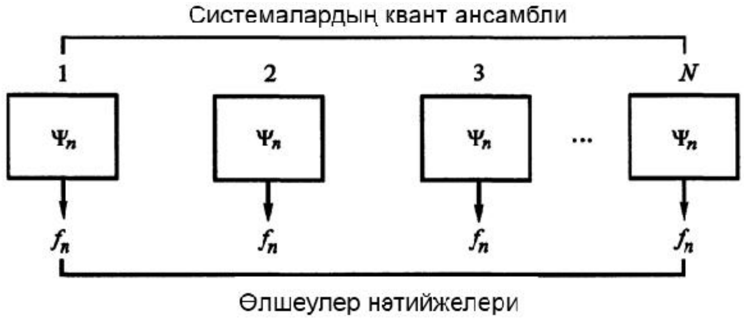
$$L_z = m\hbar,\qquad m = 1, 2, \ldots$$

шамаларына тең мәнислер алынады.

Водород атомы ҳаққындағы квантлық механиканың мәселелерин дәл шешкенде (бул мәселе 5-бапта қарап өтиледи) тап усындай жуўмақларға алып келинеди. Бундай жағдайдағы атомдағы l ҳәм m пүтин мәнислерине ийе параметрлер атомдағы электронның ҳалын характерлейтуғын квантлық санлар деп аталады.

Ψ толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын квантлық ҳалда сәйкес келетуғын f физикалық шамасы өлшенетуғын болсын. Ондай жағдайда $\widehat{\Phi}$ операторының қайсы f_n мәниси өлшеўдиң нәтийжесинде алынады деген сораў бериледи. Бул сораўға берилетуғын жуўап барлық квантлық механиканың тийкарында итималлық интерпретациясының жататуғынлығын тастыйықлайды

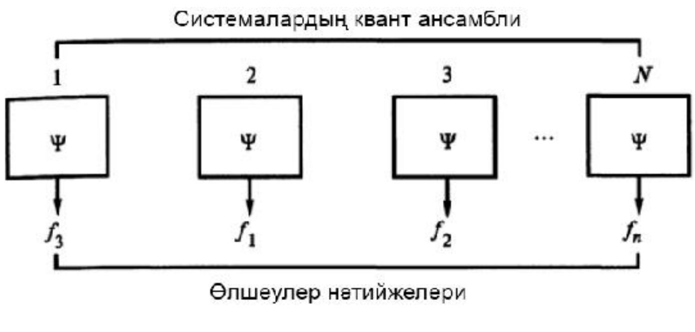
Егер квантлық системадағы бөлекшениң ҳалы $\widehat{\Phi}$ операторының меншикли функциясы болған Ψ_n толқын функциясы менен тәрийипленетуғын болса, онда бул квантлық ҳалда f физикалық шамасы f_n шамасына тең белгили мәниске ийе болады. Бул жағдай мынаны аңлатады: Егер бирдей болған көп санлы квантлық системалар берилген болса (2.3.4-сүўрет) ҳәм бул системаларда бир биринен парқы жоқ бөлекшелер бирдей квантлық ҳалларда туратуғын болса (системалардың усындай жыйнағын квантлық ансамбл деп атаймыз), онда бул ансамблдиң ҳәр қыйлы системаларында f физикалық шамасын өлшегенде биз барлық ўақытта да f_n шамасын аламыз.



2.3.4-сүўрет.

Системалардың квантлық ансамбли.

Бирақ толқын функциясы $\widehat{\Phi}$ операторының меншикли функциясы емес жағдайдың да орын алыўы мүмкин. 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 $\widehat{\Phi}$ 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-сүўрет). Бундай жағдайда f_n шамасының ҳәр бир мәниси белгили бир P_n итималлығы менен табылады.



2.3.5-сүўрет.

Квантлық ансамблниң ҳәр қыйлы системаларда өткерилген өлшеўлер ҳәр қыйлы болған f_1, $f_2, \dots, f_n$ мәнислерин береди

f шамасы анық мәниске ийе болмайтуғын системаларда оның орташа мәнисин табыў ақылға муўапық келеди. Бул шаманың орташа мәниси көп сандағы өлшеўлер өткергендеги өлшеўлер нәтийжелериниң математикалық күтилиўи (математическое ожидание) болып табылады

$$\langle f \rangle = \sum_n P_n f_n \,. \qquad (2.3.71)$$

(2.3.71)-аңлатпадағы P_n итималлығын есаплаў ушын Ψ толқын функциясын $\widehat{\Phi}$ операторының меншикли мәнислери болған Ψ_nтолық системасы бойынша қатарға жайыў керек болады, яғный былайынша көрсетиледи

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n . \qquad (2.3.72)$$

Усындай етип қатарға жайыўдың барлық ўақытта да мүмкин екенлигин ҳәм бул қатардағы коэффициентлердиң төмендеги формулалар бойынша есапланатуғынлығын еске саламыз:

$$C_n = \int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi dV . \qquad (2.3.73)$$

(2.3.72)-қатар ықтыярлы квантлық халдың f физикалық шамасының белгили бир мәнисине ийе квантлық ҳаллардыан туратуғынлығын көрсетеди. Сонлықтан биз излеп атырған итималлық P_n ниң мәниси (2.3.72)-қатардағы коэффициентлерге сәйкес келиўши модульдиң квадраты $|C_n|^2$ шамасына тең болады.

$$\langle f \rangle = \sum_n P_n f_n = \sum_n |C_n|^2 f_n . \qquad (2.3.74)$$

(2.3.73)-аңлатпаны есапқа алған ҳалда (2.3.74)-аңлатпаны есаплаўлар жүргизиў ушын қолайлы болған түрге алып келемиз. Бундай жағдайда

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n C_n^* f_n = \sum_n C_n f_n \int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi dV = \sum_n C_n \int_{\Re^N} \Psi_n^* f_n \Psi_n dV .$$

$\widehat{\Phi}$ операторының меншикли функциялары менен меншикли мәнислериниң қәсийетлери бойынша

$$f_n \Psi_n = \widehat{\Phi} \Psi_n .$$

Сонлықтан

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n \int_{\Re^N} \Psi^* (\widehat{\Phi} \Psi_n) dV = \int_{\Re^N} \Psi^* \left(\sum_n C_n \widehat{\Phi} \Psi_n \right) dV .$$

$\widehat{\Phi}$ операторының сызықлы 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. Сонлықтан квантлық системаның Ψ толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалында f физикалық шамасының орташа мәнисин есаплаў ушын

$$\langle f\rangle = \int\limits_{\Re^N} \Psi^*(\widehat{\Phi}\Psi)dV \qquad (2.3.75)$$

түриндеги формуланы аламыз.

(2.3.75)-формуланың әҳмийетин есапқа алып, оны квантлық механиканың төртинши постулаты деп те атайды.

Егер Ψ = Ψ_n теңлиги орынланатуғын болса, онда (2.3.75)-формуладан

$$\langle f\rangle = \int\limits_{\Re^N} \Psi_n^*(\widehat{\Phi}\Psi)dV = \int\limits_{\Re^N} \Psi_n^* f_n \Psi_n dV = f_n \int\limits_{\Re^N} \Psi_n^*\Psi_n dV = f_n$$

аңлатпасының келип шығатуғынлығын атап өтемиз.

Солай етип квантлық механика квантлық объекттиң анаў ямаса мынаў қәсийетиниң потенциаллық мүмкиншиликлерине санлық түрде баҳа бере алады екен. Квантлық механиканда анаў ямаса мынаў өлшеў нәтийжесиниң итималлығы тек белгили бир объектке тийисли болса да, бул итималлықтың санлық мәнисин экспериментте анықлаў ушын бирдей бөлекшелерден туратуғын коллективте (ансамблде) өлшеў жумысларын көп рет қайталаў керек болады.

Физикалық қубылысларды тап усындай етип тәрийиплеў классикалық теориядағы тәрийиплеўден принципиаллық жақтан басқаша болады. Сонлықтан квантлық механика қәлиплескен дәўирлерде бул әдеттегидей емес революциялық идеяларды көп санлы белгили физиклердиң өзлери де түсинбеди. Бундай физиклердиң қатарына А.Эйнштейнди де киргизиў мүмкин.

3.5-**мәселе**. $\widehat{\Phi}$ операторы ўақыттан ғәрезсиз деп есаплап f физикалық шамасының орташа мәнисиниң ўақыттың өтиўи менен өзгериўиниң тезлигин анықлаңыз.

Шешими:

$$\langle f\rangle = \int\limits_{\Re^N} \Psi_n^*(\widehat{\Phi}\Psi)dV$$

болғанлықтан

$$\frac{d\langle f\rangle}{dt} = \int\limits_{\Re^N} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}(\widehat{\Phi}\Psi)dV + \int\limits_{\Re^N} \Psi^*\left(\widehat{\Phi}\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right)dV.$$

Ψ функциясының эволюциясы Шредингер теңлемесиниң жәрдеминде табылатуғынлығын есапқа алып

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi \quad \text{ҳәм} \quad i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = \widehat{H}\Psi^*$$

екенлигин табамыз. Сонлықтан

$$\frac{d\langle f\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\int\limits_{\Re^N} \left(\widehat{H}\Psi^*\right)(\widehat{\Phi}\Psi)dV - \int\limits_{\Re^N} \Psi^*(\widehat{\Phi}\,\widehat{H}\,\Psi)dV\right].$$

$\widehat{\Phi}$ ҳәм $\widehat{H}$ операторлары Эрмит операторлары болғанлықтан жоқарыдағы теңликтиң оң тәрепиндеги биринши интегралды

$$\int_{\Re^N}(\widehat{H}\Psi^*)(\widehat{\Phi}\Psi)dV = \int_{\Re^N}(\widehat{\Phi}\Psi)\big(\widehat{H}\Psi\big)^* dV = \int_{\Re^N}\Psi^*(\widehat{H}\widehat{\Phi}\Psi)dV$$

түрге түрлендириў мүмкин. Демек

$$\frac{d\langle f\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\int_{\Re^N}\Psi^*\big[\big(\widehat{H}\widehat{\Phi} - \widehat{\Phi}\widehat{H}\big)\Psi\big]dV.$$

Бул аңлатпа физикалық шаманың орташа мәнисинен алынған ўақыт бойынша туўындыны базы бир оператордың орташа мәниси сыпатында көрсетиўдиң мүмкин екенлиги көрсетеди. Бул операторды $\widehat{\Phi}$ операторынан ўақыт бойынша алынған туўынды деп атайды. Солай етип ўақыттан айқын түрде ғәрезли емес $\widehat{\Phi}$ операторы ушын

$$\frac{d\widehat{\Phi}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\big(\widehat{H}\widehat{\Phi} - \widehat{\Phi}\widehat{H}\big) = \frac{i}{\hbar}\big[\widehat{H},\widehat{\Phi}\big].$$

Буннан мынадай әҳмийетли жуўмақ келип шығады: Егер базы бир f физикалық шаманың операторы $\widehat{\Phi}$ ўақыттан айқын түрде ғәрезсиз ҳәм гамильтониан $\widehat{H}$ пенен коммутацияланатуғын болса, онда бул физикалық шаманың орташа мәниси $\langle f\rangle$ ўақытқа байланыслы өзгермейди. Классикалық механикадағы сыяқлы квантлық механиканда да бундай шамаларды ҳәр қыйлы сақланыў нызамларына сәйкес келиўши қозғалыс интеграллары деп атайды.

2-3-7. Ҳәр қыйлы физикалық шамаларды бир ўақытта өлшеў

Базы бир квантлық системадағы ҳәр қыйлы болған еки физикалық шаманы бир ўақытта дәл өлшеў квантлық механикандағы әҳмийетли мәселелердиң бири болып табылады. Усындай бақланатуғын шамалар сыпатында бөлекшениң координатасы менен импульсиниң проекциясын, бөлекшениң потенциал энергиясы менен кинетикалық энергиясын, импульс моментиниң ҳәр қыйлы болған еки қураўшысын ҳәм басқаларды көрсетиў мүмкин. Усындай еки шаманы бир ўақытта дәл өлшеў бойынша экспериментти шөлкемлестириў мүмкин 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 коймады деп есаплаймыз

Биз жоқарыдағы параграфта әҳмийетли жуўмақ шығарып едик. Оның мәнисин былайынша түсиндиремиз: қандай да бир a физикалық шамасының мәниси тек сондай системада дәл өлшенеди, егер бул система сәйкес $\hat{A}$ операторының меншикли функцияларының биреўи болған толқын функциясы менен тәрийипленетуғын болса. Бирақ соны да есапқа алыў керек, усындай квантлық халда басқа бир b физикалық шамасының дәл өлшениўи шәрт емес. Усы a ҳәм b

физикалық шамаларының мәнислерин бир ўақытта дәл өлшеў мүмкин, егер оларға сәйкес келиўши $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторлары улыўмалық меншикли функциялар системасына ийе болатуғын болса.

Егер $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторлары улыўмалық меншикли функциялар системасына ийе болатуғын болса олар арасында базы бир коммутациялық қатнаслардың орын алатуғынлығын ҳәм операторлардың толқын функциясына избе-из тәсир етиўиниң нәтийжесиниң оларды пайдаланыўдың избе-излигинен ғәрезсиз екенлигин көрсетемиз. Мейли Ψ_n функциялары $(n = 1, 2, \ldots)$ $\hat{A}$ операторының да, $\hat{B}$ операторының да меншикли функциялары болсын. Бундай жағдайда төмендегидей қатнаслар орынланады:

$$\hat{A}\big(\hat{B}\Psi_n\big) = \hat{A}(b_n\Psi_n) = b_n\big(\hat{A}\Psi_n\big) = b_n a_n \Psi_n,$$
$$\hat{B}\big(\hat{A}\Psi_n\big) = \hat{B}(a_n\Psi_n) = a_n\big(\hat{B}\Psi_n\big) = a_n b_n \Psi_n\,.$$

Бул аңлатпаларда a_n ҳәм b_n арқалы $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының улыўмалық болған Ψ_n меншикли функциясына сәйкес келиўши меншикли мәнислери белгиленген. Буннан

$$\hat{A}\big(\hat{B}\Psi_n\big) = \hat{B}\big(\hat{A}\Psi_n\big)$$

екенлигине ийе боламыз. Қәлеген Ψ толқын функциясын оның меншикли функцияларының сызықлы комбинациясы $\Psi = \sum_n C_n\Psi_n$ түринде көрсетиў мүмкин болғанлықтан квантлық механикандағы операторлардың сызықлылығынан қәлеген толқын функциясы ушын

$$\hat{A}\big(\hat{B}\Psi\big) = \hat{B}\big(\hat{A}\Psi\big) \qquad (2.3.76)$$

коммутациялық қатнасының орынланатуғынлығы келип шығады. Бул коммутациялық қатнасты операторлық формада былайынша жазамыз:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \text{ ямаса } \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \qquad (2.3.77)$$

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ айырмасын $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының коммутаторы деп атайды ҳәм әдетте

$$\big[\hat{A}, \hat{B}\big] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad (2.3.78)$$

символы жәрдеминде белгилейди. Коммутаторы нолге тең еки операторды коммутацияланыўшы операторлар деп атайды.

Солай етип биз квантлық механиканың әҳмийетли 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 [яғный олар ушын (2.3.77)-қатнасының орынланыўы керек].

Демек операторлардың коммутацияланыўшылығы оларға сәйкес келиўши физикалық шамаларды бир ўақытта дәл өлшеўдиң мүмкин екенлигиниң белгиси болып табылады екен. Ал керисинше, еки оператордың коммутацияланбаўы оларға сайкес келетуғын еки физикалық шаманы бир ўақытта дәл өлшеўдиң мүмкин емес екенлигин аңғартады.

Усы қағыйда жәрдеминде бөлекшениң координатасы x пенен импульсиниң проекциясы болған p_x шамаларын бир ўақытта дәл өлшеўге болатуғынлығын ямаса болмайтуғынлығын 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

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0 \qquad (2.3.79)$$

екенлигин көрсетеди. Сонлықтан бөлекшениң координатасы x пенен импульсиниң проекциясы болған p_x шамаларын бир ўақытта дәл өлшеўге болмайды. Бул жуўмақ Гейзенбергтиң анықсызлық принципи тийкарында исленген жуўмақ пенен тәр сәйкес келеди (2.3-параграф).

Кинетикалық энергия менен потенциал энергия операторларының коммутацияланбайтуғынлығына аңсат көз жеткериўге болады. Толық энергия операторы болған $\widehat{H}$ операторын

$$\widehat{H} = \widehat{E}_K + \widehat{U}$$

кинетикалық $\widehat{E}_K$ ҳәм потенциал $\widehat{U}$ энергияларының қосындысынан туратуғын болса да квантлық системада системаның толық энергиясы кинетикалық ҳәм потенциал энергиялардың қосындысынан турады деп айтыўға болмайды. Бул жағдай қозғалыўшы бөлекшениң кинетикалық энергиясы менен потенциал энергиясын бир ўақытта дәл өлшеўге болмайды дегенди аңғартады. Сонлықтан бир ўақытта кинетикалық ҳәм потенциал энергияларын өлшеў жолы менен бөлекшениң толық энергиясын анықлаў мүмкин емес.

Квантлық механиканда математикалық объектлерге ҳәм сол объектлер үстинен исленетуғын операцияларға физикалық объектлердиң ҳәм олардың қозғалысларын басқаратуғын физикалық нызамлардың сәйкес келетуғынлығын және бир рет атап өтемиз. Белгили физик-теоретик А.В.Фок өзиниң "Квантлық механиканың басламалары" китабында квантлық механиканың математикалық тилин физика тилине аўдарыўдың сөзлигин келтирди. Мысал ретинде сол сөзликтен төмендегидей үзинди келтиремиз:

Математика	Физика
Ψ толқын функциясы	Квантлық бөлекшениң халы.
$\|\Psi\|^2 = \Psi^*\Psi$ модулиниң квадраты	Бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы.
$\int_{\Re^N}\Psi^*\Psi dV = 1$ нормировка шәрти	Бөлекшениң ҳақыйқатында да бар екенлиги.
Сызықлы эрмит операторы $\widehat{\Phi}$	f физикалық шамасы.
f_n меншикли мәнисине сәйкес келетуғын $\widehat{\Phi}$ операторының меншикли функциясы Ψ_n	f физикалық шамасының мәниси f_n ге тең болатуғын квантлық бөлекшениң ҳалы.
$\widehat{\Phi}$ операторының меншикли функциялары болған Ψ_n толқын функциялары бойынша қатарға	f шамасын өлшегенде f_n мәнисиниң алыныў итималлығы.

жайғандағы коэффициенттиң модулиниң квадраты	
$\int_{\Re^N}\Psi^*\hat{\Phi}\Psi dV$ интегралы	Берилген квантлық ҳалдағы f физикалық шамасының орташа мәниси (математикалық күтилиўи).
$\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының коммутацияланыўы: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$.	a ҳәм b физикалық шамаларын бир ўақытта бақлаўдың ҳәм дәл өлшеўдиң принципиаллық жақтан мүмкин екенлиги.

Бул сөзликти еле де даўам ете бериўге 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 туўынды алып тезлениўдиң векторлық операторын

$$\hat{\vec{a}} = \frac{d\hat{\vec{v}}}{dt} = \frac{1}{m}\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{m\hbar}\left[\hat{H}\hat{\vec{p}} - \hat{\vec{p}}\hat{H}\right] = \frac{1}{m}\left[\hat{H}\nabla - \nabla\hat{H}\right]$$

түринде анықлаймыз. Гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}$$

түринде жазылатуғын болғанлықтан, ал $\Delta = \nabla^2$ ҳәм ∇ операторлары коммутацияланыўшы операторлар болғанлықтан

$$\hat{\vec{a}} = \frac{1}{m}\left[\hat{U}\nabla - \nabla\hat{U}\right]$$

теңлигине ийе боламыз. Алынған коммутатордың мәнисин түсиндириў ушын олардың толқын функциясы Ψ ге тәсирин көремиз. Бундай жағдайда

$$\hat{U}(\nabla\Psi) - \nabla\left(\hat{U}\Psi\right) = U(\nabla\Psi) - \nabla(U\Psi) = -(\nabla U)\Psi$$

аңлатпаларын аламыз. Бирақ потенциал майданда $\hat{\vec{F}} = \left\{\hat{F}_x, \hat{F}_y, \hat{F}_z\right\}$ күшиниң 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 болатуғынлығын тастыйықлайды.

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

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\,\hat{L}_x\,.$$

$\hat{L}_x$ ҳәм $\hat{L}_y$ операторларының анық түрин есапқа алып декарт координаталар системасында усы операторлардың коммутаторының толқын функциясына тәсирин анықлаймыз:

$$\hat{L}_x\left(\hat{L}_y\Psi\right) - \hat{L}_y\left(\hat{L}_x\Psi\right) =$$
$$-\hbar^2\left\{\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial\Psi}{\partial x} - x\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right) - \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial\Psi}{\partial z} - z\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right)\right\} =$$
$$-\hbar^2\{y\frac{\partial\Psi}{\partial x} + yz\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial x} - yx\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial x} + zx\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial z} - zy\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial z} +$$
$$+z^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y} + xy\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} - x\frac{\partial\Psi}{\partial y} - xz\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial y} = -\hbar^2\left(y\frac{\partial\Psi}{\partial x} - x\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right) = i\hbar\hat{L}_z\Psi.$$

Солай етип биз

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\,\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z \neq 0$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлилледик.

Импульс моментиниң проекциялары операторларының басқа жуплары ушын да коммутациялық қатнасларды алыў мүмкин:

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

ҳәм

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

Бул қатнаслардың барлығы да импульс моментиниң барлық үш проекцияларының бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алмайтуғынлығын 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 коммутацияланатуғынлығын көрсетиўге болады. Демек импульс моментиниң квадраты (ямаса импульс моментиниң модули) өзиниң бир проекциясы менен ғана бир ўақытта өлшениўи мүмкин.

Бул нәтийжелер квантлық механиканда импульс моментиниң вектор түриндеги сүўретиниң жеткиликли дәрежеде шәртли характерге ийе екенлигин көрсетеди. Сонлықтан 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 алыўды усынды (Э.Шредингердиң квантлық механиканың тийкарғы теңлемесин 1926-жылы дүзгенлигин еске салып өтемиз). В.Гейзенберг усынған матрица шексиз көп қатарлардан ҳәм шексиз көп бағаналардан турады.

Квантлық механиканың усындай "матрицалық формасы" В.Гейзенбергтиң, М.Борнның, П.Иорданның ҳәм басқа да физиклердиң жумысларында бир биринен ғәрезсиз түрде раўажландырылды. Дәслепки дәўирлерде бул жумысларда ҳәтте толқынлық теория есапқа да алынбады. Тек кейинирек Э.Шредингер физикалық шамаларды операторлар ҳәм матрицалар түринде аңлатыўдың бир бирине эквивалент екенлигин көрсетти. Соның менен бирге квантлық механиканың мәселелерин шешиўде қолланылатуғын бул еки усылдың математикалық аппаратлары пүткиллей ҳәр қыйлы.

Биз енди физикалық шамалардың операторлары менен матрицалары арасындағы байланысты салыстырмалы әпиўайы жағдайлар ушын табамыз. Биз қарап атырған квантлық механика операторларының спектри дискрет деп есаплаймыз. Төменде талланатуғын барлық қатнаслар кейинирек П.Дирак тәрепинен үзликсиз спектрге ийе операторлар ушын да улыўмаластырылды.

Мейли квантлық механикандағы $\hat{A}$ операторының Ψ_n меншикли функцияларының жыйнағы болсын ($n = 1, 2, \ldots$). Эрмит операторларының меншикли функцияларының қәсийетлеринен қәлеген φ регулярлық функциясын оператордың меншикли функциялары бойынша қатарға жайыў мүмкин:

$$\varphi = \sum_n C_n \Psi_n. \tag{2.3.85}$$

Бул қатардың коэффициентлери төмендеги формула былайынша анықланады

$$C_n = \int_{\Re^N} \Psi_n^* \varphi dV\ . \tag{2.3.86}$$

Егер енди φ функциясы сыпатында f физикалық шамасының $\widehat{\Phi}$ операторының Ψ_m функциясына тәсириниң нәтийжеси болған $\widehat{\Phi}\Psi_m$ функциясы алынатуғын болса, онда (2.3.85)- ҳәм (2.3.86)-аңлатпалардан

$$\widehat{\Phi}\Psi_m = \sum_n \Phi_{nm} \Psi_n \tag{2.3.87}$$

аңлатпасы келип шығады. Бул жерде

$$\Phi_{nm} = \int_{\Re^N} \Psi_n^* (\widehat{\Phi}\Psi_m) dV\ . \tag{2.3.88}$$

Φ_{nm} шамаларын базы бир шексиз матрицаның элементлери сыпатында қараўымызға болады

$$\Phi = \begin{vmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} & \Phi_{13} & \cdots & \Phi_{1m} & \cdots \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} & \Phi_{23} & \cdots & \Phi_{2m} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \Phi_{n1} & \Phi_{n2} & \Phi_{n3} & \cdots & \Phi_{nm} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix}$$

Бул матрицаны $\hat{A}$ операторының меншикли функциялары системасындағы (ямаса A түриндеги көрсетиўдеги) $\widehat{\Phi}$ операторының (ямаса f физикалық шамасының) матрицасы деп атаймыз. Квантлық механиканда координаталық, импульслик, энергиялық ҳәм басқа да көринислер (түрлери) қолланылады.

Ҳәр бир Φ_{nm} шамасын m ҳалынан n ҳалына өтиўге сәйкес келетуғын матрицалық элемент деп атайды. Матрицалық элемент еки индекске ийе. Бириншиси n матрицаның қатарларының қатар саны, ал екинишиси m матрицаның бағаналарының қатар саны.

Φ_{nm} матрицалық элементлер ушын П.Дирак тәрепинен усынылған белгилеўлер де қолланылады

$$\langle n|\widehat{\Phi}|m\rangle \text{ ямаса } \langle n|f|m\rangle \qquad (2.3.89)$$

Бундай символды физикалық шама f тиң белгисинен (ямаса оған сәйкес келиўши $\widehat{\Phi}$ операторының белгисинен) ҳәм $|m\rangle$ және $\langle n|$ символларынан конструкцияланған символ деп қараўға болады. Ҳәр бир Ψ_m меншикли функциясын (басланғыш ҳалды) шексиз көп өлшемли кеңисликтиң базы бир $|m\rangle$ базислик векторы елеслетеди. Бул векторды кет-вектор деп атайды. Ψ_n меншикли функциясын (ақырғы ҳал) $\langle n|$ векторы елеслетеди ҳәм оны бра-вектор деп атайды. Бундай атамалар инглиз тилиндеги bracket (қаўсырма) сөзин пайда етиўши brac ҳәм ket сөзлеринен келип шыққан.

$\langle n|m\rangle$ белгилеўиниң $\langle n|\hat{I}|m\rangle$ белгилеўиниң әпиўайыластырылған жазылыўы деп қараўға болады. Бул аңлатпада $\hat{I}$ арқалы бирлик вектор белгиленген. Оның ушын $\hat{I}\Psi_n = \Psi_n$. Сонлықтан

$$\langle n|m\rangle = \int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, \text{ егер } n = m \text{ болса} \\ 0, \text{ егер } n \neq m \text{ болса.} \end{cases}$$

Солай етип А-елеслетиўде f физикалық шамасының $\widehat{\Phi}$ операторы Φ матрицасының жәрдеминде анықланады екен. Бул матрицаның элементлери Φ_{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 анықлаймыз:

1. Матрицаларды 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. Матрицаларды көбейтиў. Егер $\hat{C} = \hat{A} \cdot \hat{B}$ болса, онда $C = A \cdot B$ матрицалық элементлерин матрицаларды көбейтиў қағыйдасы

$$C_{nm} = \sum_k A_{nk} B_{km}$$

тийкарында есапланады. Бундай жағдайда матрицаларды көбейтиў де, операторларды көбейтиў сыяқлы коммутативлик емес, яғный $A \cdot B \neq B \cdot A$.

3. Матрицаларды қосыў ҳәм көбейтиў қағыйдалары анықланғаннан кейин матрицалардың ең әпиўайы функцияларын да анықлаў мүмкин. Мысалы, $\exp \Phi$ функциясы сыпатында матрицалардан туратуғын

$$\exp \Phi = 1 + \Phi + \frac{1}{2}\Phi^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\Phi^n + \cdots$$

қатарын түсиниў керек.

Квантлық механикандағы физикалық шамалардың Гейзенберг матрицасының бир әҳмийетли қәсийетин атап өтемиз. Егер $\widehat{\Phi}$ матрицасының Φ_{nm} матрицалық элементлерин өзиниң меншикли Ф-елеслетиўинде анықлайтуғын болсақ, онда $\widehat{\Phi}\Psi_m = f_m \Psi_m$ ҳәм (1.38)-аңлатпадан

$$\Phi_{nm} = \langle n|\widehat{\Phi}|m\rangle = \int_{\Re^N} \Psi_n^* \widehat{\Phi} \Psi_m dV = f_m \int_{\Re^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = f_m \delta_{nm}$$

аңлатпасын аламыз Бул аңлатпа $\widehat{\Phi}$ операторының матрицасының өзиниң меншикли елеслетиўинде диагоналлық матрица болып табылатуғынлығын аңғартады. Демек бул матрицаның $n = m$ элементлеринен басқа элементлериниң барлығының да нолге тең екенлигин аңғартады. Соның менен бирге бул диагоналлық элементлер $\widehat{\Phi}$ операторының меншикли мәнислери болып табылады.

Солай етип квантлық механиканың $\widehat{\Phi}$ операторының меншикли мәнислерин анықлаў ҳаққындағы әҳмийетли мәселеси матрицалық формулировкада диагоналлық түрге алып келетуғын матрицаның түрлендирилиўин табыў болып табылады екен.

Квантлық механикан матрицалық формада елеслеткенде (матрицалық 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 умытпаў керек. Квантлық механиканың бул теңлемелеринде физикалық шамалар сәйкес матрицалар менен алмастырылған.

Базы бир жағдайларда квантлық механиканың мәселелерин матрицалық усылда шешиў операторлық усылда шешкенге салыстырғанда қолайлырақ болады. Бирақ биз курсымызда квантлық механиканың мәселелерин шешкенимизде квантлық механиканың тек операторлық формасынан, яғный толқын функциясын ҳәм Шредингердиң толқынлық теңлемесин пайдаланамыз. Квантлық механиканың бир қатар мәселелерин матрицалық формада шешиўге мысалларды теориялық физика ямаса квантлық механика бойынша оқыў қолланбаларында табыўға болады.

