III бөлим

Паули теориясы

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

Ескертиў: Биз төменде операторлардың үстине «қалпақ» белгисин қоймаймыз. Бирақ қандай шаманың оператор екенлиги текстте атап өтиледи.

Қосымшалар: Электронның импульс моментине мәселелерине тийисли болған коммутацияланбайтуғын операторлар ҳаққында гәп еткенде әдетте төмендегидей үш операторды көрсетиўге болады (бул жерде ħ = 1 бирлиги қолланылған):

$$\left.\begin{aligned} m_x &= yp_z - zp_y, \\ m_y &= zp_x - xp_z, \\ m_z &= xp_y - yp_x. \end{aligned}\right\} \tag{3.1.1}$$

Бул операторлар координата ҳәм моментлер операторларынан дүзилген (классикалық механикада да тап усындай әмелди пайдаланады). Егер «қалпақлары» менен жазатуғын болсақ (3.1.1)-аңлатпаларды былайынша жазамыз:

$$\hbar\widehat{l}_x = y\widehat{p}_z - z\widehat{p}_y, \quad \hbar\widehat{l}_y = z\widehat{p}_x - x\widehat{p}_z, \quad \hbar\widehat{l}_z = x\widehat{p}_y - y\widehat{p}_x.$$

Электронның квантлық қозғалыс теңлемесин қарағанда (3.1.1)-аңлатпалардың ҳақыйқатында да импульс моменти ушын жазылған операторлар екенлигине исениўге болады.

Жоқарыдағы операторлардың координата ҳәм импульслер операторлары менен Пуассон қаўсырмаларын дүземиз. Биз мынаған ийе боламыз

$$[m_x,\ x] = \frac{i}{\hbar}(m_x x - x m_x) = 0. \tag{3.1.1*}$$

Себеби m_x операторы x бойынша дифференциаллаўды өз ишине алмайды ҳәм сонлықтан x қа көбейтиўге коммутативли. Буннан кейин мынаған ийе боламыз:

$$\left.\begin{aligned} [m_x,\ y] &= -z[p_y,\ y] = -z, \\ [m_x,\ z] &= y[p_z,\ z] = y. \end{aligned}\right\}$$

Буз бул жерде Пуассон қаўсырмаларының қәсийетлеринен пайдаландық. Тап усындай жоллар менен төмендеги аңлатпаларға ийе боламыз:

$$\left.\begin{aligned} [m_x,\ p_x] &= 0, \\ [m_x,\ p_y] &= -p_z, \\ [m_x,\ p_z] &= p_y. \end{aligned}\right\} \tag{3.1.1**}$$

(3.1.1*)-ҳәм (3.1.1**)-формулалардың жәрдеминде импульс моментиниң ҳәр қыйлы болған еки қураўшысы ушын Пуассон қаўсырмаларын аламыз:

$$[m_x,\ m_y] = [m_x,\ zp_x - xp_z] = [m_x,\ z]\,p_x - x\,[m_x,\ p_z] =$$
$$= yp_x - xp_y = -m_z.$$

Солай етип

$$\left.\begin{aligned} [m_y,\ m_z] &= -m_x, \\ [m_z,\ m_x] &= -m_y, \\ [m_x,\ m_y] &= -m_z. \end{aligned}\right\} \qquad (3.1.4)$$

Биз алған аңлатпалардың барлығы да классикалық аңлатпаларға сәйкес келеди.

Жоқарыда келтирилген формулалардың айырымларын көп тарқалған әдебиятта былайынша да жазады:

$$\begin{aligned} &\{\widehat{l}_x, x\} = 0, \quad \{\widehat{l}_x, y\} = iz, \quad \{\widehat{l}_x, z\} = -iy, \\ &\{\widehat{l}_y, y\} = 0, \quad \{\widehat{l}_y, z\} = ix, \quad \{\widehat{l}_y, x\} = -iz, \\ &\{\widehat{l}_z, z\} = 0, \quad \{\widehat{l}_z, x\} = iy, \quad \{\widehat{l}_z, y\} = -ix. \end{aligned}$$

Бул аңлатпаларда m_x моменти операторы $\widehat{l}_x$ арқалы, ал «[» түриндеги Пуассон қаўсырмасы «{» түриндеги қаўсырма менен алмастырылған.

(3.1.1)-аңлатпада берилген операторларды кеңисликтеги қозғалысқа сәйкес келиўши үш еркинлик дәрежесине ийе материаллық ноқаттың қозғалыс муғдарының моменти менен салыстырыў мүмкин. Электронның магнит майданындағы қәсийетлери, көп электронлардан туратуғын системаның (мысалы атомлардың электронлық қабықлары) қәсийетлери электронның және де бир еркинлик дәрежесине ийе екенлигин көрсетеди. Бул еркинлик дәрежеси электронның кеңисликтеги қозғалысына байланыслы емес меншикли қозғалыс муғдарының моменти менен байланыслы Бундай еркинлик дәрежесин (ҳәм оған сәйкес келетуғын электронның меншикли қозғалыс муғдарының моментин, яғный импульс моментин) инглиз сөзи менен «спин» деп атайды.

Электронның меншикли (спинлик) импульс моментиниң қәсийетлерин әдеттеги (орбиталық) момент ушын орын алмастырыў қатнасларынан үйрениў мүмкин:

$$\left.\begin{aligned} m_y m_z - m_z m_y &= i\hbar m_x, \\ m_z m_x - m_x m_z &= i\hbar m_y, \\ m_x m_y - m_y m_x &= i\hbar m_z, \end{aligned}\right\} \qquad (3.1.2)$$

(3.1.2)-аңлатпаларды жазғанымызда спин моменти де орбиталық момент ушын арналған орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады ҳәм электронның спин моментиниң ҳәр бир қураўшысы операторы бир биринен белгиси менен ғана айырмаға ийе тек еки меншикли мәниске ийе деген гипотезаны қабыл етиў керек.

Спин моментиниң қураўшылары ушын операторларды

$$(m_x)_{\text{сп}} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad (m_y)_{\text{сп}} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad (m_z)_{\text{сп}} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \qquad (3.1.3)$$

түринде жазылады деп болжаў керек. Бул аңлатпада $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$ арқалы меншикли мәнислери ±1 ге тең болған өзи өзине түйинлес оператор белгиленген. ½ шамасына тең көбейтиўши (3.1.3)-операторлардың (3.1.2)- қатнасларды қанаатландырыўының керек екенлигинен келип шығады.

Спинди ħ бирликлеринде есаплағанда (ал ħ/2 бирликлеринде емес) σ_x, σ_y, σ_z операторларының орнына

$$s_x = \frac{1}{2}\sigma_x, \quad s_y = \frac{1}{2}\sigma_y, \quad s_z = \frac{1}{2}\sigma_z$$

операторларын пайдаланған қолайлы. Бул операторлар көп электронлы мәселелерди қарағанда қолланылады.

σ_x, σ_y, σ_z операторлары ушын орын алмастырыў қатнаслары мына түрге ийе

$$\left.\begin{aligned} \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y &= 2i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z &= 2i\sigma_y, \\ \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x &= 2i\sigma_z. \end{aligned}\right\} \tag{3.1.4}$$

Бирақ биз

$$\sigma_x^2\sigma_z - \sigma_z\sigma_x^2 = \sigma_x(\sigma_x\sigma_z - \sigma_z\sigma_x) + (\sigma_x\sigma_z - \sigma_z\sigma_x)\sigma_x$$

аңлатпасына ийемиз ҳәм оннан алдыңғы қатнаслардан

$$\sigma_x^2\sigma_z - \sigma_z\sigma_x^2 = -2i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x)$$

аңлатпасын аламыз.

Бизиң гипотезамызға сәйкес σ_x операторының меншикли мәнислери ±1 ге тең. Сонлықтан σ_x^2 операторы тек бир ғана меншикли мәниске ийе болады, яғный $\sigma_x^2 = 1$. Демек бул шама енди оператор болып табылмайды. Ол енди қәлеген оператор менен, соның ишинде σ_z пенен де коммутацияланады. Сонлықтан соңғы теңлемениң оң тәрепи нолге тең. Бул теңликти соған усаған еки теңлик пенен жазсақ, төмендеги аңлатпалар системасын аламыз

$$\left.\begin{aligned} \sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y &= 0, \\ \sigma_z\sigma_x + \sigma_x\sigma_z &= 0, \\ \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x &= 0. \end{aligned}\right\} \tag{3.1.5}$$

(3.1.4)- ҳәм (3.1.5)-аңлатпаларды бир бирине теңлестирип мынаны аламыз:

$$\left.\begin{aligned} \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y, \\ \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z. \end{aligned}\right\} \tag{3.1.6}$$

Усының менен бирге биз

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \tag{3.1.7}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Енди σ_x, σ_y, σ_z операторларын еки қатар ҳәм еки бағанадан туратуғын матрица деп қарай аламыз. Соның менен бирге бул операторларды тек σ = ±1 мәнислерине тең (координаталарға қосымша болған) жаңа өзгериўшиниң функциясына тәсир ететуғын операторлар деп те қарай аламыз.

Бул функцияны $\psi(\boldsymbol{r}, \sigma)$ арқалы белгилеп ($\boldsymbol{r}$ арқалы барлық кеңисликлик координаталардың жыйнағы белгиленген) ҳәм

$$\left.\begin{aligned} \sigma_x\psi(\boldsymbol{r},\ \sigma) &= \psi(\boldsymbol{r},\ -\sigma), \\ \sigma_y\psi(\boldsymbol{r},\ \sigma) &= -i\sigma\psi(\boldsymbol{r},\ -\sigma), \\ \sigma_z\psi(\boldsymbol{r},\ \sigma) &= \sigma\psi(\boldsymbol{r},\ \sigma). \end{aligned}\right\} \tag{3.1.8}$$

деп болжап биз (3.1.6)- ҳәм (3.1.7)-қатнасларды қанаатландыра аламыз.

Егер ψ функциясын

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \tag{3.1.9}$$

бағанасы сыпатында жазсақ [бул аңлатпада $\xi = \psi(2,\ +1)$ ҳәм $\eta = \psi(2,\ -1)$] жоқарыдағы формулалар былайынша жазылады:

$$\left.\begin{aligned} \sigma_x\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \eta \\ \xi \end{pmatrix}, \\ \sigma_y\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -i\eta \\ i\xi \end{pmatrix}, \\ \sigma_z\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \xi \\ -\eta \end{pmatrix}. \end{aligned}\right| \tag{3.1.10}$$

Солай етип $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$ операторлары

$$\sigma_x = \sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \sigma_3 \tag{3.1.11}$$

матрицалары формасын қабыллайды. Бул аңлатпада

$$\sigma_1 = \begin{Bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{Bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{Bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{Bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Bmatrix}. \tag{3.1.12}$$

Бул матрицалар Паули (Pauli) матрицалары деп аталады. $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$ операторлары ушын матрицаларды сайлап алыў тек каноникалық түрлендириў ($\xi,\ \eta$ шамалары үстинен исленетуғын сызықлы орын алмастырыўларға сәйкес) дәллигине шекемги дәлликте анықланған. Сонлықтан (бул жағдай илимий әдебиятта қабыл етилген) $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$ лар ҳаққында гәп етилгенде (3.1.12)-санлы матрица түсинилетуғын болса ҳәм (80-формуладан келип шығатуғын $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$ шамаларының физикалық мәнислерин сақласақ, онда (3.1.11)-теңлик шәртли теңлик болып қалмайды, ал басқа да эквивалент болған теңликлер менен алмастырылыўы мумкин.

(3.1.6)- ҳәм (3.1.7)-теңлемелерди қанаатландыратуғын $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$ операторлары биз төмендегидей үш сызықлы комбинацияларды киргизетуғын болсақ

$$\left.\begin{aligned} \sigma'_x &= l_1\sigma_x + m_1\sigma_y + n_1\sigma_z, \\ \sigma'_y &= l_2\sigma_x + m_2\sigma_y + n_2\sigma_z, \\ \sigma'_z &= l_3\sigma_x + m_3\sigma_y + n_3\sigma_z \end{aligned}\right\} \tag{3.1.13}$$

векторлық характерге ийе болады. Бул аңлатпаларда $l_k,\ m_k,\ n_k\ (k = 1,\ 2,\ 3)$ шамаларының мәниси туўры мүйешли еки координаталар системасы арасындағы мүйешлердиң косинусларына сәйкес келеди. Бирақ жаңа σ'_x, σ'_y, σ'_z операторлары ески σ_x, σ_y, σ_z операторлар сыяқлы (3.1.6)- ҳәм (3.1.7)- қәсийетлерге ийе болады. Буннан әҳмийетли жуўмақ келип шығады: егер биз бул шамаларады вектордың қураўшылары деп қарайтуғын болсақ, онда бул вектордың қәлеген бағытқа түсирилген проекциялары ±1 ге тең меншикли мәнислерге ийе болады. Егер биз (3.1.11) ге сәйкес σ_x, σ_y, σ_z лар сыпатында (3.1.12)-матрицаларды алатуғын болсақ, онда (13)-аңлатпалар (3.1.6)- ҳәм (3.1.7)-шәртлерди қанаатландыратуғын еки бағанаға ҳәм еки қатарға ийе матрицалардың ең улыўмалық түрин береди.

(3.1.12)- үш матрица бирлик матрица менен бирликте толық системаны пайда етеди (яғный группаны пайда етеди). Бирақ бул жағдайды мынадай мәнисте қараў керек: еки қатарға ҳәм еки бағанаға ийе (яғный 4 элементке ийе) қәлеген матрицаны усы төрт санлы коэффициентлердиң сызықлы комбинациясы түринде қараў керек. Егер берилген матрица өзи-өзине түйинлес болса, онда бул коэффициентлер ҳақыйқый мәнислерге ийе болады.

Қозғалыс муғдарының толық моменти (импульстиң толық моменти) ушын операторларды дүзиўге кирисемиз. Спинлик қозғалыс моменти ушын (3.1.3)-аңлатпаны қабыл етип биз электронның қозғалыс муғдарының торлық моменти ушын оператордың төмендегидей түрге ийе болады деген жуўмаққа келемиз:

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{M}_x &= m_x + \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \\ \mathcal{M}_y &= m_y + \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \\ \mathcal{M}_z &= m_z + \frac{\hbar}{2}\sigma_z. \end{aligned}\right\} \qquad (3.1.14)$$

Қозғалыс муғдары моментиниң улыўмалық қәсийетлери бойынша қосылыўшы операторлар қандай орын алмастырыў қатнасларын қанаатландыратуғын болса қосынды қозғалыс муғдары моменти операторыда тап сондай орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады. Демек (3.1.2)-аңлатпаға сәйкес бизлер төмендеги аңлатпаларға ийе болыўымыз керек:

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{M}_y\mathcal{M}_z - \mathcal{M}_z\mathcal{M}_y &= i\hbar\mathcal{M}_x, \\ \mathcal{M}_z\mathcal{M}_x - \mathcal{M}_x\mathcal{M}_z &= i\hbar\mathcal{M}_y, \\ \mathcal{M}_x\mathcal{M}_y - \mathcal{M}_y\mathcal{M}_x &= i\hbar\mathcal{M}_z. \end{aligned}\right\} \qquad (3.1.15)$$

(3.1.15)-теңликтиң дурыс екенлигин m_x, m_y, m_z ҳәм σ_x, σ_y, σ_z шамалары ушын жазылған (3.1.2)- ҳәм (3.1.4)-аңлатпалардан, соның менен бирге қозғалыс муғдарының орбиталық ҳәм спин моментлериниң бир бири менен коммутацияланыў фактинен тиккелей тексерип көриў мүмкин.

Қозғалыс муғдарының орбиталық ҳәм спинлик моментлериниң қураўшыларынан толық қозғалыс муғдарының қураўшылары менен коммутацияланатуғын бисызықлы комбинацияны дүзиў мүмкин. Ҳақыйқатында да

$$\mathcal{M} = \sigma_x m_x + \sigma_y m_y + \sigma_z m_z + \hbar \qquad (3.1.16)$$

ямаса тап усының өзи

$$\mathcal{M} = \sigma_x \mathcal{M}_x + \sigma_y \mathcal{M}_y + \sigma_z \mathcal{M}_z - \frac{1}{2}\hbar \qquad (3.1.16^*)$$

деп болжаймыз. Биз m_x, m_y, m_z семей躍 семейству бойынша

$$\mathscr{M} m_x - m_x \mathscr{M} = -i\hbar(\sigma_y m_z - \sigma_z m_y)$$

аңлатпасына, ал $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ семейству бойынша

$$\frac{\hbar}{2}(\mathscr{M}\sigma_x - \sigma_x \mathscr{M}) = i\hbar(\sigma_y m_z - \sigma_z m_y)$$

аңлатпаларына ийемиз. Бул теңликлерди бир бирине қоссақ оң тәрепинде нолди аламыз. Шеп тәрепиндеги аңлатпаны ҳәм y пенен z бойынша қураўшыны

$$\left.\begin{aligned} \mathscr{M}\mathscr{M}_x - \mathscr{M}_x\mathscr{M} = 0, \\ \mathscr{M}\mathscr{M}_y - \mathscr{M}_y\mathscr{M} = 0, \\ \mathscr{M}\mathscr{M}_z - \mathscr{M}_z\mathscr{M} = 0. \end{aligned}\right\} \quad (3.1.17)$$

түринде жазыўға болады.

Шредингер теориясында қолланылатуғын $\mathscr{M}$ операторы менен қозғалыс муғдарының орбиталық моменти аңлатпасы арасындағы байланысты табамыз. Биз мынаған ийемиз

$$\mathscr{M}^2 - \mathscr{M}\hbar = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2. \quad (3.1.18)$$

Екинши тәрептен қозғалыс муғдарының толық моментиниң қураўшылары ушын (3.1.14)-операторлардың квадратларының суммасын (қосындысын) алатуғын болсақ ҳәм (3.1.18)-аңлатпадан пайдалансақ, мынаны аламыз

$$\mathscr{M}_x^2 + \mathscr{M}_y^2 + \mathscr{M}_z^2 = \mathscr{M}^2 - \frac{1}{4}\hbar^2. \quad (3.1.19)$$

Солай етип $\mathscr{M}_x, \mathscr{M}_y, \mathscr{M}_z$ векторының квадраты $\mathscr{M}$ скалярының квадратынан тек $\frac{1}{4}\hbar^2$ қосылыўшысы бойынша ғана айрылады екен. Биз $\mathscr{M}$ операторын қозғалыс муғдарының моментиниң спин-орбиталық скаляры деп атаймыз.

(3.1.18)-аңлатпаның оң тәрепи Шредингер теориясында ушырасатуғын ҳәм Паули матрицасына ийе емес оператор болып табылады. Оның меншикли мәнислери $\hbar^2 l(l+1)$ шамасына тең. Бул аңлатпада l арқалы пүтин оң сан ямаса нол белгиленген. Егер биз $\mathscr{M}$ операторының меншикли мәнислерин $\hbar k$ арқалы белгилесек, онда

$$k(k-1) = l(l+1) \quad (3.1.20)$$

аңлатпасына ийе боламыз ҳәм буннан берилген l ушын

$$k = -l \text{ ямаса } k = l+1 \quad (3.1.21)$$

мәнислерин аламыз. Бирақ k шамасы нолге тең бола алмайды. Ҳақыйқатында да (3.1.19)-формуладан $\mathscr{M}^2$ операторының математикалық күтилиўи (математическое ожидание) қәлеген ҳалда $\frac{1}{4}\hbar^2$ шамасынан үлкен болады. Сонлықтан $\mathscr{M}$ операторының меншикли мәнислери ушын жазылған

$$\mathscr{M}\psi = k\hbar\psi \quad (3.1.22)$$

теңлемеси нолге тең болған меншикли мәниске ийе бола алмайды. Бул $l=0$ болғанда k ның бирден бир мүмкин болған мәниси 1 ге тең, ал $l \geqslant 1$ болғанда k ның (3.1.21)-формула менен берилетуғын еки мәниси болады.

3-2. Сфералық координаталардағы қозғалыс муғдарының толық муғдарының операторлары

Шредингер теориясында орайлық симметрияға ийе мәселени қарағанымызда қозғалыс муғдарының орбиталық моменти операторлары ушын аңлатпалар алынған еди. r, ϑ, φ сфералық координаталар усы координаталар менен байланыслы болған туўры мүйешли x, y, z координаталары менен

$$x=r\sin\vartheta\cos\varphi, \quad y=r\sin\vartheta\sin\varphi, \quad z=r\cos\vartheta \tag{3.2.1}$$

аңлатпалары арқалы байланысқан.

$$p_r=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}, \quad p_\vartheta=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\vartheta}, \quad p_\varphi=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{3.2.2}$$

деп болжап биз

$$\left.\begin{aligned} m_x &= -\sin\varphi p_\vartheta-\operatorname{ctg}\vartheta\cos\varphi p_\varphi, \\ m_y &= \cos\varphi p_\vartheta-\operatorname{ctg}\vartheta\sin\varphi p_\varphi, \\ m_z &= p_\varphi. \end{aligned}\right\} \tag{3.2.3}$$

аңлатпаларын аламыз [II бөлимниң IV бабының 3-параграфындағы (2)-аңлатпа].

Қозғалыс муғдары моментиниң ҳәм оның z көшери бойынша қураўшылары операторларының меншикли функциялары Шредингер теориясында

$$m^2\psi=-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]=\hbar^2 l(l+1)\psi, \tag{3.2.4}$$

$$m_z\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}=m\psi \tag{3.2.5}$$

теңлемелерин ҳәм шардың бетиндеги бир мәнислик талабын қанаатландырады.

Қозғалыс муғдарының толық моментине (бул толық момент спинди өз ишине алады) өтиў ушын биз өткен параграфтың (3.2.14)- ҳәм (3.2.16)-формулаларына $\mathscr{M}_z$ ҳәм $\mathscr{M}$ лерди қосамыз. p_ϑ ҳәм p_φ шамаларында аңлатылған ҳалда бул операторлар

$$\mathscr{M}_z=p_\varphi+\frac{\hbar}{2}\sigma_z, \tag{3.2.6}$$

$$\begin{aligned} \mathscr{M} &= (-\sigma_x\sin\varphi+\sigma_y\cos\varphi)p_\vartheta+ \\ &+(-\sigma_x\operatorname{ctg}\vartheta\cos\varphi-\sigma_y\operatorname{ctg}\vartheta\sin\varphi+\sigma_z)p_\varphi+\hbar \end{aligned} \tag{3.2.7}$$

түрине ийе.

$\mathscr{M}_z$ ҳәм $\mathscr{M}$ операторларының улыўмалық меншикли мәнислерин табамыз. Бул функциялар

$$\mathscr{M}_z\psi=\hbar\left(m+\frac{1}{2}\right)\psi, \tag{3.2.8}$$

$$\mathscr{M}\psi = \hbar k\psi \qquad (3.2.9)$$

теңлемелерин ҳәм шардың бетиндеги бир мәнислик талабын қанаатландырады.

Биз қарап атырған операторлардың меншикли мәнислери биз жоқарыда таптық: нолге тең емес l квантлық санда k тек $k = -l$ ҳәм $k = l + 1$мәнислерин ғана қабыл ете алады. Ал m квантлық саны болса Шредингер теориясындағыдай мәнислерди қабыл етеди: ол $m = -l$ ден $m = +l$ ге шекемги пүтин мәнислерди қабыл етеди.

$\mathscr{M}_z$ ҳәм $\mathscr{M}$ операторлары ушын жазылган (3.2.6)- ҳәм (3.2.7)- аңлатпаларды әпиўайыластырыў ушын

$$L' = SLS^+, \quad \psi' = S\psi \qquad (3.2.10)$$

каноникалық түрлендириўлерин қолланамыз. Бул аңлатпада

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} + i\sigma_z \sin\frac{\varphi}{2}, \quad S^+ = \cos\frac{\varphi}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\varphi}{2}. \qquad (3.2.11)$$

Егер түрлендириўге шекем

$$\sigma_x = \sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \sigma_3, \qquad (3.2.12)$$

$$\mathscr{M}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\hbar}{2}\sigma_3 \qquad (3.2.13)$$

аңлатпаларына ийе болған болсақ, онда түрлендириўлерден кейин мыналарға ийе боламыз:

$$\left.\begin{aligned} \sigma'_x &= \sigma_1\cos\varphi - \sigma_2\sin\varphi, \\ \sigma'_y &= \sigma_2\sin\varphi + \sigma_2\cos\varphi, \\ \sigma'_z &= \sigma_3, \end{aligned}\right\} \qquad (3.2.14)$$

$$\mathscr{M}'_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \qquad (3.2.15)$$

(3.2.7)-формуладағы $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ операторларын $\sigma'_x, \sigma'_y, \sigma'_z$ операторларына ҳәм (3.2.14)-формула бойынша p_φ ди

$$p'_\varphi = Sp_\varphi S^+ = p_\varphi - \frac{\hbar}{2}\sigma_3 \qquad (3.2.16)$$

аңлатпасы менен алмастырсақ, онда түрлендирилген $\mathscr{M}$ операторын

$$\mathscr{M}' = -\sigma_1 \operatorname{ctg}\vartheta\, p_\varphi + \sigma_2\left(p_\vartheta - \frac{i\hbar}{2}\operatorname{ctg}\vartheta\right) + \sigma_3 p_\varphi + \frac{\hbar}{2} \qquad (3.2.17)$$

түринде аламыз. Бул аңлатпада p_φ менен p_ϑ шамалары (3.2.2)-операторлар болып табылады.

$\mathscr{M}$ ушын аңлатпаны буннан да әпиўайыластырыў ушын оған избе-из еки түрлендириўди қолланамыз. Бириншиден

$$\mathscr{M}'' = T\mathscr{M}'T^+, \quad \psi'' = T\psi' \qquad (3.2.18)$$

белгилеўин қабыл етемиз. Бул жерде

$$T=\cos\frac{\vartheta}{2}+i\sigma_2\sin\frac{\vartheta}{2},\quad T^+=\cos\frac{\vartheta}{2}-i\sigma_2\sin\frac{\vartheta}{2}. \qquad (3.2.19)$$

Нәтийжеде мынаны аламыз:

$$\mathscr{M}''=-\frac{\sigma_1}{\sin\vartheta}p_\varphi+\sigma_2\left(p_\vartheta-\frac{ih}{2}\operatorname{ctg}\vartheta\right). \qquad (3.2.20)$$

Екиншиден

$$\mathscr{M}^*=\sqrt{\sin\vartheta}\,\mathscr{M}''\frac{1}{\sqrt{\sin\vartheta}},\quad \psi^*=\sqrt{\sin\vartheta}\,\psi'' \qquad (3.2.21)$$

деп болжаймыз. Буннан кейин түрлендирилген $\mathscr{M}$ мына түрге енеди:

$$\mathscr{M}^*=-\frac{\sigma_1}{\sin\vartheta}p_\varphi+\sigma_2 p_\vartheta. \qquad (3.2.22)$$

Оператордың бул түри (3.2.7)-аңлатпада берилген дәслепки түринен әдеўир әпиўайы. $\mathscr{M}'_z$ операторы болса (3.2.18)- ҳәм (3.2.21)- түрлендириўлерден кейин өзгериске ушырамады. Сонлықтан оның ушын

$$\mathscr{M}^*_z=p_\varphi \qquad (3.2.23)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

ψ толқын функциясын

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \qquad (3.2.24)$$

түриндеги шардың бетиндеги еки қураўшыға ийе толқын функциясы деп қарап ҳәм

$$|\psi|^2=|\psi_1|^2+|\psi_2|^2 \qquad (3.2.25)$$

деп есаплап биз нормировка шәрти сыпатында мына қатнасты қабыл ете аламыз:

$$\frac{1}{4\pi}\int_0^\pi\int_0^{2\pi}|\psi|^2\sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi=1. \qquad (3.2.26)$$

ψ’ ҳәм ψ’’ функциялары ушын да нормировка шәрти тап усындай түрге ийе болады. ψ’’ функциясынан $\sqrt{\sin\vartheta}$ көбейтиўшиси менен айрылатуғын ψ^* функциясы ушын нормировка шәрти төмендегидей болады:

$$\frac{1}{4\pi}\int_0^\pi\int_0^{2\pi}|\psi^*|^2 d\vartheta\,d\varphi=1. \qquad (3.2.27)$$

Бир мәнислик шәрти тек дәслепки толқын функциясына ғана тийисли болады. Ал түрлендирилген толқын функцияларына келетуғын болсақ, онда (3.2.11)-түрлендириў операторлары сызықлы түрде $\sin\frac{\varphi}{2}$ ҳәм $\cos\frac{\varphi}{2}$ лерге ийе болғанлықтан олар (толқын функциялары) φ шамасы 2π ге шекем үлкейгенде белгисин өзгертеди. Демек олар кеңисликтеги ноқаттың еки мәнисли функциялары болып табылады деген сөз.

3-3. **Спинге ийе шар функциялары**

Егер еки қураўшыға ийе толқын функциясын

$$\psi^{*}=\binom{Y}{Z} \tag{3.3.1}$$

түринде (бағана түринде) жазсақ, онда жоқарыдағы параграфтағы (3.2.28)-формула бирдей болған еки теңлеме түринде жазылады:

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial Y}{\partial\varphi}&=i\left(m+\frac{1}{2}\right)Y,\\ \frac{\partial Z}{\partial\varphi}&=i\left(m+\frac{1}{2}\right)Z,\end{aligned}\right\} \tag{3.3.2}$$

ал (3.2.29)- теңлеме

$$\left.\begin{aligned}\frac{i}{\sin\vartheta}\frac{\partial Z}{\partial\varphi}-\frac{\partial Z}{\partial\vartheta}&=kY,\\ \frac{i}{\sin\vartheta}\frac{\partial Y}{\partial\varphi}+\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}&=kZ\end{aligned}\right\} \tag{3.3.3}$$

теңлемелер системасына алып келинеди. (3.3.2)-теңлемени де қанаатландырыўы ушын функцияларды

$$\left.\begin{aligned}Y(\vartheta,\ \varphi)&=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}e^{i\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}A(\vartheta),\\ Z(\vartheta,\ \varphi)&=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}e^{i\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}B(\vartheta)\end{aligned}\right\} \tag{3.3.4}$$

түринде аламыз. Бундай жағдайда $A(\vartheta)$ ҳәм $B(\vartheta)$ функциялары төмендегидей теңлемелер системасын қанаатландырады

$$\left.\begin{aligned}\frac{dA}{d\vartheta}&=\frac{\left(m+\frac{1}{2}\right)}{\sin\vartheta}A+kB,\\ \frac{dB}{d\vartheta}&=-\frac{\left(m+\frac{1}{2}\right)}{\sin\vartheta}B-kA,\end{aligned}\right\} \tag{3.3.5}$$

ал олар ушын нормировка шәрти

$$\frac{1}{2}\int_{0}^{\pi}(A^{2}+B^{2})\,d\vartheta=1 \tag{3.3.6}$$

аңлатпасы болады. Бул функцияларды әдеттеги $P_l^m(\cos\vartheta)$ шар функциялары арқалы аңлатыўға болады. Бу функциялардың айырым қәсийетлерин еске түсиремиз.

$$P_l^m(x) = P_l^m(\cos\vartheta) \tag{3.3.7}$$

функциясы

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP_l^m}{dx}\right] - \frac{m^2}{1-x^2}P_l^m + l(l+1)P_l^m = 0 \tag{3.3.8}$$