2-4-1. Стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси

Ўақытқа ийе

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \qquad (2.4.1)$$

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 ўақыттың функциясы болған $\Psi(x,y,z,t)$ функциясын табыўға мүмкиншилик береди. Нәтийжеде бөлекшени кеңисликтиң қәлеген ноқатында қәлеген ўақыт моментинде табыўдың итималлығының тығызлығы есапланады. Нәтийжеде күш майданында қозғалыўшы бөлекшениң квантлық ҳалды тәрийиплеў мүмкиншилиги туўылады.

Квантлық механикада күш майданындағы қозғалыс ҳаққындағы мәселелердиң пүтин классы бар болып, бундай мәселелерде $\Psi(x,y,z,t)$ толқын функциясы ўақыттан ғәрезли емес болады. Сонлықтан $\Psi(x,y,z,t) \equiv \Psi(x,y,z)$ теңлиги орынланады. Бундай күш майданларын стационар күш майданлары деп атаймыз ҳәм бундай ўақытлары $U(x,y,z)$ күш функциясы бөлекшениң потенциал энергиясы мағанасына ийе болады. Стационар майданларда квантлық система энергия E ниң белгили бир мәнисине ийе ҳалларда тура алады. Бундай ҳалларды стационар ҳаллар деп атаймыз. Ал усындай ҳалларда туратуғын бөлекшелердиң қозғалысы ҳаққындағы мәселелерди квантлық механиканың стационар мәселелери деп атайды. Квантлық системалардың стационар ҳалларын таллаўға усы бап арналған.

Стационар ҳалға сәйкес келиўши толқын функциясының улыўмалық түрин табамыз. (2.4.1)-теңлемедеги $\hat{H}$ операторы анық ўақыттан ғәрезсиз болғанлықтан $\Psi(x,y,z,t)$ толқын функциясын еки функцияның көбеймеси түринде жазыўға болады

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\varphi(t). \qquad (2.4.2)$$

Бул функциялардың бири $\psi(x,y,z)$ тек координатадан, ал екиншиси $\varphi(t)$ тек ўақыттан ғәрезли. (2.4.2) функциясын (2.4.1)-теңлемеге қойып ҳәм буннан кейин теңлемениң еки бөлимин де $\psi(x,y,z)\varphi(t)$ көбеймесине бөлсек

$$\frac{i\hbar}{\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\psi}\hat{H}\psi \qquad (2.4.3)$$

теңлемесин аламыз. (2.4.3)-теңлемениң шеп тәрепи тек ўақыттан, ал оң тәрепи тек координаталардан ғәрезли. Егер теңлемениң оң ҳәм шеп тәреплери турақлы шамаға тең болса бундай теңликтиң орынланыўы мүмкин. Бул турақлы шаманы E арқалы белгилеймиз. Усындай жоллар менен (2.4.3)-теңлемеден еки теңлеме аламыз. Олардың биреўи $\psi(x,y,z)$ функциясы, ал екиншиси тек $\varphi(t)$ функциясы ушын. Оларды былайынша жазамыз:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \qquad (2.4.4a)$$

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = E\psi. \quad (2.4.4b)$$

(2.4.4a) теңлемеси толық энергия операторының (яғный $\widehat{H}$ гамильтонианның) меншикли функцияларын ҳәм меншикли мәнислерин анықлайды. Сонлықтан E шамасы квантлық механикалық системаның толық энергиясы болып табылады. (2.4.4a) теңлемесин $\widehat{H}$ 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 мәнислери бөлекшениң потенциал энергиясы болған $U(x, y, z)$ функциясының айқын түринен ғәрезли. 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 таллаўға 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 φ_0 арқалы базы бир константа белгиленген. Улыўмалықты жойтпастан $\varphi_0 = 1$ деп есаплаў мүмкин. Себеби $\varphi(t)$ функциясы барлық аңлатпаларға тек $\psi(x, y, z)$ функциясы менен көбейме түринде қатнасады. Соның менен бирге $\psi(x, y, z)$ функциясының өзи турақлы көбейтиўши дәллигинде анықланады. Соның ушын $\varphi(t)$ функциясы ушын және де бир ықтыярлы алынған турақлыны киргизип отырыўдың 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 ғәрезли екенлиги көринип тур

$$\omega = \frac{E}{t}.$$

Бул нәтийже дәслеп еркин бөлекше ушын қолланылған де Бройлдиң $E = \omega\hbar$ формуласының бөлекше стационар күш майданында қозғалғанында да дурыс екенлигин көрсетеди.

Стационар ҳаллар ушын бөлекшениң турған орнын табыўдың итималлығының тығызлығының ўақыттан ғәрезсиз екенлигин атап өтемиз. Ҳақыйқатында да

$$\omega = |\Psi(x,y,z,t)|^2 = |\psi(x,y,z)|^2 \left|e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\right|^2 = \\ = |\psi(x,y,z)|^2 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{i\frac{E}{\hbar}t} = |\psi(x,y,z)|^2. \quad (2.4.9)$$

Стационар ҳалларда итималлықлар ағысының тығызлығы векторының да, физикалық шамалардың орташа мәнислериниң де ўақыттан ғәрезсиз екенлигин көрсетиўге болады.

(2.4.9)-формуланы есапқа алғанда толқын функциясының нормировка шәрти

$$\int_{\Re^N} |\Psi(x,y,z,t)|^2 dV = 1$$

мынадай түрге енеди

$$\int_{\Re^N} |\psi(x,y,z)|^2 dV = 1. \quad (2.4.10)$$

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 ғәрезли емес физикалық шаманың орташа мәнисиниң турақлы шама болатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими: Операторы Â ўақыттан ғәрезсиз болған *a* шамасын қараймыз. (3.75)-аңлатпаға сәйкес орташа мәнис <*a*>

$$\langle a \rangle = \int_{\Re^N} \Psi^*(x,y,z,t) \hat{A} \Psi(x,y,z,t) dV$$

аңлатпасының жәрдеминде бериледи. (2.4.8)-толқын функциясының түрин есапқа алған ҳалда

$$\langle a \rangle = \int_{\Re^N} \psi(x,y,z) e^{i\frac{E}{\hbar}t} \hat{A} \psi(x,y,z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dV$$

аңлатпасын аламыз. Â операторы ўақыттан анық түрде ғәрезсиз болғанлықтан ўақытлық көбейтиўши $e^{i\frac{E}{\hbar}t}$ шамасын қаўсырмадан сыртқа шығарыў мүмкиншилигин береди

$$\langle a \rangle = \int_{\Re^N} \psi(x,y,z) e^{i\frac{E}{\hbar}t} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \hat{A} \psi(x,y,z) dV.$$

$e^{i\frac{E}{\hbar}t} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = 1$ теңлиги орынланатуғын болғанлықтан ақыр-аяғында

$$\langle a\rangle = \int\limits_{\Re^N} \psi(x,y,z)\hat{A}\psi(x,y,z)dV$$

аңлатпасын аламыз.

Солай етип орташа мәнис ўақыттан ғәрезсиз болып шығады екен.

4.2-**мәселе**. Егер бөлекше стационар ҳалда турса ҳәм дискрет спектрге ийе болса, онда оның импульсиниң орташа мәниси $<p_x>$ 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 төмендегидей коммутациялық байланыстың бар екенлигин көрсетип өтемиз

$$\left[\hat{H},\hat{x}\right] = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x.$$

$\left[\hat{H},\hat{x}\right]$ коммутаторы менен базы бир ψ функциясына тәсир етемиз

$$\begin{gathered}\left[\hat{H},\hat{x}\right]\psi = \hat{H}(\hat{x}\psi) - \hat{x}\left(\hat{H}\psi\right) = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) + Ux\psi - x\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U\psi\right) = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) + x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}.\end{gathered}$$

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi) = 2\frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ екенлигин есапқа алып

$$\left[\hat{H},\hat{x}\right]\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(2\frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) + \frac{\hbar^2}{2m}x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{i\hbar}{m}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x\psi$$

аңлатпасына, яғный $\left[\hat{H},\hat{x}\right]\psi = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x\psi$ екенлигине ийе боламыз. Буннан

$$\hat{p}_x = \frac{im}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{x}\right]$$

екенлиги келип шығады.

Енди импульс проекциясы $<p_x>$ шамасының орташа мәнисин табамыз. ψ толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын ҳалдағы физикалық шаманың орташа мәниси

$$\langle p_x\rangle = \int\limits_{\Re^N} \psi^*\hat{p}_x\psi dx$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпаға $\hat{p}_x$ операторы ушын аңлатпаны қойсақ

$$\langle p_x\rangle = \frac{im}{\hbar}\int\limits_{\Re^N}(\psi^*\hat{H}\hat{x}\psi - \psi^*\hat{x}\hat{H}\psi)dx = \frac{im}{\hbar}\int\limits_{\Re^N}(\psi^*\hat{H}x\psi - \psi^*x\hat{H}\psi)dx$$

аңлатпасына ийе боламыз. Енди $\hat{H}$ операторының эрмитли екенлигинен, яғный

$$\int_{\Re^N} \psi_1^* \hat{H}\psi_2 dx = \int_{\Re^N} \psi_2 (\hat{H}\psi_1)^* dx$$

екенлигинен пайдаланамыз. Бул аңлатпаларда ψ_1 ҳәм ψ_2 лер арқалы жүдә кең класстағы ықтыярлы функциялар белгиленген. Бул функциялардың интегралланыўы ҳәм интегралланыў шегараларында нолге тең болыўы керек. $\hat{H}$ операторының Эрмитли екенлигин есапқа алсақ

$$\langle p_x \rangle = \frac{im}{\hbar} \int_{\Re^N} \left[x\psi(\hat{H}\psi)^* - x\psi^* \hat{H}\psi \right] dx$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бөлекшениң ҳалы стационар болғанлықтан

$$\hat{H}\psi = E\psi \text{ ҳәм } (\hat{H}\psi)^* = (E\psi)^* = E\psi.$$

Солай етип

$$\langle p_x \rangle = \frac{im}{\hbar} \int_{\Re^N} (xE\psi\psi^* - xE\psi\psi^*) dx = 0.$$

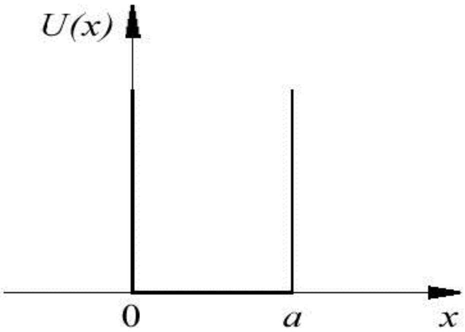
2-4-2. Өткермейтуғын дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше

Квантлық механиканың стационар мәселелерин қараўды таллаў ушын ең әпиўайы болған мәселеден баслаймыз. Бул мәселе өткермейтуғын дийўалларға ийе (яғный 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 өзгешеликлери [энергияның квантланыўы, энергия қәддилериниң азғыныўы (вырождение энергетических уровней) ҳәм басқалар)] шекли тереңликке ийе потенциал шуқыр ушын да қарап өтиледи

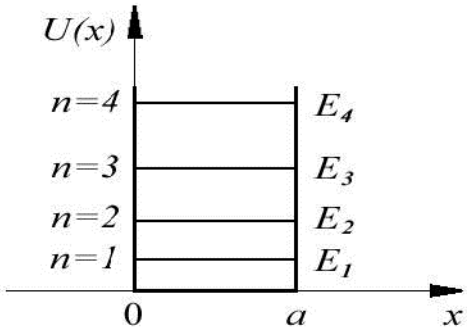
Бир өлшемли потенциал шуқыр. Бир өлшемли дийўалларының бийиклиги шексиз туўры мүйешли потенциал қутыдағы бөлекшени қараймыз. Бул жағдайда бөлекшениң энергиясы $U(x)$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x < a \end{cases}$$

шамаларына тең болады. Шуқырдың ишинде $U(x)$ тың шамасы турақлы ҳәм нолге тең, ал шуқырдың сыртларында шексизликке айланады. (2.4.1-сүўрет).



4.1-сүўрет.



4.2-сүўрет.

Бөлекшениң x көшери бағытындағы бир өлшемли қозғалысы ушын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0. \qquad (2.4.11)$$

Потенциал шуқырдың сыртында потенциал энергия шексизликке айланатуғын болғанлықтан (2.4.11)-теңлемениң орынланыўы ушын $\psi(x)$ функциясының нолге айланыўы керек, яғный $\psi(x) \equiv 0$. Бул жағдай диййаллары шексиз бийик болған шуқырдан бөлекшениң шыға алмайтуғынлығын аңғартады (демек бундай шуқырдың диййаллары арқалы бөлекше өте алмайды деген сөз). Үзликсизлик шәрти шуқырдың шегараларында толқын функциясының нолге тең болатуғынлығын аңғартады, яғный $\psi(x)$ функциясы $x = 0$ ҳәм $x = a$ ноқатларында нолге айланады.

Солай етип шуқырдағы бөлекшениң қозғалысы мәселеси

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0, \qquad 0 < x < a \qquad (2.4.12)$$

теңлемесин шешиўге алып келинеди. Шегаралық шәртлери

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0.$$

Жаңа белгилеў киргиземиз

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}. \qquad (2.4.13)$$

Бундай жағдайда (2.4.12)-теңлеме тербелислер теориясынан белгили болған теңлемеге айланады

$$\psi' + k^2\psi = 0.$$

Бул теңлемениң шешими

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \qquad (2.4.14)$$

түринде жазылады.

$\psi(0) = 0$ шегаралық шәртин пайдалансақ

$$A \sin\alpha = 0$$

аңлатпасын аламыз. Буннан $\alpha = \pm\pi m$ екенлиги келип шығады. $m = 1, 2, \ldots$ m ниң жуп мәнислеринде ψ(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 модулиниң квадраты $|\psi(x)|^2$ ийе. Модульдиң квадраты m шамасын сайлап алыўдан, яғный $\psi(x)$ функциясының белгисинен ғәрезли емес. Сонлықтан α = 0 деп есаплаўымызға болады.

Екинши шегаралық шәрт $\psi(a) = 0$

$$A \sin ka = 0$$

теңлигине алып келеди. Бул теңлик $A \neq 0$ болған жағдайлар ушын

$$ka = \pm\pi n, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.4.15}$$

(2.4.14)-шешимге кириўши $n = 0$ болған жағдайдың мәселениң шәртин қанаатландырмайтуғынлығын атап өтемиз. Себеби $n = 0$ болғанда $\psi \equiv 0$ шәртиниң орынланыўы керек, ал бул жағдай бөлекшениң шуқырда жоқ екенлигине сәйкес келеди. Сонлықтан 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

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.4.16}$$

Алынған энергия спектри (2.4.16) ның әҳмийетли 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-сүўрет). Шредингер теңлемесиниң шешиминиң өзинен өзи энергияның квантланыўына алып келмейтуғынлығын атап өтемиз. Квантланыў толқын функциясы ушын жазылған шегаралық шәртлерден, яғный потенциал шуқырдың шегараларында толқын функциясының нолге тең екенлигинен келип шығады.

(2.4.16)-аңлатпадағы шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясын анықлайтуғын 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 атаймыз. Басқа барлық ҳаллар қозған ҳаллар болып табылады. $n = 2$ шамасы биринши қозған ҳалға, $n = 3$ шамасы екинши қозған ҳалға сәйкес келеди (ҳәм 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 ишиндеги тынышлықта турған бөлекше ийе болады. Квантлық механиканда бундай тынышлықтағы ҳал пүткиллей орын алмайды.

Энергия спектриниң дискретлигин толығырақ таллаймыз. $n-$ ҳәм $(n+1)-$қәддилер арасындағы энергия қәддилериниң айырмасы ΔE_n шамасын табамыз

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

ΔE_n шамасының мәнисин айқын жағдайлар ушын баҳалаймыз.

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 (өжире температураларында $kT \approx 2{,}6 \cdot 10^{-2}$ эВ). Бундай жағдайда қозғалыўшы молекулалардың тутас энергия спектри ҳаққында 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 ~ 1 эВ ке тең) жүдә киши. Бирақ (бул VI бапта көрсетиледи) макроскопиялық өлшемлердеги потенциал шуқырдағы электрон ушын дискрет қәддилердиң болыўы принципиаллық әҳмийетке 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 ($E_{\text{байл.}} \sim 10$ эВ) салыстырғанда әдеўир сезилерликтей шама болып табылады. Сонлықтан бул жағдайдағы энергия спектриниң дискретлигин есапқа алмаўға болмайды.

Потенциаллық шуқырдағы бөлекшениң энергиясының спектрин таллаўды жуўмақлаў алдында оның және бир қәсийетин қараймыз. ΔE_n шамасының E_n шамасына қатнасын есаплаймыз.

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}.$$

n квантлық санның үлкейиўи менен бул қатнастың мәниси кемейеди $\left(\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n}\right)$. Сонлықтан энергиялық спектрдиң дискретлиги n ниң өсиўи менен кемейеди. Бул нәтийже сәйкЕгерк принципи деп аталатуғын әҳмийетли болған физикалық принциптиң көриниўи болып табылады. Бул сәйкЕгерк принципи бойынша n квантлық санның үлкен мәнислеринде, яғный $n \to \infty$ шеклеринде квантлық механика классикалық механикаға өтеди.

Бир өлшемли шуқырдағы бөлекшениң толқын функциялары. Енди бир өлшемли потенциал шуқырда жайласқан бөлекшениң толқын функцияларын талқылаўға өтемиз. (2.4.15)-аңлатпаны есапқа алып (2.4.14)-аңлатпадан мынаған ийе боламыз

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{\pi n x}{a}\ .$$

A көбейтиўшиси (2.4.10)-толқын функциясының нормировка шәртинен табылады

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n(x)|^2dx = A^2\int_0^a sin^2\frac{\pi n x}{a}dx = A^2\frac{a}{2} = 1.$$

Солай етип A ушын

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

аңлатпасына ийе боламыз ҳәм сонлықтан диййўалларының бийиклиги шексиз болған бир өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекше ушын

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n x}{a} \qquad (2.4.17)$$

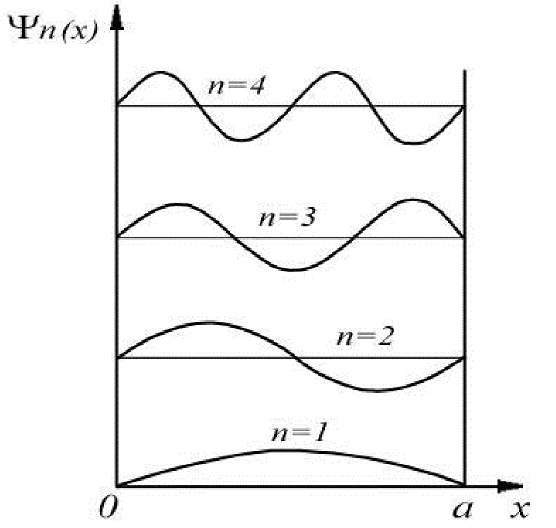
түрдеги толқын функцияларын аламыз. Бул аңлатпада $0 < x < a$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ Улыўмалық теорияға сәйкес (3.5 ти қараў керек) бул функциялар ортонормировкаланған функциялар болып табылады. Яғный

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}.$$

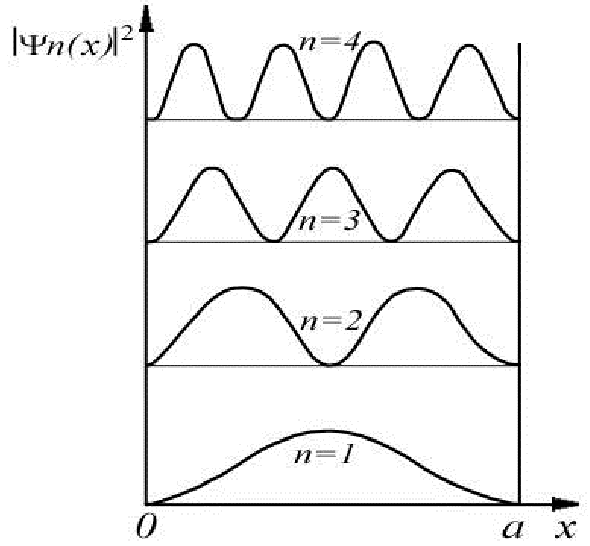
Бул аңлатпада δ_{mn} арқалы 1 ҳәм 0 мәнислерине ийе болатуғын Кронекер символы белгиленген

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 \text{ (егер } m = n \text{ болса)} \\ 0 \text{ (егер } m \neq n \text{ болса).} \end{cases} \qquad (2.4.18)$$

n квантлық санның төрт мәнисине сәйкес келетуғын $\psi_n(x)$ толқын функциялары 2.4.3-сүўретте келтирилген. n квантлық санның ҳәр қыйлы мәнислерине сәйкес келиўши толқын функциялары бир биринен үлкен айырмаға ийе 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-сүўрет.



2.4.4-сүўрет.

Табылған толқын функцияларының өзлерине тән қәсийетлериниң бири шуқырдың шегарасындағы туўындының үзилиске түсиўинде (секириўге ушыраўында) көринеди. Бул секириў бөлекшениң потенциал энергиясы болған $U(x)$ шамасының шексизликке айланыўы менен байланыслы. Шекли тереңликке ийе болған шуқырда (бул жағдай 2-4-4-параграфта талланады) толқын функциясының туўындысы шуқырдың шегарасында секириўге ушырамайды, яғный толқын функциясы бир қәлипте өзгереди.

2.4.4-сүўретте толқын функциясының модулиниң квадратының (яғный $|\psi_n(x)|^2$ шамасының) графиги көрсетилген. $|\psi_n(x)|^2$ шамасының бөлекшени шуқырдың ишинде табыўдың итималлығының тығызлығын беретуғынлығын еске салып өтемиз.

Ҳәр қыйлы n лер ушын бөлекшелердиң ҳәр қыйлы ҳаллары ушын итималлықтың тығызлықлары ҳәр қыйлы болатуғынлығы көринип тур. Мысалы тийкарғы ҳалда турған бөлекшени (яғный $n = 1$ болған жағдайда) шуқырдың орайында табыўдың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады. Ал биринши қозған ҳалда (яғный $n = 2$ болғанда) бөлекшени шуқырдың орайында табыўдың итималлығы нолге тең. Соның менен бирге бөлекшени шуқырдың орайының оң ҳәм шеп тәреплеринде бирдей итималлық пенен табыў мүмкин. Бул жағдай классикалық бөлекшениң шуқырда жайласыўынан пүткиллей басқа. Классикалық бөлекшени шуқырдың қәлеген ноқатында табыўдың итималлығы бирдей.

Шуқырдың ишиндеги $x_1 \leq x \leq x_2$ областта бөлекшени табыўдың итималлығы

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx \qquad (2.4.19)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Математикалық көз-қарастан өткизбейтуғын 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 еселенген ярым толқын узынлығы жайласыўы керек ($a = n\frac{\lambda}{2}$). Биз қарап атырған жағдайда λ

ҳаққында гәп етилгенде шуқырдың ишиндеги бөлекшениң де Бройль толқын узынлығы болған ψ_{db} шамасын түсинемиз.

Еки өлшемли потенциал шуқыр. Дийўалларының бийиклиги шексиз болған (дийўаллары шексиз бийик, сонлықтан бөлекшени өткермейтуғын) еки өлшемли туўры мүйешли потенциал шуқырды қараймыз. Бундай жағдайда бөлекшениң потенциал энергиясы $U(x,y)$ төмендегидей түрге ийе болады

$$U(x,y) = \begin{cases} 0, \text{егер } (x,y) \in \Omega \text{ болса} \\ \infty, \quad \text{егер } (x,y) \notin \Omega \text{ болса.} \end{cases}$$

Бул аңлатпада $\Omega = \{(x,y): 0 < x < a_1,\ 0 < y < a_2\}$ арқалы (x,y) тегислигиндеги туўры мүйешли область белгиленген (2.4.5-сүўрет). Бир өлшемли жағдайдағыдай потенциал шуқырдың сыртында $\psi(x,y) \equiv 0$. Шуқырдың ишинде x ҳәм y көшерлери бағытындағы қозғалыслар бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан $\psi(x,y)$ функциясын

$$\psi(x,y) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \tag{2.4.20}$$

көбеймеси түринде излеймиз. Бул аңлатпада $\psi_1(x)$ арқалы тек x координатасына ғәрезли болған толқын функциясы, ал $\psi_2(y)$ арқалы тек y координатасынан ғәрезли 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

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{\psi_2(y)}\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E \tag{2.4.21}$$

аңлатпасына өтемиз. (2.4.21) диң шеп тәрепиндеги биринши қосылыўшы тек x координатасынан, ал екинши қосылыўшы тек y координатасынан ғәрезли. Олардың қосындысы турақлы шамаға тең болғанлықтан қосылыўшылардың өзлери де турақлы шамаға тең болады, яғный

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_1,$$
$$\frac{1}{\psi_2(y)}\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_2.$$

Бул аңлатпаларда E_1 ҳәм E_2 арқалы бирликлери 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

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_1\psi_1(x) = 0,$$
$$\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_2\psi_2(y) = 0. \quad (2.4.22)$$

Бундай теңлемелердиң шешимлерин биз жоқарыда алған едик. Демек $\psi_1(x)$ ҳәм $\psi_2(y)$ функциялары

$$\psi_{1,n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a_1}}\sin\frac{\pi n_1 x}{a_1},$$
$$\psi_{1,n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{a_2}}\sin\frac{\pi n_2 y}{a_2}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпалардағы n_1 ҳәм n_2 квантлық санлар $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots$ мәнислерин қабыл етеди. Демек еки өлшемли туўры 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 $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots$

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 $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots$

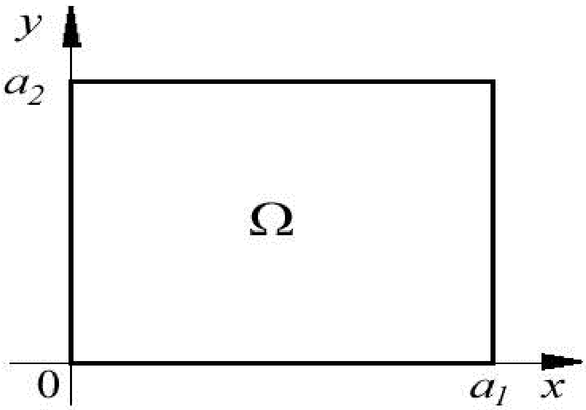
Бөлекшениң энергиясының спектри (2.4.24) дискрет болып табылады ҳәм n_1 және n_2 квантлық санларнан ғәрезли.

Енди квадрат потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысын қараймыз. Бул жағдайда $a_1 = a_2 = a$. Бундай жағдайда бөлекшениң энергия спектри

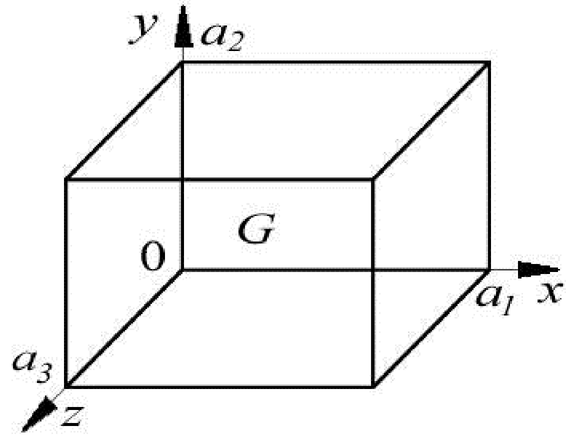
$$E_{n_1,n_2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2) \quad (2.4.25)$$

түрине ийе. Бул аңлатпада да $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots$

(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 ψ_{n_1,n_2} ҳәм ψ_{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 атаймыз. Еки өлшемли квадратлық потенциал шуқырда $n_1 = n_2$ болған энергия қәддилери айнымаған қәддилер болып табылады.



2.4.5-сүўрет.



2.4.5-сүўрет.

Үш өлшемли потенциал шуқыр. Дийўаллары шексиз бийик болған үш өлшемли потенциал шуқырдағы (потенциал қутыдағы) бөлекшени қараймыз. Туўры мүйешли параллелопипедтиң ишки областын G = $\{(x, y, z): 0 < x < a_1,\ 0 < y < a_2, 0 < z < a_3\}$ арқалы белгилеймиз (2.4.6-сүўрет). 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 ийе болады. Потенциал шуқырдың сыртында бөлекшениң толқын функциясы $U(x, y, z) \equiv 0$. Еки өлшемли жағдайды қараған жағдайдағыдай бул жағдайда 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 ғәрезли.

Еки өлшемли шуқырдағы мәселени шешиўдиң усылындағыдай үш өлшемли жағдайда үш бир өлшемли теңлеме аламыз

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_1\psi_1(x) = 0,$$
$$\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_2\psi_2(y) = 0,$$
$$\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_3\psi_3(z) = 0.$$

Бул аңлатпада $E_1 + E_2 + E_3 = E$. G областының шегараларында (ямаса потенциал ящиктиң өткермейтуғын дийўалларында) бул теңлемелердиң шешимлери нолге айланады. Усы жағдайдың жәрдеминде (яғный потенциал қутының өткизбейтуғын дийўалларында) бөлекшениң толқын функциясының түри

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{a_1a_2a_3}}\sin\frac{\pi n_1 x}{a_1}\sin\frac{\pi n_2 y}{a_2}\sin\frac{\pi n_3 z}{a_3} \qquad (2.4.26)$$

ҳәм оның энергиялық спектри

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{n_1}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{a_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{a_3}\right)^2\right] \qquad (2.4.27)$$

анықланады. Бул аңлатпаларда n_1, n_2 ҳәм n_3 квантлық санлар $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots$ мәнислерин қабыл етеди. Үш өлшемли потенциал шуқырда бөлекшениң толқын функциясы да, энергиясы да үш квантлық саннан ғәрезли болатуғынлығын атап өтемиз.

Енди бөлекшениң кублық потенциал шуқырдың ишиндеги қозғалысын қараймыз. Бул жағдайда $a_1 = a_2 = a_3 = a$. Усыған сәйкес энергия спектри

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \qquad (2.4.28)$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада да $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \ldots$

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 ҳаққындағы мәселе 4.4-мәселеде шешиледи.

4.3-**мәселе**. Массасы m болған бөлекше шексиз терең еки өлшемли потенциал шуқырда екинши қозған ҳалда жайласқан. Усы бөлекшени $0 < x \le \frac{a}{3}$, $0 < y \le \frac{a}{3}$ 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 ($n_1, n_2 = 1, 2, 3, \ldots$). 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 $0 < x \le \frac{a}{3}$, $0 < y \le \frac{a}{3}$ областында табыўдың итималлығы

$$P = \int_0^{a/3}\int_0^{a/3} \left|\psi_{2,2}(x,y)\right|^2 dxdy = \frac{4}{a^2}\int_0^{a/3}\int_0^{a/3} sin^2\frac{2\pi x}{a} sin^2\frac{2\pi y}{a} dxdy = \left(\frac{1}{3}-\frac{\sqrt{3}}{8\pi}\right)^2 \approx 0{,}07$$

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 өткизбейтуғын (яғный шексиз бийик) үш өлшемли кублық потенциал шуқырда жайласқан. Кубтың қабырғаларының 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, яғный 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 төмендеги кестеде келтирилген:

Қәдди-лердиң 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 турғанындай, энергияның алтыншы қәддине квантлық санларның квадратларының қосындысы 14 ке тең болған сан сәйкес келеди. Ал бесинши қәдди ушын бул сумманың 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 айныў 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 жыйнақларын көрсетиўге болады. Егер үш квантлық санның екеўи бир бирине тең, ал үшиншиси оларға тең болмайтуғын жағдайда энергияның қәдди ушын айныў саны үшке тең. Мысалы үш қайтара айныған қәддилерге екинши, үшинши ҳәм төртинши энергия қәддилерин көрсетиўге болады. Егер квантлық санлар бир бирине тең болмайтуғын болса, онда айныў санының мәнисин үш санның орынларын өзгертип қойыў операцияларының санына, яғный алтыға тең болады. Тап усындай ситуация алтыншы қәддиде жүзеге келеди. Солай етип алтыншы қәддиниң айныў саны $K_6 = 6$.

4.5-**мәселе**. Атом ядросындағы нуклон ядролық күшлердиң 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 тәсирлесиўде бул бөлекшелер бирдей қәсийет көрсетеди. Сонлықтан ядродағы протонлар менен нейтронларды нуклонлар деп атайды.

Жақыннан тәсир етиўши қуўатлы ядролық күшлер нуклонларды ядрода услап турады. Мәселениң шәрти бойынша ядро күшлериниң майданы болған $U(r)$ шамасын өткермейтуғын дийўалға ийе сфералық потенциал шуқырдың жәрдеминде моделлестириў мүмкин.

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{егер } r < a \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } r > a \text{ болса.} \end{cases}$$

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 екенлиги менен байланыслы. Сонлықтан шуқырдан сыртта, яғный $r > a$ болған областларда, нуклонның толқын функциясы нолге тең.

Бул жағдай нуклонның ядроның ишиндеги $0 \leq r < a$ 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 есаплаймыз ($U = 0$). 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 ψ ди радиаллық координата r диң, мүйешлик өзгериўшилер ϑ менен φ диң функциясы деп қараймыз, яғный $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$. Мәселениң шәрти бойынша сфералық шуқырдағы бөлекшениң ҳалы сфералық симметрияға ийе болғанлықтан (яғный ϑ, φ координаталарынан ғәрезсиз) бөлекшениң толқын функциясын тек радиаллық координата r ден ғәрезли деп есаплаймыз. 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 шәртти қанаатландырады:

$$|\psi(0)| < \infty \text{ ҳәм } \psi(a) = 0.$$

Бул шәртлердиң бириншиси толқын функциясының кеңисликтиң қәлеген ноқатындағы шекленгенлигиниң, ал екиншиси потенциал шуқырдың шегараларының өткизбейтуғынлығын есапқа алғандағы толқын функциясының үзликсизлигиниң нәтийжеси.

$\psi(r)$ толқын функциясын $\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$ түринде излеймиз. $\psi(r)$ функциясының координата бойынша туўындылары

$$\frac{d\psi}{dr} = \frac{1}{r}\frac{du}{dr} - \frac{1}{r^2}u,$$
$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = \frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\frac{du}{dr} + \frac{2}{r^3}u.$$

Бул туўындыларды Шредингер теңлемесине қойып $u(r)$ функциясы ушын теңлеме аламыз:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2mE}{h^2}u = 0, \quad 0 \leq r < a.$$

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). Сонлықтан (2.4.16)- ҳәм (2.4.17)- аңлатпаларды есапқа алғанда оның шешимлерин былайынша жаза аламыз:

$$u_n(r) = A\sin\frac{n\pi r}{a}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

$\psi(r)$ функциясына қайтып келип нормировкаланбаған (A = const) толқын функцияларын жазамыз

$$\psi_n(r) = A\frac{\sin\frac{n\pi r}{a}}{r}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

Бул функциялар биз қарап атырған потенциал шуқырдағы бөлекшениң барлық мүмкин болған сфералық симметрияға ийе болатуғын квантлық ҳалларды тәрийиплейтуғын мәселениң шешими болып табылады. Бул квантлық ҳаллардыа бөлекшениң толық энергиясының төмендегидей мәнислери сәйкес келеди

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

$n = 1$ болған жағдайда биз қарап атырған ядродағы нуклонның мүмкин 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 әдеўир үлкен. Усының нәтийжесинде ядролық процесслерде бөлинип шығатуғын энергияның муғдары химиялық реакцияларда бөлинип шығатуғын энергияның мәнисинен миллионлаған есе үлкен болады. Аўыр ядролардың бөлиниў ҳәм жеңил ядролардың синтези реакцияларының жүзеге келиўи квантлық механика нызамларының нәтийжеси сыпатында алынған бул жуўмақлардың дурыс екенлигин тастыйықлайды.

2-4-3. Потенциал табалдырық ҳәм дийўал областындағы бөлекшениң қозғалысы

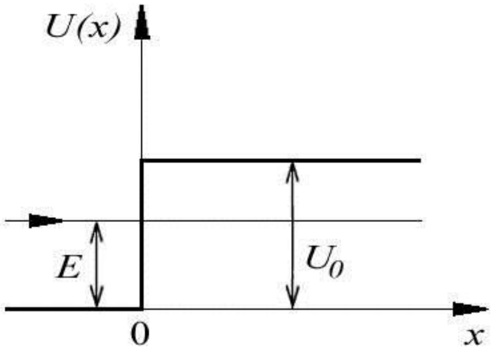
Жоқарыдағы параграфта кеңисликтиң шекленген областындағы бөлекшениң қозғалысы қарап өтилди. Бундай қозғалысты финитлик қозғалыс деп атаймыз. Енди күш майданында жайласқан бөлекшениң шексизликке кете алатуғын қәбилетликке ийе болатуғын жағдайды қараймыз. Басқа сөз бенен айтқанда енди бөлекшениң инфинитлик қозғалысын үйренемиз.

Потенциал табалдырық областындағы бөлекшениң қозғалысы. Потенциал энергиясы

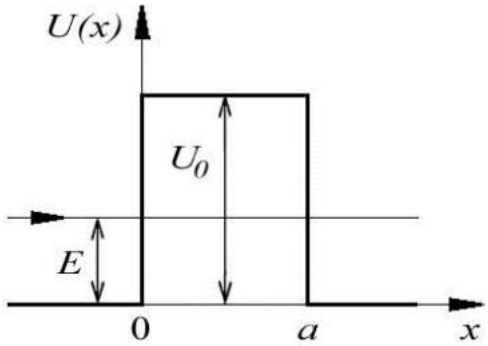
$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{егер } x < 0 \text{ болса} \\ U_0, & \text{егер } x < 0 \text{ болса.} \end{cases}$$

түрине ийе күш майданындағы бөлекшениң қозғалысын қараймыз.

Бундай жағдайда бөлекше потенциал табалдырық областында жайласқан деп атайды. Табалдырықтың шегарасында, яғный $x = 0$ болған жағдайда, бөлекшениң потенциал энергиясын шекли болған U_0 шамасына бирден өзгереди (секирмели түрде өзгереди) (2.4.7-сүўрет).



2.4.7-сүўрет.



2.4.8-сүўрет.

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 көрсетиў 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 (яғный $E < U_0$). Бундай жағдайды бийик потенциал табалдырық жағдайы деп атайды.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \text{ ҳәм } k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)} \qquad (2.4.29)$$

белгилеўлерин пайдаланып I ҳәм II областлары ушын Шредингер теңлемелерин аламыз

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \qquad (2.4.30a)$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0. \qquad (2.4.30b)$$

(2.4.30)-теңлемелердиң шешимлери

$$\psi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}, \qquad (2.4.31a)$$

$$\psi_2(x) = A_2e^{k_2x} + B_2e^{-k_2x} \qquad (2.4.31b)$$

функциялары болып табылады.

Жоқары потенциал табалдырық бар болған жағдайда I ҳәм II областларындағы бөлекшениң ҳалларын тәрийиплеўши ψ_1 ҳәм ψ_2 функцияларының пүткиллей ҳәр қыйлы түрге ийе болатуғынлығын атап өтемиз. ψ_1 толқын функциясындағы биринши қосылыўшыға x көшериниң бойы менен -∞ тен табалдырық областына, яғный шеп тәрептен оң тәрепке тарқалатуғын тегис де Бройль толқыны сәйкес келеди. ψ_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 исениў ушын стационар ҳалдағы (2.4.8) толқын функциясы ушын жазылған ўақытқа байланыслы болған $e^{-i\omega t}$ көбейтиўшисин 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 сыяқлы 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 екен. 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. Сонлықтан бул қосылыўшының алдында турған коэффициент A_2 ниң мәнисиниң 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 (яғный үзликсиз туўындыға ийе болыўы керек). Сонлықтан 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 туўындыларының мәнислерин бир бирине теңлестириў толқын функцияларын ҳәм олардың туўындыларын бир бирине жалғастырыў атамасын (сшивка волновых функций ҳәм их производных) алды. Бул жағдайда жалғастырыў шәрти

$$\psi_1(0) = \psi_2(0),$$
$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

ямаса

$$A_1 + B_1 = B_2, \quad ik_1A_1 - ik_1B_1 = -k_2A_2\,. \tag{2.4.32}$$

түрлерине ийе болады. (2.4.32)-теңлемелер системасы B_1 ҳәм B_2 коэффициентлерин A_1 коэффициенти арқалы аңлатыўға, яғный 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 киреди) B_1 ҳәм B_2 коэффициентлериниң A_1 коэффициентине қатнасы түринде көрсетиле алады. Сонлықтан улыўмалықты жоғалтпай $A_1 = 1$ деп ала аламыз. Бундай жағдайда (2.4.32)-аңлатпадан B_1 ҳәм B_2 ушын

$$B_1 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}, \quad B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \tag{2.4.33}$$

аңлатпаларын аламыз.

Солай етип бийик табалдырық жағдайында бөлекшениң толқын функциялары төмендегидей түрге ийе болады екен

$$\psi_1(x) = e^{ik_1x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}e^{-ik_1x}\,, \qquad x < 0, \tag{2.4.34a}$$

$$\psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}e^{-ik_2}, \qquad x > 0. \tag{2.4.34b}$$

(2.4.32)-теңлемелер системасының k_1 менен k_2 коэффициентлериниң қәлеген мәнисинде, яғный энергия E ниң қәлеген мәнислеринде ($E < U_0$ екенлигин еске саламыз) шешимге ийе болатуғынлығын атап өтемиз. Бул бөлекшениң үзликсиз энергия спектрине ийе болатуғынлығын аңғартады.

Бөлекшениң бийик табалдырықта кери қарай шағылысыўының итималлығын анықлаўшы шағылысыў коэффициентин анықлаймыз. Өзиниң физикалық мәниси бойынша шағылысыў коэффициенти R былайынша есапланады:

$$R = \frac{|\vec{J}_{\text{шағ}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|}. \tag{2.4.35}$$

Бул аңлатпада $\vec{J}_{\text{шағ}}$ (шағылысыўшы) ҳәм $\vec{J}_{\text{к.т.}}$ (келип түсиўши) арқалы итималлық ағысы тығызлығы белгиленген. Олар сәйкес табалдырыққа түсиўши [(2.4.34a) аңлатпадағы биринши 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]

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}[\psi\, grad\, \psi^* - \psi^*\, grad\, \psi]. \tag{2.4.36}$$

(2.4.34a) ҳәм (2.4.36)-аңлатпаларды есапқа алып

$$|\vec{J}_{\text{к.т.}}| = \frac{\hbar k_1}{m},$$
$$|\vec{J}_{\text{шағ}}| = \frac{\hbar k_1}{m}\left|\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right|^2$$

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 өтиўиниң итималлығын анықлаўшы табалдырық арқалы өтиў коэффициенти D

$$D = \frac{|\vec{J}_{\text{өтиўши}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|}$$

түрине 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 қойсақ $\vec{J}_{\text{өтиўши}} = 0$, 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 областындағы бөлекшениң қәсийетлерин көремиз. Бөлекшениң толқын функциясы $\psi_2(x)$ [(2.4.34b) аңлатпасына қараңыз] нолге тең емес ҳәм x пенен бирликте экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди. Ал бул жағдай бөлекшениң табалдырық астында болыў (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 анықлаў мүмкин емес. Сонлықтан квантлық механиканда бөлекшениң толық энергиясын бир ўақытта дәл анықланған кинетикалық ҳәм потенциал энергиялардың қосындысы деп қараўға 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 табыўдың итималлыгының тығызлығы

$$w_2(x) = \frac{dP}{dx} = |\psi_2(x)|^2 = \left|\frac{2k_1}{k_1 + ik_2}\right|^2 e^{-2k_2 x} = \tag{2.4.37}$$
$$= \left|\frac{2k_1}{k_1 + ik_2}\right|^2 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}x}$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады ҳәм оның шамасы бөлекшениң m массасынан, энергиялардың $U_0 - E$ айырмасынан ҳәм табалдырықтың шегарасынан кашықлық x тан ғәрезли.

(2.4.37)-аңлатпадағы экспоненциаллық көбейтиўшиниң мәнисин электрон ушын баҳалаймыз. $U_0 - E = 1$ деп алайық. $x = 10^{-10}$ м болғанда (яғный табалдырықтан қашықлық атомның өлшеминдей болғанда)

$$e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)x}} \approx 0,29$$

шамасына ийе боламыз. Демек бул жағдайда экспоненциаллық көбейтиўши сезилерликтей мәниске ийе болады екен ҳәм бул өз гезегинде II областта бийик потенциал табалдырықтан тап сондай аралықта электронды табыўдың 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 болыўының 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 шағылысыў коэффициенти $R = 1$ болса да, яғный шағылысыў толық болса да, шағылысыўдың табалдырықтың өзинде (яғный I ҳәм II областлар арасындағы шегарада) жүзеге келиўиниң 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 ишки шағылысыў қубылысы болып табылады. Толық ишки шағылысыў қубылысы жақтылық оптикалық жақтан тығызырақ областтан оптикалық жақтан кем тығызлыққа ийе орталыққа өткенде бақланады. Усы қубылыста жақтылық оптикалық тығызлығы кем орталыққа өте алады. Бирақ бундай жағдайда оның амплитудасы $\psi_2(x)$ сыяқлы экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди.

Енди табалдырыққа келип түсиўши бөлекшениң энергиясы E потенциал табалдырықтың бийиклиги U_0 ден жоқары болған, яғный $E > U_0$ болған жағдайды қараймыз. Бундай табалдырықты пәс потенциал табалдырық деп атайды ҳәм I менен II областлар ушын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \qquad (2.4.38a)$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0. \qquad (2.4.38b)$$

Бул аңлатпалардағы k_1 менен k_2

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \text{ ҳәм } k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} \qquad (2.4.39)$$

формулалары менен анықланады. (2.4.38)-формулаларды шешип

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x},\ x < 0, \tag{2.4.40a}$$
$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x},\ x > 0 \tag{2.4.40b}$$

функцияларына ийе боламыз. Табалдырыққа бөлекше x тың терис мәнисли тәрепинен жақынлайды деп есаплаймыз (яғный шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалады). Бундай жағдайда $\psi_1(x)$ функциясының биринши қосылыўшысы табалдырыққа келип түсиўши де Бройль толқынын, ал $\psi_1(x)$ функциясының екинши қосылыўшы табалдырықтан шағылысқан де Бройль толқынын береди. Тап сол сыяқлы $\psi_2(x)$ функциясының биринши қосылыўшысы табалдырық арқалы өткен де Бройль толқынына сәйкес келеди. II областта шағылысқан толқын болмағанлықтан (2.4.40b) аңлатпасындағы B_2 коэффициентин нолге тең етип алыў керек болады, яғный $B_2 = 0$.

Шегарадағы толқын функцияларын ҳәм олардың туўындыларын жалғастырыў шәрти A_1, B_1 ҳәм A_2 коэффициентлери ушын төмендегидей теңлемелерге алып келеди

$$\begin{gathered} A_1 + B_1 = A_2, \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2. \end{gathered} \tag{2.4.41}$$

Биз жоқарыда қарап өткен жағдайдағыдай $A_1 = 1$ 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 қозғалыўшы бөлекшениң толқын функциялары ушын

$$\begin{gathered} \psi_1(x) = e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{ik_1 x}, \\ \psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} \end{gathered} \tag{2.4.42}$$

аңлатпаларын алады екенбиз. Бул аңлатпалардағы k_1 менен k_2 (2.4.39)-аңлатпаларда берилген.

Табалдырықта шағылысыў (R) ҳәм табалдырықтан өтиў (D) коэффициентлерин табыў ушын келип түсиўши, шағылысқан ҳәм табалдырықтан өткен (сынған) де Бройль толқынлары ушын итималлықтың ағысының тығызлығын табамыз. Биз тапқан толқын функцияларын (2.4.36)-аңлатпаға қойсақ

$$\begin{gathered} |\vec{J}_{\text{к.т.}}| = \frac{\hbar k_1}{m}, \\ \left|\vec{J}_{\text{шағылысыўшы}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m} \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2, \\ \left|\vec{J}_{\text{өтиўши}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m} \left|\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right|^2 \end{gathered} \tag{2.4.43}$$

формулаларын аламыз. (2.4.35) пенен (2.4.43) лерди есапқа алғанда пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыў коэффициенти ушын мына формуланы аламыз:

$$R = \left|\frac{|\vec{J}_{\text{шағылысыўшы}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|}\right| = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}}\right)^2 . \quad (2.4.44)$$

(2.4.44)-формуладан $E > U_0$ болған жағдайда пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыўының итималлығының нолге тең емес екенлиги көринеди. Яғный бундай жағдайда дийўал үстиндеги шағылысыў (надбарьерное отражение) деп аталатуғын шағылысыўдың жүзеге келиўи мүмкин. Бул нәтийже квантлық механиканың нәтийжеси болып табылады ҳәм бөлекшелерде толқынлық қәсийеттиң бар екенлиги менен түсиндириледи. Классикалық механика нызамларына бағынатуғын макроскопиялық бөлекше пәс потенциал табалдырық арқалы өткенде шағылыспайды, ал табалдырық арқалы өткенде оның кинетикалық энергиясының шамасы кемейеди.

Қызықлы 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 шағылысыўшы де Бройль толқынлары арасындағы фазалар айырмасы ғана өзгериске ушырайды. (2.4.42)-аңлатпада $\psi_1(x)$ функциясының биринши e^{ik_1x} ҳәм екинши $\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}e^{ik_1x}$ қосылыўшыларының мәнислери бирдей. Сонлықтан k_1менен k_2 лердиң орынларын алмастырған менен нәтийже өзгериске ушырамайды, яғный шағылыстырыў коэффициенти R диң мәниси өзгермейди. Бул нәтийжени басқа сөз бенен де айтыў мүмкин: пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыў коэффициенти бөлекшениң қозғалыс бағытына ғәрезли емес.

"Төңкерилип қойылған" табалдырықта келип түсиўши ҳәм шағылысқан толқынлардың амплитудаларының белгилери ҳәр қыйлы. Бул фазалар айырмасы π ге тең болған жағдайға сәйкес келеди. Яғный "Төңкерилип қойылған" табалдырықта шағылысқанда толқынның фазасы секирмели түрде π шамасына өзгереди. Оптика менен салыстырыўды 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

$$D = \frac{|\vec{J}_{\text{өтиўши}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 4\frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{\left(1 + \sqrt{1 - U_0/E}\right)^2} \quad (2.4.45)$$

шамасы болып табылады. Солай етип пәс потенциал табалдырық жағдайында да $R + D = 1$. Бундай нәтийжени итималлықларды қосыў көз-қарасы бойынша күтиў тәбийий. Себеби келип түсиўши бөлекше табалдырықтан шашырайды ямаса II областқа өтеди.

Бөлекшениң табалдырық областында қозғалысын тәрийиплейтуғын де Бройль толқынының I ҳәм II областлар шегарасында сынатуғынлығын атап өтиў керек. Бул сыныў бөлекшениң тезлигиниң өзгериўи ҳәм де Бройль толқынының узынлығы λ_{db} шамасының өзгериўи 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 узынлықлары, ал v_1 ҳәм v_2 арқалы сол областлардағы де Бройль толқынларының тезликлери 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 ийе 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 дәлиллейди. "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 өтиўи. 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 областты потенциал барьер деп атаймыз. Потенциал барьер областындағы бөлекшениң қозғалысын изертлеўди бир бир өлшемли туўры мүйешли потенциал шуқырды қараў менен баслаймыз (2.4.8-сүўрет).

Мейли, бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(x) = \begin{cases} 0, & (x < 0 \text{ болғанда}), \\ U_0, & (0 < x < a \text{ болғанда}), \\ 0, & (x > 0 \text{ болғанда}). \end{cases}$$

I арқалы барьердиң шеп тәрепиндеги областты II арқалы $0 < x < a$ областын ҳәм III арқалы барьердиң оң тәрепин белгилейик. Бөлекше барьерге x тың терис мәнислери тәрепинен жақынлайды, яғный шептен оң тәрепке қарай қозғалады деп есаплаймыз. Бөлекшениң энергиясы E барьердиң бийиклиги U_0 шамасынан киши болған жағдайды, яғный $E < U_0$ теңсизлиги орынланатуғын жағдайды үйренемиз. ($E > U_0$ теңсизлиги орынланатуғын жағдай усы параграфтың 4.7-мәселесинде шешилген).

I, II ҳәм III областлар ушын Шредингер теңлемелери былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0,$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) = 0,$$
$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_3(x) = 0. \tag{2.4.47}$$

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)-теңлемелердиң шешимлери болады

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}, \\ \psi_2(x) &= A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}, \\ \psi_3(x) &= A_3e^{ik_1x} + B_3e^{-ik_1x}. \end{aligned} \tag{2.4.48}$$

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.

Барьердиң шегараларында (яғный $x = 0$ ҳәм $x = a$ ноқатларында) толқын функцияларын ҳәм олардың туўындыларын жалғастырыў шәрти

$$\begin{gathered} 1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ ik_1 - ik_1B_1 = k_2A_2 - k_2B_2, \\ A_2e^{k_2a} + B_2e^{-k_2a} = A_3e^{k_1a}, \\ k_2A_2e^{k_2a} + k_2B_2e^{-k_2a} = ik_1A_3e^{k_1a} \end{gathered} \tag{2.4.49}$$

теңлемелери системасының пайда болыўына алып келеди. (2.4.49)-теңлемелер системасы төрт B_1, A_2, B_2, A_3 белгисизлерге ийе төрт теңлемеден турады. Бул система k_1 менен k_2 шамаларының, яғный энергия E ниң қәлеген мәнислеринде шешимлерге ийе болады. Демек энергия спектри үзликсиз спектр болып табылады деген сөз.

Бул мәселеде тийкарғы дыққатты бөлекшениң барьер арқалы өтиўине аўдарамыз. (2.4.49)-системаны барьер арқалы өткен толқынның амплитудасы A_3 ушын шешип

$$A_3 = \frac{4ik_1k_2e^{ik_1a}}{(k_1 - ik_2)^2e^{k_2a} - (k_1 - ik_2)^2e^{k_2a}}$$

аңлатпасын аламыз. Барьерге келип түсетуғын ҳәм барьер арқалы өтетуғын толқын ушын итималлықтың ағысының тығызлығын табамыз. (2.4.36)- ҳәм (2.4.48)-аңлатпаларды есапқа алған ҳалда

$$|\vec{J}_{\text{к.т.}}| = \frac{\hbar k_1}{m},$$
$$\left|\vec{J}_{\text{өтиўши}}\right| = \frac{\hbar k_1}{m}|A_3|^2.$$

формулаларына ийе болмыз. $|\vec{J}_{\text{к.т.}}|$ ҳәм $\left|\vec{J}_{\text{өтиўши}}\right|$ шамаларының мәнислерин (2.4.37)-аңлатпаға қойсақ барьер арқалы өтиў коэффициентин табамыз

$$D = \frac{|\vec{J}_{\text{өтиўши}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|} = |A_3|^2 = \left[1 + \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2}\right)^2 sh^2 k_2 a\right]^{-1}. \qquad (2.4.50)$$

Бул аңлатпадағы гиперболалық синус

$$sh\,(k_2a) = \frac{1}{2}(e^{k_2a} - e^{-k_2a}).$$

Егер барьердиң кеңлиги a ушын $k_2a \gg 1$ шәрти орынланатуғын болса (жоқарыда келтирилген есаплаўлар бул шәрттиң a ның мәниси бир неше атомлық қатламның қалыңлығындай болған жағдайларда орынланатуғынлығын көрсетеди) $e^{-k_2a} \ll 1$ ҳәм сонлықтан гиперболалық синусты экспонента менен алмастырыў мүмкин

$$sh\,(k_2a) \approx \frac{1}{2}e^{k_2a}.$$

Бул жағдайда барьер арқалы өтиў коэффициенти төмендегише анықланады:

$$D \approx \frac{16k_1^2k_2^2}{(k_1^2+k_2^2)^2}e^{-k_2a}.$$

Бул аңлатпаға k_1 менен k_2 ниң мәнислерин қойып

$$D \approx D_0\, exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}\right\}$$

формуласын аламыз. Бул формуладағы

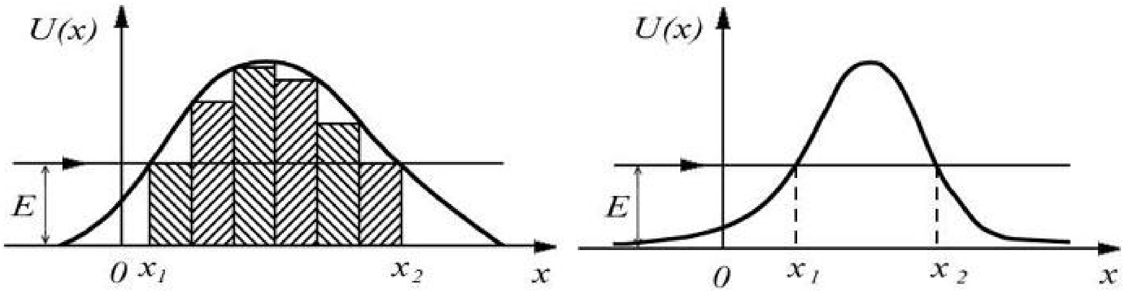
$$D_0 = 16\frac{E}{U_0}\left(1 - \frac{E}{U_0}\right)$$

шамасы $\frac{E}{U_0}$ ге қарата әстелик пенен өзгеретуғын функция болып табылады. Оның (D_0 диң) сан мәниси 1 ге жақын. D шамасының мәселениң параметрлеринен тийкарғы ғәрезлигин экспонента береди. Сонлықтан потенциал барьер арқалы өтиў коэффициентиниң мәнисин есаплағанда $D_0 \approx 1$ мәниси қабыл етиледи. Бундай жағдайда D ушын жазылған аңтатпа

$$D \approx exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}\right\} \qquad (2.4.51)$$

түрине енеди. (2.4.51)-формуладан D өтиў коэффициентиниң барьердиң 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 турады деп есаплаймыз (2.4.9а сүўрет). Барьердиң формасы жеткиликли дәрежеде бир тегис өзгереди деп есаплаймыз (яғный барьердиң бийиклиги де Бройль толқын узынлығындай қашықлықларда көп өзгериске ушырамайды деп есаплаймыз). Бундай жағдайда туўры мүйешли барьерлердиң бийиклиги жоқарылайтуғын участкалардағы толқынлардың шағылысыўын есапқа алмаўға ҳәм толқынның әззилеўин тек жутылыўдың есабынан жүзеге келеди деп есаплаўға болады.



4.9-сүўрет. Ықтыярлы формадағы потенциал барьердиң схемалық сүўрети.

i-туўры мүйешли барьер арқалы өтиўши де Бройль толқынын i + 1 барьерге келип түсиўши толқын деп қараймыз. Бөлекшениң избе-из жайласқан барьерлер арқалы өтиўиниң итималлығы ҳәр бир барьер арқалы өтиўдиң итималлықларының көбеймесине тең. Сонлықтан өтиў коэффициенти D ҳәр бир барьер арқалы өтиў коэффициентлери D_i шамаларының көбеймесине тең

$$D = \prod_i D_i \approx \prod_i exp\left\{-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m[U(x_i) - E]}\right\} = \\ = exp\left\{-\sum_i \left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m[U(x_i) - E]}\right]\right\}. \quad (2.4.52)$$

Бул аңлатпада Δx_i ҳәм $U(x_i)$ арқалы i – барьердиң кеңлиги менен бийиклиги белгиленген. (2.4.52)-аңлатпада суммалаўдан интеграллаўға 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 ийе боламыз. Бул аңлатпада x_1 менен x_2 арқалы $U(x) = E$ шәрти орынланатуғын координаталардың мәнислери белгиленген (2.4.9b сүўрет).

Туннель эффекти. Бийиклиги бөлекшениң энергиясынан үлкен болған потенциал барьер арқалы бөлекшениң өтиўин туннель эффекти атамасын алды (бөлекше барьердиң асты менен өтиў барысында туннелде өткен сыяқлы болып қозғалады). Туннель эффектиниң 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 өтиў итималлығының шамасы бөлекшениң массасынан ҳәм потенциал барьердиң түринен (яғный $U(x)$ функциясынан) күшли экспоненциялық ғәрезликке ийе. Бөлекше барьер арқалы өткенде оның E толық энергиясының өзгериске ушырамайтуғынлығын атап өтемиз.