теңлемесин қанаатландырады ҳәм $x = \pm 1$ болған жағдайдағы оның шешимин көрсетеди. $m = 0$ болғанда $P_l^m(x)$ Лежандр полиномына алып келинеди

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dx^l}(x^2-1)^l, \tag{3.3.9}$$

ал $m \geqslant 0$ болғанда мынаған тең болады:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x). \tag{3.3.10}$$

m ниң терис мәнислеринде $P_l^m(x)$ функциясы оң m ниң мәниси қойылатуғын функциялар арқалы

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(x). \tag{3.3.11}$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

Биз қарап атырған ϑ мүйешиниң функциялары $P_l^m(\cos\vartheta)$ ҳәм $P_l^{m+1}(\cos\vartheta)$ төмендегидей биринши тәртипли теңлемелер системасын қанаатландырады:

$$\left.\begin{aligned} &\frac{d}{d\vartheta}P_l^m(\cos\vartheta) - m\operatorname{ctg}\vartheta P_l^m(\cos\vartheta) = -P_l^{m+1}(\cos\vartheta),\\ &\frac{d}{d\vartheta}P_l^{m+1}(\cos\vartheta) + (m+1)\operatorname{ctg}\vartheta P_l^{m+1}(\cos\vartheta) =\\ &\qquad\qquad = (l+m+1)(l-m)P_l^m(\cos\vartheta) \end{aligned}\right\} \tag{3.3.12}$$

Усы системаға *A* ҳәм *B* функциялары ушын (3.3.5)-теңлеме де алып келинеди.
(3.3.5)-аңлатпадан (3.3.12)-аңлатпаға өтиў ушын дәслеп

$$A + iB = \sqrt{\sin\vartheta}\, e^{-i\frac{\vartheta}{2}}(y_1 + iy_2) \tag{3.3.13}$$

түрлендириўин орынлаўымыз керек [усыған уқсас болған ψ функциясынан ден ψ* функциясына түрлендириўди өткен параграфтың (3.2.18)- ҳәм (3.2.21)-формулалардың жәрдеминде иследик]. y_1 менен y_2 ушын теңлемелер былайынша жазылады:

$$\left.\begin{aligned} &\frac{dy_1}{d\vartheta} - m\operatorname{ctg}\vartheta\, y_1 = (k+m)\,y_2,\\ &\frac{dy_2}{d\vartheta} + (m+1)\operatorname{ctg}\vartheta\, y_2 = -(-k+m+1)\,y_1. \end{aligned}\right\} \tag{3.3.14}$$

Егер биз

$$y_1 = -c(k+m)P_l^m, \quad y_2 = cP_l^{m+1} \tag{3.3.15}$$

ямаса

$$y_1 = -c' P_l^{-m}, \quad y_2 = c' (-k + m + 1) P_l^{-m-1} \tag{3.3.16}$$

деп алсақ ҳәм (3.3.20)-формулаға сәйкес

$$k(k-1) = l(l+1) \tag{3.3.17}$$

деп алсақ бул теңлемелер әдеттеги шар функциялар ушын жазылған (3.3.12)-теңлемелерге сәйкес келеди.

l сыпатында биз терис болмаған

$$-k, \; k-1$$

санларының бирин алыўымыз мүмкин. Буны былайынша жазыўға болады:

$$l + \frac{1}{2} = \left| k - \frac{1}{2} \right|. \tag{3.3.18}$$

(3.3.16)- ҳәм (3.3.16)-аңлатпаларды теңлестирип, буннан кейин (3.3.11)-формуланы пайдалансақ c' пенен c шамаларының қатнасы ушын

$$\frac{c'}{c} = (-1)^m (k+m) \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \tag{3.3.19}$$

аңлатпасын аламыз. Бул турақлылардың мәнислери (3.3.6)-нормировка шәртинен анықланады. Бул нормировка шәртин былайынша жаза аламыз:

$$\frac{1}{2} \int_0^{\pi} (y_1^2 + y_2^2) \sin\vartheta \, d\vartheta = 1\,. \tag{3.3.20}$$

Буннан кейин биз мыналарды ала аламыз:

$$c = \frac{1}{\sqrt{|k+m|}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}, \quad c' = (-1)^m \frac{k+m}{\sqrt{|k+m|}} \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}. \tag{3.3.21}$$

Егер биз

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} [P_l^{*m}(x)]^2 \, dx = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} [P_l^{*m}(\cos\theta)]^2 \sin\vartheta \, d\vartheta = 1 \tag{3.3.22}$$

шәртине сәйкес нормировкаланған

$$P_l^{*m}(x) = \sqrt{2l+1} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(x) \qquad (x = \cos\vartheta), \tag{3.3.23}$$

шар функциясын киргизетуғын болсақ, онда төмендеги аңлатпаларға ийе боламыз:

$$y_1 = -\frac{k+m}{\sqrt{(k+m)(2k-1)}} P_l^{*m}, \quad y_2 = \sqrt{\frac{k-m-1}{2k-1}} P_l^{*m+1}. \tag{3.3.24}$$

Бул аңлатпалардағы квадрат түбирлерди оң белги менен алыў керек. k менен l шамалары арасындағы (3.3.18)-қатнасты итибарға алып жоқарыдағы формулаларды былайынша жаза аламыз:

$$y_1 = -\sqrt{\frac{k+m}{2k-1}}\,P_{k-1}^{*m}, \quad y_2 = \sqrt{\frac{k-m-1}{2k-1}}\,P_{k-1}^{*m+1} \quad (k>0), \tag{3.3.25}$$

$$y_1 = \sqrt{\frac{k+m}{2k-1}}\,P_{-k}^{*m}, \quad y_2 = \sqrt{\frac{k-m-1}{2k-1}}\,P_{-k}^{*m+1} \quad (k<0). \tag{3.3.25*}$$

Бул формулалардан терис белгиге ийе k ларға ийе y функцияларының оң мәнисли k ларға ийе функциялар арқалы былайынша аңлатылатуғынлығы көринип тур:

$$\left.\begin{aligned} y_1(-k,\,m,\,\vartheta) &= -\sqrt{\frac{k-m}{k+m+1}}\,y_1(k+1,\,m,\,\vartheta),\\ y_2(-k,\,m,\,\vartheta) &= \sqrt{\frac{k+m+1}{k-m}}\,y_2(k+1,\,m,\,\vartheta). \end{aligned}\right\} \tag{3.3.26}$$

Бизиң шар функцияларды k ның бир неше мәнислери ушын қандай мәнислерге ийе болатуғынлығын төмендеги кестеде беремиз:

	$k=+1 \quad (l=0)$	
$m=-1$	$y_1=0$	$y_2=1$
$m=0$	$y_1=-1$	$y_2=0$
	$k=-1 \quad (l=1)$	
$m=-1$	$y_1=-\sin\theta$	$y_2=\cos\theta$
$m=0$	$y_1=\cos\theta$	$y_2=\sin\theta$
	$k=+2 \quad (l=1)$	
$m=-2$	$y_1=0$	$y_2=-\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\vartheta$
$m=-1$	$y_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\vartheta$	$y_2=\sqrt{2}\cos\vartheta$
$m=0$	$y_1=-\sqrt{2}\cos\vartheta$	$y_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\vartheta$
$m=1$	$y_1=-\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\vartheta$	$y_2=0$

3-4. Спинге ийе шар функцияларының базы бир қәсийетлери

Өткен параграфтағы

$$\left[-i\sigma_2 \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\left(m+\frac{1}{2}\right)}{\sin\vartheta}\sigma_1\right]\binom{A}{B} = k\binom{A}{B} \tag{3.4.1}$$

түринде жазылған (3.3.5)-теңлемелерди өзи өзине түйинлес

$$\mathcal{L} = -i\sigma_2 \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\left(m+\frac{1}{2}\right)}{\sin\vartheta}\sigma_1 \tag{3.4.2}$$

операторының k меншикли мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциялары ушын жазылған теңлемелер деп қараўға болады. Буннан A ҳәм B функцияларының ортогоналлық қәсийетке ийе болатуғынлығы келип шығады:

$$\int_0^\pi [A(k,\vartheta)A(k',\vartheta) + B(k,\vartheta)B(k',\vartheta)]\,d\vartheta = 0 \qquad (k \neq k') \tag{3.4.3}$$

ҳәм функциялардың туйық системасын өз ишине алады.

3-параграфтағын (3.3.13)-формула бойынша A ҳәм B функцияларынан y_1 ҳәм y_2 функцияларына өтип биз бул функциялардың да туйық ортогоналлық системаны өз ишине алатуғынлығы ҳаққында жуўмақ шығарамыз. 3-параграфтағы (3.3.20)-нормировканы дыққатқа алып быз былайынша

$$\frac{1}{2}\int_0^\pi [y_1(k,m,\vartheta)\,y_1(k',m,\vartheta) + y_2(k,m,\vartheta)\,y_2(k',m,\vartheta)]\sin\vartheta\,d\vartheta = \delta_{kk'} \tag{3.4.4}$$

ямаса қысқаша

$$\frac{1}{2}\int_0^\pi y(k,m,\vartheta)\,y(k',m,\vartheta)\sin\vartheta\,d\vartheta = \delta_{kk'} \tag{3.4.5}$$

аңлатпасын жаза аламыз. Бул аңлатпада y белгиси арқалы y_1 ҳәм y_2 функцияларының жыйнағын түсинемиз.

$u_1(\vartheta)$ ҳәм $u_2(\vartheta)$ функцияларының ықтыярлы жубын биз бир $u(\vartheta)$ белгиси менен аңлатып $y(k,m,\vartheta)$ функциялары бойынша қатарға

$$u(\vartheta) = \sum_k c(k)\,y(k,m,\vartheta) \tag{3.4.6}$$

түринде жайыў мүмкин. (3.4.6)-аңлатпаның астында еки теңлик тур деп түсиниў керек:

$$u_p(\vartheta) = \sum_k c(k)\,y_p(k,m,\vartheta) \qquad (p = 1, 2) \tag{3.4.6*}$$

ҳәм $c(k)$ коэффициентлери еки теңликте де бирдей мәнислерге ийе. Бул коэффициентлер

$$c(k)=\frac{1}{2}\int_0^{\pi} y(k,\ m,\ \vartheta)\,u(\vartheta)\sin\vartheta\,d\vartheta \tag{3.4.7}$$

ямаса толығырақ

$$c(k)=\frac{1}{2}\int_0^{\pi}[y_1(k,\ m,\ \vartheta)\,u_1(\vartheta)+y_2(k,\ m,\ \vartheta)\,u_2(\vartheta)]\sin\vartheta\,d\vartheta \tag{3.4.7*}$$

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул жерде

$$u(\vartheta)=\cos\vartheta\cdot y(k_0,\ m,\ \vartheta) \tag{3.4.8}$$

деп аламыз.

(3.4.7*) түриндеги интегралды есаплаў ушын $y(k,\ m,\ \vartheta)$ функцияларын (3.4.25)- ҳәм (3.4.25*)-формулалар бойынша шар функциялары арқалы аңлатыўға ҳәм квантлық механикада шар функцияларына тийисли болған мағлыўматлар ишинде кеңнен белгили болған

$$xP_l^{*m}(x)=\frac{\sqrt{l^2-m^2}}{\sqrt{4l^2-1}}\,P_{l-1}^{*m}(x)+\frac{\sqrt{(l+1)^2-m^2}}{\sqrt{4(l+1)^2-1}}\,P_{l+1}^{*m}(x)$$

рекуррентли формуладан пайдаланыўға болады. Есаплаўлар тек үш $c(k)$ коэффициентлериниң нолге тең емес екенлигин, сонлықтан (3.4.6)-аңлатпаны қатарға жайыў тек үш ағзаға ийе болатуғынлығын, егер биз k_0 диң орнына k ны жазатуғын болсақ, онда қатардың

$$\begin{aligned}\cos\vartheta\cdot y(k,\ m,\ \vartheta)&=-\frac{2m+1}{4k^2-1}\,y(-k,\ m,\ \vartheta)+\\&+\frac{\sqrt{(k+m)(k-m-1)}}{|2k-1|}\,y(k-1,\ m,\ \vartheta)+\\&+\frac{\sqrt{(k-m)(k+m+1)}}{|2k+1|}\,y(k+1,\ m,\ \vartheta)\end{aligned} \tag{3.4.9}$$

түрине ийе болатуғынлығын көрсетеди.

Бул формуланың дурыс екенлигин $y(k,\ m,\ \vartheta)$ функцияларын әдеттеги шар функциялар арқалы аңлатыў жолы менен көрсетиўге болады.

Егер

$$u(\vartheta)=\sin\vartheta\,y(k_0,\ m-1,\ \vartheta) \tag{3.4.8*}$$

түриндеги белгилеўди алсақ, онда жоқарыдағыдай есаплаўлардың нәтийжесинде төмендеги теңлемени аламыз:

$$\sin\vartheta \cdot y(k,\ m-1,\ \vartheta) = 2\,\frac{\sqrt{k^2-m^2}}{4k^2-1}\, y(-k,\ m,\ \vartheta) - \\ - \frac{\sqrt{(k-m-1)(k-m)}}{2k-1}\, y(k-1,\ m,\ \vartheta) + \\ + \frac{\sqrt{(k+m+1)(k+m)}}{2k+1}\, y(k+1,\ m,\ \vartheta). \tag{3.4.10}$$

Бул формуланың дурыслығы шар нормировкаланған функцияларына тийисли көп қолланылатуғын

$$(1-x^2)^{1/2} P_l^{*m}(x) = -\frac{\sqrt{(l-m)(l-m-1)}}{\sqrt{4l^2-1}} P_{l-1}^{*m+1}(x) + \\ + \frac{\sqrt{l+m+1)(l+m+2)}}{\sqrt{4(l+1)^2-1}} P_{l+1}^{*m+1}(x)$$

рекуррентли формуланың жәрдеминде тексерилип көриледи [(3.4.10)-формуланың өзи соңғы формуланың улыўмаластырылған түри болып табылады].

(3.4.9)- ҳәм (3.4.10)-аңлатпалардың тек y_1 ҳәм y_2 функциялары ушын ғана емес, ал A ҳәм B функциялары ушын да дурыс болып табылады. Себеби олардың бири екиншисиниң k ҳәм m шамаларынан ғәрезсиз коэффициентлерге ийе сызықлы комбинациялары болып табылады.

Биз жоқарыда туйықлық теоремасына тийкарланып рекуррентлик қатнасларды келтирип шығарыў усылын баянладық. Бул жағдай әдеттеги шар функциялары, Легардың улыўмаласқан полиномлары ушын қолланылатуғын улыўмалық жағдай болып табылады.

3-5. Паулидиң толқын теңлемеси

Классикалық релятивистлик емес механикада $A_x,\ A_y,\ A_z$ векторлық ҳәм Ф скаляр потенциалға ийе электромагнит майданында турған заряды $-e$ ге, массасы m ге тең болған бөлекше ушын Лагранж функциясы

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - \frac{e}{c}(\dot{x}A_x + \dot{y}A_y + \dot{z}A_z) + e\Phi \tag{3.5.1}$$

түрине ийе болады. $x,\ y,\ z$ координаталары менен түйинлес улыўмаласқан

$$p_x = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{x}},\quad p_y = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{y}},\quad p_z = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{z}} \tag{3.5.2}$$

«моментлер» қозғалыс муғдарының қураўшылары болған

$$P_x = m\dot{x},\quad P_y = m\dot{y},\quad P_z = m\dot{z} \tag{3.5.3}$$

шамаларына сәйкес келмейди, ал

$$p_x = P_x - \frac{e}{c}A_x,\quad p_y = P_y - \frac{e}{c}A_y,\quad p_z = P_z - \frac{e}{c}A_z \tag{3.5.4}$$

қатнаслары арқалы байланысқан. Бөлекшениң энергиясы

$$E = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y + \dot{z}p_z - \mathscr{L} = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - e\Phi \tag{3.5.5}$$

шамасына тең. Энергияны улыўмаласқан моментлер арқалы аңлатып биз классикалық Гамильтон функциясын аламыз:

$$H=\frac{1}{2m}\left[\left(p_x+\frac{e}{c}A_x\right)^2+\left(p_y+\frac{e}{c}A_y\right)^2+\left(p_z+\frac{e}{c}A_z\right)^2\right]-e\Phi. \qquad (3.5.6)$$

Магнит майданы жоқ болғанда векторлық потенциалды нолге тең деп есаплаў мүмкин ҳәм алдыңғы аңлатпа

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)-e\Phi \qquad (3.5.7)$$

түрине ямаса

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+U(x,\ y,\ z) \qquad (3.5.8)$$

түрине енеди. Бул аңлатпада

$$U=-e\Phi \qquad (3.5.9)$$

шамасы бөлекшениң потенциал энергиясы болып табылады.

Биз Шредингер теориясында энергия операторының классикалық Гамильтон функциясынан $p_x,\ p_y,\ p_z$ улыўмаласқан моментлерин

$$p_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad p_y=-i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad p_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \qquad (3.5.10)$$

операторлары менен алмастырыў жолы менен алынатуғынлығын билемиз. Спин менен байланысқан жаңа еркинлик дәрежесин киргизиў

$$P=\sigma_x p_x+\sigma_y p_y+\sigma_z p_z \qquad (3.5.11)$$

операторын дүзиўге ҳәм оны энергия операторын дүзиў ушын пайдаланыўға мүмкиншилик береди.

P операторының 1-параграфта қарап өтилген

$$\mathcal{M}=\sigma_x m_x+\sigma_y m_y+\sigma_z m_z+\hbar \qquad (3.5.12)$$

операторы менен антикоммутацияға ушырайтуғынлығын көрсетиў мүмкин [1-параграфтағы (3.1.15)- формула]. Сонлықтан

$$\mathcal{M}P+P\mathcal{M}=0 \qquad (3.5.13)$$

теңлигине ийе боламыз.

Дәлили ушын 1-параграфтағы $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$ матрицаларының қәсийетлери ҳәм

$$\left.\begin{aligned} m_y p_z-p_z m_y&=p_y m_z-m_z p_y=i\hbar p_x,\\ m_z p_x-p_x m_z&=p_z m_x-m_x p_z=i\hbar p_y,\\ m_x p_y-p_y m_x&=p_x m_y-m_y p_x=i\hbar p_z. \end{aligned}\right\} \qquad (3.5.14)$$

қатнаслары қолланылады.

Биз бул жерде есаплаўлар жүргизбеймиз, бирақ есаплаўларды декарт координаталарында емес, ал сфералық координаталарда жүргизсек есаплаўлардың әдеўир әпиўайыласатуғынлығын аңғарамыз. Бундай есаплаўлар келеси параграфта әмелге асырылады.

Егер биз электрон тек материаллық бөлекшениң x, y, z координаталары кеңислигиндеги қозғалысына сәйкес келетуғын еркинлик дәрежелерине ғана ийе болатуғын болса, онда биз энергия операторы ушын Шредингер аңлатпасына қайтып келемиз. Электронның спин менен байланыслы болған еркинлик дәрежесин киргизиў классикалық механиканың шамаларынан квантлық механиканың шамаларына өтиўге жаңа мүмкиншиликлер ашып береди.

$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ матрицаларының қәсийетлерин және p_x, p_y, p_z операторларының коммутативлигин пайдаланып биз (3.5.8)-энергия операторын

$$H = \frac{1}{2m}(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z)^2 + U(x, y, z) \quad (3.5.15)$$

түринде жаза аламыз. Демек (3.5.11)-формуланың жәрдеминде анықланатуғын P операторын киргизиў бул жерде ҳеш нәрсени де өзгертпейди екен. Магнит майданы болғанда аўҳал басқаша болады. Бул жағдайда классикалық Гамильтон функциясы (3.5.6) түрине ийе болады ҳәм координаталар менен канореникалық түйинлес улыўмаласқан моментлер қозғалыс муғдарының қураўшылары менен сәйкес келмейди, ал олар менен (3.5.4)-қатнаслар менен байланысқан. Биз бул қатнасларды былайынша көширип жазамыз:

$$P_x = p_x + \frac{e}{c}A_x, \quad P_y = p_y + \frac{e}{c}A_y, \quad P_z = p_z + \frac{e}{c}A_z. \quad (3.5.16)$$

Егер биз бул шамаларды операторлар деп қарайтуғын болсақ, онда олар коммутативлик болмайды, ал

$$\left.\begin{aligned} \frac{i}{\hbar}(P_y P_z - P_z P_y) &= \frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right) = \frac{e}{c}\mathscr{H}_x, \\ \frac{i}{\hbar}(P_z P_x - P_x P_z) &= \frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right) = \frac{e}{c}\mathscr{H}_y, \\ \frac{i}{\hbar}(P_x P_y - P_y P_x) &= \frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) = \frac{e}{c}\mathscr{H}_z. \end{aligned}\right\} \quad (3.5.16)$$

орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады. Бул аңлатпада $\mathscr{H}_x, \mathscr{H}_y, \mathscr{H}_z$ лар арқалы магнит майданының қураўшылары белгиленген. Сонлықтан магнит майданы болғанда p_x, p_y, p_z операторларынан P_x, P_y, P_z операторларына өтиў бундай алмастырыўдың (3.5.8)- ямаса (3.5.15)-теңлемеде әмелге асырылғанлығына байланыслы ҳәр қандай нәтийжени береди. Егер p_x, p_y, p_z операторларынан P_x, P_y, P_z операторларына өтиў (3.5.8)-теңлемеде өтилсе, онда (3.5.6)-аңлатпаға қайтып келемиз. Оны H^0 арқалы белгилеймиз, сонлықтан

$$H^0 = \frac{1}{2m}\left[\left(p_x + \frac{e}{c}A_x\right)^2 + \left(p_y + \frac{e}{c}A_y\right)^2 + \left(p_z + \frac{e}{c}A_z\right)^2\right] - e\Phi. \quad (3.5.18)$$

Егер бул өтиўди (3.5.15)-теңлемеде әмелге асырсақ ҳәм $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ лар ушын 1-параграфтағы (3.5.6)-қантасты ҳәм усы параграфтағы қозғалыс муғдары операторлары ушын (3.5.17)-орын алмастырыў қатнасларынан пайдалансақ, онда биз

$$H^{*}=H^{0}+\mu^{0}(\sigma_{x}\mathscr{H}_{x}+\sigma_{y}\mathscr{H}_{y}+\sigma_{z}\mathscr{H}_{z}) \tag{3.5.19}$$

операторын аламыз. Биз бул жерде қысқалық ушын

$$\mu^{0}=\frac{\hbar e}{2mc} \tag{3.5.20}$$

аңлатпасынан пайдаландық. μ^0 турақлысын биз электронның магнит моменти деп қарай аламыз.

(19)-энергия операторы Шредингер теориясындағы сәйкес оператордың магнит майданы бар жағдай ушын (салыстырмалық теориясы ушын қосымшалар киргизилмеген) улыўмаластырылған түри болып табылады. биз оны Паули операторы деп,

$$H^{*}\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{3.5.21}$$

толқын теңлемесин Паули толқын теңлемеси деп атаймыз.

IV бөлим

Квантлық механиканың көп электронлық мәселеси ҳәм атомның қурылысы

4-1. Толқын функциясының симметриялық қәсийетлери

Биз жоқарыда бир электронның ҳалын тәрийиплейтуғын толқын функциясын қарадық. Стационар ҳаллар ушын толқын функциясы Шредингер теңлемесин қанаатландырыўы керек. n электроннан туратуғын системаның ҳалын анықлаў мәселесинде толқын функциясы электронлардың координаталарын алмастырыў менен спинлик өзгериўшилерге қарата базы бир симметрия шәртин (дурысырағы антисимметрия шәртин) қанаатландырыўы керек. Бул шәрт Паули шәрти деп аталады. Усының менен бир қатарда көплеген мәселелерде электронлар системасының толық спини (қозғалыс муғдарының меншикли моменти) берилген деп есаплаўға болады. Бундай жағдайда толқын функциясы және де бир қосымша шәртти қанаатландырыўы керек болады.

Бир электронның толқын функциясының үш кеңисликлик координата x, y, z ҳәм тек еки мәниске ийе болатуғын (мысалы σ = + 1 ҳәм σ = - 1) спинлик өзгериўшиге байланыслы екенлигин биз билемиз. Үш кеңисликлик координатаның жыйнағын r арқалы белгилеп электронның толқын функциясын

$$\psi(x,\ y,\ z,\ \sigma) = \psi(r,\ \sigma) \tag{4.1.1}$$

түринде жаза аламыз. n электроннан туратуғын системаның толқын функциясы бул электронлардың барлық координаталардан ҳәм спинлик өзгериўшилеринен ғәрезли болады. Биз мынаған ийе боламыз:

$$\psi = \psi(r_1,\ \sigma_1;\ r_2,\ \sigma_2;\ \ldots;\ r_n,\ \sigma_n). \tag{4.1.2}$$

Көпшилик жағдайда i-номерли электронға тийисли болған барлық өзгериўшилердиң жыйнағын x_i арқалы белгилеген қолайлы болады (яғный оның кеңисликлик координаталары менен спинлик өзгериўшилериниң жыйнағы). n электроннан туратуғын системаның толқын функциясын бундай жағдайда мына түрде жазамыз:

$$\psi = \psi(x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n). \tag{4.1.3}$$

Паули принципине муўапық толқын функциясы $x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n$ өзгериўшилерине қарата антисимметриялық болыўы керек. Яғный толқын функциясы усы өзгериўшилердиң қәлеген жубының орынларын алмастырғанда белгисин өзгертиўи керек. Мысалы

$$\psi(x_2,\ x_1,\ x_3,\ \ldots,\ x_n) = -\psi(x_1,\ x_2,\ x_3,\ \ldots,\ x_n). \tag{4.1.4}$$

Енди n электроннан туратуғын системаның базы бир (қосынды) спинге ийе болыўы талабын келтирип шығарыўға кирисемиз. Буның ушын спинниң тийкарғы қәсийетлерин еске түсиремиз.

Бир электрон жағдайында спинлик өзгериўшиге тәсир ететуғын қәлеген оператордың

$$\left.\begin{aligned} \sigma_x\psi(r,\ \sigma) &= \psi(r,\ -\sigma), \\ \sigma_y\psi(r,\ \sigma) &= -i\sigma\psi(r,\ -\sigma), \\ \sigma_z\psi(r,\ \sigma) &= \sigma\psi(r,\ \sigma). \end{aligned}\right\} \tag{4.1.5}$$

теңликлери менен анықланатуғын үш $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ операторларының сызықлы комбинациясы түринде көрсетилиўи мүмкин[1].

Егер ψ толқын функциясын еки қураўшыдан туратуғын толқын функциясы, солардың бири ψ(*r*, +1), ал екиншиси ψ(*r*, -1) ге тең деп есапласақ, онда $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ операторларының тәсири Паули матрицаларының тәсириндей болады:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4.1.6}$$

Ал

$$s_x = \frac{1}{2}\sigma_x, \quad s_y = \frac{1}{2}\sigma_y, \quad s_z = \frac{1}{2}\sigma_z \tag{4.1.7}$$

операторлары

$$\left.\begin{aligned} s_y s_z - s_z s_y &= i s_x, \\ s_z s_x - s_x s_z &= i s_y, \\ s_x s_y - s_y s_x &= i s_z, \end{aligned}\right\} \tag{4.1.8}$$

орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады. Бул қатнаслар (ħ бирликлеринде аңлатылған) қозғалыс муғдарының моментиниң қәсийетлерин тәрийиплейди. Сонлықтан оларды электронның меншикли қозғалыс муғдары моментиниң қураўшыларының операторлары деп қараўымызға болады. Көп электронларға ийе болған жағдайда (4.1.5)-аңлатпаға сәйкес *l*-электронның спинлик өзгериўшисине тәсир етиўши $\sigma_{lx}, \sigma_{ly}, \sigma_{lz}$ операторлары сыяқлы анықлаўға болады. Биз мынаған ийе боламыз

$$\left.\begin{aligned} \sigma_{lx}\psi &= \psi(r_1,\ \sigma_1;\ r_2,\ \sigma_2;\ \ldots;\ r_l,\ -\sigma_l;\ \ldots), \\ \sigma_{ly}\psi &= -i\sigma_l\psi(r_1,\ \sigma_1;\ r_2,\ \sigma_2;\ \ldots;\ r_l,\ -\sigma_l;\ \ldots), \\ \sigma_{lz}\psi &= \sigma_l\psi(r_1,\ \sigma_1;\ r_2,\ \sigma_2;\ \ldots;\ r_l,\ \sigma_l;\ \ldots). \end{aligned}\right\} \tag{4.1.9}$$

ħ бирликлеринде жазылған электронлар системасының қозғалыс муғдарының спинлик моментиниң қураўшылары ушын жазылған операторлар (4.1.7)-аңлатпадағыдай түрде анықланыўы мумкин. Атап айтқанда

$$\left.\begin{aligned} s_x &= \frac{1}{2}(\sigma_{1x} + \sigma_{2x} + \ldots + \sigma_{nx}), \\ s_y &= \frac{1}{2}(\sigma_{1y} + \sigma_{2y} + \ldots + \sigma_{ny}), \\ s_z &= \frac{1}{2}(\sigma_{1z} + \sigma_{2z} + \ldots + \sigma_{nz}). \end{aligned}\right\} \tag{4.1.10}$$

[1] Биз бул параграфта ҳәм буннан кейин операторлардың аңлатпаларының үстине «қалпақ» белгисин қоймай жазамыз. Операторлар белгисиниң устине «қалпақ» қойыў зәрүрлиги пайда болғанда биз ескертемиз.

Бул операторлар (4.1.8)-орын алмастырыў қатнасларын қанаатландырады. (4.1.8)-орын алмастырыў қатнасларынан электронлардың қозғалыс муғдарының моменти ушын жазылған

$$s^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 \tag{4.1.11}$$

операторы s_x, s_y, s_z операторларының ҳәр бири менен коммутацияланатуғынлығын ҳәм оның меншикли мәнислериниң $s(s + 1)$ шамасына тең екенлигин, ал s шамасының пүтин терис емес санның жартысы екенлигин келтирип шығарыўға болады. Егер электронлардың саны n жуп болса s тиң мәниси пүтин оң санға ямаса нолге тең болады. Егер электронлардың саны тақ болса, онда s ярым пүтин санға (тақ санның ярымына) тең. Еки жағдайда да $\frac{n}{2} - s = k$ шамасы терис емес пүтин санға тең болады. Бул k санын компенсацияланбаған спинге ийе электронлар жубының саны деп түсиниўге болады.

s шамасы берилген жағдайда s_x, s_y, s_z операторларының ҳәр қайсысының меншикли мәнислери

$$-s, \ -s + 1, \ \ldots, \ s - 1, \ s \tag{4.1.12}$$

санларына тең болады (бул санлардың саны $2s + 1$ дана).

s^2 ушын жазылған (11)-оператордың

$$s^2 = n - \frac{n^2}{4} + \sum_{i<j} P_{ij} \tag{4.1.13}$$

түринде көрсетилиўи мүмкин. Бул аңлатпадағы P_{ij} символы σ_i, σ_j спинлик өзгериўшилериниң орынларын алмастырыўын аңлатады.

n дана электроннан туратуғын системаның анық қосынды спинге ийе болыўы талабын енди

$$s^2\psi = s(s + 1)\psi \tag{4.1.14}$$

теңлемеси түринде жазылыўы мүмкин.