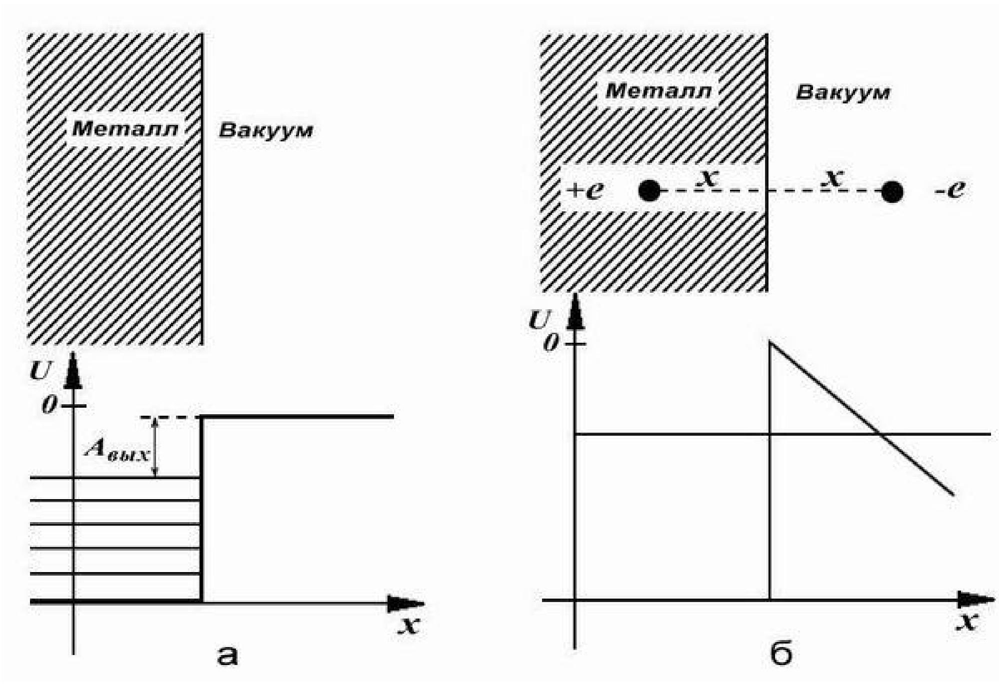
Туннеллик эффект бир қатар әҳмийетли физикалық қубылысларды аңсат түсиндире алады. Олардың қатарына металлардан электронлардың салқын эмиссиясы, ядролардың радиоактивлик α-ыдыраўы, потенциаллардың контактлық айырмасы ҳәм басқалар киреди. Соның менен бирге туннель эффекти ҳәзирги заман техникасында көп қолланылып атыр. Мысалы оның тийкарында сканнерлеўши электрон микроскопы дөретилди. Нәтийжеде беттиң физикасы менен техникасында революциялық өзгерислер жүз берди, бул нанотехнологиялардың раўажланыўы менен үлкен перспективаларға ийе бола баслады.

Металдан электронлардың салқын эмиссиясы. Электронды металдан суўырып алыў ушын оған шамасы $A_{\text{шығыў}}$ шығыў жумысына 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 сүўрет).

Мейли металлдың бетине жақын аралықта кернеўлиги ε шамасына тең болған электр майданы пайда етилген болсын. Бул майдан электронның металдан шығыўын тәмийинлейди. Бундай жағдайда металлдың бетиниң қасында электронның потенциал энергиясы

$$U(x) = U_0 - eEx = A_{\text{шығыў}} - e\varepsilon x \qquad (2.4.54)$$

шамасына тең болады. Басқа сөз бенен айтқанда металл-вакуум шегарасында үш мүйешли формаға ийе болған потенциал барьер пайда болады (2.4.10b сүўрет). Бул барьер арқалы электронлардың туннеллениўи салқын ямаса автоэлектронлық эмиссия қубылысын түсиндиреди. Салқын ямаса автоэлектронлық эмиссия қубылысы деп металдан электронлардың жүдә төменги температураларда шығыўына айтамыз.



2.4.10-сүўрет.

Бул мәселени қатаң түрде шешиў ушын ушып шығыўшы электронға металл тәрепинен тәсир ететуғын айналық сүўрет күшин де (сила зеркального изображения) есапқа алыўдың керек екенлигин атап өтемиз. Бирақ бундай күшти есапқа алыў ақырғы нәтийжеге тәсирин тийгизбейди ҳәм есаплаўларды күшли қурамаластырады. Сонлықтан сүўрет күшиниң потенциал барьердиң түрине қосатуғын үлесин биз есапқа алмаймыз.

Классикалық физика шеклеринде салқын эмиссия қубылысын түсиндириў мүмкин емес. Ҳақыйқатында да электр майданы металдың ишине кирмейди. Сонлықтан бундай майдан металдың сыртындағы электронның потенциал энергиясын өзгерте алады. Ал бул жағдай потенциал барьердиң пайда болыўын тәмийинлейди ҳәм бундай барьер арқалы электрон өте алмайды.

Квантлық механиканда болса металдан электронлардың туннеллениў итималлығы үш мүйешли потенциал барьер арқалы өтиў коэффициенти D ның жәрдеминде анықланады (2.4.10b сүўрет)

$$D \approx exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_0}\sqrt{2m[U(x)-E]}\,dx\right\}.$$

Бундай жағдайда мәселе

$$I = \frac{2}{\hbar}\int_0^{x_0}\sqrt{2m[U(x)-E]}\,dx$$

интегралын есаплаўға алып келинеди. Бул аңлатпадағы $U(x)$ шамасы (2.4.54)-аңлатпаның жәрдеминде анықланады, ал интеграллаўдың жоқарғы шеги $U(x_0) = E$ шәртинен анықланады. Интеграллап

$$I = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar\varepsilon}\left(A_{\text{шығыў}} - E\right)^{3/2}$$

аңлатпасын аламыз.

$$\varepsilon_0 = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar}\left(A_{\text{шығыў}} - E\right)^{3/2}$$

аңлатпасын киргиземиз. Бул аңлатпадағы ε_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 туўры пропорционал. Демек тоқтың тығызлығы электр майданы ε ниң функциясы сыпатында былайынша жазылады

$$j = j_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right).$$

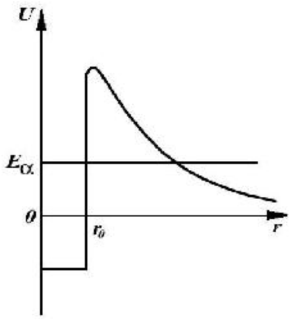
ε_0 шамасының мәнисин баҳалаймыз. $A_{\text{шығыў}} - E \ \sim 1$ эВ болған жағдай ушын

$$\varepsilon_0 \sim 10^8 \text{ В/м}.$$

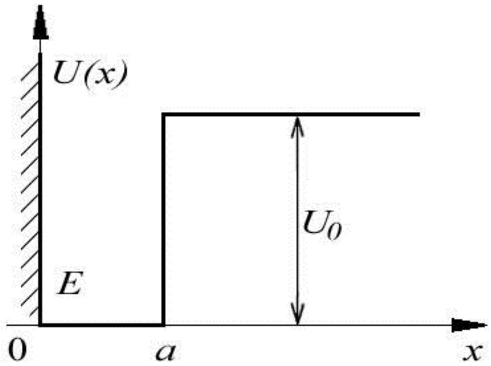
Демек салқын эмиссияның сезилерликтей тоғының металлға тек $\varepsilon \sim \varepsilon_0 \sim 10^8$ В/м шамасындағы электр майданын түсиргенде ғана бақланатуғынлығын көремиз.

Электронлардың салқын эмиссиясы металлардың бетлериниң физикалық қәсийетлерин, газлердиң адсорбциясын, катализ ҳәм коррозия қубылысларын изертлегенде кеңнен қолланылады. Салқын эмиссиялы эмиттерлер (автоэлектронлық эмиттерлер) үлкен тығызлыққа ийе j тоқларды алыў процесслеринде қолланылады. Металлдың бетине жақын орынларда жүдә үлкен болған ε электр майданын пайда етиў ушын автоэлектронлық эмиттерлерди қыйсықлығы киши радиусқа ийе бетлер түринде соғады.

Радиоактивли α-ыдыраў. Бөлекшелердиң потенциал барьер арқалы өтиўине және бир мысал радиоактивли ядролардың α-ыдыраўы болып табылады. Бундай ыдыраўда радиоактивли ядро өзинен α-бөлекшелерин шығарады. α-бөлекшеси гелий атомының ядросы болып табылады ҳәм ол еки протоннан ҳәм еки нейтроннан турады. α-бөлекшесин шығаратуғын ядроны ана ядро деп атайды. α-бөлекшесин шығарған ядроның майданындағы усы α-бөлекшесиниң потенциал энергиясы 4.11-сүўретте келтирилген.



4.11-сүўрет.



4.12-сүўрет.

α-бөлекше менен ядро арасындағы қашықлық үлкен болғанда олар арасында Кулон ийтерисиўши күши тәсир етеди ҳәм бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze\cdot 2e}{r}$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада Ze арқалы α-бөлекше шығарған ядроның заряды, $2e$ арқалы α-бөлекшесиниң заряды белгиленген. α-бөлекшеси менен оны шығарған ядро арасындағы Кулон күши ядроның өлшемлери менен салыстырарлықтай кашықлықларға шекем тәсир етеди (яғный $r_0 \sim 10^{-14} - 10^{-15}$ м аралыққа шекем). $r \le r_0$ қашықлықларында α-бөлекшелери менен ядро арасында күшлирек болған ядролық тартысыў күшлери тәсир етеди. Ядроның ишинде α-бөлекшеси потенциал шуқырдың ишинде жайласқан болады ҳәм ол ядродан тек туннель эффекти есабынан шыға алады. Туннелеўдиң итималлығын есаплаўлардың нәтийжелери шуқырдың формасынан күшли ғәрезли емес. Сонлықтан шуқырды туўры мүйешли деп есаплаўға ҳәм оның кеңлиги ядроның радиусы r_0 арқалы анықланады деп есаплаўға болады.

Эксперименталлық изертлеўлердиң нәтийжелери α-ыдыраўдағы потенциал шуқырдың бийиклиги шама менен 20-30 МэВ шамасына тең екенлигин, ал нурландырылған α-бөлекшелериниң энергияларының мәнислери 5-6 МэВ шамасында екенлигин көрсетеди. Бул шама барьердиң бийиклигинен әдеўир киши ҳәм сонлықтан α-бөлекшелери ядро тәрепинен тек туннель эффектиниң салдарынан шығарылады.

Ядро физикасында радиоактивли ыдыраў нызамы белгили. Бул нызам еле ыдырамаған ядролардың санының ўақытқа байланыслы өзгериўин сыпатлайды ҳәм

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}. \qquad (2.4.55)$$

түринде жазылады. Бул формулада N_0 арқалы дәслепки ўақыт моментиндеги (яғный $t = 0$ ўақыт моментиндеги) еле ыдырамаған (еле α-бөлекшелерин шығармаған) ядролардың саны белгиленген. Ал еле ыдырамаған ядроларды биз жоқарыда ана ядролар деп атаған едик. λ шамасы ыдыраў турақлысы деп аталады ҳәм ядролардың ыдыраў тезлигин сыпатлайды.

Ыдыраў турақлысы λ менен α-бөлекшесиниң потенциал барьер арқалы D өтиў коэффициенти арасындағы байланысты табамыз. Мейли ядроның радиусы r_0 шамасына тең, ал α-бөлекшесиниң тезлиги v болсын. Бундай жағдайда α-бөлекшесиниң потенциал барьердиң дийўалына ўақыт бирлигиндеги соқлығысыўларының 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 α-бөлекшелерин шығарған ядролардың саны dN шамасына тең болады ҳәм оның мәнисин

$$dN = -N(t)\frac{v}{2r_0}Ddt$$

формуласының жәрдеминде анықлаймыз. Бул формуладағы (-) белгиси dN ядролар санының еле ыдырамаған ядролардың есабынан қуралатуғынлығы 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 турақлысының мәниси потенциал барьер арқалы өтиў 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 таллаўды биз басқышпа-басқыш алып барамыз ҳәм дәслеп тек бир дийўалының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырды қараймыз (2.4.12-сүўрет). Бундай мәселе әмелий жақтан әҳмийетке ийе. Себеби арасында тартылыс күшлери тәсир ететуғын еки бөлекше (буған мысал ретинде молекуланы пайда етиўши еки атомды қараўға болады) өзиниң түри бойынша биз қарайын деп атырған моделге жақын.

Тек бир шексиз бийик дийўалға ийе бир өлшемли шуқыр.

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_0, & x > 0. \end{cases}$$

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 үйрениўге 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 (яғный бөлекшени потенциал шуқырда жайласқан деп есаплаймыз). I область ушын Шредингер теңлемеси (2.4.6)

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0, \qquad (2.4.56)$$

ал II область ушын

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi_2(x) = 0 \qquad (2.4.57)$$

түрине енеди. Белгилеўлер киргиземиз:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \text{ ҳәм } k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}. \qquad (2.4.58)$$

Усы аңлатпаларды пайдаланып (2.4.56)- ҳәм (2.4.57)-аңлатпаларды

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0, \qquad (2.4.59a)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) = 0 \qquad (2.4.59b)$$

түрине келтиремиз. (2.4.59)-теңлемелерди шешип $\psi_1(x)$ ҳәм $\psi_2(x)$ функцияларын табамыз

$$\psi_1(x) = A\sin(k_1x + \alpha), \qquad (2.4.60a)$$

$$\psi_2(x) = Be^{k_2x} + Ce^{-k_2x}. \qquad (2.4.60b)$$

Толқын функциялары ушын қойылатуғын шәртлерди пайдаланамыз. Толқын функциясы барлық ўақытта да шекли болыўы керек. Ал (2.4.60b)-аңлатпадағы биринши қосылыўшы $x \to \infty$ шегинде шексиз өседи. Сонлықтан B коэффициентиниң нолге тең болыўын талап етиў керек болады. Буннан $\psi_2(x) = Ce^{-k_2x}$ теңлемесине ийе боламыз.

Енди шегаралық шәртлерди таллаўға өтемиз. Шуқырдың шеп шегарасындағы $\psi_1(x)$ толқын функциясының үзликсизлиги жоқарыда биз көрип өткендей $\psi_1(x) = 0$ теңлигин тәмийинлейди. Буннан α = 0 екенлигине ийе боламыз. $x = a$ ноқатындағы толқын функцияларын ҳәм оның туўындыларын жалғастырыў шәрти

$$\begin{gathered} A\sin k_1 a = Ce^{-k_2 a}, \\ k_1 A\cos k_1 a = -k_2\, Ce^{-k_2 a} \end{gathered} \tag{2.4.61}$$

теңлемелер системасын береди. (2.4.61)-теңлемелердеги биринши теңлемени екиншисине бөлсек

$$\frac{1}{k_1}\, tg\, k_1 a = -\frac{1}{k_2} \tag{2.4.62}$$

қатнасына өтемиз. Бул қатнас болса шуқырдағы бөлекшениң энергия спектрин анықлайды.

(2.4.62)-теңлеме трансцендент теңлеме болып табылады. Сонлықтан E энергиясының мәнисин анық түрде есаплаўдың мүмкиншилиги жоқ. Усы жағдайға байланыслы (2.4.58)-аңлатпаны есапқа алған (2.4.62)-аңлатпа жәрдеминде бөлекшениң энергиясының спектриниң дискрет екенлигин, яғный шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясының квантланатуғынлығын көрсетиўге болады.

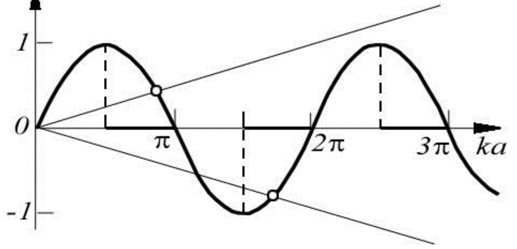
(2.4.62)- трансцендент теңлеме

$$\sin k_1 a = \pm\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}}\, k_1 a \tag{2.4.63}$$

түрине аңсат алып келинеди. (2.4.63)-теңлемениң оң ҳәм шеп тәреплерин $k_1 a$ көбеймесиниң функциялары деп есаплап олардың графиклерин сызамыз (2.4.13-сүўрет). Синусоида менен туўрының кесилисиў ноқатлары биз излеп атырған толық энергия E ниң мәнислерине сәйкес келетуғын (2.4.63)-теңлемениң коренлерин береди. (2.4.62)-аңлатпаға сәйкес $tg\, k_1 a < 0$ болғанлықтан биз $k_1 a$ көбейтиўшисиниң тек

$$\frac{\pi}{2} + \pi m < k_1 a < \pi + \pi m$$

шәртин қанаатландыратуғын мәнислерин ғана есапқа аламыз. $m = 0, 1, 2, 3, \ldots$ 4.13-сүўретте $k_1 a$ ның мәнислериниң сәйкес областлары абсцисса көшеринде жуўан сызықлар менен көрсетилген.



2.4.13-сүўрет

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 сызықтың қыялығы сонша төмен ҳәм бул туўры синусоида менен көп санлы кесилисиў ноқатларына ийе болады. Демек потенциал шуқырда соншама көп энергия қәддилери жайласады деген сөз.

Шуқырда ең кеминде энергияның бир қәдди болатуғын шәртти табамыз. Бундай жағдайда (2.4.63)-теңлемениң оң тәрепине сәйкес келиўши туўрының қыялығын анықлайтуғын

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}} < \frac{1}{\pi/2}$$

теңсизлигин қанаатландырыўы керек. Буннан U_0a^2 ушын

$$U_0a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \qquad (2.4.64)$$

шәртине ийе боламыз.

Бул аңлатпаны толығырақ таллаймыз. Усы шәрт орынланғанда ғана шуқыр ишиндеги бөлекше ушын Шредингер теңлемеси шешимге ийе болады, яғный 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 (яғный 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 усындай жағдайлар көп ушырасады. Мысалы еки нейтрон ҳәм еки протон арасында ядролық тартысыў күшлери тәсир етеди. Бирақ тәбиятта еки протоннан ямаса еки нейтроннан туратуғын байланысқан ҳал ушыраспайды. Себеби бундай бөлекшелердиң бир бири менен тәсирлесиўине сәйкес келетуғын потенциал шуқыр жеткиликли емес тереңликке ҳәм кеңликке ийе.

Протон менен нейтрон арасындағы тәсир етисиў күшиниң шамасы еки протон ямаса еки нейтрон арасындағы тәсир етисиў күшиниң шамасынан азмаз ғана үлкен. Усы азмаз айырма протон менен нейтрон арасындағы байланысқан ҳал – дейтронның пайда болыўы ушын жеткиликли. Протон менен нейтрон арасындағы тәсирлесиўге сәйкес келетуғын потенциал шуқырда энергияның тек бир қәдди жайласады. Демек дейтрон барлық ўақытта да тийкарғы ҳалда жайласады, оның қозған ҳаллары пүткиллей жоқ.

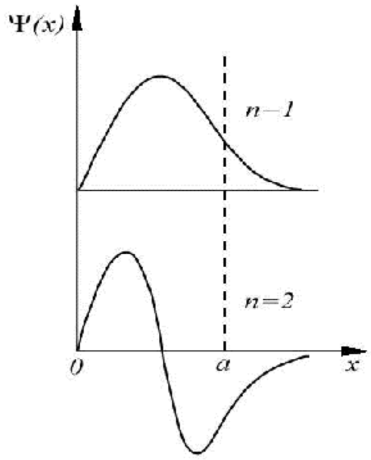
Биз қарап атырған мәселениң толқын функцияларын таллаўға қайтып келемиз. Жоқарыда $x < 0$ болғанда $\psi(x) \equiv 0$ теңлигиниң орынланатуғыны айтып өтилген еди. I областта, яғный потенциал шуқырда толқын функциясы

$$\psi_1(x) = A\sin k_1x$$

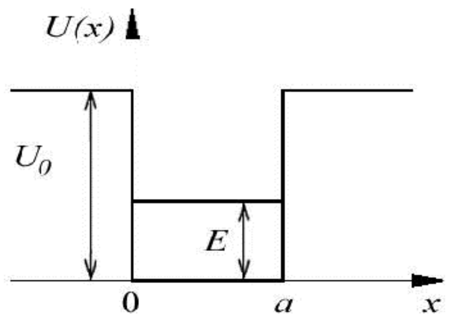
түрине ийе. Бул еки шексиз бийик дийўалға ийе шуқырда толқын функциясының осуилляцияланыўшы шешимге ийе болатуғынлығын көрсетеди. II областтағы толқын функциясының түри үлкен қызығыўшылық пайда етеди

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2 x}.$$

$\psi_2(x)$ толқын функциясы потенциал шуқырдың сыртында нолге тең емес, ал x қашықлығына байланыслы экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Бул жағдай өз гезегинде бөлекшени табыўдың итималлығының потенциал шуқырдың сыртында да нолге тең болмайтуғынлығын аңғартады (2.4.7-мәселеге қараңыз). A ҳәм C константалары арасындағы қатнас нормировка шәртиниң жәрдеминде анықланады. Бул мәселе ушын толқын функцияларының сапалық түрлери 4.20-сүўретте келтирилген.



4.14-сүўрет. (2.4.20-



4.15-сүўрет. (2.4.21)

Енди $E > U_0$ болған жағдайды қараймыз. I ҳәм II областлар ушын Шредингер теңлемесин сәйкес

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0 \tag{2.4.65a}$$

ҳәм

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2\psi_2(x) = 0 \tag{2.4.65b}$$

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

$$\psi_1(x) = A' \sin k_1 x = \frac{A'}{2i}\left(e^{ik_1 x} - e^{-ik_1 x}\right) \tag{2.4.66}$$

түрине ийе. (2.4.65b) теңлемесиниң шешимин былайынша жазамыз:

$$\psi_2(x) = D\sin(k_2 x + \varphi) = B'e^{ik_2 x} - C'e^{ik_2 x}. \tag{2.4.67}$$

$x = a$ ноқатында функцияларды ҳәм олардың туўындыларын жалғастырыў операциясын орынласақ төмендегидей теңлемелер системасына өтемиз:

$$\frac{A'}{2i}\left(e^{ik_1a} - e^{-ik_1a}\right) = B'e^{ik_2a} - C'e^{-ik_2a},$$
$$\frac{A'}{2i}ik_1\left(e^{ik_1a} - e^{-ik_1a}\right) = ik_2\left(B'e^{ik_2a} - C'e^{-ik_2a}\right).$$

Бул теңлемелер системасын B' ҳәм C' амплитудаларына қарата шешсек, онда олардың A' амплитуда арқалы аңлатпаларын аламыз:

$$\begin{aligned} B' &= \frac{A'}{4i}e^{-ik_2a}\left[e^{ik_1a}\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right) - e^{-ik_1a}\left(\frac{k_1}{k_2}-1\right)\right], \\ C' &= \frac{A'}{4i}e^{ik_2a}\left[e^{ik_1a}\left(\frac{k_1}{k_2}-1\right) - e^{-ik_1a}\left(\frac{k_1}{k_2}+1\right)\right]. \end{aligned} \qquad (2.4.68)$$

(2.4.68)-аңлатпалардың k_1 менен k_2 ниң қәлеген мәнислериндеги (яғный бөлекшениң энергиясының қәлеген мәнисиндеги) B' ҳәм C' амплитудаларының мәнислерин анықлайтуғынлығын атап өтемиз.

$E > U_0$. Бул $E > U_0$ шәрти орынланғанда бөлекшениң энергиясының үзликсиз спектрге ийе болатуғынлығын көрсетеди.

(2.4.66)- ҳәм (2.4.67)-толқын функцияларын таллаймыз. Олардың ҳәр қайсысы де Бройльдиң 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 қосылыўшы) бир бөлеги $x = a$ шуқырдың шегарасында шағылысады ҳәм (2.4.67)-аңлатпаның биринши қосылыўшысына үлес қосады. Қалған бөлеги сынады (2.4.66-аңлатпадағы екинши қосылыўшы). Буннан кейин толқын $x = 0$ диййўалында шағылысады (2.4.66-аңлатпадағы биринши қосылыўшы) ҳәм шуқырдың $x = a$ шегарасында қайтадан сынады. Усының нәтийжесинде (2.4.57)-аңлатпаның биринши қосылыўшысына үлес қосады ҳәм шексизликке кетеди.

Шекли тереңликке ийе туўры мүйешли потенциал шуқыр. Шекли тереңликке ийе туўры мүйешли потенциал шуқырдың ишинде жайласқан бөлекшени қараймыз (2.4.14-сүўрет). Бундай модель атомның әтирапындағы электронның қасындағы электронның қозғалысын сапалық түрде тәрийиплей алады. Сонлықтан атом физикасы менен қатты денелер физикасында кеңнен қолланылады.

Мейли бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0, \quad I \text{ область} \\ 0, & 0 < x < a, \quad II \text{ область} \\ U_0, & x > a, \quad III \text{ область}. \end{cases}$$

түрине ийе болсын.

Дәслеп $E < U_0$ болған жағдайды қараймыз (яғный бөлекше шуқырдың ишинде жайласқан деген сөз). I ҳәм III областлар ушын (потенциал шуқырдан сыртта) Шредингер теңлемесин былайынша жазамыз

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi_{1,3} = 0$$

$k_1 = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$ белгилеўин қабыл етемиз ҳәм

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} - k_1^2\psi_{1,3} = 0$$

теңлемесин аламыз.

Бул теңлеме

$$\psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x},$$
$$\psi_3(x) = A_3 e^{k_1 x} + B_3 e^{-k_1 x}$$

түриндеги шешимлерге ийе болады. Толқын функциясының шекли болыўы ушын $B_1 = 0$ ҳәм $A_3 = 0$ болыўы шәрт.

II областта, яғный 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:

$$\begin{gathered}\psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x},\\ \psi_2(x) = C\sin(k_2 x + \alpha),\\ \psi_3(x) = B_3 e^{-k_1 x}.\end{gathered} \tag{2.4.69}$$

$x = 0$ ҳәм $x = a$ ноқатларында толқын функцияларын ҳәм олардың туўындыларын жалғастырыў барысында

$$tg\ \alpha = \frac{k_2}{k_1},$$
$$tg\ (k_2 a + \alpha) = -\frac{k_2}{k_1}$$

еки аңлатпасын аламыз. Оларды

$$\sin\alpha = \frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}},$$
$$\sin(k_2 a + \alpha) = -\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}}$$

түрине алып келиў қыйын емес. Бул еки аңлатпадан α ны жоғалтып

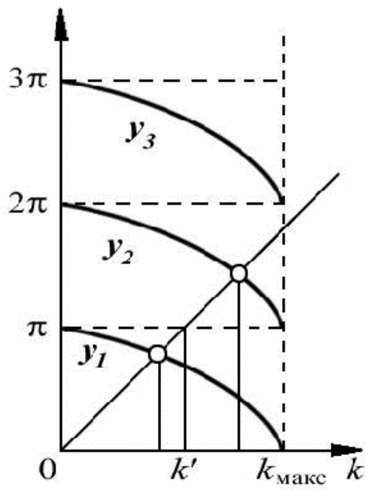
$$k_2 a = \pi n - 2\arcsin\left(\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}}\right), \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.4.70}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпа болса шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергия спектрин анықлайды. n ниң терис мәнислери ямаса оның $n = 0$ болған мәниси мәселениң шәртин қанаатландырмайды. Себеби (2.4.70)-аңлатпаның шеп тәрепи терис мәниске ийе бола алмайды.

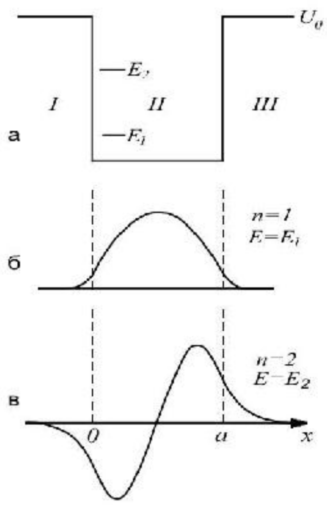
arcsin функциясының аргументиниң мәниси 1 ден үлкен бола алмайды. Сонлықтан

$$\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}} \leq 1$$

ҳәм k_2 шамасының мәниси $k_{2max} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mU_0}$ шамасы менен шекленген.



2.4.16-сүўрет.



2.4.17-сүўрет.

Бул жағдайда да графикалық усыллардың жәрдеминде де шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясының квантланған, яғный (2.4.70)-аңлатпаның жәрдеминде анықланған энергия спектриниң дискрет екенлигин көрсетемиз. Буның ушын (2.4.70)-теңлемениң шеп ҳәм оң тәреплериниң k_2 шамасынан байланысының графиклерин сызамыз. Шеп тәрепиниң графиги $y = k_2 a$ туўры сызығы болып табылады. Оның қыялығы шуқырдың кеңлиги a ның өсиўи менен өседи. (2.4.70)-теңлемениң шеп тәрийипиниң $n = 1, 2, 3$ мәнислери ушын сызылған графиклери y_1, y_2 ҳәм y_3 иймекликлери менен берилген. $y = k_2 a$ туўры сызығы менен y_i иймеклериниң кесилисиў ноқатлары (2.4.70)-теңлемениң коренлери болып табылады. Демек k_2 шамасының мәнислери, яғный оның менен байланыслы болған E энергияның мәнислериниң спектри дискрет болып шығады. Шуқырдың кеңлиги a қаншама үлкен болса, яғный $y = k_2 a$ туўры сызығы тик болса, онда ол y_i иймекликлери менен көп ноқатта кесилиседи. Ҳәр бир кесилисиў ноқаты энергияның белгили бир қәддине 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, яғный

$$U_0 < \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

шәрти орынланғанда шуқырда тек бир энергия қәдди қалады. Тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциал шуқырда ең кеминде бир энергия қәддиниң, яғный бир байланысқан ҳалдың болатуғынлығын атап өтемиз.

Шуқырдың тереңлиги шексиз үлкейгенде (яғный $U_0 \to \infty$ шәрти орынланғанда) (2.4.70) энергия спектриниң шексиз терең потенциал шуқыр ушын алынған (яғный диййаллары шексиз бийик болған) (2.4.16)-спектрге өтетуғынлығына аңсат көз жеткериўге болады.

Биз қарап атырған мәселедеги (2.4.69)-толқын функцияларының сапалық түри 4.17-сүўретте келтирилген. Потенциал шуқырдың ишинде толқын функциялары синусоида түрине ийе, ал шуқырдан сыртта экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Үлкен энергияға ийе ҳаллар ушын (яғный $U_0 - E$ айырмасы киши болғанда) толқын функциялары шуқырдың шетлеринде үлкен мәнислерге ийе болады ҳәм шуқырдан қашықласқанда әстелик пенен киширейеди.