Бул теңлемени қанаатландыратуғын функцияны табамыз. $k = \frac{n}{2} - s$ түринде аламыз ҳәм $\alpha_1, \ \alpha_2, \ \ldots, \ \alpha_k$ шамалары 1, 2, 3, ..., n қатарынан алынған k дана ҳәр қыйлы санлардың жыйнағы болсын. Буннан кейин мейли

$$F_{\alpha_1\alpha_2 \ldots \alpha_k} = F\left(\sigma_{\alpha_1}\sigma_{\alpha_2} \ldots \sigma_{\alpha_k} \,\middle|\, \sigma_{\alpha_{k+1}}\sigma_{\alpha_{k+2}} \ldots \sigma_{\alpha_n}\right) \tag{4.1.15}$$

функциясы вертикал белгиге шекемги $\sigma_{\alpha_1}, \ \sigma_{\alpha_2}, \ \ldots, \ \sigma_{\alpha_k}$ аргументлерине қарата да симметриялы ҳәм вертикал белгиден кейинги $\sigma_{\alpha_{k+1}}, \ \sigma_{\alpha_{k+2}}, \ \ldots, \ \sigma_{\alpha_n}$ спинлик өзгериўшилерге қарата да симметриялы функция болсын. Барлық электронлардың координаталарынан ғәрезли болған $\binom{n}{k}$ дана

$$\psi_{\alpha_1\alpha_2 \ldots \alpha_k} = \psi(r_1, \ r_2, \ \ldots, \ r_n) \tag{4.1.16}$$

функцияларын киргиземиз (бул функцияларда спинлик өзгериўшилер жоқ). (4.1.16)-функциялар да (4.1.15)-функциялар сыяқлы $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$, шамаларының белгилерине қарата симметриялы. Енди

$$\psi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2; \ldots; r_n, \sigma_n) = \\ = \sum_{(\alpha_1 \ldots \alpha_k)} \psi_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_k}(r_1, r_2, \ldots, r_n) F_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_k}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n) \tag{4.1.17}$$

суммасын дүземиз. (4.1.13)-формуланың тийкарында (4.1.17)-функцияның s тиң $\frac{n}{2} - k$ шамасына тең мәнислеринде егер (4.1.16)-координаталық функциялар

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_k} = 0 \tag{4.1.18}$$

аңлатпасы арқалы байланысқан болса (4.1.14)-теңлемени қанаатландыратуғынлығы көрсетиўге болады. (4.1.18)-формуладағы α шамалары 1, 2, 3, …, n мәнислерин қабыл етеди ($\alpha_2, \ldots, \alpha_k$ шамаларынан басқасын) (4.1.18)-қатнаслардың (аңлатпалардың) саны $\binom{n}{k-1}$ шамасына тең.

s^2 операторының меншикли меншикли функциясы электронлардың спини берилген системасының физикалық мүмкин болған ҳалын анықлаўы ушын Паули принципин қанаатландырыўы зәрүр (яғный x_i өзгериўшилерине қарата антисимметриялы болыўы керек). Бундай жағдайға

$$\psi_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_k}(r_1, r_2, \ldots, r_n) = \\ = \varepsilon(P)\,\psi(r_{\alpha_1}, r_{\alpha_2}, \ldots, r_{\alpha_k} | r_{\alpha_{k+1}}, r_{\alpha_{k+2}}, \ldots, r_{\alpha_n}) \tag{4.1.19}$$

функциясы бойынша (4.1.16)-функциялардың барлығын электронлардың координаталарының тек бир

$$\psi = \psi(r_1, r_2, \ldots, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, \ldots, r_n) \tag{4.1.20}$$

функциясы менен аңлатыў арқалы жетиўге болады. (4.1.19)-формулада $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ арқалы ықтыярлы тәртипте алынған 1, 2, …, n санлары, ал P арқалы

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \ldots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \ldots & \alpha_n \end{pmatrix} \tag{4.1.21}$$

орын алмастырыўы белгиленген. (4.1.21)-орын алмастырыўы 1 ди α_1 ге, 2 ни α_2 ге ҳәм сол сыяқлы орны алмастырыўларды орынлайды. ε(P) арқалы +1 (егер орны алмастырыў жуп болса) ҳәм -1 (егер орын алмастырыў тақ болса) белгиленген.

(4.1.20)-функция симметрияның төмендегидей шәртлерин қанаатландырыўы керек:

1) биринши k аргументлерине қарата [(4.1.20)-аңлатпада сызықша белгисиниң шеп тәрепинде турған] ψ функциясы антисимметриялы, мысалы

$$\psi(r_2, r_1, r_3, \ldots, r_k | r_{k+1}, \ldots, r_n) = \\ = -\psi(r_1, r_2, r_3, \ldots, r_k | r_{k+1}, \ldots, r_n), \tag{4.1.22}$$

2) кейинги $n - k$ аргументлерге қарата антисимметриялы (сызықшаның оң тәрепинде жайласқан), мысалы

$$\psi(r_1, r_2, \ldots, r_k | r_{k+2}, r_{k+1}, r_{k+3}, \ldots, r_n) = \\ = -\psi(r_1, r_2, \ldots, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, r_{k+3}, \ldots, r_n), \tag{4.1.23}$$

3) ψ функциясы цикллық симметрия қәсийетине ийе, бул қәсийет төмендеги теңликте көринеди

$$\psi(r_1, \ldots, r_{k-1}, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, \ldots, r_n) = \\ = \psi(r_1, \ldots, r_{k-1}, r_{k+1} | r_k, r_{k+2}, \ldots, r_n) + \ldots \\ \ldots + \psi(r_1, \ldots, r_{k-1}, r_{k+l} | r_{k+1}, \ldots, r_{k+l-1}, r_k, r_{k+l+1}, \ldots, r_n) + \ldots \\ \ldots + \psi(r_1, \ldots, r_{k-1}, r_n | r_{k+1}, \ldots, r_{n-1}, r_k). \tag{4.1.24}$$

Бул теңликтиң оң тәрепи $n - k$ ағзадан турады. r_k аргументи болса сызықтың оң тәрепиндеги $n - k$ ағзаның ҳәр бириниң орнына избе-из қойылып шығылады.

Цикллық симметрия қәсийети (4.1.18)-қатнастың нәтийжеси болып табылады. $\binom{n}{k-1}$ дана қатнастың ҳәр бири (4.1.24)-түрдеги теңликтиң биреўине алып келеди. Бул жағдайды аңсат түрде тексерип көриў мүмкин [буның ушын (4.1.22)- ҳәм (4.1.23)- аңлатпалардың антисимметрия қәсийетин есапқа алыў керек. Егер P арқалы $(r_k, r_{k+1}, \ldots, r_n)$ аргументлериниң циклլық орын алмастырыўларын белгилесек [яғный $(r_k, r_{k+1}, \ldots, r_n)$ циклдың ҳәр бир ағзасы келеси ағза менен, ал ең ақырғы ағза биринши ағза менен алмастырылады], онда (4.1.24)-теңлик $n - k$ айырмасы жуп болғанда

$$(1 + P + P^2 + \ldots + P^{n-k})\psi = 0, \tag{4.1.25}$$

ал $n - k$ айырмасы тақ болғанда

$$(1 - P + P^2 - \ldots - P^{n-k})\psi = 0 \tag{4.1.26}$$

түринде жазылады.

Спини нолге тең еки электроннан туратуғын дара жағдайда $(n = 2,\ k = 1)$ ҳал координатаға ғәрезли болған симметриялық функцияның жәрдеминде тәрийипленеди. Ал спини $s = 1$ болған ҳал $(n = 2,\ k = 0)$ антисимметриялық функция менен тәрийипленеди.

Жоқарыда келтирилген симметрияның үш талабын қанаатландыратуғын n дана $r_1, r_2, \ldots, r_n$ аргументлериниң функциясына мысал ретинде еки анықлаўшының көбеймесин көрсетиўге болады:

$$\psi = \Psi^{(1)}\Psi^{(2)}. \tag{4.1.27}$$

Бул аңлатпада

$$\left.\begin{aligned}\Psi^{(1)} &= \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \cdots & \psi_1(r_k) \\ \cdot & \cdots & \cdot \\ \psi_k(r_1) & \cdots & \psi_k(r_k) \end{vmatrix}, \\ \Psi^{(2)} &= \begin{vmatrix} \psi_1(r_{k+1}) & \cdots & \psi_1(r_n) \\ \psi_{n-k}(r_{k+1}) & \cdots & \psi_{n-k}(r_n) \end{vmatrix}. \end{aligned}\right\} \qquad (4.1.28)$$

Бул анықлаўшылар бир электронның координатасынан ғәрезли болған

$$\psi_1(r),\ \psi_2(r),\ \ldots,\ \psi_{n-k}(r) \qquad (4.1.29)$$

функцияларынан турады. Усының менен бирге үлкен анықлаўшы барлық $n-k$ дана функцияға, ал кишкенеси солардың ишиндеги дәслепки k дана функциясына ийе.

Биз өткерген таллаўларымыз арқалы тек координаталардан емес, ал спинлик өзгериўшилерден де ғәрезли болған (4.1.2)-толқын функциясын тек координаталардан ғәрезли болған Шредингер толқын функциясы түринде көрсеттик. Усының менен бирге Паули принципи де, қозғалыс муғдарының спинлик моменти ушын (4.1.14) теңлеме де қатаң түрде есапқа алынды.

Шредингер толқын функциясы спинлик өзгериўшилерден ғәрезли болмаса да қосынды спинниң мәниси оның қәсийетлеринде сәўлеленеди. Себеби сол қәсийетлерден оның симметриясы ғәрезли.

Бирден қарағанда парадокс болып көринетуғын факт усы жағдайға байланыслы түсиндириледи: Шредингер теңлемеси де, толқын функциясы да спинлик өзгериўшилерге ийе емес. Ал усы жағдайға қарамастан энергияның қәддилери қосынды спинниң мәнисинен ғәрезли. Парадокс былайынша аңсат түрде түсиндириледи: берилген спинге ийе энергияның қәддине сәйкес толқын функциясына қосынды спинниң ҳәр қыйлы мәнислерине сәйкес келиўши симметрия шәртлери қойылады.

4-2. Энергия операторы ҳәм оның симметриясы

Көп электронлы системаның стационар ҳалын тәрийиплейтуғын толқын функциясы энергия операторының меншикли функциясы болыўы керек. Энергия операторын классикалық механикаға сәйкес мына түрде жазамыз

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{k=1}^{n}\Delta_k + \sum_{k=1}^{n} U(x_k, y_k, z_k) + \sum_{k>l=1}^{n}\frac{e^2}{\sqrt{(x_k-x_l)^2+(y_k-y_l)^2+(z_k-z_l)^2}}. \qquad (4.2.1)$$

Бул аңлатпада k-санлы электронның координаталарына тәсир етиўши Δ_k арқалы Лаплас операторы, ал $U(x, y, z)$ арқалы электронға қатнасы бойынша сыртқы болған майданның потенциал энергиясы (мысалы атом ушын ядроның майданы ямаса молекула ушын бир неше ядроның майданы). Қос сумма электронлардың өз-ара тәсир етисиўине сәйкес келиўши потенциаллық энергия. (4.2.1)-энергия операторы магнит майданы болмаған жағдайға сәйкес келеди. Егер электронлар системасы сырттан түсирилген магнит майданында жайласқан болғанда энергия операторы спиннен ғәрезли болған қосымша ағзаларға ийе болған болар еди.

Системаның энергиясының қәддилери ҳәм стационар ҳаллар

$$H\psi = E\psi \qquad (4.2.2)$$

теңлемесиниң жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпадағы H шамасы (4.2.1)-теңлемедеги энергия операторы болып табылады. Биз жоқарыда H операторы спинлик өзгериўшилерге ийе болмаса да энергия қәддилери E ниң s квантлық санға (қозғалыс муғдарының спинлик моментине) байланыслы екенлигин көрсеттик. Бул жағдайдың Шредингер толқын функциясы ψ диң симметриялық қәсийетиниң s тиң мәнисинен ғәрезли екенлигинде екенлигин биз билемиз.

Атомда H операторы сфералық симметрияға ийе, яғный оның түри координаталар көшерин кеңисликтеги қәлеген бурыўларда өзгериссиз қалады. Бундай жағдайда Шредингердиң (координаталық) толқын функциясының орбиталық қозғалыс муғдары моментиниң квадраты операторының (l квантлық саны) ҳәм оның бир координата көшерине түсирилген проекциясы операторы (m квантлық саны) ушын меншикли функциясы болыўы керек талабына бағындырыўымыз керек болады. Егер бул функция s тиң белгили бир мәниси ушын симметрия қәсийетине де ийе болатуғын болса, онда оның жәрдеминде 1-параграфтың (4.2.2)-түрдеги спинге ийе толқын функциясын дүзиўге болады. Бундай функция Паули принципин қанаатландырады ҳәм төмендегидей бес оператордың меншикли функциясы болады:

1) энергия операторының,

2) орбиталық қозғалыс муғдары моментиниң квадраты операторының,

3) спинлик қозғалыс муғдарының квадраты операторының,

4) қозғалыс муғдарының толық моментиниң (орбиталық плюс спинлик) квадраты операторының,

5) қозғалыс муғдарының толық моментиниң көшерлердиң бирине түсирилген қураўшысы операторының.

Жоқарыда айтылған жағдай бойынша дүзиўлер векторлық модель бойынша алып барылады. Бул модель ҳаққында биз гәп етпеймиз.

Еки атомлы молекула жағдайында энергия операторы сфералық симметрияға емес, ал аксиаллық симметрияға ийе болады (яғный координаталар системасын еки ядроны тутастырыўшы көшердиң дөгерегинде бурғанда өзгермейди). Аксиаллық симметрия да квантлың санларды киргизиў ҳәм толқын функциясын (толық емес) анықлаў ушын қолланылады.

Сфералық ямаса аксиаллық симметрияны қолланыў квантлық санларды киргизиўге ҳәм усындай жоллар менен энергияның қәддилерин классификациялаўға мүмкиншилик береди. Бирақ симметрия көз-караслары қәддилердиң өзлерин ҳәм стационар ҳалларды анықлаў ушын жеткиликли емес. (4.2.2)-теңлемени дәл шешиў (бир электрон болған жағдай буған кирмейди) ушын оғада қыйын математикалық қыйыншылықларды бастан кешириўди талап етеди. Сонлықтан жуўық усылларды раўажландырыў үлкен әҳмийетке ийе болады. Бул усыллардың ең әҳмийетлиси келисилген майдан усылы болып табылады. Енди усы усылды баянлаўға кирисемиз.

4-3. **Келисилген майдан усылы**

Энергия операторының меншикли функциялары ушын теңлемени вариациялық басламадан алыў мүмкин

$$\delta W = 0. \qquad (4.3.1)$$

Бул теңлемедеги W

$$W = \frac{1}{N} \int \bar{\psi} H \psi \, dV, \quad N = \int \bar{\psi} \psi \, dV \tag{4.3.2}$$

аңлатпаларының жәрдеминде анықланады. Бул формуладағы ψ 4-1 параграфта киргизилген спинлик өзгериўшилерден ғәрезсиз координаталық функция болып табылады. Конфигурациялық кеңисликтиң көлем элементи dV барлық электронлардың координаталарының дифференциалларының көбеймесине тең болады

$$dV = dx_1 \, dy_1 \, dz_1 \, \ldots \, dx_n \, dy_n \, dz_n. \tag{4.3.3}$$

Нормировкалаўшы интеграл болған *N* ди биз берилген турақлы деп есаплай аламыз.

Бизиң тастыйықлаўымыздың дурыслығын дәлиллеў ушын (4.3.2)-аңлатпаға кириўши интеграллардың вариацияларын дүземиз. Н өзине өзи түйинлес оператор болғанлықтан биз

$$\delta \int \bar{\psi} H \psi \, dV = \int \delta \bar{\psi} H \psi \, dV + \text{түйинлес.} \tag{4.3.4}$$

Усының менен бир қатарда

$$\delta \int \bar{\psi} \psi \, dV = \int \delta \bar{\psi} \psi \, dV + \text{түйинлес.} \tag{4.3.5}$$

Екинши теңликти *E* ҳақыйқый көбейтиўшисине көбейтип ҳәм бириншиден оны алып, буннан кейин алынған нәтийжени нолге теңеп

$$\int \delta \bar{\psi} (H\psi - E\psi) \, dV + \text{түйинлес} = 0. \tag{4.3.6}$$

Бул теңлик интеграл астындағы δψ көбейтиўшиси нолге тең болған жағдайда ψ диң ҳақыйқый ҳәм жормал бөлимлерин ықтыярлы түрдеги вариацияларда ғана орынланады. Буннан

$$H\psi = E\psi \tag{4.3.7}$$

аңлатпасы келип шығады. Бул теңлеме энергия операторының меншикли функциялары ушын жазылған теңлеме болып табылады. Солай етип бизиң тастыйықлаўымыздың дурыс екенлиги дәлилленди.

W шамасының физикалық мәниси ψ ҳалындағы системаның энергиясының математикалық күтиўинен ибарат. *W* дың экстремаллық мәниси энергияның қәдди *E* ге тең. s квантлық санның берилген мәнисине сәйкес келиўши ең төменде турған қәддини табыў ушын интегралды вариациялағанда бизге керекли болған симметрияға ийе ҳәм базы бир улыўмалық шәртлерди қанаатландыратуғын (туўындыларға ийе, интеграллардың жыйнақлығы) барлық функцияларын салыстырыў ушын алыўымыз керек. Буннан кейинги қәддилерди алыў ушын жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда толқын функциясының төмениректе жайласқан қәддилерге сәйкес келиўши барлық толқын функцияларына ортогоналлық болыўын талап етиўимиз керек.

Мәселени шешиўди әпиўайыластырыў ушын биз толқын функциясына қосымша шәртлерди қойыўымыз керек. Мысалы 4-1 параграфтағы (4.1.27)- ҳәм (4.1.28)-

аңлатпаларға сәйкес толқын функциясы бир электронлық функциялардан қуралған еки анықлаўшының көбеймесинен турыўы талап етиледи. Бундай жағдайда eң төмендеги қәддиниң орнына энергияның бир қанша жоқары мәнисин аламыз. Бирақ энергияның бул мәниси eң төменги қәддиге сәйкес келиўши энергияның мәнисинен азмаз ғана айырмаға ийе болады. Тап усындай жоллар менен келеси қәддилер ушын оған жақын мәнислер алынады.

W ға 4-2 параграфтағы (4.2.28)-анықлаўшылардың көбеймесин қойыўдың нәтийжесин есаплаймыз. Бул жағдайда да $\psi_p(r)$ функцияларын бир бири менен ортогонал деп есаплаймыз:

$$\int \bar{\psi}_p(r)\, \psi_q(r)\, d\tau = \delta_{pq}, \qquad d\tau = dx\, dy\, dz. \tag{4.3.8}$$

Бул жағдайдың улыўмалыққа тәсир етпейтуғынлығы айқын. Бунының ушын 4-2 параграфтағы (4.2.1)-энергия операторын

$$H(r_1,\ r_2,\ \ldots,\ r_n) = \sum_{p=1}^{n} H(r_p) + \sum_{p>q=1}^{n} \frac{e^2}{|r_p - r_q|} \tag{4.3.9}$$

түринде жазамыз. Бул аңлатпада

$$H(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(x,\ y,\ z). \tag{4.3.10}$$

Бундайжағдайда биз мына аңлатпаны аламыз:

$$\begin{aligned} W = \sum_{p=1}^{k} \int \bar{\psi}_p(r)\, H(r)\, \psi_p(r)\, d\tau + \sum_{p=1}^{n-k} \int \bar{\psi}_p(r)\, H(r)\, \psi_p(r)\, d\tau + \\ + \frac{e^2}{2} \iint \frac{\rho^{(1)}(r, r)\, \rho^{(1)}(r', r') - |\rho^{(1)}(r, r')|^2}{|r - r'|}\, d\tau\, d\tau' + \\ + \frac{e^2}{2} \iint \frac{\rho^{(2)}(r, r)\, \rho^{(2)}(r', r') - |\rho^{(2)}(r, r')|^2}{|r - r'|}\, d\tau\, d\tau' + \\ + e^2 \iint \frac{\rho^{(1)}(r, r)\, \rho^{(2)}(r', r')}{|r - r'|}\, d\tau\, d\tau'. \end{aligned} \tag{4.3.11}$$

Бул аңлатпада биз $\rho^{(1)}$ ҳәм $\rho^{(2)}$ арқалы

$$\rho^{(1)}(r,\ r') = \sum_{p=1}^{k} \bar{\psi}_p(r)\, \psi_p(r'), \tag{4.3.12}$$

$$\rho^{(2)}(r,\ r') = \sum_{p=1}^{n-k} \bar{\psi}_p(r)\, \psi_p(r') \tag{4.3.13}$$

аңлатпаларды белгиледик. Алынған формулалар көргизбели түрде түсиндириледи. Биринши гезекте системаның толық толқын функциясын $\psi_p(r)$ арқалы белгилеў системаның ҳәр бир электроны ушын өзиниң толқын функциясы жазыў мүмкин деген болжаўға сәйкес келеди (биз шәртли түрде «өзиниң орбитасын» деп айтыўымыз мүмкин). Бундай жағдайда электронлар еки топарға бөлинеди: бириншисине $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_k$ «орбиталарындағы» электронлар, ал екинши топарға $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{n-k}$ «орбиталарында жайласқан» электронлар киреди. Еки топар бир биринен спинлериниң қарама-қарсы екенлиги менен айрылады. $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_k$ орбиталарында ҳәр қыйлы спинге ийе болған еки электроннан жайласады. Ал басқа $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{n-k}$ орбиталарында болса бирдей спинге ийе бир электроннан жайласады. Биринши k орбиталардағы спинлер бир бирин жоқ қылады. Ал қалған $n-2k$ орбиталардағы электронлардың спинлери бир бирине қосылады. Ҳәр бир электронның спининиң абсолют мәниси ½ ге тең болғанлықтан системаның толық спини бизиң күткенимиздей $\frac{n}{2}-k=s$ шамасына тең болып шығады.

$$e\rho^{(1)}(r,\ r)=e\sum_{p=1}^{k}|\psi_p(r)|^2 \tag{4.3.14}$$

шамасына тең электронның заряды e ге көбейтилген $\rho^{(1)}(r, r)$ шамасын биринши топардағы электронлардың зарядының кеңисликлик тығызлығы деп түсиниўимиз керек. $e\rho^{(2)}(r,r)$ шамасы да тап сондай етип түсиндириледи. Ҳәр қыйлы r, r' аргументлерине ийе (4.3.12)- ҳәм (4.3.13)-аңлатпаларды классикалық көз-қарасларда турып түсиндириўге болмайды. Оларға шәртли түрде «аралас тығызлық» деп атама бериў мүмкин.

Электронлар системасының энергиясы ушын (4.3.11)-аңлатпаға мәни беремиз. Биринши сумма ядролар майданындағы биринши топарға кириўши электронлардың потенциал ҳәм кинетикалық энергиялары болып табылады. Ал екинши сумма екинши топарға кириўши потенциал ҳәм кинетикалық энергиялар болып табылады. Қос интегралдағы (двойной интегралдағы) бирдей аргументлерге ийе $\rho^{(1)}$ ағзалар биринши топардағы электронлардың электростатикалық энергиясын береди. Ал аралас тығызлыққа ийе ағзаның классикалық мәниси жоқ ҳәм бул ағзаның энергия ушын жазылған аңлатпаға қатнасыўы өзине тән квантлық эффект болып табылады (оны квантлық алмасыў энергиясы деп атайды). Екинши қос интеграл екинши топардағы электронлар ушын тап сондай мәниске ийе. Ең ақырғы қос интеграл еки топар электронлар арасындағы электростатикалық тәсир етисиў энергиясын көрсетеди.

Бизиң формулаларымызға берилген мәни қатаң түрде берилген болмаса да өзиниң көргизбелилиги менен айрылады. Сонлықтан олардың физикалық мәнисин түсиниў ушын пайдалы. (4.3.11)-аңлатпаға қатаң түрде мәни бериў де вариацияланатуғын интегралға белгили симметрияға ийе толқын функциясын қойыўға алып келинеди.

Биз излеп атырған $\psi_p(r)$ функциялары ушын теңлемелер системасы (4.3.8)-қосымша шәртлер тийкарында (4.3.11)-аңлатпаны вариациялаў жолы менен алынады. Бул теңлемелер системасы

$$2[H(r)+V(r)]\psi_p(r)-e^2\int\frac{[\rho^{(1)}(r',r)+\rho^{(2)}(r',r)]}{|r-r'|}\psi_p(r')\,d\tau'= \\ =\sum_{q=1}^{n-k}\lambda_{qp}\psi_q(r)\qquad(p=1,\ 2,\ \ldots,\ k), \tag{4.3.15}$$

$$[H(r)+V(r)]\psi_p(r)-e^2\int\frac{\rho^{(2)}(r',r)}{|r-r'|}\psi_p(r')\,d\tau'= \\ =\sum_{q=1}^{n-k}\lambda_{qp}\psi_q(r)\qquad(p=k+1,\ \ldots,\ n-k) \tag{4.3.16}$$

түрине ийе. Бул формулаларда $V(r)$ шамасы

$$V(r)=e^2\int\frac{\rho^{(1)}(r',r')+\rho^{(2)}(r',r')}{|r-r'|}\,d\tau' \qquad (4.3.17)$$

мәнисине ийе ҳәм оған барлық электронлардың потенциалының e ге көбеймеси мәнисин бериў мүмкин. λ_{qp} шамалары (4.3.8)-ортогоналлық шәртлерине сәйкес келиўши лагранжлық көбейтиўшилер болып табылады. Бул көбейтиўшилер δW вариацияларын қурастырғанда есапқа алыныўы керек. λ_{qp} матрицаларының диагоналлық емес элементлери бир индекстиң мәниси k + 1 ден үлкен болса, ал екиншисиниң мәниси k ға тең ямаса оннан киши болғанда ғана нолге тең болмайды деп есаплаўға болады.

(4.3.16)-теңлемениң $\psi_p(r)$ ушын өзиниң коэффициентлеринде бундай функцияға ийе емес екенлигин аңғарамыз. Сонлықтан $\psi_p(r)$ функциясынан басқа барлық функцияларды белгили деп есапласақ, онда $\psi_p(r)$ ушын жазылған теңлеме сызықлы болады.

Теңлемениң бул қәсийетин былайынша келтирип шығарыўға болады.

$$\rho_p^{(2)}(r,r')=\sum_{q=1}^{n-k}(1-\delta_{pq})\,\bar{\psi}_q(r)\,\psi_q(r') \qquad (4.3.18)$$

деп есаплайық ҳәм $V_p(r)$ арқалы (4.3.12)- ҳәм (4.3.13)-аңлатпалардың жәрдеминде емес, ал (4.3.12)- ҳәм (4.3.18)-суммалардың жәрдеминде есапланған (4.3.17)-аңлатпаға уқсас аңлатпаны белгилейик Бундай жағдайда егер V ны V_p ға, $\rho^{(2)}$ ни $\rho_p^{(2)}$ ға алмастырсақ (4.3.16)-теңлеме өзиниң түрин сақлайды.

Енди (4.3.15)-теңлемеге келемиз. Оны ҳәр бир орбитада еки электроннан бар, яғный s = 0 болған жағдай ушын жазамыз. Бундай жағдайда n жуп сан болады, $k=\frac{n}{2}$ ҳәм(4.3.12)- ҳәм (4.3.13)-суммалары ρ дағы жоқарғы индексти алып таслайтуғындай болып бир бири менен сәйкес келеди. Усының менен бир қатарда λ_{qp} матрицасын диагоналлық матрица деп қараўға болады

$$\lambda_{qp}=2E_p\delta_{qp} \qquad (4.3.19)$$

түринде ала аламыз. Нәтийжеде

$$[H(r)+V(r)]\,\psi_p(r)-e^2\int\frac{\rho(r',r)}{|r-r'|}\,\psi_p(r')\,d\tau'=E_p\psi_p(r) \qquad (4.3.20)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада

$$V(r)=2e^2\int\frac{\rho(r',r)}{|r-r'|}\,d\tau \qquad (4.3.21)$$

ҳәм

$$\rho(r',r)=\sum_{q=1}^{\frac{n}{2}}\bar{\psi}_q(r')\,\psi_q(r). \qquad (4.3.22)$$

Егер енди $V_p(r)$ ушын жаңа анықлама

$$V_p(r) = 2e^2 \int \frac{\rho(r', r')}{|r - r'|} d\tau' - e^2 \int \frac{|\psi_p(r')|^2}{|r - r'|} d\tau' \qquad (4.3.22)$$

киргизетуғын болсақ ҳәм (4.3.18)-аңлатпа сыяқлы белгилесек

$$\rho_p(r', r) = \sum_{q=1}^{n-k} (1 - \delta_{pq}) \bar{\psi}_q(r') \psi_q(r),$$

онда (4.3.20)-теңлеме былайынша жазылады:

$$[H(r) + V_p(r)] \psi_p(r) - e^2 \int \frac{\rho_p(r', r)}{|r - r'|} \psi_p(r') d\tau' = E_p \psi_p(r). \qquad (4.3.23)$$

Бул теңлемеде интеграллылық ағзаны алып тасласақ, онда оны потенциал энергиясы

$$\Phi = U(r) + V_p(r) \qquad (4.3.24)$$

шамасына тең майдандағы электрон ушын Шредингер теңлемеси деп қараўға болады. Бул аңлатпада $U(r)$ арқалы (4.3.10)-аңлатпаға кириўши сыртқы майданның потенциал энергиясы, ал $V_p(r)$ арқалы белгиленген басқа барлық (берилген электроннан басқа) электронлар пайда еткен майданның потенциал энергиясы белгиленген. Ҳақыйқатында да (4.3.22)-формула бойынша есапланған $V_p(r)$ дың шамасы $\rho - |\psi_p|^2$ тығызлыгына сәйкес келиўши потенциалға пропорционал. (4.3.20)-теңлемедеги интеграллық ағзаға классикалық мағана болады. Ол квантлық алмасыў энергиясына дүзетиў атамасын алды.

Интеграллық ағзаға ийе емес (4.3.20)-теңлемелер (дурысырағы дәллиги бир қанша киши теңлемелер) биринши рет англиялы математик Хартри (Hartree) тәрепинен усынылды. Бирақ ол теңлемеге қанаатландырарлық тийкарлама бере алмады. Себеби ол теңлемени келтирип шығарғанда вариациялық басламалардан пайдаланбады ҳәм электронлар системасының толқын функциясын қарап шықпай, тек ғана ҳәзир ғана айтылып өтилген көргизбели көз-карасларға сүйенди. (4.3.20)-теңлемелер Хартри тәрепинен өзи өзи менен келистирилген майдан теңлемеси деп аталды (толқын функциялары ушын теңлемелерге кириўши потенцил V ның өзи толқын функциялар арқалы аңлатылады деген мәнисте).

Берилген спин ушын толқын функциясының симметрия қәсийетлерин есапқа алыўшы интеграллық ағзаларға ийе толық теңлемелерди бизлер вариациялық принциптен келтирип шығардық. Усының менен бирге Хартри теңлемеси де тийкарланды. Бул теңлемелер әдебиятта квантлық алмасыўға ийе өзи өзи менен келистирилген ямаса келисилген майдан атамасын алды.