Енди бөлекшениң энергиясы үлкен, яғный $E > U_0$ шәрти орынланатуғын жағдайды қараймыз. (2.4.6) Шредингер теңлемеси I, II ҳәм III областларда төмендегидей 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: биреўи $+x$ бағытында, ал екиншиси оған қарама-қарсы бағытта қозғалады. Анықлық ушын бөлекше шуқырға x тың терис мәнислери тәрептен жақынласады деп есаплайық (бул бөлекшениң шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалатуғынлығына сәйкес келеди). Бундай жағдайда $\psi_3(x)$ ушын жазылған аңлатпадағы екинши қосылыўдың болмаўы керек. Себеби бул қосылыўшы бөлекшениң $+\infty$ тен шуқырға қарай қозғалыўына, яғный 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, екиншиси шуқырда шағылысқан толқынға сәйкес келеди. $\psi_2(x)$ функциясындағы биринши қосылыўшы $A_2 e^{ik_2 x}$ толқыны $x = 0$ шегарасында шағылысқан толқынды, екинши қосылыўшы $x = a$ 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 (яғный $A_1 = 1$).

$x = 0$ ҳәм $x = a$ ноқатларында толқын функцияларын ҳәм олардың туўындыларын жалғастырыў шәртлери төмендегидей теңлемелер системаларына алып келеди

$$1 + B_1 = A_2 + B_2,$$

$$i\tilde{k}_1 - i\tilde{k}_1 B_1 = ik_2 A_2 - ik_2 B_2,$$
$$A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{i\tilde{k}_1 a},$$
$$ik_2 A_2 e^{ik_2 a} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 a} = ik_1 A_3 e^{i\tilde{k}_1 a}.$$

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 (яғный энергия E ниң қәлеген мәнислеринде шешимге ийе болғанлықтан) бөлекше үзликсиз энергия спектрине ийе болады деген жуўмаққа келемиз.

Өткен толқынның амплитудасы A_3 ушын төмендегидей аңлатпа аламыз:

$$A_3 = \frac{4\tilde{k}_1 k_2 e^{i\tilde{k}_1 a}}{\left(\tilde{k}_1 + k_2\right)^2 e^{ik_2 a} - \left(\tilde{k}_1 - k_2\right)^2 e^{ik_2 a}}.$$

Бөлекшениң шуқырдың үсти менен өтиўи итималлығын характерлейтуғын D өтиў коэффициенти (2.4.37)-аңлатпаның жәрдеминде есапланады. Келип түсиўши ҳәм өткен толқынлар ушын итималлық ағысы тығызлығы векторы (2.4.36)-, (2.4.37)- ҳәм (2.4.70)-аңлатпаларға сәйкес

$$\left|\vec{J}_{\text{к.т}}\right| = \frac{\hbar\tilde{k}_1}{m}, \quad \left|\vec{J}_{\text{өтиўши}}\right| = \frac{\hbar\tilde{k}_1}{m}|A_3|^2$$

түрине ийе болады. Солай етип

$$D = |A_3|^2 = \left|\frac{4\tilde{k}_1 k_2 e^{i\tilde{k}_1 a}}{\left(\tilde{k}_1 + k_2\right)^2 e^{ik_2 a} - \left(\tilde{k}_1 - k_2\right)^2 e^{ik_2 a}}\right|^2 \qquad (2.4.73)$$

формуласына ийе боламыз. (2.4.73)-аңлатпаға (2.4.72)-аңлатпадан $\tilde{k}_1$ менен k_2 шамаларының мәнислерин қойсақ

$$D = \left[1 + \frac{U_0^2 \, sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)}\right]^{-1} \qquad (2.4.74)$$

формуласын аламыз. (4/74)-аңлатпадан өтиў коэффициенти D ның бөлекшениң энергиясы E менен потенциал шуқырдың тереңлиги 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 шағылысыўының итималлығының нолге тең емес екенлигин аңғартады. Классикалық физикада пүткиллей жоқ бундай қубылыс бөлекшеде толқынлық қәсийетлердиң бар болыўы менен түсиндириледи.

$sin^2 k_2 a = 0$ болғанда өтиў коэффициенти D бирге тең болады. Бундай жағдайда бөлекше шуқырдың шегараларында шағылыспайды. Бул шәрт $k_2 a = \pi n$ болғанда, яғный бөлекшениң энергиясы

$$E = \frac{\pi^2 n^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (2.4.75)$$

шамаларына тең болған жағдайларда орынланады.

Жоқарыда келтирилген таллаў 2-бапта келтирилген Рамзауэр тәжирийбесин квантлық механика түсиндире алады. Бул тәжирийбеде инерт газы атомларының энергиясы белгили бир мәнислерге ийе болған электронлар ушын мөлдир екенлигин көрсетти. Рамзауэр тәжирийбесиниң нәтийжелерин үш өлшемли потенциал шуқыр областындағы электронның қозғалысын қарап болғаннан кейин толығырақ түсиндириўге болатуғынлығы сөзсиз. Бирақ бир өлшемли мәселени шешкенде алынған нәтийжелер де Рамзауэр тәжирийбесиниң нәтийжелерин тек сапалық жақтан емес, ал санлық жақтан да түсиндириў мүмкиншилигине ийе.

$k_2 a = \pi n$ шәртин былайынша да жазыўға болады

$$2a = \lambda_{db} n. \tag{2.4.75}$$

(2.4.75)-аңлатпада λ_{db} арқалы шуқырдың ишиндеги бөлекшениң де Бройль толқын узынлығы белгиленген. Бул шәрт шуқырдың еки шегарасында шағылысқан толқынлардың интерференциясының салдарынан толқынлардың бир бирин сөндириўине сәйкес келеди. Толқын оптикасында бақланатуғын тап усындай қубылысты оптиканы жақтыландырыў деп аталады.

4.8-**мәселе**. Массасы m болған бөлекше бир өлшемли, дийўалларының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырда жайласқан. (2.4.12-сүўрет). Шуқырдың тереңлиги U_0, ал кеңлиги a шамасына тең. Бөлекшеде тек бир $E = \frac{U_0}{2}$ шамасына тең энергияның қәдди бар деп есаплап 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) $x > a$ областында бөлекшени табыўдың итималлығын.

Шешими: $E < U_0$ теңсизлиги орынланғанда бөлекшениң энергиясының мүмкин болған мәнислерин анықлайтуғын 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 π/2 ден π ге шекемги шеклер ишинде жайласқан болыўы керек. (2.4.63-формуладан кейинги таллаўды 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 қанаатландырыўының керек екенлигин көремиз. Енди бөлекшениң координатасының ең итимал болған $x_{\text{ең итимал}}$ мәнисин табамыз.

Бөлекшени шуқырдың ишинде табыўдың итималлығының тығызлығы толқын функциясының модулиниң квадратының жәрдеминде анықланатуғынлығын билемиз. Бул шаманы $|\psi(x)|^2$ арқалы белгилеймиз. Шуқырдың ишинде (2.4.60a аңлатпаға қараңыз) $|\psi(x)|^2 \sim sin^2 k_1 x$ болғанлықтан, экстремум мәселесин шешиў арқалы

$$\frac{d|\psi(x)|^2}{dx} \sim \sin 2\, k_1 x = 0$$

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 қалдырыўымыз 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 табыўдың итималлығын табамыз. P_1 ҳәм P_2 арқалы бөлекшени сәйкес шуқырдың ишинде ҳәм сыртында табыўдың итималлығын белгилейик. (2.4.60a) ҳәм (2.4.60b) 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 жалғастырыў 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 нәтийже ~ 15 % шамасына тең жеткиликли дәрежедеги итималлық пенен бөлекше потенциал шуқырдың сыртында бола алады деген жуўмақты аңғартады.

4.9-**мәселе**. Массасы m болған бөлекше тереңлиги U_0 болған туўры мүйешли потенциал шуқырға шептен оң тәрепке қарай келип түседи (2.4.15-сүўрет). Бөлекшениң толық энергиясы $E > U_0$ белгили деп есаплап бөлекшениң шуқырдан шағылысыў коэффициенти максималлық мәниске ийе болатуғындай шуқырдың кеңлиги a ның мәнисин есаплаңыз.

Шешими: Потенциал шуқырдағы бөлекшениң шағылысыўы квантлық эффект болып табылады. Классикалық бөлекше шуқырда шағылыспайды. Шуқыр областында оның кинетикалық энергиясы менен тезлиги өседи. Толқынның қәлеген тосқынлықтан шағылысатуғынлығы сыяқлы квантлық бөлекше толқынлық қәсийетке ийе болғанлықтан шуқырда шағылысады.

R шағылысыў коэффициенти менен D өтиў коэффициенти бир бири менен $R = 1 - D$ қатнасы менен байланысқан болғанлықтан шағылысыўдың 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 мәнислериндеги D ның мимимумы $|sin^2 k_2 a| = 1$ болған жағдайда орын алады. Буны былайынша жазамыз

$$k_2 a = (2m + 1)\frac{\pi}{2}, \quad m = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Буннан бөлекшениң шағылысыўы 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 изертлегенде әҳмийетли орынды ийелейди. Бундай тербелислерге мысал ретинде қатты денелердеги, молекулалардағы атомлардың тербелислерин келтириў мүмкин.

x көшери бойлап квазисерпимли $F = -kx$ күшиниң тәсиринде жүзеге келетуғын бир өлшемли гармоникалық осцилляторды қараймыз. Бундай осциллятордың потенциал энергиясы

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\,\omega_0^2\,x^2}{2} \tag{2.4.77}$$

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 алып келинеди.

Дәслеп классикалық гармоникалық осциллятордың қәсийетлерин қарап өтемиз. Мейли толық энергиясы E болған бөлекше (2.4.77) күш майданында тербелсин (2.4.18-сүўрет). 2.4.18-сүўреттеги a_0 ҳәм $-a_0$ ноқатларында бөлекшениң толық энергиясы потенциал энергияға ийе болады [яғный $E = U(x)$] ҳәм сонлықтан бул ноқатлар бурылыў ноқатлары да болып табылады. Бөлекше потенциал шуқырдың ишинде оның дийўаллары арасындағы $[-a_0, a_0]$ кесиндисинде тербелмели түрде қозғалады. Оның шеклеринен бөлекше шығып кете алмайды. Тербелис амплитудасы a_0 ның мәниси $a_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}$ формуласының жәрдеминде анықланады.

Квантлық механиканда гармоникалық осциллятор ҳаққындағы мәселени шешкенде (2.4.77)-потенциал энергиясы қойылған (2.4.6)-Шредингер теңлемесин шешиў керек болады

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - \frac{m\,\omega_0^2\,x^2}{2}\right]\psi = 0, \qquad -\infty < x < +\infty. \tag{2.4.78}$$

Төмендегидей шамаларды киргиземиз

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega_0} \text{ ҳәм } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \tag{2.4.79}$$

және $\xi = \frac{x}{x_0}$ бирликлери жоқ жаңа өзгериўшиге өтсек (2.4.78)-аңлатпаны

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[\eta - \xi^2]\psi = 0 \tag{2.4.80}$$

түрине алып келемиз. Таллаўлар (2.4.80)-теңлеменин шешимлериниң η шамасының барлық мәнислеринде емес, ал

$$\eta = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

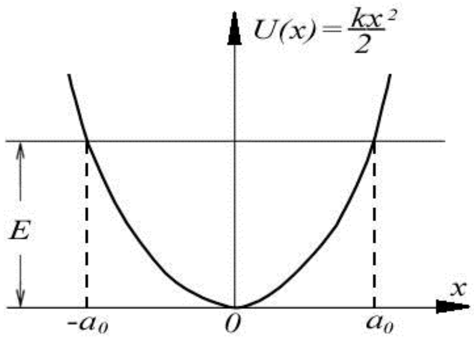
мәнислеринде ғана үзликсиз ҳәм шекли болатуғынлығын көрсетеди.

(2.4.79)-аңлатпаға сәйкес осциллятордың энергиясы болған E шамасын η арқалы аңғартсақ, онда

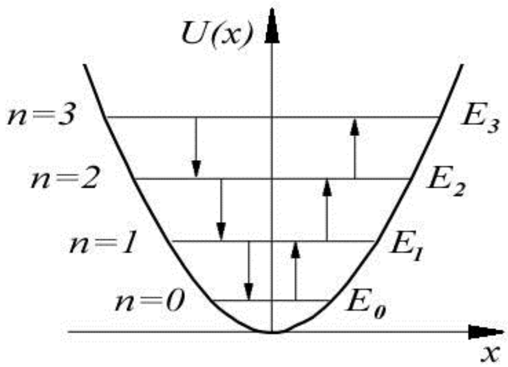
$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \qquad (2.4.81)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул формула гармоникалық осциллятордың энергиясының квантланыў нызамын анықлайды. Биз бул жерде гармоникалық осциллятордың энергиясының қәддилериниң эквидистантлық екенлигин көремиз (яғный бир биринен бирдей $\Delta E = \hbar\omega_0$ қашықлықларында жайласады). Туўры мүйешли потенциал шуқырда жайласқан бөлекше ушын биз басқаша нәтийже алғанлығымызды атап өтемиз (2.4.19-сүўрет) .

(2.4.81)-спектрдиң және бир әҳмийетли өзгешелиги ноллик тербелислер деп аталатуғын тербелислердиң 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 болыўы барлық квантлық системалар ушын тән ҳәм анықсызлық қатнасларының нәтийжеси болып табылады. Ҳақыйқый квантлық системаларнда, мысалы кристалларда бундай тербелислердиң абсолют нол температурасына жүдә жақын температураларда да сақланатуғынлығын көп санлы тәжирийбелер көрсетеди. Абсолют нол температурада жыллылық тербелислериниң толық сөниўи керек.



2.4.18-сүўрет.



2.4.19-сүўрет.

Ноллик тербелислер физикада оғада үлкен орын ийелейди. Мысалы нормал басымларда суйық гелий абсолют нол температурада да кристалланбайды. Ноллик тербелислердиң бар екенлигин көп санлы тәжирийбелер дәлиллейди.

Ноллик тербелислериниң энергиясы $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ шамасының мәнисиниң қандай болатуғынлығын анықсызлық қатнаслары тийкарында баҳалайық (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 салмақлық аўҳалы орынланатуғын ноқатта жайластырамыз. Бундай жағдайда координатаның анықсызлығы Δx

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2}} = \sqrt{a_0^2\,\overline{cos^2\omega_0 t}} = \sqrt{\frac{1}{2}a_0^2}$$

шамасына тең болады. Тербелислер амплитудасы a_0 энергия E менен $E = \frac{1}{2}ma_0^2\omega_0^2$ аңлатпасы арқалы байланысқан. Сонлықтан

$$\Delta x = \sqrt{\frac{E}{m\omega_0^2}}.$$

Тап сол сыяқлы импульстиң анықсызлығы ушын төмендеги аңлатпаға ийе боламыз

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2}} = \sqrt{m^2a_0^2\omega_0^2\,\overline{sin^2\omega_0 t}} = \sqrt{\frac{1}{2}m^2a_0^2\omega_0^2} = \sqrt{mE}.$$

Δx пенен Δp шамаларын $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ анықсызлық қатнасына қойсақ, онда

$$E \geq \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

шәртин 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 Δn арқалы осциллятордың дәслепки ҳәм соңғы қәддилери арасындағы айырма белгиленген. Бирақ бул дурыс емес. Бул курстың шеклеринен шығып кететуғын дәл есаплаўлар гармоникалық осциллятор тәрепинен электромагнит нурларды жутыў менен шығарыўда тек қоңсылас қәддилер арасындағы өтиўлердиң мүмкин екенлигин көрсетеди, яғный

$$\Delta n = \pm 1. \tag{2.4.82}$$

Системаның бир ҳалдан екинши ҳалға өткендеги квантлық санларның өзгериўин анықлайтуғын шәртлерди таңлаў қағыйдалары деп атайды. Солай етип гармоникалық осциллятор тәрепинен электромагнит нурларын шығарыў ҳәм жутыўды характерлейтуғын таңлаў қағыйдасы (2.4.82)-аңлатпа болып табылады.

Енди гармоникалық осциллятордың толқын функцияларын таллаўға өтемиз. Өзгериўши коэффициентлерге ийе дифференциаллық теңлемелер теориясында (2.4.80) теңлемениң шешимлериниң мына түрге ийе болатуғынлығы көрсетиледи:

$$\psi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi), \qquad n = 0, 1, 2, 3, \dots \tag{2.4.83}$$

Бул аңлатпада $H_n(\xi)$ арқалы n-тәртипли Чебышев-Эрмит полиномы белгиленген. Ол төмендеги формула бойынша есапланады:

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \qquad (2.4.84)$$

Бундай полиномлар ушын

$$H_{n+1}(\xi) + 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) = 0$$

рекуррентли аңлатпаның дурыс екенлигин атап өтемиз. Бул рекуррентли аңлатпа $H_0(\xi) \equiv 1$ екенлиги тийкарында барлық n лер ушын $H_n(\xi)$ шамаларының мәнислерин анықлаўға мүмкиншилик береди. Мысалы

$$H_2(\xi) = 2\xi H_1(\xi) - 2H_0(\xi) = 4\xi^2 - 2.$$
$$H_3(\xi) = 2\xi H_2(\xi) - 4H_1(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

ҳәм тағы басқалар. (2.4.83) тиң толқын функциялары ортонормировкаланған, яғный

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \delta_{mn}$$

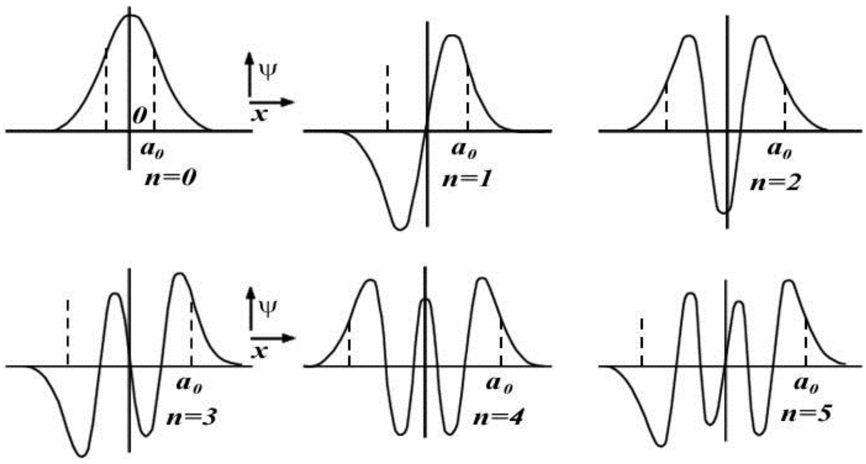
шәртин қанаатландырады. Бул аңлатпада δ_{mn} арқалы (2.4.18) Кронекер символы белгиленген.

Гармоникалық осциллятордың биринши үш энергия қәдди ушын толқын функцияларын келтиремиз

$$n = 0, \;\; \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right),$$
$$n = 1, \;\; \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \qquad (2.4.85)$$
$$n = 2, \;\; \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0\sqrt{\pi}}} \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right) exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right).$$

n квантлық санның 0 ден 5 ке шекемги мәнислериндеги толқын функцияларының графиклери 2.4.20-сүўретте келтирилген. $[-a_0, a_0]$ кесиндиси классикалық осциллятор тербелетуғын областты анықлайды. 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 ғәрезли болады.

2.4.20-сүўрет.



(2.4.83) – (2.4.85) аңлатпалардан гармоникалық осциллятордың толқын функцияларының белгили бир жуплыққа ийе екенлиги келип шығады. Бул толқын функциялары n квантлық санның мәниси жуп ҳәм $n = 0$ болғанда x координатасының жуп функциялары болып табылады. Квантлық сан n ниң мәниси толқын функциясының x көшерин кесип өтиў ноқатларының санын да анықлайды. Тийкарғы ҳалда, яғный $n = 0$ 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 ниң мәниси бир бирликке артқанда гармоникалық осциллятордың толқын функциясы жуплығын өзгертеди ҳәм x көшери менен кесилисиў ноқатын 1 ге арттырады.

Классикалық $[-a_0, a_0]$ областынан сыртта ψ_n толқын функциялары нолге тең емес екенлигин атап өтемиз. Бул квантлық гармоникалық осциллятордың белгили бир итималлық пенен параболалық потенциал областының сыртында да тура алатуғынлығын билдиреди. 4.10-мәселеде тийкарғы ҳалда турған гармоникалық осциллятордың классикалық областының сыртында тура алыў итималлығы есапланған.

n квантлық санының киши мәнислеринде толқын функциясының модулиниң квадраты $|\psi_n(x)|^2$ арқалы анықланатуғын бөлекшени табыўдың итималлығы 2.4.21-сүўретте пунктир сызық пенен көрсетилген классикалық осцилляторды табыўдың итималлығының тығызлығы болған

$$\frac{dP}{dx} = \frac{1}{\pi\sqrt{a_0^2 - x^2}} \qquad (2.4.86)$$

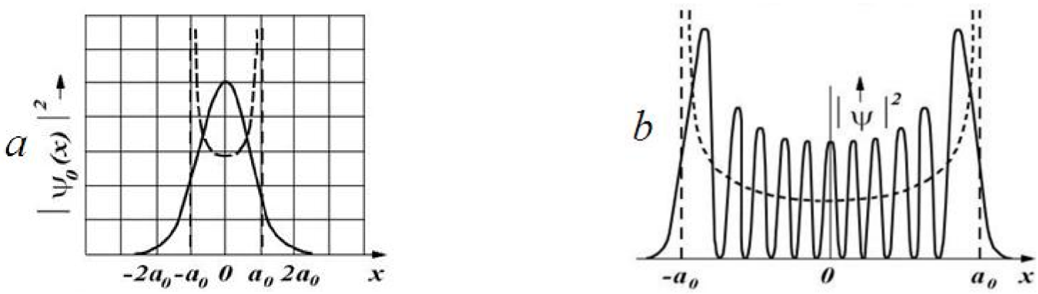
шамасына тең болады.

Классикалық осциллятордың итималлығының тығызлығы болған (2.4.86)-аңлатпаны былайынша алыў мүмкин. Мейли dt ўақыты ишинде бөлекше координатасы x болған ноқаттан координатасы x+dx болған ноқатқа өтетуғын болсын. Яғный оның координатасы кеңлиги dx болған щамаларға өзгеретуғын болсын. Гармоникалық тербелислер ушын $x = a_0 \sin\frac{2\pi}{T}t$ болғанлықтан $dx = a_0\frac{2\pi}{T}\cos\frac{2\pi}{T}t\,dt$. Сонлықтан 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 табыўдың итималлығы $|\psi_n(x)|^2$ максимумы x = 0 ноқатында жайласқан Гаусс иймеклигиниң формасындай формаға ийе болады (2.4.21-сүўреттеги тутас сызық). Ал классикалық осцилляторды табыўдың итималлығының тығызлығы x = 0 ноқатында минималлық мәниске ийе ҳәм бурылыў ноқатларында (бундай ноқатларда бөлекшелердиң тезлиги нолге тең болады, 2.4.21а сүўреттеги пунктир 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 сүўрет). $n \to \infty$ шегинде $|\psi_n(x)|^2$ иймеклиги итималлық тығызлығының классикалық тарқалыў функциясына өтеди.

Биз қарап өткен гармоникалық осциллятор модели ҳәм усы модель менен байланыслы болған бөлекшениң параболалық потенциал шуқырдағы қозғалысы ҳаққындағы мәселе идеалластырыў болып табылады. Бундай мәселени шешиў тербелиўши бөлекшениң тең салмақлық аўҳалы әтирапындағы киши тербелислеринде ғана ҳақыйқатлыққа жақын нәтийжелерди береди. Барлық ҳақыйқый ситуацияларда өзиниң тең салмақлық аўҳалы әтирапында тербелиўши бөлекшениң $U(x)$ потенциал энергиясы (2.4.79) ға салыстырғанда әдеўир қурамалы түрге ийе болады. Сонлықтан амплитуда үлкейген жағдайда амплитуданың базы бир шамасынан баслап бөлекшениң қозғалысы гармоникалық тербелислерден көбирек айырмаға ийе бола баслайды. Бундай қозғалысты ангармоникалық қозғалыс, ал сәйкес осцилляторды ангармоникалық осциллятор деп атайды. Бирақ киши тербелислерде ангармонизмниң тәсири жүдә киши. Сонлықтан бундай жағдайда квантлық механикалық системалардың тербелмели қозғалысын тәрийиплеў ушын гармоникалық осциллятор моделинен пайдаланыў имканиятын береди.



2.4.21-сүўрет

Бул бапта туўры мүйешли ҳәм парабола тәризли потенциал шуқырлардағы бөлекшениң қозғалысларын талладық ҳәм шуқырдың формаларының ҳәр қыйлы болыўына қарамастан шуқырлардағы бөлекшениң қәсийетлеринде көп улыўмалықлардың бар екенлигин көрдик:

1. Шуқырдың ишинде қозғалыўшы бөлекшениң энергия спектри дискрет спектр болып табылады, яғный энергия квантланады.

2. Тийкарғы ҳалда турған бөлекшениң, яғный ең төменги энергия қәддинде турған бөлекшениң энергиясы нолге тең емес.

3. Бөлекшени табыўдың 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, яғный 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 кесилисиў ноқатларының саны 1 ге артады..

Жоқарыда келтирилген қәсийетлердиң барлығының потенциал шуқырдың қәсийетлеринен ғәрезсиз, яғный $U(x)$ потенциал энергияның түринен байланыссыз екенлигин атап өтемиз.

Және бир аўҳалды 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 үстинен қозғалатуғын болса ($E > U_0$ болған жағдайда) оның энергия спектри үзликсиз 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 (яғный $-a_0 \leq x \leq a_0$ областының сыртында, a_0 арқалы классикалық тербелислердиң 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, яғный

$$\frac{ka_0^2}{2} = \frac{\hbar\omega_0}{2}.$$

Буннан классикалық тербелислердиң 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 өзгериўшисиниң 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 атаймыз. Бул интеграл итималлықлар теориясында, теориялық ҳәм математикалық физикада кеңнен қолланылады. Ҳәзирги заман универсаллық программалаў пакетлери бул интегралдың мәнисин аңсат есаплап бере алады. Мысалы Mathematica 8.0 тилинде $N[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy]$ командасы менен есаплаў жүргизгенде 0.8427007929497149 нәтийжесин береди. Демек

$$P_{\text{кл}} = 0{,}8427 \approx 0{,}84.$$

Демек бөлекшениң классикалық областының сыртында табыўдың итималлығы

$$P = 1 - P_{\text{кл}} \approx 0{,}16$$

шамасына тең екен.

Солай етип тийкарғы ҳалдағы гармоникалық осциллятордың классикалық областтан сыртта табылыўының итималлығы 16 процентке тең, яғный әдеўир үлкен шаманы қурайды.

4.11-**мәселе**. Жийилиги ω_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 $\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$ түринде жазылады. $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$.

Биз қарап атырған мәселедеги потенциал ҳәм кинетикалық энергия операторлары былайынша жазылады:

$$\hat{U} = \frac{m_0 \omega_0^2 x^2}{2} \text{ ҳәм } \hat{E}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}.$$

(3.62)-аңлатпаға сәйкес кинетикалық энергиясының орташа мәниси $\langle E_k \rangle$ менен потенциал энергиясының орташа мәниси $\langle U \rangle$ былайынша анықланады

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\, \hat{U}\, \psi_1(x) dx, \quad \langle E_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\, \hat{E}\, \psi_1(x) dx$$

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

$$\langle U\rangle = \frac{m_0\omega_0^2 x_0^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{x}{x_0}\right)^4 e^{\frac{x^2}{x_0^2}}\, d\left(\frac{x}{x_0}\right) = \frac{m_0\omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} y^4 e^{-y^2}dy =$$

$$= \frac{2m_0\omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty} y^4 e^{-y^2}dy = \frac{2m_0\omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}}\ I_1$$

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 туўындысы

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\frac{2}{x_0}\left(-\frac{3x}{x_0^2}+\frac{x^3}{x_0^4}\right)e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

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 усындай тастыйықлаўдың гармоникалық осциллятордың басқа да қәлеген ҳалы ушын да дурыс екенлигин көрсетиўге болады. Биз 2.3-параграфта квантлық механиканда бөлекшениң толық энергиясының кинетикалық ҳәм потенциал энергиялардың қосындысынан туратуғынлығы ҳаққында гәп еткенде тек ғана энергияның орташа мәнислери нәзерде тутылатуғынлығын атап өткен едик. Ҳәзир алынған нәтийжелер де бундай тастыйықлаўдың дурыс екенлигин және бир рет дәлиллейди.

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 турақлы шама белгиленген. Бөлекшениң энергиясының меншикли мәнислерин ҳәм n −қәддиниң айныў санын табыңыз.

Шешими: x, y ҳәм z көшерлери бойындағы қозғалыслар бир биринен ғәрезсиз 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 ғәрезли, $\psi_2(y)$ тек y тен ғәрезли, ал $\psi_3(z)$ тек z координатасынан ғәрезли толқын функциялары. $\psi(x,y,z)$ толқын функциясын (2.4.6)-Шредингер теңлемесине қойып

$$\psi_2(y)\psi_3(z)\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x)\psi_3(z)\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \psi_1(x)\psi_2(y)\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \\ + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x,y,z)]\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) = 0$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемени $\psi(x,y,z)$ қа бөлип ҳәм мәселениң шәртинде берилген $U(x,y,z)$ функциясының түрин пайдаланып

$$\left[\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{kx^2}{2}\right] + \left[\frac{1}{\psi_2(y)}\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{ky^2}{2}\right] + \\ + \left[\frac{1}{\psi_3(z)}\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{kz^2}{2}\right] = -\frac{2m}{\hbar^2}E$$

аңлатпасына келемиз. Бул теңликтиң шеп тәрепиндеги квадрат қаўсырманың ишиндеги биринши аңлатпа тек x координатасының функциясы, квадрат қаўсырма ишиндеги екинши аңлатпа тек y координатасының функциясы, ал үшиншиси тек z координатасының функциясы болып табылады. Олардың қосындысы турақлы шамаға тең болғанлықтан олардың ҳәр бири де турақлы шамаға тең болыўы керек

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{kx^2}{2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_1,$$
$$\frac{1}{\psi_2(y)}\frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{ky^2}{2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_2,$$
$$\frac{1}{\psi_3(z)}\frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{kz^2}{2} = -\frac{2m}{\hbar^2}E_3.$$

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 ғәрезли 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 диң мәнисинде n_2 саны 0 ден $(n - n_1)$ ге шекем өзгереди, яғный $n - n_1 + 1$ 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, яғный $K_1 = 1$. Биринши қозған ҳал ($n = 1$) ушын айныў саны $K_1 = 3$. Бул ҳалға квантлық санларның (100), (010), (001) мәнислери сәйкес келеди.