Квантлық алмасыўға ийе келисилген майдан теңлемелери ушын басқа да формулировка орынлы болады. Бул формулировканы Дирак берди ҳәм онда спинлик өзгериўшилер әўел бастан жоқ етилмейди, ал олар бир электронлық толқын функцияларына киреди. 1-параграфтағы электронлар системасының толқын функциясы

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \dots & \psi_1(x_n) \\ \cdot & \cdot\ \cdot\ \cdot & \cdot \\ \psi_n(x_1) & \dots & \psi_n(x_n) \end{vmatrix} \qquad (4.3.24)$$

түриндеги бир электронлық функцияларға ийе бир анықлаўшы арқалы жуўық түрде аңлатылады. Бул бир электронлық функциялар ушын биз алған теңлемелерге сәйкес келетуғын теңлемелер алынады. Бул усылдың артықмашлығы есаплаўлардың әпиўайылығында (себеби еки анықлаўшының көбеймеси менен емес, ал тек бир анықлаўшы менен жумыс ислеўге туўры келеди). Бирақ бул усылдың кемшилиги де бар. Кемшилик соннан ибарат, 1-параграфтағы қозғалыс муғдарының спинлик моменти ушын жазылған (4.3.14)-теңлеме барлық ўақытта орынланбайды, ал тек ғана бир электронлық функцияларды сәйкес түрде сайлап алғанда ғана орынланады. Сфералық симметрия бар болғанда (4.3.24)-анықлаўшыға кириўши $\psi_i(x)$ функцияларын радиаллық R_{nl} функциялары арқалы анықлаўға болады. Усындай симметрия бар болған жағдайларда $\psi_i(x)$ функцияларын спинге ийе шар функциялары арқалы да анықлаўға болады. Бундай жағдайларда радиаллық функциялар ушын теңлемелер бизиң дәслепки усыл менен алынған функциялар менен бирдей болыўы шәрт.

Спинге ийе толқын функциялары ушын келисилген майдан теңлемелери екинши квантланыў теориясының жәреминде де келтирип шығарылады.

V бөлим

Дирак теориясы

I бап. Дирактың толқын теңлемеси

5-1. Квантлық механика ҳәм салыстырмалық теориясы

Шредингер теориясы да, Паули теориясы да релятивистлик емес характерге ийе. Бул теорияларда материаллық бөлекшениң ямаса қандай да бир тәсирдиң кеңисликтеги тарқалыўының жақтылықтың тезлигинен үлкен тезликлерде бола алмайтуғынлығы есапқа алынбаған. Квантлық механиканың релятивистлик улыўмаластырылыўы жаңа физикалық түсиниклерди пайдаланыўды ҳәм ҳәтте толқын теңлемесиниң интерпретациясын өзгертиўди талап етеди. Толқын функциясының түрин өзгертиў электрон ушын спиннен басқа жәнe де бир еркинлик дәрежесин киргизиў зәрүрлиги ҳәм бир дене мәселеси шеклеринде турып оны таллаўдың мүмкин емес екенлигинен ибарат.

Бирақ салыстырмалық теориясының талапларын есапқа алған ҳалда берилген электромагнит майданындағы бир дене (бир электрон) мәселесин формаллық жақтан қойыўдың мүмкин екенлиги Дирак тәрепинен табылды. Ол электрон ушын өзиниң релятивистлик теңлемесин усынды.

Биз III баптың 13-параграфтың биринши бөлиминде толқын теңлемеси, яғный электронның ўақыттың өтиўи менен ҳалының өзгерисин тәрийиплейтуғын теңлемениң

$$H\psi - i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0 \tag{5.1.1}$$

түрине ийе болатуғынлығын көрген едик. Бул теңлемеде H арқалы энергия операторы (Гамильтон операторы) белгиленген. Толқын теңлемеси менен квантлық қозғалыс теңлемеси тығыз байланысқан. Биз қозғалыс теңлемесинен толқын теңлемесин алған едик (I бөлимниң III бабының 13-параграфы). Толқын теңлемесин қозғалыс теңлемесинен де алыў мүмкин (IV баптың I бөлиминиң 4-параграфы). Енди биз Дирактың идеяларын пайдаланып (5.1.1)-толқын теңлемесин салыстырмалық теориясына улыўмаластырыўымыз керек. Алынған теңлемениң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығын талап етиўимиз керек ҳәм оннан салыстырмалық теориясының классикалық қозғалыс теңлемесиниң алыныўы шәрт.

5-2. Классикалық қозғалыс теңлемеси

Салыстырмалық теориясының классикалық қозғалыс теңлемесиниң ҳәм оған сәйкес келетуғын Лагранж ҳәм Гамильтон функцияларының қандай болатуғынлығын еске түсирип өтемиз.

Салыстырмалық теориясының механикасында P_x, P_y, P_z қозғалыс муғдары $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$ тезлиги менен

$$P_x = \frac{m\dot{x}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}, \quad P_y = \frac{m\dot{y}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}, \quad P_z = \frac{m\dot{z}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \tag{5.2.1}$$

теңлемелери арқалы байланысқан. Бул аңлатпаларда

$$v^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2. \tag{5.2.1*}$$

Бул жағдайда электромагнит майданындағы массасы m ҳәм заряды $-e$ болған электронның қозғалыс теңлемеси

$$\left.\begin{aligned} \frac{dP_x}{dt} &= -\frac{e}{c}(\dot{y}\mathscr{H}_z - \dot{z}\mathscr{H}_y) - e\mathscr{E}_x, \\ \frac{dP_y}{dt} &= -\frac{e}{c}(\dot{z}\mathscr{H}_x - \dot{x}\mathscr{H}_z) - e\mathscr{E}_y, \\ \frac{dP_z}{dt} &= -\frac{e}{c}(\dot{x}\mathscr{H}_y - \dot{y}\mathscr{H}_x) - e\mathscr{E}_z. \end{aligned}\right\} \tag{5.2.2}$$

түрине ийе болады. Бул теңлемелерден

$$\frac{dT}{dt} = -e(\dot{x}\mathscr{E}_x + \dot{y}\mathscr{E}_y + \dot{z}\mathscr{E}_z) \tag{5.2.3}$$

теңлемеси келтирилип шығарылады. Бул аңлатпада

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \tag{5.2.4}$$

электронның кинетикалық энергиясы болып табылады.

Бул теңлемелерди Лагранж

$$\mathscr{L} = -mc^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} - \frac{e}{c}(\dot{x}A_x + \dot{y}A_y + \dot{z}A_z) + e\Phi \tag{5.2.5}$$

функциясынан да алыў мүмкин. Бул аңлатпада Φ арқалы скаляр, ал $\boldsymbol{A} = (A_x, A_y, A_z)$ арқалы векторлық потенциал белгиленген. x координатасы менен түйинлес улыўмаласқан «момент»

$$p_x = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{x}} = \frac{m\dot{x}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} - \frac{e}{c}A_x = P_x - \frac{e}{c}A_x \tag{5.2.6}$$

аңлатпасы арқалы жазылады. Басқа координаталар ушын да тап усындай аңлатпалар алынады. Солай етип p_x, p_y, p_z «моментлери» P_x, P_y, P_z қозғалыс муғдарларының қураўшылары менен бирдей емес екен. Олар арасындағы байланыс релятивистлик емес жағдайдағыдай

$$P_x = p_x + \frac{e}{c}A_x, \quad P_y = p_y + \frac{e}{c}A_y, \quad P_z = p_z + \frac{e}{c}A_z \tag{5.2.7}$$

қатнасларының жәрдеминде бериледи [III бөлимниң 5-параграфының (3.5.16)-

формуласына қараңыз]. Электронның энергиясы

$$E = \dot{x}p_x + \dot{y}p_y + \dot{z}p_z - \mathscr{L} = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} - e\Phi \tag{5.2.8}$$

шамасына тең. Оны улыўмаласқан моментлер арқалы аңлатып Гамильтонның классикалық функциясын аламыз:

$$H_{\text{класс}} = mc^2\sqrt{1+\frac{1}{m^2c^2}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2} - e\Phi. \tag{5.2.9}$$

5-3. **Толқын теңлемесин келтирип шығарыў**

Бизге жоқарыдағы параграфтағы (9)-Гамильтон функциясына сәйкес келетуғын квантлық операторды табыўымыз керек. Биз еркин электронның әпиўайы жағдайынан баслаймыз: электромагнит майданы жоқ, скаляр ҳәм векторлық потенциаллар нолге тең. Бул жағдайда

$$H_{\text{класс}} = mc^2\sqrt{1+\frac{1}{m^2c^2}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)}. \tag{5.3.1}$$

Салыстырмалық теориясы ушын характерли болған теңлемелердиң координаталарға ҳәм ўақытқа карата симметриясынан, толқын теңлемеси сызықлы түрде ўақыт бойынша дифференциаллаў операторын өз ишине қамтыйтуғын болғанлықтан бул теңлеме сызықлы түрдеги координаталар бойынша дифференциаллаў операторына да ийе болыўы керек. Демек энергия квантлық оператор

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

операторларына карата сызықлы болыўы, яғный

$$H = \beta_1 p_x + \beta_2 p_y + \beta_3 p_z + \beta_4 \tag{5.3.2}$$

түрине ийе болыўы керек. Бул аңлатпада β_k арқалы p_x, p_y, p_z шамаларына ийе емес ҳәзирше белгисиз болған операторлар белгиленген. Бирақ бул операторлар x, y, z координаталарына ийе болмаўы керек. Себеби еркин электрон ушын кеңисликтиң барлық ноқатлары бирдей ҳуқыққа ийе болыўы керек. Демек олар Шредингер териясының толқын функциясы ғәрезли емес қандайда бир жаңа өзгериўшилерге тәсир етиўи керек. Бул жаңа өзгериўшилердиң мәнисин биз төменде анықлаймыз. Олардың Паули теориясы тәрепинен киргизилетуғын операторлардың улыўмаласқан түри болып табылады.

β_k операторларының қәсийетлерин анықлаў ушын квантлық механикандағы электронның энергияның квадраты менен қозғалыс муғдарының квадраты арасындағы қатнас классикалық физикада орын алатуғын қатнастай, атап айтқанда

$$H^2 = m^2c^4 + c^2(p_x^2+p_y^2+p_z^2) \tag{5.3.3}$$

түринде болыўын талап етемиз.

β_k операторларының өз ишине кординаталарды алмайтуғынлығы ҳәм сонлықтан p_x, p_y, p_z операторлары менен коммутацияланатуғынлығы есапқа алған ҳалда (5.3.2)-оператордың квадратын есаплаймыз. Бул мынаған ийе боламыз:

$$\begin{aligned} H^2 = \beta_4^2 + \beta_1^2 p_x^2 + \beta_2^2 p_y^2 + \beta_3^2 p_z^2 + \\ + (\beta_1\beta_4 + \beta_4\beta_1) p_x + (\beta_2\beta_4 + \beta_4\beta_2) p_y + (\beta_3\beta_4 + \beta_4\beta_3) p_z + \\ + (\beta_2\beta_3 + \beta_3\beta_2) p_y p_z + (\beta_3\beta_1 + \beta_1\beta_3) p_z p_x + (\beta_1\beta_2 + \beta_2\beta_1) p_x p_y. \end{aligned} \quad (5.3.4)$$

Егер

$$\beta_4^2 = m^2c^4, \quad \beta_1^2 = \beta_2^2 = \beta_3^2 = c^2, \quad \beta_i\beta_k + \beta_k\beta_i = 0 \qquad (i \neq k) \quad (5.3.5)$$

шәрти орынланатуғын болса (5.3.4)-аңлатпа (5.3.3)-аңлатпаға сәйкес келеди.

Егер биз

$$\beta_1 = c\alpha_1, \quad \beta_2 = c\alpha_2, \quad \beta_3 = c\alpha_3, \quad \beta_4 = mc^2\alpha_4 \quad (5.3.6)$$

қатнасларының жәрдеминде β_k операторының орнына оған пропорционал болған α_k операторын киргизетуғын болсақ, онда *H* операторы былайынша жазылады:

$$H = c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z) + mc^2\alpha_4, \quad (5.3.7)$$

ал жаңа α_k операторы

$$\alpha_k^2 = 1, \quad \alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i = 0 \qquad (i \neq k) \quad (5.3.8)$$

шәртин қанаатландыратуғын болады. Бул шәртлерди былайынша жаза аламыз

$$\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i = 2\delta_{ik} \qquad (i,\ k = 1,\ 2,\ 3,\ 4). \quad (5.3.9)$$

5-4. **Дирак матрицалары**

Паули матрицаларының еки функция үстинен подстановка болғанлығы сыяқлы α_k операторын төрт ψ_1, ψ_2, ψ_3, ψ_4 функциялары үстинен подстановка деп қараўға болатуғынлығын биз төменде көремиз. Солай етип α_k операторының тәсир етиў объекти төрт функцияның жыйнағы болады, ал операторлардың өзлерин подстановка коэффициентлеринен туратуғын матрица түринде көрсетиў мүмкин.

ψ_1, ψ_2, ψ_3, ψ_4 функцияларының жыйнағын бир ψ символы менен жийи белгилеймиз, ал

$$\left.\begin{aligned} \psi_1' = \alpha_{11}\psi_1 + \alpha_{12}\psi_2 + \alpha_{13}\psi_3 + \alpha_{14}\psi_4, \\ \psi_2' = \alpha_{21}\psi_1 + \alpha_{22}\psi_2 + \alpha_{23}\psi_3 + \alpha_{24}\psi_4, \\ \psi_3' = \alpha_{31}\psi_1 + \alpha_{32}\psi_2 + \alpha_{33}\psi_3 + \alpha_{34}\psi_4, \\ \psi_4' = \alpha_{41}\psi_1 + \alpha_{42}\psi_2 + \alpha_{43}\psi_3 + \alpha_{44}\psi_4 \end{aligned}\right\} \quad (5.4.1)$$

подстановкасын (орнына қойыўын) қысқа түрде былайынша

$$\psi' = \alpha\psi \tag{5.4.2}$$

жазамыз. Бул аңлатпада α арқалы

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & \alpha_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{pmatrix} \tag{5.4.3}$$

матрицасы белгиленген.

5-3 параграфтағы (5.3.9)-қатнасларды қанаатландыратуғын α_1, α_2, α_3, α_4 операторларын Паули теориясын қарағанымыздағы матрица сыяқлы матрицалар менен аңғартамыз.

α_1, α_2, α_3, α_4 матрицаларынан алты матрица қурамыз: биринshiden

$$\sigma_x = -i\alpha_2\alpha_3, \quad \sigma_y = -i\alpha_3\alpha_1, \quad \sigma_z = -i\alpha_1\alpha_2 \tag{5.4.4}$$

матрицаларын, екинshiden

$$\rho_a = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3, \quad \rho_b = \alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4, \quad \rho_c = \alpha_4 \tag{5.4.5}$$

матрицалары.

Паули матрицалары қандай қатнасларды қанаатландыратуғын болса σ_x, σ_y, σ_z матрицаларының да тап сондай қатнасларды қанаатландыратуғынлығын аңсат тексерип көриўге болады. Атап айтқанда

$$\left.\begin{aligned} \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y, \\ \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z. \end{aligned}\right\} \tag{5.4.6}$$

Олардың ҳәр бириниң квадраты 1 ге тең болады:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \tag{5.4.7}$$

Тап усындай қатнасларды ρ_a, ρ_b, ρ_c матрицалары да қанаатландырады. Олар ушын биз

$$\left.\begin{aligned} \rho_b\rho_c &= -\rho_c\rho_b = i\rho_a, \\ \rho_c\rho_a &= -\rho_a\rho_c = i\rho_b, \\ \rho_a\rho_b &= -\rho_b\rho_a = i\rho_c, \end{aligned}\right\} \tag{5.4.8}$$

ҳәм

$$\rho_a^2 = \rho_b^2 = \rho_c^2 = 1 \tag{5.4.9}$$

аңлатпаларына ийе боламыз.