2-5-1. Атомлардың квантлық қәсийетлери

Атомлардың нурланыўы. Атомлар ҳаққындағы оғада әҳмийетли болған информацияларды физиклер олардың электромагнит нурланыўын изертлеўлердиң барысында алады. Тәжирийбелер атомлардың оптикалық спектрлериниң сызықлы спектрлер екенлигин көрсетеди. Бул атомлардың нурланыў спектриниң айырым спектраллық сызықлардан туратуғынлығын аңғартады. Ҳәр бир атом өзине тән болған сызықлы оптикалық спектрге ийе болады.

Атомлардың ишиндеги ең әпиўайысы болған водородтың нурланыўы ушын 1885-жылы Бальмердиң улыўмаласқан формуласы деп аталатуғын эмперикалық формула келтирилип шығарылды. Водород атомының барлық спектраллық сызықлары ушын толқын узынлықларының мәниси үлкен дәллик пенен төмендеги формуланың жәрдеминде анықланады екен

$$\frac{1}{\lambda_{nk}} = \tilde{R}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad k > n. \qquad (2.5.1)$$

Сәйкес жийиликлер

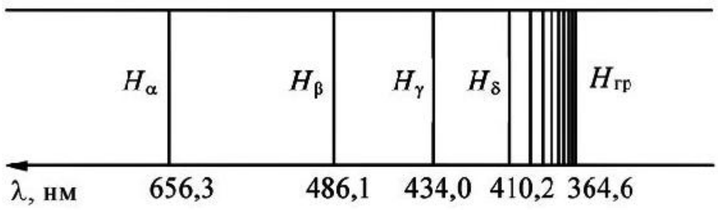
$$\omega_{nk} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right), \quad k > n \qquad (2.5.1а)$$

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул формулаларда R =2,067·10[16] сек[-1] арқалы Ридберг турақлысы белгиленген. $\tilde{R} = \frac{R}{2\pi c}$ = 109678 см[-1], n менен k лар турақлы шамалар

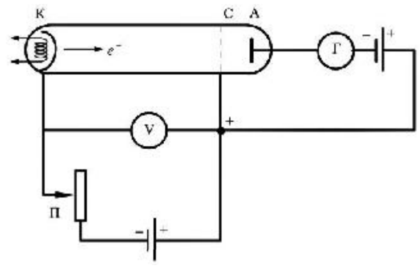
Водород атомларының нурланыўының төмендегидей спектраллық сериялары белгили (бул сериялардың атамалары оларды биринши ашқан физиклердиң атлары менен аталған):

n = 1 – Лайман сериясы (ультрафиолет нурланыў),
n = 2 – Бальмер сериясы (көзге көринетуғын жақтылық),
n = 3 – Пашен сериясы (инфрақызыл нурланыў),
n = 4 – Брэкетт сериясы (инфрақызыл нурланыў),
n = 5 – Пфунд сериясы (инфрақызыл нурланыў) ҳәм басқалар.

Водород атомының спектриниң көзге көринетуғын бөлиминдеги Бальмер сериясы сызықларының схемасы 5.1-сүўретте берилген. Сүўретте H_α, H_β, H_γ ҳәм H_δ арқалы нурланыў спектриниң характерли сызықлары көрсетилген. Ал $H_{\text{шег.}}$ сызығы болса(2.5.1)-формуладағы n = 2 ҳәм $k = \infty$ шамаларына сәйкес келиўши серияның қысқа толқынлы шегарасына сәйкес келеди.



2.5.1-сүўрет.



2.5.2-сүўрет.

(2.5.1а) формуласында водород атомының нурланыўы спектриниң қәлеген сызығының жийилигин бир типтеги еки аңлатпаның айырмасы сыпатында көрсетиўдиң мүмкин екенлигин атап өтемиз. Бул бир типтеги аңлатпалар пүтин санларға ғәрезли ҳәм оларды спектраллық термлер деп атайды. Ҳақыйқатында да (2.5.1а) аңлатпасын былайынша жаза аламыз

$$\omega_{nk} = T(n) - T(k). \qquad (2.5.2)$$

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 есаплаў 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 сәўлелендиреди. Ҳақыйқатында да Планктиң формуласы бойынша атомның нурланыўы жийилигин оның энергиясы менен байланыстырамыз. Спектрдиң сызықлылығынан болса биз атомның энергиясының дискретлиги, яғный атомның энергиясының квантланғанлығы ҳаққындағы жуўмаққа келемиз.

Франк ҳәм Герц тәжирийбеси. Атомлардың энергиясының дискретлиги менен байланыслы болған атомлардың квантлық қәсийетин тастыйықлаўшы ең әпиўайы тәжирийбелердиң бирин 1913-жылы Дж.Франк ҳәм Г.Герц тәрепинен орынланды. Бул тәжирийбениң схемасы 5.2-сүўретте келтирилген. Экспериметаллық дүзилистиң тийкарғы элементи хызметин газ бенен толтырылған үш электродлы электрон лампа атқарады. Газ сыпатында басымы шама менен 1 мм сынап бағанасы басымындағы сынаптың пуўларын пайдаланыў мүмкин. Франк ҳәм Герц тәжирийбесинде С торға катод К ға салыстырғанда шамасы оң болған V потенциалы бериледи. Сонлықтан С торы тезлетиўши потенциалдың орнын ийелейди.

Термоэлектронлық эмиссияның есабынан катодтан ушып шығатуғын электронлар V тезлетиўши потенциаллар айырмасында тезленеди, бул тезлениўдиң шамасын П патенциометри менен өзгертиледи ҳәм V вольтметри менен өлшенеди.

Тор ҳәм А анод арасына шама менен 1 в кернеў түсириледи. Бул кернеў тормозлаўшы майданды пайда етиў ушын керек. Тор арқалы ушып өткен ҳәм тормозлаўшы 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 белгили бир дискрет мәнислерге ийе бола алатуғын, усының менен бир қатарда атомның тийкарғы ҳәм биринши қозған ҳалы арасындағы энергияның мәниси бойынша қашықлық ΔE шамасына тең болса, онда электронлардың атомлар менен соқлығысыўларының характери электронның кинетикалық энергиясының мәниси $W_k = eV$ менен тиккелей байланыслы болады. Бул жерде V арқалы катод менен тор арасындағы тезлетиўши потенциаллар айырмасы белгиленген.

Егер $W_k < eV$, яғный $V < V_1 = \Delta E / e$ болса, онда электрон атом менен соқлығысқанда атомға өзиниң энергиясының көп бөлегин бере алмайды. Бундай жағдайда электронның атом менен соқлығысыўы серпимли соқлығысыў болып табылады. Бундай соқлығысыўды электронның кинетикалық энергиясы атомның ишки 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 тормозлаўшы майдан арқалы өте алады ҳәм коллектор шынжырындағы тоқты пайда етиўге қатнасады. Әдеттеги вакуумлы лампадағыдай 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 ишки энергиясына айланады, яғный атомды қоздырыў ушын жумсалады.

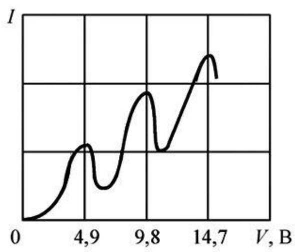
Электронлардың атомлар менен серпимли емес соқлығысыўлары электронлар торға жақынлағанда жүзеге келеди. Соқлығысқаннан кейин энергиясын жоғалтқан электронлар тормозлаўшы майдан арқалы өте алмайды. Нәтийжеде ол анод-коллекторға жетип келе алмайды. Нәтийжеде тордағы тезлетиўши кернеўдиң мәниси V_1 ге тең болғанда коллектор шынжырындағы I тоқтың күши кескин түрде киширейийўи керек..

Тезлетиўши потенциалдың шамасы буннан былай артқанда гальванометр жәрдеминде өлшенетуғын тоқтың шамасы және де артады. Бирақ кернеўдиң 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 сыяқлы $V_3 = 3V_1$ үш, төрт ҳәм басқа да серпимли емес соқлығысыў режиминиң де орын алыўы мүмкин.

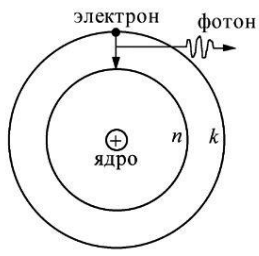
Солай етип атомның энергиясы квантланатуғын болса, онда тезлетиўши потенциал V шамасының пүтин сан еселенген V_1 мәнислеринде коллектор шынжырындағы I тоғының ийméклигинде анық көринетуғын кемейиўлердиң орын алыўы керек. Бундай жағдайда бундай кемейиўлердиң тезлетиўши кернеў шкаласындағы басланған участкалары арасындағы қашықлық ΔV шамасы атомның қозыў энергиясы ΔE менен $\Delta E = e\Delta V$ аңлатпасы арқалы байланысқан.

Франк ҳәм Герцтиң тәжирийбелеринде алынған $I = I(V)$ ғәрезлиги бул жуўмақты жүдә жақсы тастыйықлады (2.5.3-сүўрет). Бундай ғәрезлик атомлардың энергиялық ҳалларының дискретлигиниң айқын эксперименталлық дәлили болып табылады. Мысалы 5.3-графикте сынап атомнының биринши қозған халы оның тийкарғы ҳалынан 4,9 эВ қашықлықта турғанлығы көринип тур.

Лампаны басқа да газлер менен толтырғанда да (мысалы гелий ямаса неон менен толтырғанда) жоқарыда сынап атомлары ушын келтирилген нызамлықлардай нызамлықлар бақланады. Егер тәжирийбелер жүдә пуқталық пенен өткерилсе, онда $I = I(V)$ ғәрезлигинде атомның басқа да қозған ҳалларына, ҳәтте атомлардың ионларға айланыўына сәйкес келиўши де тоқтың кемейиўлерин бақлаўға болады.



2.5.3-сүўрет.



2.5.4-сүўрет.

Франк ҳәм Герц тәжирийбесиниң екинши әҳмийетли нәтийжеси лампаның λ = 253 нм узынлықтағы ультрафиолет жақтылықты шығарыўында. Бундай нур шығарыў катод пенен тор арасындағы кернеўдиң 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 түсиндириўге болады. Электронлар менен соқлығысыўдың нәтийжесинде қозған сынап атомлары тийкарғы ҳалға нурланыў менен қайтады. (1.41)-аңлатпаға сәйкес бундай нурланыў ушын толқын узынлығының мәнисин есаплай аламыз. Ҳақыйқатында да $\varepsilon = \Delta E$ = 4,9 эВ = $7,84 \cdot 10^{-19}$ 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 шашыраўын изертлеў бойынша өткерилген 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 тең. "Планетарлық" сөзи атомның Қуяш системасына уқсаслығынан алынған. Қуяш системасында планеталар базы бир орбиталар бойлап үлкен массаға ийе орайлық дене болған Қуяштың дөгерегинде айланады. Тап сол сыяқлы атомларда электронлар үлкен массаға ийе оң зарядланған ядроның дөгерегинде белгили орбиталар бойынша айланады.

Бирақ классикалық физиканың көз-қараслары менен қарағанда атомның модели ишки қарама-қарсылықларға ийе болып шығады. Бул жағдай биринши гезекте электронда зарядтың бар екенлиги менен байланыслы.

Классикалық электродинамиканың нызамлары бойынша ядроның дөгерегинде айланыўшы электрон қәлеген басқа тезлениў менен қозғалыўшы зарядланған бөлекше сыяқлы электромагнит толқынларын нурландырыўы керек. Бундай нурланыўдың спектри үзликсиз болады, яғный нурланыў қәлеген толқын узынлығындағы электромагнит толқынлардан турыўы керек. Бул тәжирийбеде бақланатуғын атомлардың спектриниң сызықлы екенлигине қайшы келеди.

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда үзликсиз нурланыў электронның энергиясын кемейтеди. Сонлықтан нурланыўдың есабынан қозғалыўшы электронның орбитасының радиусының киширейиўи керек. Нәтийжеде ақыр-аяғында электронның ядроға қулап түсиўи талап етиледи. Басқа сөз бенен айтқанда классикалық физикада атомның планетарлық модели орнықлы емес.

1913-жылы Н.Бор атомның планетарлық моделин қорғап қалыў ушын квантланыў идеясын қолланыўдың кереклигин, биринши гезекте электронлардың қозғалыўы ушын руқсат етилген базы бир орбиталарды айырып алыўдың зәрүрлигин көрсетти. Әлбетте, квантланыў қағыйдаларында Планктың квантлық турақлысының қатнасыўы керек. Тәсир кванты $\hbar$ импульс моментиниң бирлигине ийе болғанлықтан Бор теорияға ядроның әтирапында қозғалыўшы электронның импульс моментиниң квантланыўын қосты.

Водород атомы ең әпиўайы атом болып табылады. Бундай атомда бир электрон ядроның Кулон майданында туйық орбита бойынша қозғалады. Биринши жақынласыўда ядроны тынышлықта турады, ал электронлардың орбитасын шеңбер тәризли орбиталар деп есаплаўға болады.

Усындай болжаўлар тийкарында Н.Бор водород атомының теориясын үш постулат түринде дөретти.

1. Атомдағы электрон тек базы бир стационар орбиталар бойынша қозғалады. Сол орбиталардың ҳәр бири ушын $n = 1, 2, 3, \dots$ түриндеги қатар санын жазыў мүмкин. Бундай қозғалыс атомның стационар ҳалына сәйкес келеди. Ҳәр бир стационар ҳалға өзгермейтуғын E_n толық энергиясы сәйкес келеди. Бул айтылғанлар стационар туйық орбита бойынша қозғалатуғын электронлардың энергияны нурландырмайтуғынлығын билдиреди.

2. Руқсат етилген стационар орбиталардағы электронның импульс моментиниң мәниси L пүтин сан еселенген Планк турақлысы $\hbar$ қа тең болыўы керек. Сонлықтан - стационар орбита ушын

$$L = n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.5.3}$$

квантланыў шәртиниң орынланыўы керек.

3. Нурланыў квантының нурланыўы (шығарылыўы) ямаса жутылыўы атом бир стационар ҳалдан екинши стационар ҳалға өткенде жүзеге келеди (2.5.4-сүўрет). Атомның нурланыўының жийилиги ω атомның еки стационар ҳалына сәйкес келетуғын энергиялардың айырмасының жәрдеминде анықланады. Сонлықтан

$$\hbar\omega_{nk} = E_k - E_n, \quad k > n. \tag{2.5.4}$$

Атомның энергиясының квантланыўы. Электронның массасын m арқалы белгилеймиз. Биз дәслеп усындай массаға ийе электронның ядро дөгерегинде Кулон күшиниң тәсиринде радиусы r болған шеңбер тәризли орбита бойынша айланыў шәрти менен Бордың электрон ушын импульс моментиниң квантланыў формуласын жазамыз

$$\begin{cases} \dfrac{mv^2}{r} = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \dfrac{e^2}{r^2}, \\ mvr = n\hbar. \end{cases} \tag{2.5.5}$$

Бул теңлемелер системасын шешип водород атомындағы стационар орбиталардың радиуслары ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 n^2}{me^2}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.5.6}$$

Теорияның универсаллық константасы сыпатында Бор радиусын ала аламыз

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0{,}529 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \tag{2.5.7}$$

Бул радиус водород атомындағы биринши стационар орбитаның радиусы болып табылады. Усы тийкарда (2.5.6)-формуланы

$$r_n = an^2, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.5.8}$$

түринде жазамыз.

(2.5.7)- ҳәм (2.5.8)-формулалар тийкарында алынған водород атомының өлшемлери (~ 10^{-10} м) газлердиң кинетикалық теориясында алынған нәтийжелерге сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз.

n — стационар орбитадағы электронның тезлиги ушын (2.5.5)-аңлатпадан

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar n} \tag{2.5.9}$$

формуласын аламыз. Буннан биринши стационар орбитада қозғалыўшы электронның тезлигиниң $2{,}2 \cdot 10^6$ 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 қозғалыўшы электронның толық энергиясы оның кинетикалық ҳәм потенциал энергияларының қосындысынан турады. Электронның кинетикалық энергиясы

$$E_K = \frac{mv^2}{2} = \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2}. \qquad (2.5.10)$$

Электронның ядро менен кулон тәсир етисиўине сәйкес келиўши потенциал энергиясы

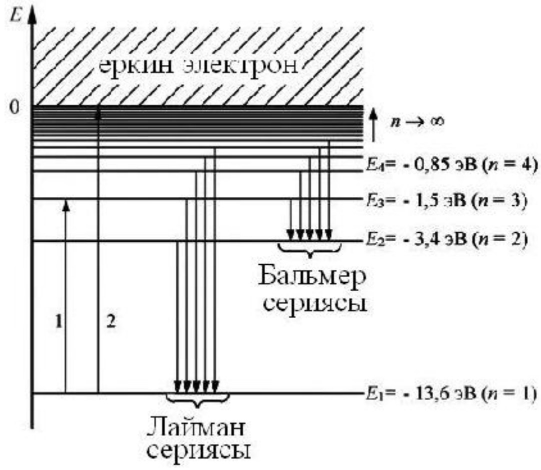
$$U = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} = -\frac{me^2}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2 n^2}. \qquad (2.5.11)$$

(2.5.10)- ҳәм (2.5.11)-формулаларды есапқа алған ҳалда Бор теориясының оғада әҳмийетли болған формуласын – водород атомындағы электронның энергиясының квантланыў формуласын аламыз

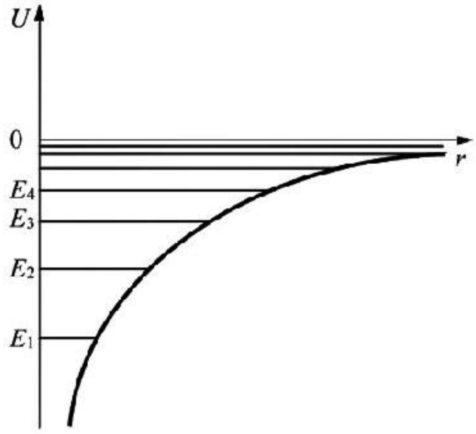
$$E = E_K + U = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13{,}6}{n^2}\ \text{эВ}. \qquad (2.5.12)$$

Атомдағы электронның толық энергиясы терис мәниске ийе болып шықты. Себеби анықламасы бойынша электронның ядро менен тәсирлесиўиниң электростатикалық энергиясының мәниси нолден киши. Орбитаның қатар санының (номериниң) үлкейиўи менен атомдағы электронның толық энергиясының мәниси өседи. Соның менен бирге орбитаның қатар саны бул теорияда квантлық сан болып табылады.

5.5-сүўретте (2.5.12)-формулаға сәйкес водород атомындағы электронның энергиясының спектри келтирилген. Оң мәнисли энергиялар областында еркин электронның энергия спектри тутас спектр болып табылады. Толық энергияның мәниси терис болған жағдайларда атом менен байланысқан электронның энергия спектри дискрет характерге ийе. Көрсетпелилик ретинде 5.5-сүўретте энергияның мүмкин болған ҳәр бир мәнисине энергия қәдди сәйкес келетуғынлығын сәўлелендирилген. Стационар ҳалда электрон сол дискрет энергия қәддилериниң биринде тура алады. Электронның бир қәддиден екинши қәддиге өтиўи бул сүўретте стрелканың жәрдеминде көрсетилген. Бул стрелканың басы менен ушы электронның өтиўи жүзеге келетуғын энергияның қәддилерине сәйкес келеди.



2.5.5-сүўрет.



2.5.6-сүўрет

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 белгиледик.

Егер атомға қосымша энергия берилетуғын болса, онда ол биринши қозған ҳалға өте алады (2.5.4-сүўреттеги 1 өтиўи). Бундай жағдайда электрон үлкенирек радиусқа ийе болған орбитаға өтеди. Атомды қоздырыўдың ҳәр қыйлы усыллары бар (газ атомының хаотик жыллылық тербелислериндеги соқлығысыўлары, газ арқалы жоқары энергияға ийе бөлекшелерди жибериў (электронларды, альфа-бөлекшелерин ҳәм тағы басқалар), атомларды ультрафиолет нурлар менен нурландырыў.

Егер электронға берилген энергияның муғдары жеткиликли дәрежеде үлкен болса, онда электронды атомнан айырып алыўға да болады. Бундай процессти атомның ионизациясы деп атайды. 5.4-сүўретте водород атомының ионизациясы ушын зәрүрли болған энергияның ең киши мәниси (2 өтиўи)

$$E_i = |E_1| = 13{,}6 \text{ эВ} \tag{2.5.13}$$

шамасына тең. Бул шама водород атомының ионизациясы бойынша өткерилген тәжирийбелердиң нәтийжелерине толық сәйкес келеди.

Қозған ҳалда атом көп ўақыт жасай алмайды (тура алмайды). Қәлеген система сыяқлы атом да ең киши энергияға ийе ҳалды ийелеўге умтылады. Сонлықтан 10^{-8} сек ўақыттан кейин қозған атом өзи-өзинен (спонтан түрде) киши энергияға ийе ҳалға өтеди. Бул өтиў 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 қашықлыққа ийе k –орбитадан n –орбитаға өтетуғын болса ($k > n$), онда Бордың үшинши постулатын пайдаланып нурландырылған электромагнит толқынының жийилигин аңсат есаплаў мүмкин. (2.5.4)- ҳәм энергияның квантланыў формуласы (2.5.12) ни пайдаланып водород атомындағы $k \to n$ өтиўиндеги нурланыўдың жийилигин

$$\omega_{nk} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right) \tag{2.5.14}$$

формуласының жәрдеминде есаплай аламыз. Бул формуладағы

$$R = \frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3} = 2{,}07 \cdot 10^{16}\ 1/\text{сек} \qquad (2.5.15)$$

шамасы оптикалық экспериментлерде алынған Ридберг турақлысының мәнисине дәл сәйкес келеди.

Водородтың нурланыўының жийиликлери ушын алынған формула Бальмердиң улыўмаласқан формуласы менен бирдей (2.5.1а формуласы). Сонлықтан тийкарында (2.5.3) квантланыў постулаты жатырған водород атомының Бор теориясының 1922-жылы физика бойынша халық аралық Нобель сыйлығын алыўға миясар болғаны таң қаларлық емес.

Жоқарыда баянланған теорияны эллипс тәризли орбиталар 1915-жылы дөретилген Бор-Зоммерфельд теориясы ушын улыўмаластырыўға ҳәм қәлеген "водород тәризли" атомлардың қәсийетлерин сыпатлаў 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. Әпиўайы 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 биринши 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 тәрийиплеп 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 (кейинирек бул ойлап табыўдың толық дурыс емес екенлиги көрсетиледи). Бордың бул теорияны қурамалы атомлар ушын улыўмаластырыў ҳәм усындай қурамалы атомлар ушын квантланыў постулатларын табыўға болған тырысыўлары сәтсизлик пенен питти.

Ҳәзирги заман физикасының көз-қараслары бойынша атом электронның толқынлық қәсийетлерин есапқа алмайтуғын классикалық физика нызамларының жәрдеминде тәрийиплениўи мүмкин емес физикалық система болып табылады.

Бул баптың буннан кейинги параграфларында ҳәзирги заман квантлық механиканың атомлық системаларды қалай тәрийиплейтуғыны көрсетиледи.

5.1-мәселе. Бор теориясында электронның импульс моментиниң квантланыўы шәртин электронда толқынлық қәсийетлердиң бар екенлиги ҳаққындағы 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. Сонлықтан (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 пенен байланыстырыў мүмкин. Оның толқын узынлығы

$$\lambda_{db} = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Сонлықтан Бордың квантланыў шәртин былайынша жазыўға болады

$$2\pi r = n\lambda_{db}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Бул аңлатпада әҳмийетли жағдайды көремиз: узынлығына пүтин сан еселенген 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 $mr_e = Mr_{yadro}$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 тезликлери белгиленген

Ядроның қозғалысын есапқа алсақ, атомның импульсиниң моменти ушын

$$L = mv_er_e + Mv_{yadro}r_{yadro} = m\omega r_e^2 + M\omega r_{yadro}^2$$

аңлатпасын аламыз. Теорияның тийкарғы теңлемелери сыпатында электронның шеңбер тәризли орбита бойынша қозғалыў ҳәм Бордың атомның импульсиниң моментиниң квантланыўы шәртин аламыз

$$\begin{cases} m\omega r_e^2 = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\left(r_e + r_{yadro}\right)^2}, \\ m\omega r_e^2 + M\omega r_{yadro}^2 = n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} \mu\omega^2 r = \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}, \\ \mu\omega r^2 = n\hbar, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \end{cases}$$

Бул аңлатпада μ 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

$$E = \frac{mv_e^2}{2} + \frac{Mv_{yadro}^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\left(r_e + r_{yadro}\right)} = \frac{\mu\omega^2 r}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул аңлатпаға r_n менен ω_n шамаларының мәнислерин қойсақ биз излеп атырған водород атомының энергиясының квантланыўы 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 сызықларының 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 Ридбергтиң модификацияланған турақлысы 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 әдеўир кем екенлигин көрсетеди. Бирақ спектроскопиялық усыллардың оғада жоқары дәллигинен водородтың изотопларының (бир элементтиң массасы ҳәр қыйлы болған атомлары) спектриндеги айырманы экспериментте табыўға мүмкиншилик береди. Тап усындай 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 тәрийиплениўи

5.1-мәселени шешкенде биз атомда қозғалыўшы электронлардың де Бройль толқын узынлығы атомның өзиниң өлшемлери менен салыстырарлықтай екенлигин көрдик. Бундай жағдайларда электронлық толқынлық қәсийетлериниң бар екенлигин есапқа алмаўға болмайтуғынлығын биз жақсы билемиз. Себеби бундай электронлардың атомлардағы қозғалысын классикалық физиканың нызамлары тийкарында тәрийиплеўге болмайды. Сонлықтан атомлық системалар квантлық механиканың нызамларын пайдаланыў керек болған физика илиминиң әҳмийетли объектлериниң бири болып табылады. Атомларды тәрийиплеў ушын квантлық механиканың қандай да бир қосымша болжаўларды ямаса Бор теориясының постулатлары сыяқлы постулатларды талап етпейтуғынлығын атап өтемиз

Водород сыяқлы атомлар ушын квантлық механиканың мәселесин келтирип шығарамыз. Электрон заряды Ze болған қозғалмайтуғын ядроның дөгерегинде қозғалады деп есаплаймыз. Водород атомы ушын Z = 1. Басқа водород тәризли атомлар (ионлар) ушын Z = 2, 3, 4, ... Бундай модель атом физикасының әҳмийетли моделлериниң бири болып табылады. Бундай модель ушын электрон қозғалатуғын электростатикалық майданның потенциалын дәл жаза аламыз. Сонлықтан водород тәризли атомлардың квантлық теорияның барлық жуўмақларын экспериментте тексерип көриў мүмкин.

Ядроның электр майданындағы электронның потенциал энергиясы

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (2.5.16)$$

аңлатпасының жәрдеминде есапланады. Бундай майдандағы электронның қозғалысын базы бир сфералық потенциал майдандағы қозғалыс сыпатында қарай аламыз. Оның формасы 5.6-сүўретте көрсетилген.

4.2-параграфта әпиўайы формаға ийе потенциал шуқырда қозғалатуғын бөлекшениң энергиясының спектриниң дискрет екенлигин көрген един. Тап сол сыяқлы атомдағы электронның энергиясы да дискрет спектрге (яғный электронның толық энергиясының қәддилери E_1, E_2, E_3 ҳәм басқа да шамаларға тең) ийе болады деп болжаўға болады. Водород атомы ушын алынған спектр дурыслығы 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

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad (2.5.17)$$

Шредингер теңлемесиниң шешимлерин табыўымыз керек болады. Бул теңлемедеги гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U} \qquad (2.5.17a)$$

түринде жазылады. Бул аңлатпадағы m электронның массасы, E арқалы ψ толқын функциясы менен тәрийипленетуғын оның ҳалындағы толық энергиясы белгиленген. Потенциал энергияның операторы $\widehat{U}$ болса (2.5.16)-аңлатпада берилген $U(r)$ функциясына көбейтиў болып табылады.

Шредингер теңлемесиниң биз излеп атырған шешимлери $\widehat{H}$ толық энергия операторының меншикли функциялары болып табылады. Бундай шешимлерди табыў жеткиликли дәрежеде қурамалы болған дифференциал теңлемени шешиў менен байланыслы. Бул мәселениң квантлық механикандағы ең әҳмийетли мәселелердиң бири екенлиги есапқа алып бундай шешимлерди табыў схемасын толық баянлаймыз. Бул схеманы баянлаўдың барысында математикалық физиканың арнаўлы функцияларының бири болған сфералық функциялардан пайдаланыўға туўры келеди. Базы бир айқын квантлық ҳаллар ушын сфералық функциялар белгили элементар функциялардың комбинациясы түринде анық аналитикалық формада жазылады. Сфералық функциялардың қәсийетлери ҳаққында толығырақ мағлыўматларды математика бойынша справочниклерде табыў мүмкин.

Атомдағы электронның қозғалысын тәрийиплеў ушын координаталардың сфералық системасын пайдаланған қолайлы. Бундай координаталардың басы сыпатында атом ядросының 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. Δ_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 $\hat{L}^2 = -h^2\Delta_{\theta,\varphi}$ түринде жазылады. Сонлықтан (2.5.17)-Шредингер теңлемеси

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\psi + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2\psi - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\psi = E\psi \quad (2.5.20)$$

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 $\widehat{H}$ пенен коммутацияланады. Сонлықтан 3-бапта баянланған квантлық механиканың улыўмалық қағыйдалары бойынша атом қәлеген 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 төмендеги теңлемени қанаатландырады:

$$\hat{L}^2 Y_{l,m} = l(l+1)Y_{l,m}. \tag{2.5.22}$$

$Y_{l,m} = Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ функциялары сфералық ямаса шар функциялар деп аталады. Бул функциялар l ҳәм m пүтин мәниске ийе параметрлериниң жәрдеминде анықланады. Бул пүтин санларды квантлық санлар деп атаймыз.

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 төменде талқылаймыз.

Базы бир нормировкаланған сфералық функциялар ушын анық формулаларды келтиремиз:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},\ Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\varphi,\quad Y_{1,\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(\pm i\varphi);$$
$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\,cos^2\theta - 1),\ Y_{2,\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta\exp(\pm i\varphi);$$
$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{5}{32\pi}}\ sin^2\theta\exp(\pm i2\varphi),\ Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\cos\theta\,(5cos^2\theta - 3).$$

(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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dX}{dr}\right) + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]\cdot X = Ex \tag{2.5.23}$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемениң шешимин

$$X(r) = \frac{R(r)}{r} \tag{2.5.24}$$

түринде излеймиз. Бундай жағдайда усындай түрге ийе болған биз излеп атырған $X(r)$ функциясын (2.5.23)-теңлемеге қойсақ $R(r)$ функциясы ушын әпиўайырақ теңлемеге ийе боламыз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]\cdot R = ER. \tag{2.5.25}$$

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

$$\rho = Z\frac{r}{a}\ \text{ҳәм}\ \varepsilon = -\frac{1}{Z^2}\frac{E}{W}\ \ (\varepsilon > 0) \tag{2.5.26}$$

Бундай жағдайда (2.5.25)-теңлеме

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \varepsilon\right) \cdot R = 0 \qquad (2.5.27)$$

түрине ийе болады. Өзгермели коэффициентлерге ийе бул теңлемениң дәл шешимин еки функцияның көбеймеси түринде излеў керек болады:

$$R(\rho) = v(\rho) \cdot \exp(-\alpha\rho), \quad \alpha = \sqrt{\varepsilon}. \qquad (2.5.28)$$

(2.5.28)-аңлатпаны (2.5.27)-аңлатпаға қойсақ изленип атырған жаңа $v(\rho)$ функциясы ушын теңлемени табамыз. Қурамалы емес есаплаўлардан кейин

$$\frac{d^2v}{d\rho^2} - 2\alpha\frac{dv}{d\rho} + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)v = 0 \qquad (2.5.29)$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемениң шешими болған $v(\rho)$ функциясын дәрежели қатар түринде излеймиз

$$v(\rho) = \rho^{l+1}\sum_{k=0}^{\infty} a_k\rho^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\rho^{k+l+1}. \qquad (2.5.30)$$

Бул қатардың a_k коэффициентлерин табыў ушын (2.5.30) ды (2.5.29) ға қоямыз ҳәм ρ шамасының бирдей дәрежеге ийе ағзаларын жыйнаймыз. Бундай әмеллер

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k[(k+l+1)(k+l) - l(l+1)]\rho^{k+l+1} + \\ + \sum_{k=0}^{\infty}[2 - 2\alpha(k+l+1)]\rho^{k+l} = 0 \qquad (2.5.31)$$

түриндеги теңлемениң пайда болыўына алып келеди. Биринши қосылыўшыда $k = 0$ теңлиги орынланғанда квадрат қаўсырмадағы аңлатпа нолге айланады. Сонлықтан суммалаў $k = 1$ мәнисинен басланады. Демек биринши 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 мүмкин. Бул теңликтиң барлық ρ лар ушын орынланыўы ушын оның ҳәр бир дәрежесиниң алдындағы коэффициенттиң нолге тең болыўы керек. Сонлықтан (2.5.30)-аңлатпадағы қатар (2.5.29)-теңлемениң шешими бола алады, егер оның коэффициентлери ушын төмендегидей рекуррентли қатнас орынланатуғын болса:

$$a_{k+1} = a_k\frac{2\alpha(k+l+1) - 2}{(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1)}. \qquad (2.5.32)$$

(2.5.29)-теңлемесиниң бир теклилиги (2.5.32)-теңлемедеги a_0 коэффициентин сайлап алыўдан кейин дәслеп a_1 ди, кейин a_2 ни, буннан кейин басқа да коэффициентлерди анықлаўға мүмкиншилик береди. Усындай жоллар менен барлық a_k коэффициентлерин есаплап болғаннан кейин (2.5.29)-теңлемениң биз излеп атырған шешимлерин ρ ның дәрежелери бойынша белгили коэффициентлери 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 усындай 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 2αρ дәрежеси бойынша жайыўды көрсетеди.

Демек (2.5.30)-аңлатпадағы қатар шексиз көп қосылыўшылардан турса, онда ρ 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 $\exp(2\alpha\rho)$ көбейтиўшисине көбейткеннен кейин де ρ → ∞ шегинде R(ρ) радиаллық қураўшының шексиз өсетуғынлығы келип шығады. (2.5.21) менен (2.5.24)-аңлатпаларды есапқа алғанда да усындай 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 (бөлинип) қалса, яғный шекли дәрежели көп ағзалы болса, онда биз дүзген Шредингер теңлемесиниң шешими ρ → ∞ шегинде кемейеди ҳәм регулярлықтың барлық шәртлерин қанаатландырады. Тек усындай жағдайда ғана (2.5.28)-аңлатпадағы экспоненциаллық көбейтиўши шексизликте толқын функциясының модулиниң квадратының киширейиўин тәмийинлейди.

(2.5.32)-аңлатпадан (2.5.30)-аңлатпадағы қатардың $k = n_r$ ағзасындағы үзилип қалыўы

$$2\alpha(n_r + l + 1) = 2 \qquad (2.5.33)$$

шәрти орынланғанда орын алады. $n_r + l + 1$ пүтин санын n арқалы белгилеймиз (яғный $n = n_r + l + 1$). Бундай жағдайда n_r ди радиаллық квантлық сан, ал n ди бас квантлық сан деп атаймыз. $n \geq l + 1$, яғный $l \leq n - 1$ екенлиги көринип тур.

Бундай жағдайда (2.5.33) шәрти αn = 1 ямаса ε = 1|n² түрине енеди. (2.5.26)-шәртти есапқа алғанда бул шәртти атомдағы электронның толық энергиясын квантлаўдың шәрти сыпатында қабыл етиўге болады

$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots \qquad (2.5.34)$$

Солай етип толқын функциясының регулярлығы шәрти атомның энергиясының квантланыўы шәртине алып келди. Бул шәрт Z = 1 болған жағдайда Бор теориясындағы водород атомындағы энергияның квантланыўына дәл сәйкес келеди. Сонлықтан (2.5.34)-формуладан экспериментлерде тексерилип көрилген (2.5.14) Бальмер формуласы келип шығады.

Солай етип электронның водород тәризли атомлардағы толқын функциясы n ҳәм k квантлық санларнан ғәрезли болады екен ҳәм былайынша жазылады

$$X_{nl}(\rho) = \rho^l \cdot \exp\left(-\frac{\rho}{n}\right) \cdot \sum_{k=0}^{n_r} \alpha_k \rho^k. \tag{2.5.35}$$

Бул аңлатпада $\rho = Z{\cdot}r/a$, $n_r = n - (l + 1)$, $l \le n - 1$, ал a_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

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 \sin\theta \; dr \, d\theta \, d\varphi = 1. \tag{2.5.36}$$

Бул формулада $dV = r^2 \sin\theta \; dr \, d\theta \, d\varphi$ арқалы сфералық координаталардағы көлемниң элементи белгиленген.

Солай етип атомдағы электронның квантлық ҳалды анықлайтуғын толқын функциясы табылды. Ол мынадай түрге ийе:

$$\psi_{nlm}(\rho,\theta,\varphi) = X_{nl}(\rho) Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

ҳәм ол n, m және l санларынан ғәрезли.

Орбиталық квантлық сан болған l санының берилген мәнисине сәйкес келиўши квантлық ҳалларды белгилеў ушын төмендегидей спектроскопиялық символлар қолланылады:

l диң мәниси	0	1	2	3	4	5	6	...
Ҳалдың белгиси	s	p	d	f	g	h		

$l = 0$ болған ҳалды s-ҳал, ал усындай ҳалдағы электронды s-электрон деп атаймыз. $l = 1$ болған ҳалды p-ҳал деп атайды.

Электронның уывнт ҳалын толығырақ белгилеў ушын n бас квантлық санның мәнисин де бериў керек. Бул квантлық сан ҳалдың белгисиниң алдында жазылады. Мысалы $n = 2$ ҳәм $l = 0$ болған квантлық ҳалдағы электронды 2s белгиси менен белгилеймиз, ал $n = 4$ ҳәм $l = 2$ болған квантлық ҳалдағы электронды 4d арқалы белгилеймиз. Бундай мысалларды көплеп келтириў мүмкин.

Барлық ўақытта $l \le n - 1$ теңсизлиги орынланатуғын болғанлықтан

$$n = 1 \to 1s,$$
$$n = 2 \to 2s, 2p,$$
$$n = 3 \to 3s, 3p, 3d$$
$$n = 4 \to 4s, 4p, 4d, 4f$$

ҳәм тағы басқаларды жазыўымыз мүмкин.

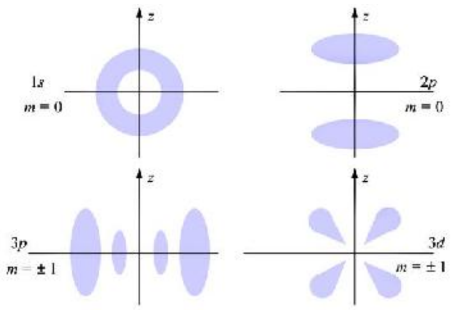
$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ сфералық функцияларының қәсийетлерин таллаў барлық s-электронлардың, яғный $l = 0$ ҳәм $m = 0$ ҳаллардың сфералық симметрияға ийе ҳаллар екенлигин көрсетеди. Бул ҳаллардағы толқын функциясының мәниси θ ҳәм φ мүйешлик өзгериўшилериниң мәнислеринен ғәрезли емес.

Параграфтың ақырында водород тәризли бир қатар атомлардағы нормировкаланған толқын функцияларын жазамыз.

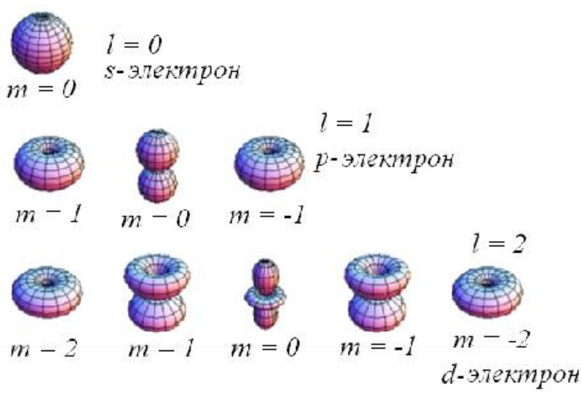
n	l	m	ψ_{nlm}	Ҳал
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\exp(-\rho)$	1s
2	0	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}(2-\rho)\exp(-\frac{\rho}{2})$	2s
2	1	0	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\rho\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)\cos\theta$	2p
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-сүўретте 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 ҳәр қыйлы ноқатларында усы итималлықтың тығызлығына туўры пропорционал. Квантлық теорияда тап усындай итималлық тығызлығының тығызлығы думаны түринде атомның образы тап усындай усылда бериледи.

2.5.7b сүўретте болса Mathematica 8.0 универсаллық программалаў тилинде алынған сәйкес сүўретлер берилген.



2.5.7a сүўрет. Водород атомындағы бир қатар квантлық ҳаллар ушын толқын функцияларының жәрдеминде итималлықтың радиаллық электронлық тығызлығы "думан" түриндеги көриниси.



2.5.7b сүўрет. Mathematica 8.0 универсаллық программалаў 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 ҳәм 2p ҳаллардағы электронды ядродан қандай қашықлықларда ең үлкенирек итималлық пенен табыўдың мүмкин екенлигин анықлаңыз.

Шешими: Мәселениң шәртинде берилген ҳаллардағы электронды ядродан ҳәр қыйлы қашықлықларда табыў мүмкин. Бундай жағдайда электронды ядродан r қашықлығында табыўдың итималлығы радиуслары r шамасынан r+dr шамасына шекемги жуқа шар қатламында табыўдың 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 қатламның қалыңлығы dr ге пропорционал, яғный

$$dP = \omega(r) dr.$$

Ядродан ең итимал қашықлықты $r^{(\text{итимал})}$ арқалы белгилейик. Бундай қашықлық ушын итималлықтың радианлық тығызлығы $\omega(r)$ шамасы максималлық мәниске ийе болыўы шәрт.

Жоқарыда келтирилген кестеден водород атомының электронының толқын функцияларын алып, 1s ҳал ушын

$$\omega_1(r) = A\, r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right), \quad A = const$$

екенлигин, ал 2p ҳалы ушын

$$\omega_2(r) = B\, r^4 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right), \quad B = const$$

екенлигине ийе боламыз. Бул функциялардың туўындыларын нолге теңеп 1s ҳалы ушын $r_1^{(\text{итимал})} = a$ мәнисин аламыз. Демек бул ҳалдағы электронды ядродан биринши Бор орбитасының радиусына теңдей қашықлықларда табыўдың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады деген сөз.

2p ҳаллары ушын $r_2^{(\text{итимал})} = 4a$ шамасына ийе боламыз. Демек 2p ҳалда турған электронды табыўдың итималлығы ядродан $4a$ шамасына тең қашықлықта, яғный ядродан екинши Бор орбитасының радиусына тең қашықлықта табыўдың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады.

Солай етип квантлық механиканда электронның белгили бир орбита бойынша қозғалыўы 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 қашықлықлардағы электр майданының потенциалын анықлаңыз.

Шешими: Биз излеп атырған потенциал ядроның майданының потенциалынан ҳәм электронның ядроның дөгерегинде айланыўы менен байланыслы болған электронлық "думанның" потенциалының қосындысынан турады: φ= φ_n + φ_e. Бул аңлатпада φ_n арқалы ядро майданының потенциалы белгиленген.

Толқын функциясының итималлықлық мәниси бойынша электрон "бултындағы" электр зарядының көлемлик тығызлығы $\rho_e = -e|\psi_{100}|^2$ шамасына тең. Кеңисликте тап усындай болып тарқалған зарядтың майданының потенциалын потенциал ушын жазылған Пуассон теңлемесин шешиў жолы менен анықланады:

$$\Delta\varphi_e = -\frac{\rho_e}{\varepsilon_0}.$$

Егер водород атомында қашықлықтың масштабы ҳәм характерли потенциал ушын Бор радиусы a ны ҳәм усындай қашықлықтағы ядроның потенциалы $\varphi_0 = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a}$ 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

$$\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{dr^2}(r\,\varphi_e) = 4\exp(-2r).$$

түрине алып келиў мүмкин. Бул бир текли емес дифференциал тенлеменің 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

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a}\left(\frac{a}{r}+1\right)\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$$

формуласын аламыз. Бул аңлатпаны талласақ, онда ядроның қасында (бундай жағдайда $r \ll a$) потенциалдың

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

шамасына тең болатуғынлығын көремиз. Демек кеңисликтиң бул областында электр потенциалы тек ядроның оң мәниске ийе заряды тәрепинен пайда етиледи екен.

Ядродан қашықласқан сайын терис зарядқа ийе электронлық "туманның" майданы ядроның майданын экранлай баслайды. Сонлықтан ядродан жеткиликли дәрежедеги үлкен қашықлықларда, яғный $r >> a$ шәрти орынланғанда

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}\exp\left(-\frac{2r}{a}\right),$$

яғный ядродан 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 (яғный атомның өзиниң квантлық ҳалының) үш квантлық санн бериў менен толық анықланатуғынлығын көрдик. Демек квантлық санларның мәнислери берилген болса атомның қәсийетлерин толық тәрийиплеўге болады деген сөз.

Квантлық санларның бәриниң мәнислери пүтин санға тең ҳәм олар атомның берилген квантлық ҳалдағы тийкарғы физикалық шамаларды өлшегенде алынатуғын нәтийжелерди болжаўға мүмкиншилик береди.

1. Бас квантлық сан n. Бул квантлық сан $n = 1, 2, 3, \ldots$ мәнислерине тең бола алады ҳәм қәлеген квантлық ҳалдағы электронның толық энергиясын анықлайды

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} = -\frac{13{,}6}{n^2}\ \text{эВ}. \quad (2.5.37)$$

Энергияның бул мәнислериниң (2.5.17а) гамильтонианның меншикли мәнислери екенлигин атап өтемиз. Сонлықтан водород атомындағы байланысқан ҳалда терис мәнисли дискрет энергия спектрине ийе болады, Энергия қәддилери арасындағы айырма $E = 0$ шамасына жақынласқанда қойыўласады ҳәм дискретлик жоғалады.

2. Орбиталық (азимуталлық) квантлық сан l. Бас квантлық санның мәниси берилген квантлық ҳаллардыда азимуталлық квантлық сан

$$l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$$

мәнислерине ийе болады.

Жоқарыдағы параграфта исленген жуўмақлар бойынша атомның ҳәр қыйлы квантлық ҳалларды тәрийиплейтуғын $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ 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 қәлеген 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 квантланыўының бул формуласын таллаймыз. Бор теориясындағы қозғалыўшы электронның импульс моментиниң квантланыўы (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 ҳалларының да бар болыўы мүмкин. Барлық s ҳалларда, мысалы 1s ҳалда $l = 0$ ҳәм (2.5.38)-аңлатпа бойынша $L = 0$.

Атомда белгили бир траектория (яғный орбита) бойынша қозғалыўшы электронды классикалық физика көз-карaслары менен қарағанда импульс моментиниң нолге тең болыўы мүмкин емес.

Тәжирийбелер ноллик орбиталық моментке ийе ҳаллардың бар екенлигин тастыйықлайды. Демек атомдағы электронның қозғалысын тәрийиплеўдиң классикалық усылынан бас тартқанда ғана атомның қәсийетлерин дурыс есаплаўға ҳәм болжаўға болатуғынлығын көрсетеди. Квнат механикасындағы бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплеўдиң итималлықлық усылы атомлық системаларды тәрийиплеўдиң бирден бир дурыс усылы болып табылады. Ҳәзирги заман физикасының жуўмақларының мәниси усыннан ибарат.

Ядроның әтирапында қозғалыўшы электрон зарядланған бөлекше болғанлықтан, бундай қозғалыс атомда базы бир туйық тоқтың болатуғынлығына сәйкес келеди. Бундай туйық 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 шығыўы ушын кеткен ўақытты T арқалы белгилесек, онда усындай қозғалысқа мәниси

$$i = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}$$

шамасына тең туйық тоқ сәйкес келеди. Бул тоққа

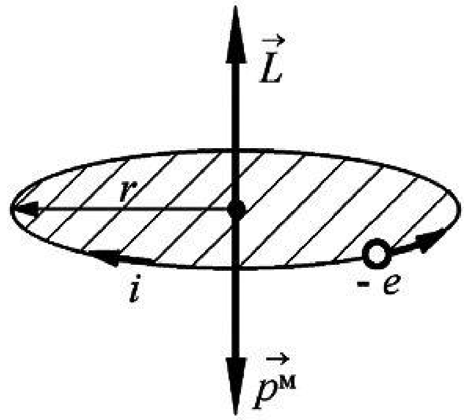
$$p^m = i\pi r^2 = \frac{2vr}{2}$$

магнит моменти сәйкес келеди. Бундай жағдайда механикалық ҳәм магнит моментлери арасындағы байланыс

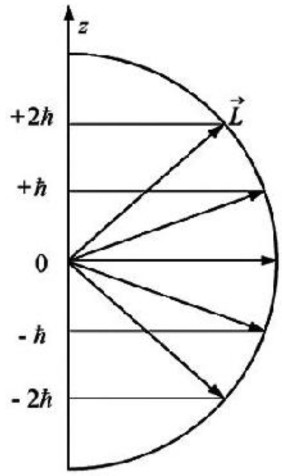
$$\Gamma_0 = \frac{p^m}{L} = \frac{e}{2m} \qquad (2.5.39)$$

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-сүўрет).

Квантлық механиканда орбиталық магнит моментин табыў ушын электр тоғының кеңисликтеги тығызлығы $\vec{j}_e$ шамасын итималлықлардың ағысының тығызлығы $\vec{j}$ арқалы $\vec{j}_e = -e\vec{j}$ формуласы бойынша анықлап алыў керек болады. Итималлықлар ағысы тығызлығын атомның берилген квантлық ҳалдыа сәйкес келетуғын толқын функциясын билиў арқалы (3.23)-формуланың жәрдеминде есаплайды. Гиромагнит қатнастың дәл квантлық механикалық есаплаўлары да (2.5.39)-формулаға алып келеди.



2.5.8-сүўрет.



2.5.9-сүўрет.

Солай етип қәлеген квантлық ҳалда водород атомы тек механикалық моментке емес [оның шамасын (2.5.38)-формуланың жәрдеминде есаплаймыз], ал магнит моментине де ийе болады екен

$$p^m = \Gamma_0 L = \mu_b\sqrt{l(l+1)}. \qquad (2.5.40)$$

Бул аңлатпадағы универсаллық турақлы

$$\mu_b = \frac{e\hbar}{2m} = 0{,}927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл}$$

шамасы атомлардың магнит моментлерин өлшеў бирлиги сыпатында 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 диң тек бирге өзгеретуғын өтиўлердиң болыўы мүмкин, яғный $\Delta l = \pm 1$. Демек оптикалық өтиўлер ушын айтылған $\Delta l = \pm 1$ өтиўлери таңлап алыў қағыйдасы (правило отбора) деп аталады. Бундай таңлап алыў қағыйдасының орын алыўына тиккелей себеп бар. Нурландырылған электромагнит нурлары (фотон) өзи менен бирге тек энергияны ғана емес, ал белгили бир импульс моментин де алып кетеди. Сонлықтан фотон нурланғанда электронның орбиталық квантлық сан бирге өзгериўи 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 сыпатлайтуғын $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ 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 z көшерине түсирилген проекциясының тек белгили бир мәнислерге ийе болатуғынлығы келип шығады. Бул мәнислер мыналар:

$$L_z = m\hbar. \quad (2.5.41)$$

Кеңисликтеги z 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 бағытларға ийе болатуғынлығын көрсетеди (2.5.9-сүўрет). Электронлық орбиталар ҳаққындағы классикалық көз-қараслар бойынша $\vec{L}$ векторы барлық ўақытта орбита тегислигине перпендикуляр бағытланған. Демек (2.5.41)-аңлатпа кеңисликтеги орбиталардың сырттан түсирилген майданның бағытына салыстырғанда дискрет түрде жайласатуғынлығын сәўлелендиреди екен.

Жоқарыда гәп етилген атомның магнит ҳәм механикалық моментлери арасындағы байланыс (2.5.41)-аңлатпаны есапқа алғанда атомның магнит моментиниң айырып алынған z бағытына түсирилген проекциясының мүмкин болған мәнислерин анықлаўға мүмкиншилик береди екен:

$$p_z^m = \Gamma_0 L_z = m\mu_b. \quad (2.5.42)$$

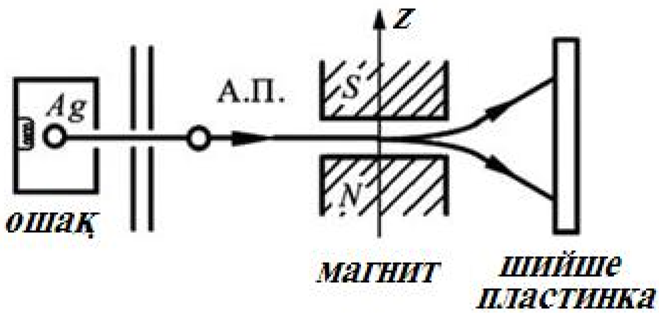
Демек атомның магнит моментиниң айырып алынған z бағытына түсирилген проекцияларының мүмкин болған мәнислери магнит квантлық саннан ғәрезли болады екен.

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

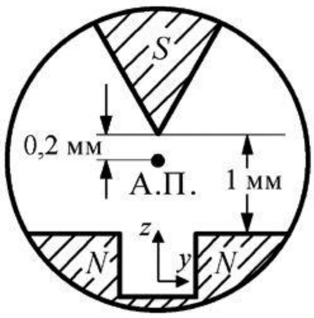
Штерн ҳәм Герлах тәжирийбеси. Оптикалық экспериментлер атомлардың энергиясының квантланатуғынлығы ҳаққындағы жеткиликли болған мағлыўматларды береди. Енди квантланыўдың басқа түри болған кеңисликтеги квантланыўды қараймыз. Бул квантланыў атомның магнит моментиниң сыртқы магнит майданы бағытына түсирилген проекциясының дискрет мәнислерге ийе болыўынан 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 жәрдеминде сыпатланады. Қурамалырақ атомлар ушын бул формуланың түри өзгерислерге ушырайды (2.5.6-параграфты қараңыз). Бирақ бундай атомлар ушын да квантлық механиканың тийкарғы жуўмағы өз күшинде қалады: атомның магнит моментиниң сырттан түсирилген майданның бағытына түсирилген проекциясы тек дискрет квантлық мәнислерге ийе болады.

Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесинде атомлық система ушын кеңисликтеги квантланыў былайынша демонстрацияланады. Вакуум ошағында пуўландырыў ҳәм енсиз саңлақлар арқалы өткериў жолы менен гүмистиң ямаса басқа металдың атомларының жиңишке дәстеси алынады. (2.5.10а-сүўрет). Бул дәсте бир текли емес магнит майданы арқалы өткериледи. Бул майданда магнит индукциясының үлкен градиентиниң болыўы шәрт. Тәжирийбеде магнит майданының индукциясы $\vec{B}$ үлкен мәниске ийе ҳәм z көшери бағытында бағытланған.



2.5.10a сүўрет.



2.5.10b сүўрет.

Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесиниң схемасы.

Бундай магнит майданын пайда етиў ушын пышақтың жүзи сыяқлы полюске ийе магнит қолланылады (2.5.10b-сүўрет). Бул магниттен жүдә жақын қашықлықтан атомлар дастеси өткериледи.

Магнит полюслери арасынан өтиўши атомларға магнит майданы бағытында

$$F_z = p_z^m \frac{\partial B}{\partial z} \qquad (2.5.43)$$

күши тәсир етеди. Бул күш бир текли емес магнит майданының индукциясының градиентиниң есабынан пайда болады ҳәм атомның магнит моментиниң майданның бағытына түсирилген проекциясының шамасынан ғәрезли. Усы күштиң тәсиринде атомлар дәстеси z көшери бағытында аўысыўға 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-караслары бойынша тәртипсиз жыллылық қозғалыслары орын алатуғын болғанлықтан магнит майданына кирип келгенде атомлардың магнит моментлери қәлеген бағытқа қарай бағытланған болады. Усындай жағдай ҳәр қандай атомлар ушын F_z күшиниң үзликсиз тарқалыўына, яғный 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)-күштиң тәсиринде атомлар дәстеси дәстелердиң дискрет санына бөлиниўи керек. Нәтийжеде шийше пластинкада атомлардың айналық дискрет жолақлары пайда болады. Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесинде тап усындай нәтийже бақланды.

Солай етип Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесинде атомлардың магнит моментлериниң кеңисликлик квантланыўы ҳаққындағы квантлық механиканың жуўмақлары тастыйықланды.

Электронның спини. Квантлық механиканан электронлық "думанның" симметриясының бар екенлигиниң нәтийжесинде тийкарғы қозбаған ҳалда турған атомның механикалық ҳәм магнитлик моментлери нолге тең болатуғынлығы 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 тастыйықламады. Тәжирийбелер қозбаған атомлар дәстесиниң тек еки дәстеге ажыралатуғынлығын көрсетти. Шийше пластинкада болса жоқарыға ҳәм төменге қарай симметриялы жайласқан енсиз еки жолақ пайда болды. Бул аўысыўларды өлшеў қозбаған гүмис атомларының магнит моментин анықлаўға мүмкиншилик берди. Магнит майданының бағытында түсирилген оның проекциясы $+\mu_B$ ҳәм $-\mu_B$ шамаларына тең болып шықты.

Квантлық механика менен тәжирийбе арасындағы бул қарама-қарсылық биринши 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 қыйыншылықлары 1925-жылы сапластырылды. Усы жылы С.Гаудсмит 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 спини ҳаққындағы 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 биринши гезекте электрон қандай тезлик пенен айланса да (яғный жақтылықтың тезлигинен киши тезлик нәзерде тутылады) Бор магнетонына тең магнит моментин пайда етиў мүмкин емес екенлигин көрсетти. Усының менен бир қатарда айланыўшы электрон модели менен есапланған меншикли магнит ҳәм механикалық моментлердиң гиромагнитлик қатнасының мәниси тәжирийбеде алынған шамадан еки есе киши болып шықты.

Солай етип Жер сыяқлы өз көшери дөгерегинде айланыўшы электрон модели дурыс 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 ишки 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 сыяқлы физикалық шама болып табылады.

Теория менен эксперимент жуўмақларын бир бири менен сәйкеслендириўде Гаудсмит ҳәм Уленбеклер орбиталық моментлерге сәйкес электронның меншикли механикалық ҳәм магнит моментлериниң шамалары

$$L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \text{ ҳәм} \tag{2.5.44}$$

$$p_s^m = 2\mu_B\sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}\mu_B \tag{2.5.45}$$

формуласы менен анықланады деп болжады. Бундай моментлер ушын гиромагнитлик қатнас

$$\Gamma_s = \frac{p_s^m}{L_s} = \frac{2\mu_B}{\hbar} = \frac{e}{m} \tag{2.5.46}$$

шамасына тең ҳәм орбиталық қозғалыс ушын келтирилип шығарылған (2.5.39)-гиромагнитлик қатнастан еки есе үлкен болып шығады.

Бул теорияда меншикли моментлердиң берилген z бағытына түсирилген проекциясы $m_s = \pm s = \pm\frac{1}{2}$ квантлық санның жәрдемтнде анықланады. Бундай жағдайда

$$L_{sz} = m_s\hbar = \pm\frac{\hbar}{2}, \tag{2.5.47}$$

$$p_{sz}^m = 2m_s\mu_B = \pm\mu_B \tag{2.5.48}$$

шамаларына тең болады. (2.5.44 - 5.48) аңлатпалардан электронның спинлик моментлериниң шамаларының турақлы екенлиги келип шығады. Ал электронның қосымша еркинлик дәрежеси менен бул моментлердиң z дана проекциясы байланыслы. Бул проекциялар m_s квантлық санның жәрдеминде анықланады ҳәм тек еки мәниске ийе болады. Бундай еки квантлық ҳаллар ҳаққында гәп еткенде спини жоқарыға қарай бағытланған $(m_s = +\frac{1}{2})$ ҳәм спини төменге қарай бағытланған $(m_s = -\frac{1}{2})$ ҳаллар нәзерде тутылады. Сонлықтан электронның қәлеген системадағы ҳалы ҳаққында гәп етилгенде спини бағытын да көрсетиў керек болады.

Демек электронның атомдағы квантлық ҳал төрт квантлық санның жәрдеминде анықланады екен. Оларды төмендегидей кесте түринде көрсетемиз.

Атамасы	Бел-	Мүмкин болған

	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

$$2\sum_{0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \qquad (2.5.49)$$

комбинациясы сәйкес келеди.

Электронда спинниң бар екенлигин есапқа алып водород атомының импульсиниң толық моментин анықлаймыз. Бул толық момент электронның орбиталық ҳәм меншикли моментлериниң қосындысынан турады. Квантлық системадағы қәлеген импульс моменти сыяқлы қосынды моменттиң шамасы

$$L_j = \hbar\sqrt{j(j+1)} \qquad (2.5.50)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпадағы j квантлық сан

$$j = l + s \text{ ҳәм } j = |l - s|$$

мәнислерине ийе 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 бағытларына сәйкес келеди.

Атомның толық импульс моментиниң квантлық сан ушын төмендегидей таңлап алыў қағыйдасы орын алады:

$$\Delta j = 0, \pm 1.$$

Механикалық моментлер менен магнит моментлери байланысқан. Олар еки туйық тоқ сыяқлы бир бири менен тәсир етиседи. Бундай тәсирлесиў спин-орбиталық тәсирлесиў деп аталады. Бундай тәсирлесиў атомның толық энергиясын өзгертеди ҳәм сонлықтан ҳәр қыйлы j квантлық санна ийе ҳалларда атом ҳәр қыйлы энергияға ийе болыўы керек. Бундай айырманың болыўы атомның оптикалық спектриндеги сызықлардың бир неше сызықларға айрылыўын тәмийинлейди. Оптикалық спектр сызықларының бир неше сызықларға айрылыўы жүдә кишкене мәниске ийе болып, ол водород атомының оптикалық спектриниң жуқа қурылысының пайда болыўына алып келеди. Бундай спектрде спектр сызықлары дублетлик (қос) структураға ийе. Бундай жуқа структурадағы сызықлар арасындағы қашықлықлар тийкарғы сызықлар арасындағы кашықлықлардан жүзлеген мың есе киши болса да экспериментаторлар бундай жуқа структураның бар екенлигин тәжирийбелериниң барысында жүдә сезгир ҳәм жоқары ажырата алыўшылық қәбилетликке ийе оптикалық әсбаплардың жәрдеминде анықлады.

Электронның спинге ийе болыўының физикалық тәбияты нелерден ибарат? Бул сораўға жуўап классикалық физикада да жоқ, релятивистлик емес квантлық механиканда да жоқ. Релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарында Шредингер теңлемесиниң жататуғынлығын биз жақсы билемиз. Бундай теорияда спин қосымша гипотезаның жәрдеминде киргизиледи. Бул гипотеза теорияның тийкарғы қағыйдаларынан келип шықпайды, ал эксперимент пенен теорияның нәтийжелерин бир бири менен сәйкеслендириў мақсетинде пайдаланылады.

1928-жылы П.Дирак квантлық механикан бөлекшениң релятивистлик қозғалысы ушын улыўмаластырды. Релятивистлик квантлық теорияның (кват механикасының) тийкарында дәслеп релятивистлик 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 шешиўдиң барысында үш квантлық санна ийе болғанымыздай, Дирак теңлемесин шешиўдиң барысында төртинши, спин квантлық санның тәбийий түрде пайда болатуғынлығын атап өтемиз.

Релятивистлик 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 турақлысы атамасына ийе болды.

Солай етип улыўмалық сөзлер менен электронның меншикли механикалық ҳәм магнит моментлериниң квантлық механикандағы релятивистлик эффект сыпатында пайда болатуғынлығын айтып өтемиз.

Тек электрон емес, ал басқа да көп санлы элементар бөлекшелер s спинге ийе болады. Бир қатар бөлекшелер ушын спин пүтин мәниске ийе, ал басқа бөлекшелер ушын ярым пүтин мәниске ийе. Мысалы ядроның қурамлық 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 тәсирлесиўиниң салдарынан водород атомларының оптикалық спектриниң аса жуқа структурасы жүзеге келеди. Бул спектр сызықларының "аса киши" бөleклерге бөлиниўи (бир сызықтың бир бирине аса жақын жайласқан сызықларға ажыралыўы) түринде 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 күшти анықлаңыз. Ядроның магнит моментин есапқа алмаңыз.

Шешими: Магнитостатиканың белгили формуласының жәрдеминде дөңгелек тоқтың көшериндеги оның орайынан z қашықлықта жайласқан орындағы магнит майданының индукциясын есаплаймыз

$$B(z) = \frac{\mu_0 I R^2}{2(R^2 + z^2)^{3/2}}.$$

B шамасын өзгериўши 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. Сонлықтан

$$p_z^m = p_{zs}^m = \pm\mu_B.$$

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 параллель 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 жуўық түрде шешиў усыллары**

Уйытқыў теориясының тийкарғы теңлемелери

Квантлық механиканың мәселелериниң барлығын дәл шешиў мүмкин емес. Көпшилик жағдайларда энергия менен толқын функцияларының мәнислерин тек жуўық түрде ғана анықлаўға болады. Сонлықтан квантлық механикада Шредингер теңлемесин жуўық түрде есаплаў усыллары кеңнен қолланылады. Бундай усыллардың ең кең тарқалған түри уйытқыў теориясы болып табылады.

Квантлық механикада атомдағы электронлардың қозғалысларын изертлеў ушын тийкарғы күш сыпатында ядро менен электронлар арасындағы электростатикалық тәсир етисиў күши алынады. Ал уйытқыў сыпатында электролардың бир бири менен тәсирлесиў (ийтерисиў) күшлерин алыўға болады. Егер атом сыртқы электр ямаса магнит майданына жайластырылған болса, онда бул майданлар шамасы бойынша ядро пайда еткен электр майданының шамасынан әдеўир киши болады. Бул жағдайда уйытқыў сыпатында электронлардың сыртқы электр ямаса магнит майданындағы қозғалысын қарай аламыз.

Системаның гамильтонианы ўақытқа байланыслы болмайтуғын стационар жағдайлар ушын уйытқыў теориясын қараймыз. Бундай жағдайда системаның гамильтонианы:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \hat{T} + \hat{V}_0 + \hat{V}' = \hat{H}^0 + \hat{V}' \qquad (2.6.1)$$

түринде жазылады. Бул аңлатпадағы уйытқыў операторы $V' << V$, ал потенциаллық энергияның тийкарғы бөлеги V^0 дәл шешимге ийе

$$\hat{H}^0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 \qquad (2.6.2)$$

Шредингер теңлемесин қанаатландырады. Егер $V' = 0$ теңлиги орынланатуғын болса бул теңлеменің энергия E_n^0 ҳәм толқын функциясы Ψ_n^0 менен тәрийипленетуғын дәл шешимлери болады. Бирақ V' нолге тең болмағанда бизиң мынадай теңлемени шешиўимиз керек болады:

$$\left(\hat{H}^0 + \hat{V}'\right)\Psi = E\Psi. \qquad (2.6.3)$$

Бизиң ўазыйпамыз (2.6.3)-теңлемедеги V' уйытқыў энергиясын есапқа алып жуўық түрде болса да $\left(\hat{H}^0 + \hat{V}'\right)$ операторының меншикли мәнислери E_n менен Ψ_n меншикли функцияларын табыўдан ибарат.

Уйытқыў теориясы бойынша энергия E менен толқын функциясы Ψ диң мәнислери төмендегидей қатарлар түринде изленеди:

$$\Psi = \Psi^0 + \Psi' + \Psi'' + \ldots \qquad (2.6.4)$$

$$E = E^0 + E' + E'' + \ldots \qquad (2.6.5)$$

Бул аңлатпадағы E', Ψ' менен E'', Ψ'' шамалары Ψ^0, E^0 шамаларына салыстырғанда кишилиги бойынша биринши ҳәм екинши тәртипли шамалар болып табылады. Уйытқыў энергиясын V^0 потенциалының энергиясы менен киши λ шамасының (λ<<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 Ψ' ҳәм *E*' шамаларының мәнислерин анықлаў ушын төмендегидей теңлеме аламыз:

$$\left(E^0 + E' - \hat{H}^0 - \hat{V}'\right)\left(\Psi^0 + \Psi'\right) = 0\,. \qquad (2.6.6)$$

Бут теңлемеде қатнасатуғын ағзаларды мәнислериниң үлкенлигине қарай жыйнасақ төмендегидей теңлемени аламыз:

$$\left(E^0 - \hat{H}^0\right)\Psi^0 + \left[\left(E' - \hat{V}'\right)\Psi^0 + \left(E^0 - \hat{H}^0\right)\Psi'\right] + \left(E' - \hat{V}'\right)\Psi' = 0\,. \qquad (2.6.7)$$

Уйытқыў теориясының биринши тәртипли жуўық шешимлерин табыў ушын кишилиги бойынша екинши тәртипли $\left(E' - \hat{V}'\right)\Psi'$ шамасын нолге тең деп есаплап дәл шешимниң $\left(E^0 - \hat{H}^0\right)\Psi^0$ көбеймеси ушын алынатуғынлығын аңғарамыз. Бундай жағдайда (2.6.7)-теңлеме ноллик жууықлаўда

$$\left(E^0 - \hat{H}^0\right)\Psi^0_{n'} = 0 \tag{2.6.8}$$

теңлемесине айланады ҳәм бул теңлемени шешиў арқалы Гамильтон операторының

$$E^0_1, E^0_2, E^0_3, \ldots, E^0_n, \ldots$$

меншикли мәнислери менен

$$\Psi^0_1, \Psi^0_2, \Psi^0_3, \ldots, \Psi^0_n, \ldots$$

меншикли функцияларын анықлаўға болады. Бундай жағдайда (2.6.7)-теңлемениң орнына

$$\left(E^0 - \hat{H}^0\right)\Psi' = -\left(E' - \hat{V}'\right)\Psi^0{}_n \tag{2.6.9}$$

түриндеги теңлемени аламыз.

Мейли басланғыш моментте система $n' = n$ квантлық ҳалда турған болсын. Дәл шешимде $E^0 = E^0_n, \Psi^0 = \Psi^0_n$ теңликлери орынланатуғын болғанлықтан биринши тәртипли жууықлаўда $E' = E'_n, \Psi' = \Psi'$ теңликлерин қабыл етсек болады. Бундай жағдайда (2.6.9)-теңлемени былайынша жазыўға болады:

$$\left(E^0_n - \hat{H}^0\right)\Psi'_n = -\left(E'_n - \hat{V}'\right)\Psi^0_n \tag{2.6.10}$$

Қәлеген функцияны ортонормировкаланған функциялардың толық системасы бойынша қатарға жайыўға болғанлықтан $\Psi^0_{n'}$ функциясын төмендегидей қатар түринде излеймиз:

$$\Psi'_n = \sum_{n'} C_{n'} \Psi^0_{n'}. \tag{2.6.11}$$

Ендиги ўазыйпа усы Фурье қатарындағы белгисиз $C_{n'}$ коэффициентлерин анықлаўдан ибарат болады. (2.6.11)-аңлатпаны (2.6.10)-теңлемеге қойсақ

$$\sum_{n'} C_{n'} \left(E^0_n - \hat{H}^0\right)\Psi^0_{n'} = -\left(E'_n - \hat{V}'\right)\Psi^0_{n'} \tag{2.6.12}$$

теңлемесин аламыз, ал (2.6.8)-теңлемени есапқа алсақ, онда (2.6.12)-теңлеме былайынша жазылады:

$$\sum_{n'} C_{n'} \left(E^0_n - E^0_{n'}\right)\Psi^0_{n'} = -\left(E'_n - \hat{V}'\right)\Psi^0_n. \tag{2.6.13}$$

Энергия қәддилери азғынбаған жағдай

Егер берилген система азбаған болса, яғный энергияның ҳәр бир E^0_n меншикли мәнисине Ψ^0_n меншикли функциялардың тек бир ғана мәниси сәйкес келетуғын болса, онда (2.6.13)-теңлемениң шеп тәрепин Ψ_n^{0*} ге көбейтип пүткил кеңислик бойынша интегралласақ төмендегидей қатнасқа келемиз:

$$\sum_{n'} C_{n'}\left(E_n^0 - E_{n'}^0\right)\delta_{nn'} = -E' + \int \Psi_n^{0*} \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x. \quad (2.6.14)$$

Бул аңлатпада Ψ_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)-теңликтиң шеп тәрепи нолге тең болғанлықтан $n' = n$ болғанда $\left(E_n^0 - E_{n'}^0\right) = 0$, 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 жуўықлаўын тәрийиплейтуғын (2.6.13)-Шредингер теңлемесин түрлендирип жазайық:

$$\sum_{n''} C_{n''}\left(E_n^0 - E_{n''}^0\right)\Psi_{n''}^0 = -\left(E_n' - V'\right)\Psi_n^0. \quad (2.6.18)$$

Бул теңлемениң шеп тәрепин $\Psi_{n'}^{0*}$ (бул жерде $n' \neq n$) функциясына көбейтип ҳәм ортонормалық шәртти есапқа алып пүткил кеңислик бойынша интегралласақ $C_{n'}$ коэффициенти ушын мынадай қатнас аламыз:

$$C_{n'} = \frac{\overline{V_{n'n}}}{E_n^0 - E_{n'}^0}. \quad (2.6.19)$$

Бул аңлатпада

$$\overline{V'} = \int \Psi_{n'}^0 \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x. \quad (2.6.20)$$

Бундай жағдайда Ψ_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 жуўықлаўдағы

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \Psi'_n = C_n^0 \Psi_n^0 + \sum_{n'} {}' C_{n'} \Psi_{n'}^0 \qquad (2.6.22)$$

түринде жазылатуғын ноллик жуўықлаўдағы толық толқынлық функцияларды нормалаў (нормировка) шәртинен алынады:

$$\int \Psi_n^* \Psi_n d^3x = 1. \qquad (2.6.23)$$

(2.6.22)- аңлатпада

$$C_n^0 = 1 + C_n. \qquad (2.6.24)$$

(2.6.22)-толқынлық функцияны (2.6.23)-нормалаў шәртине қойып кишилиги бойынша тек биринши тәртипли шамалар менен шекленсек, онда

$$\left|C_n^0\right|^2 \int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 d^3x + \sum_{n'} {}' \left\{ C_n^{0*} C_{n'} \int \Psi_n^{0*} \Psi_{n'}^0 d^3x + C_{n'}^* C_n^0 \int \Psi_{n'}^{0*} \Psi_n^0 d^3x \right\} = 1 \qquad (2.6.25)$$

түриндеги аңлатпаға ийе боламыз. Бундай жағдайда толқынлық функцияның ортонормалық шәртинен

$$C_n^0 = 1, \qquad (2.6.26)$$

ал (2.6.24)-теңлемеден $C_n = 0$ мәнислерин аламыз. Демек уйытқыў теориясының биринши тәртипли жуўықлаўы бойынша толқынлық функция

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \sum_{n'} {}' \frac{\overline{V'_{n'n}}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \Psi_{n'}^0 \qquad (2.6.27)$$

түринде болады. Усының менен бир қатарда Ψ'_n толқынлық функциясы энергияның меншикли мәниси $E'_{n'}$ сыяқлы уйытқыў энергиясының биринши дәрежесине пропорционал болады.

Энергия қәддилериниң азғын жағдайы ушын уйытқыў теориясы

Енди энергияның E_n^0 меншикли мәнисине *j* дана $\Psi_{n_1}^0, \Psi_{n_2}^0, \ldots, \Psi_{n_j}^0$ меншикли функцияларының сәйкес келетуғын уйытқыў теориясын қараймыз.

Бул функциялардың қәлеген

$$\Psi_n^0 = \sum_{i=1}^{j} C_i^0 \Psi_{n_i}^0$$

сызықлық түрлениўи де энергиясының меншикли мәнислери E_n^0 болған ноллик жуўықлаўдағы

$$\left(E_n^0 - \hat{H}^0\right) \Psi_n^0 = 0$$

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)-теңликтиң шеп тәрепин $\Psi_{n_i}^{0*}$ функциясына көбейтип барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз. Сонда

$$\int \Psi_{n_i}^{0*}\left(E_n^0 - \hat{H}^0\right)\Psi' d^3x = -\int \Psi_{n_i}^{0*}\left(E_n' - V'\right)\Psi_n^0 d^3x \tag{2.6.28}$$

теңлемесин аламыз. Туўындыларды аўыстырыў теориясынан пайдалансақ, онда кейинги теңликтиң орнына

$$\int \Psi'\left(E_n^0 - \hat{H}^0\right)\Psi_{n_i}^{0*} d^3x = -\int \Psi_{n_i}^{0*}\left(E_n' - \hat{V}'\right)\Psi_n^0 d^3x \tag{2.6.29}$$

теңлигин аламыз. Бул теңликтеги $\Psi_{n_i}^{0*}$ функциясының $\left(E_n^0 - \hat{H}^0\right)\Psi_{n_i}^{0*} = 0$ Шредингер теңлемесиниң шешими екенлигин есапқа алсақ мынадай теңликке ийе боламыз:

$$\int \Psi_{n_i}^{0*}\left(E_n' - V'\right)\sum_{i'=1}^{j} C_{i'}^0 \Psi_{n_i}^0 d^3x = 0\,. \tag{2.6.30}$$

$\Psi_{n_i}^0$ меншикли функциясын $\int \Psi_{n_i}^{0*}\Psi_{n_i}^0 d^3x = \delta_{n_i n_i}$ түринде ортонормаланған деп есапласақ, онда (2.6.30)-теңликтиң орнына төмендегидей теңлеме жазамыз:

$$C_i^0\left(E_n' - \overline{V_{ii}'}\right) = \sum_{i'-1}^{j} C_i^0 \overline{V_{ii'}'}\,. \tag{2.6.31}$$

Бул теңликте

$$\overline{V_{ii}'} = \int \Psi_{n_i}^{0*}\hat{V}'\Psi_{n_i}^0 d^3x, \tag{2.6.32}$$

$$\overline{V_{ii'}'} = \int \Psi_{n_i}^{0*}\hat{V}'\Psi_{n_{i'}}^0 d^3x. \tag{2.6.33}$$

(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 диң бирден (1 ден) j шамасына шекемги аралықтағы қәлеген мәниске ийе болатуғынлығынан E_n' энергияның ҳәм C_i^0 коэффициентлериниң белгисиз мәнислери ушын j дана бир текли теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned}
&C_i^0\left(E_n' - V_{11}'\right) - C_2^0 V_{12}' - \ldots - C_j^0 V_{1j}' = 0,\\
&-C_1^0 V_{21}' + C_2^0\left(E_n' - V_{22}'\right) - \ldots - C_j^0 V_{2j}'\,,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\,,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\,,\\
&-C_1^0 V_{j1}' - C_2^0 V_{j2}' - \ldots + C_{jj}^0\left(E_n' - V_{jj}'\right) = 0.
\end{aligned} \tag{2.6.34}$$

Егер Ψ_n^0 толқынлық функциясының

$$\int \Psi^{0*}_{n} \Psi^{0}_{n} d^3x = 1 \qquad (2.6.35)$$

нормалаў шәртин қанаатландыратуғынлығын есапқа алсақ, онда уйытқыў энергиясы E'_n менен C^0_i белгисиз коэффициентлерин анықлаўдың қыйын емес екенлигин аңғарамыз.

(2.6.34)-системаның нолге тең емес шешимлериниң болыўы ушын оның детерминатнының нолге тең болыўы керек. Бундай жағдайда E'_n энергиясының мәнислерин табыў ушын төмендегидей теңлеме аламыз:

$$\begin{vmatrix} (E'_n - V'_{11}), V'_{12}, \ldots, -V'_{1j} \\ -V'_{21}, (E'_n - V'_{22}), \ldots, -V'_{2j} \\ -V'_{j1}, -V'_{j2}, \ldots, (E'_n - V'_{jj}) \end{vmatrix} = 0\,. \qquad (2.6.36)$$

Бул теңлемени әсирлик теңлеме деп атайды. Бул термин аспан механикасынан алынған.

Егер әсирлик теңлемениң бир неше түбири болса (j ға тең болыўы шәрт емес), онда ҳәр бир түбир ушын (2.6.34)-теңлемеден пайдаланып табылған C^0_i коэффициентлер сәйкес келеди. Яғный 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 түткиллей жоғалыўы да мүмкин.

Штарк эффекти

Егер атомды сырттан түсирилген электр майданына орналастырса, онда атомның энергия қәддилери қосымша қәддилерге ажыралады. Улыўма физика курсынан бул эффектти Штарк эффекти деп аталатуғынлығын ҳәм оның 1913-жылы ашылғанлығын билемиз. Энергия қәддилериниң магнит майданы тәсиринде қосымша қәддилерге ажыралыўын Зееман эффекти деп атайтуғын едик. Тәжирийбелерге 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 (сызықлы Штарк эффекти), ал басқа атомларды кернеўликтиң екинши дәрежесине (квадратлық Штарк эффекти) пропорционал болып шықты.

Классикалық физика көз-караслары бойынша Штарк эффектин түсиндириў мүмкин болмады. Кватлық механика ғана бул қубылысты түсиндире алды.

Водород атомы ушын сызықлы Штарк эффектин үйренейик ҳәм екинши энергия қәдди менен шекленемиз (n = 2). Сырттан түсирилген майданның кернеўлигиниң шамасы 10^4 – 10^5 В/см. Ал водород ядросы тәрепинен пайда етилген электр майданының кернеўлиги шама менен $5{*}10^9$ В/см шамасына тең. Демек сырттан түсирлиген электр майданын уйытқыў сыпатында қарай алады екенбиз.

Уйытқыў энергиясы сыпатында электронның сыртқы электр майданындағы

$$V' = e_0 \varepsilon z$$

потенциал энергиясын ала аламыз. Уйытқыў болмаған жағдайдағы электронны потенциал энергиясы

$$E_2^0 = -\frac{R\hbar}{4}$$

ҳәм энергияның усы мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциялар

$$\Psi_1^0 = \Psi_{2,0,0} = R_{20}(r)Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{20}(r), \tag{2.6.38}$$

$$\Psi_2^0 = \Psi_{2,1,0} = R_{21}(r)Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}R_{21}\cos\theta, \tag{2.6.39}$$

$$\Psi_3^0 = \Psi_{2,1,1} = R_{21}(r)Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}R_{21}(r)\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}, \tag{2.6.40}$$

$$\Psi_4^0 = \Psi_{2,1,-1} = R_{21}(r)Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}}R_{21}(r)\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi}. \tag{2.6.41}$$

θ ҳәм φ мүйешлерин декарт координаталары менен алмастырсақ жоқарыдағы функциялар төмендегидей түрге енеди:

$$\Psi_1^0 = f_1(r), \tag{2.6.43}$$

$$\Psi_2^0 = f_2(r)z, \tag{2.6.44}$$

$$\Psi_3^0 = f_2(r)\frac{x+iy}{\sqrt{2}}, \tag{2.6.45}$$

$$\Psi_4^0 = -f_2(r)\frac{x-iy}{\sqrt{2}}. \tag{2.6.46}$$

Бул аңлатпалардағы

$$f_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{20}(r), \tag{2.6.47}$$

$$f_2(r) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{R_{21}(r)}{r}, \tag{2.6.48}$$

ал электронның улыўмалық толқын функциясын

$$\Psi^0 = \sum_{i-1}^{4} C_i^0 \Psi_i^0 \tag{2.6.49}$$

түринде жазамыз.

Биз қарап атырған жағдайда системаның азғыныўының еселиги 4 ке тең (яғный *j* = 4) болғанлықтан белгисиз C_i^0 коэффициентлер менен системаның уйытқымаған ҳалын тәрийиплейтуғын E_2^0 энергияға мәнис бериў ушын (2.6.34)-қатнастан төмендегидей теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned}
&C_1^0\left(E_2' - \overline{V_{11}'}\right) - C_2^0\overline{V_{12}'} - C_3^0\overline{V_{13}'} - C_4^0\overline{V_{14}'} = 0,\\
&-C_1^0\overline{V_{21}'} + C_2^0\left(E_2' - \overline{V_{22}'}\right) - C_3^0\overline{V_{23}'} - C_4^0\overline{V_{24}'} = 0,\\
&-C_1^0\overline{V_{31}'} - C_2^0\overline{V_{22}'} + C_3^0\left(E_3' - \overline{V_{33}'}\right) - C_4^0\overline{V_{34}'} = 0,\\
&-C_1^0\overline{V_{41}'} - C_2^0\overline{V_{42}'} - C_3^0\overline{V_{43}'} + C_4^0\left(E_4' - \overline{V_{44}'}\right) = 0.
\end{aligned} \tag{2.6.49}$$

Бул аңлатпада

$$\overline{V_{i'i}} = \int \Psi_{i'}^{0*}\hat{V}'\Psi_i^0 d^3x = e_0\varepsilon\int \Psi_{i'}^{0*}\hat{Z}'\Psi_i^0 d^3x. \tag{2.6.50}$$

Көлем бойынша интеграллаўда $\overline{V_{11}'}, \overline{V_{22}'}, \overline{V_{33}'}, \overline{V_{13}'}, \overline{V_{23}'}, \overline{V_{14}'}, \overline{V_{24}'}, \overline{V_{34}'}$ 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 $\overline{V}_{12}'$ ҳәм $\overline{V}_{21}' = \overline{V}_{12}'$ матрицалық элементлери ғана нолге тең болмайды:

$$\overline{V}_{12}' = \overline{V}_{21}' = e_0\varepsilon\int f_1(r) f_2(r) z^2 d_3x. \tag{2.6.51}$$

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 θ ҳәм φ мүйешлери бойынша интеграллағаннан кейин төмендегидей теңликти аламыз:

$$V_{21}' = V_{12}' = \frac{e_0\varepsilon}{24a_0^4}\int_0^\infty r^4\left(2 - \frac{r}{a_0}\right)e^{\frac{r}{a_0}} dr. \tag{2.6.52}$$

Егер $\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^S d\rho = r(s+1)$ екенлигин есапқа алсақ, онда матрицалық элементлер ушын

$$V_{12}' = V_{21}' = -3e_0\varepsilon a_0 \tag{2.6.53}$$

шамаларына ийе боламыз. $V_{i'i}'$ матрицалық элементлериниң усы мәнислерин есапқа алған жағдайда энергияның E_2' мәнислери ушын төмендегидей әсирлик теңлеме аламыз:

$$\begin{vmatrix} E_2' & 3a_0 & 0 & 0 \\ 3a_0 e_0\, \varepsilon & E_2' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2' \end{vmatrix} = 0. \tag{2.6.54}$$

Бул теңлемени $E'^2_2\left(E'^2_2 - 9a_0^2 e_0^2 \varepsilon^2\right) = 0$ түринде жазыўға болады:

$$\begin{aligned} E_2'^{(1)} &= -3a_0 e_0 \varepsilon, \\ E_2'^{(2)} &= -3a_0 e_0 \varepsilon, \\ E_2'^{(3)} &= E_2'^{(4)} = 0. \end{aligned} \tag{2.6.55}$$

Ал бул энергияның ҳәр бир мәнисине (2.6.49)-теңлик бойынша ҳәр түрли C_i коэффициентлери сәйкес келеди:

$$\begin{aligned} &C_1^{(1)} = C_2^{(1)}; C_3^{(1)} = C_4^{(1)} = 0, \\ &C_1^{(2)} = -C_2^{(2)}; C_3^{(2)} = C_4^{(2)} = 0, \\ &C_1^{(3)} = -C_2^{(3)}; C_3^{(3)}, C_4^{(3)} \neq 0, \\ &C_1^{(4)} = C_2^{(4)}; C_3^{(4)}, C_4^{(4)} \neq 0. \end{aligned} \tag{2.6.56}$$

Усының менен бирге энергиясы

$$E_2^{(1)} = E_2^0 + E_2'^{(1)} = -\frac{R\hbar}{4} - 3e_0 a_0 \varepsilon \tag{2.6.57}$$

шамасына тең қәддиге ноллик жуўықлаўда

$$\Psi^{0(1)} = C_1^{(1)}\left(\Psi_{2,0,0} + \Psi_{2,1,0}\right) \tag{2.6.58}$$

меншикли функция сәйкес келеди.

Егер толқынлық функцияның нормаллаў шәртин болған $\int \Psi^{0(1)*}\Psi^{0(1)} d^3x = 1$ шәртин есапқа алсақ (2.6.58)-функцияны

$$\Psi^{0(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_{2,0,0} + \Psi_{2,1,0}\right) \tag{2.6.59}$$

түринде жаза аламыз. Ал келеси квантлық ҳал ушын

$$E_2^{(2)} = E_2^0 + E_2'^{(2)} = -\frac{R\hbar}{4} + 3e_0 a_0 \varepsilon. \tag{2.6.60}$$

Ноллик жуўықлаўдағы толқынлық функция

$$\Psi^{0(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_{2,0,0} - \Psi_{2,1,0}\right). \tag{2.6.61}$$

(2.6.55)-қатнасларда $E_2^{(3)} = E_2^{(4)} + E'^{0}_2$ болған ҳаллар электр майданында уйытқыўға ушырамайтуғын болғанлықтан бул ҳаллар ушын

$$\Psi^{0(3)} = \Psi_{2,1,1} \qquad (m = +1)$$
$$\Psi^{0(4)} = \Psi_{2,1,-1} \qquad (m = -1)$$

түриндеги толқынлық функцияларды ямаса олардың сызықлық түрлениўлерин пайдаланыўға болады (яғный $m = \pm 1$ 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 *xy* 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.

Водород атомындағы екинши энергия қәддиниң электр майданындағы бир неше қәддилерге бөлиниўи. a) электр майданы болмағанда, b) сырттан түсирилген электр майданы бар болғанда.

Сызықлық Штарк эффектин былайынша түсиндириўге болады: $n = 2$ болған ҳалда атомдағы электронның қозғалысын тәрийиплейтуғын толқынлық функция орайлық симметрияға ийе болмайды. Нәтийжеде атомда қосымша p' моменти пайда болады. Сонлықтан сырттан түсирилген электр майданына ($E_x = E_y = 0, E_z = \varepsilon$) жайластырылған атом қосымша

$$V' = -(\vec{p}\vec{E}) = -p\varepsilon\cos\gamma \qquad (2.6.62)$$

энергиясына ийе болады. Бул аңлатпада γ арқалы атомның электрлик диполлик моменти менен z көшери арасындағы мүйеш белгиленген. (2.6.62)-теңликти (2.6.55)-қатнас пенен салыстырсақ атомның электрлик моментиниң $p = 3e_0a_0$ шамасына тең, $\Psi^{0(1)}$ шешими ушын мүйештиң γ = 0, ал $\Psi^{0(2)}$ шешими ушын γ = π шамасына тең болатуғынлығын көремиз.

Энергияның $E_2^{(3)}, E_2^{(4)}$ мәнислери ушын $\gamma = \pm\frac{\pi}{2}$ теңлиги орынланады деп қабыл етсек, электрлик момент электр майданына перпендикуляр болады ҳәм усыған сәйкес атом қосымша энергияға ийе бола алмайды.

Солай етип водород атомының $n = 2$ болған ҳал ушын сызықлы 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.