ρ матрицасының σ матрицасына көбеймеси ушын

$$\left.\begin{aligned}\rho_a\sigma_x=\sigma_x\rho_a=\alpha_1,\\ \rho_a\sigma_y=\sigma_y\rho_a=\alpha_2,\\ \rho_a\sigma_z=\sigma_z\rho_a=\alpha_3,\end{aligned}\right\}\tag{5.4.10}$$

буннан кейин

$$\left.\begin{aligned}\rho_b\sigma_x=\sigma_x\rho_b=i\alpha_1\alpha_4,\\ \rho_b\sigma_y=\sigma_y\rho_b=i\alpha_2\alpha_4,\\ \rho_b\sigma_z=\sigma_z\rho_b=i\alpha_3\alpha_4\end{aligned}\right\}\tag{5.4.11}$$

ҳәм ең ақырында

$$\left.\begin{aligned}\rho_c\sigma_x=\sigma_x\rho_c=-i\alpha_2\alpha_3\alpha_4,\\ \rho_c\sigma_y=\sigma_y\rho_c=-i\alpha_3\alpha_1\alpha_4,\\ \rho_c\sigma_z=\sigma_z\rho_c=-i\alpha_1\alpha_2\alpha_4\end{aligned}\right\}\tag{5.4.12}$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Солай етип ρ матрицаларының ҳәр қайсысы σ матрицаларының ҳәр қайсысы менен коммутацияланады. Усы жағдайға байланыслы ρ ҳәм σ матрицаларын электронның ҳәр қыйлы еркинлик дәрежелери менен байланысқан деп айта аламыз.

ρ ҳәм σ шамалары арқалы α_i матрицалары ушын жазылған аңлатпадан пайдаланып 3-параграфтағы энергия операторы ушын жазылған (5.4.7)-аңлатпаны мына түде жазыўымыз мүмкин:

$$H=c\rho_a(\sigma_x p_x+\sigma_y p_y+\sigma_z p_z)+mc^2\rho_c\tag{5.4.13}$$

3-параграфтағы энергия операторы ушын жазылған (5.4.9)-шәртти қанаатландыратуғын $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ матрицаларына $\alpha_5=\rho_b$ деп есаплап бесинши матрицаны қосыўымыз мүмкин екенлигин аңғарамыз. Бул матрица (5.4.13)-энергия операторы менен антикоммутацияға ушырайды.

Жоқарыда қәлиплестирилген қәсийетлерге ийе төрт бағанаға ҳәм төрт қатарға ийе матрицаны қурыў менен шуғылланамыз. Буның ушын дәслеп Паули теориясында ушырасатуғын еки бағанаға ҳәм еки қатарға ийе үш матрицаны қараймыз. Оларды σ_1^0, σ_2^0, σ_3^0 арқалы белгилеймиз ҳәм былайынша жазамыз:

$$\sigma_1^0=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_2^0=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \sigma_3^0=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}.\tag{5.4.14}$$

Буннан кейин

$$\sigma_1^0\begin{pmatrix}\xi\\\eta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\eta\\\xi\end{pmatrix},\quad \sigma_2^0\begin{pmatrix}\xi\\\eta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-i\eta\\i\xi\end{pmatrix},\quad \sigma_3^0\begin{pmatrix}\xi\\\eta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\xi\\-\eta\end{pmatrix}\tag{5.4.15}$$

подстановкасы бир шаманың үстинде емес, ал бир ўақытта еки $\begin{pmatrix}\xi\\\eta\end{pmatrix}$ ҳәм $\begin{pmatrix}\xi^*\\\eta^*\end{pmatrix}$ санлары үстинде жүргизиледи деп болжаймыз. Санлардың бул еки жубын ψ_1, ψ_2, ψ_3, ψ_4 санларының төрттен бири деп қараў керек. Соның менен бирге ξ, η, ξ^*, η^* санларын ψ_1, ψ_2, ψ_3, ψ_4 санлары менен саластырыўды ҳәр қыйлы жоллар менен әмелге асырыў мүмкин.

Мысалы былайынша болжаўға болады:

$$\psi_1=\xi,\quad \psi_2=\eta,\quad \psi_3=\xi^*,\quad \psi_4=\eta^* \qquad (5.4.16)$$

ямаса

$$\psi_1=\xi,\quad \psi_2=\xi^*,\quad \psi_3=\eta,\quad \psi_4=\eta^*. \qquad (5.4.17)$$

Биринши жағдайда бизиң подставкамызға сәйкес келиўши матрица былайынша жазылады:

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i&0&0\\i&0&0&0\\0&0&0&-i\\0&0&i&0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}, \qquad (5.4.18)$$

ал екинши жағдайда болса матрицалар басқаша жазылады

$$\rho_1=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix},\quad \rho_2=\begin{pmatrix}0&0&-i&0\\0&0&0&-i\\i&0&0&0\\0&i&0&0\end{pmatrix},\quad \rho_3=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}. \qquad (5.4.19)$$

Әлбетте өз алдына алынған σ_1, σ_2, σ_3 подстановкалары ҳәм өз алдына ρ_1, ρ_2, ρ_3 орнына қойыўларды да еки функция үстинен исленген (5.4.15)- орнына қойыў (подстановка) қанаатландыратуғын қатнасларды қанаатландырады. Атап айтқанда

$$\left.\begin{aligned}\sigma_2\sigma_3&=-\sigma_3\sigma_2=i\sigma_1,\\ \sigma_3\sigma_1&=-\sigma_1\sigma_3=i\sigma_2,\\ \sigma_1\sigma_2&=-\sigma_2\sigma_1=i\sigma_3,\\ \sigma_1^2&=\sigma_2^2=\sigma_3^2=1,\end{aligned}\right\} \qquad (5.4.20)$$

$$\left.\begin{aligned}\rho_2\rho_3&=-\rho_3\rho_2=i\rho_1,\\ \rho_3\rho_1&=-\rho_1\rho_3=i\rho_2,\\ \rho_1\rho_2&=-\rho_2\rho_1=i\rho_3,\\ \rho_1^2&=\rho_2^2=\rho_3^2=1.\end{aligned}\right\} \qquad (5.4.21)$$

Екинши тәрептен ҳәм бир σ подстановкасы ҳәр бир ρ подстановкасы менен коммутацияланатуғынлығын тексерип көриў мүмкин

$$\sigma_i\rho_k=\rho_k\sigma_i \qquad (i,\ k=1,\ 2,\ 3). \qquad (5.4.22)$$

ρ ҳәм σ матрицаларының ҳәр қайсысы, соның менен олардың (5.4.22)- көбеймелери де +1 ҳәм -1 болған еки қайтара меншикли мәнислерине ийе болады.

Үш σ_i матрицасы, үш ρ_i матрицасы ҳәм тоғыз $\sigma_i\rho_k$ матрицасы бирлик матрица менен бирге 16 матрицаны пайда етеди. Бул матрицаны толық матрица деп айтыўға болады. Себеби төрт бағанаға ҳәм төрт қатарға ийе матрицаны, ямаса 16 элементи бар матрицаны санлы коэффицинетлери менен бул 16 матрицалардың сызықлы комбинациясы түринде көрсетиў мүмкин.

Мысалы, ρ_i ҳәм σ_i матрицалары арқалы Дирак теңлемесине кириўши матрицаларды ҳәм олар менен байланыслы болған ρ_a, ρ_b, ρ_c ҳәм σ_x, σ_y, σ_z матрицаларын аңлатыўымыз мүмкин. Буны ҳәр қыйлы жоллар менен орынлаў мүмкин. Демек берилген физикалың мәниске ийе матрица ҳәр қыйлы математикалық формаларға ийе болады екен. Әдебиятта Дирак тәрепинен усынылған жазыў жийи ушырасады. Ол мынадай жазыўды усынды

$$\left.\begin{aligned} &\sigma_x = \sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \sigma_3, \\ &\rho_a = \rho_1, \quad \rho_b = \rho_2, \quad \rho_c = \rho_3. \end{aligned}\right\} \tag{5.4.23}$$

(5.4.15)- ҳәм (5.4.10)-формулаларға сәйкес α_k матрицасы мынадай түрге ийе

$$\alpha_1' = \rho_1\sigma_1, \quad \sigma_2' = \rho_1\sigma_2, \quad \alpha_3' = \rho_1\sigma_3, \quad \alpha_4' = \rho_3 \tag{5.4.24}$$

(биз бул матрицаларды буннан кейин биз пайдаланатуғын матрицалардан айырыў ушын штрих пенен жаздық).

Гейпара жағдайларға байланыслы матрицаларды төмендегидей етип сайлап алыў қолайлырақ:

$$\left.\begin{aligned} &\sigma_x = \rho_3\sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \rho_3\sigma_3, \\ &\rho_a = \rho_3, \quad \rho_b = \rho_1\sigma_2, \quad \rho_c = \rho_2\sigma_2 \end{aligned}\right\} \tag{5.4.25}$$

ямаса анық түрде

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{5.4.26}$$

$$\rho_a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \rho_b = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_c = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{5.4.27}$$

Буннан α_k матрицасы ушын төмендегидей мәнислер алынады:

$$\alpha_1 = \sigma_1, \quad \alpha_2 = \rho_3\sigma_2, \quad \alpha_3 = \sigma_3, \quad \alpha_4 = \rho_2\sigma_2 \tag{5.4.28}$$

ямаса анық түрде

$$\left.\begin{aligned} &\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \end{pmatrix}, \\ &\alpha_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}\right\} \tag{5.4.29}$$

5-5. **Еркин электрон ушын Дирак теңлемеси**

Енди биз еркин электрон ушын Дирак теңлемесин ашылған түрде жаза аламыз. Егер *H* арқалы 5-3 параграфтағы (5.3.7)-оператор белгиленген болса, онда

$$H\psi=[c(\alpha_1 p_x+\alpha_2 p_y+\alpha_3 p_z)+mc^2\alpha_4]\,\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{5.5.1}$$

толқын теңлемеси төрт дифференциал теңлеме системасы түринде жазылады:

$$\left.\begin{aligned}
&-i\hbar c\left(\frac{\partial\psi_2}{\partial x}-i\frac{\partial\psi_2}{\partial y}+\frac{\partial\psi_1}{\partial z}\right)-mc^2\psi_4=i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t},\\
&-i\hbar c\left(\frac{\partial\psi_1}{\partial x}+i\frac{\partial\psi_1}{\partial y}-\frac{\partial\psi_2}{\partial z}\right)+mc^2\psi_3=i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t},\\
&-i\hbar c\left(\frac{\partial\psi_4}{\partial x}+i\frac{\partial\psi_4}{\partial y}+\frac{\partial\psi_3}{\partial z}\right)+mc^2\psi_2=i\hbar\frac{\partial\psi_3}{\partial t},\\
&-i\hbar c\left(\frac{\partial\psi_3}{\partial x}-i\frac{\partial\psi_3}{\partial u}-\frac{\partial\psi_4}{\partial z}\right)-mc^2\psi_1=i\hbar\frac{\partial\psi_4}{\partial t}.
\end{aligned}\right\} \tag{5.5.2}$$

Егер Дирак теңлемеси (5.5.1)-түрде жазылған болса (бундай жазыўды символлық түрдеги жазыў деп атайды) изертлеў қолайлырақ болады. Сонлықтан (5.5.2)-түрдеги формуланы пайдаланыў ушын зәрүрлик болмайды.

Биз матрицалардың α_γ сайлап алыўдың еки вариантын қарап шықтық. Олардың биринщиси (Дирак тәрепинен усынылғаны) 5-4 параграфтағы (5.5.23)-формулаға, екиншиси болса 5-4 параграфтағы (5.5.25)-формулаға сәйкес келеди.

Базы бир мақсетлер ушын еркин электронның төрт қураўшыдан туратуғын толқын функциясы ушын жазылған теңлемелер системасы ҳақыйқый коэффициентлерге ийе болатуғын α_k матриcаның көриниси қолайлы. Буның ушын 4-параграфтағы (5.5.25)-формулалардағы ρ_2 менен ρ_3 матрицаларының орынларын алмастырыў ҳәм ρ_1 матрицасының алдындағы белгини өзгертиў керек. Бундай жағдайда 4-параграфтағы (5.5.25)-аңлатпаның орнына:

$$\left.\begin{aligned}
&\sigma_x^0=\rho_2\sigma_1, && \sigma_y^0=\sigma_2, && \sigma_z^0=\rho_2\sigma_3,\\
&\rho_a^0=\rho_2, && \rho_b^0=-\rho_1\sigma_2, && \rho_c^0=\rho_3\sigma_2.
\end{aligned}\right\} \tag{5.5.3}$$

аңлатпаларына ийе боламыз.

Жаңа матрицаларды ескилеринен айырыў ушын «0» значоклары менен тәмийинледик[2]. Барлық (5.5.3)-матрицалар таза жормал элементлерге ийе болады.

Жаңа ҳәм ески матрицалар арасындағы байланыс матрицалар менен исленетуғын каноникалық түрлендириўлердиң жәрдеминде әмелге асырылады:

$$T=\frac{1}{\sqrt{2}}(\rho_2+\rho_3). \tag{5.5.4}$$

Бул матрица өзи өзине түйинлес ҳәм унитар матрица болып табылады. Сонлықтан

$$T^{-1}=T^{+}=T,\quad T^2=1. \tag{5.5.5}$$

Ҳақыйқатында биз

---

2 Ҳәзир гәп төрт қатарлы матрицалар ҳаққында айтылып атыр. Сонлықтан бул матрицаларды 4-параграфтағы (5.4.14)-Паули матрицалары менен алжастырыў мүмкин емес.

$$T\rho_2 T = \rho_3, \quad T\rho_3 T = \rho_2, \quad T\rho_1 T = -\rho_1 \tag{5.5.6}$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Жаңа α_k матрицасы (енди биз оны α_k^0 арқалы белгилеймиз) ески матрица менен каноникалық түрлендириўлер менен байланысқан:

$$\alpha_k^0 = T^{+}\alpha_k T. \tag{5.5.7}$$

Олар мынаған тең:

$$\alpha_1^0 = \sigma_1, \quad \alpha_2^0 = \rho_2\sigma_2, \quad \alpha_3^0 = \sigma_3, \quad \alpha_4^0 = \rho_3\sigma_2. \tag{5.5.8}$$

5-4 параграфтағы (5.4.28)-аңлатпа менен салыстырыў олардың α_2 менен α_4 тиң орын алмасыўы менен айрылатуғынлығы көрсетеди. Биринши үш α_k^0 матрицасының элементлери ҳақыйқый, ал α_4^0 элементлери жормал болады.

Еркин электрон ушын (5.5.2)-төрт дифференциал теңлемелер системасын енди былайынша жаза аламыз:

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{\partial\psi_2^0}{\partial x} - \frac{\partial\psi_4^0}{\partial y} + \frac{\partial\psi_1^0}{\partial z} + \frac{1}{c}\frac{\partial\psi_1^0}{\partial t} + \frac{mc}{\hbar}\psi_2^0 = 0, \\
&\frac{\partial\psi_1^0}{\partial x} + \frac{\partial\psi_3^0}{\partial y} - \frac{\partial\psi_2^0}{\partial z} + \frac{1}{c}\frac{\partial\psi_2^0}{\partial t} - \frac{mc}{\hbar}\psi_1^0 = 0, \\
&\frac{\partial\psi_4^0}{\partial x} + \frac{\partial\psi_2^0}{\partial y} + \frac{\partial\psi_3^0}{\partial z} + \frac{1}{c}\frac{\partial\psi_3^0}{\partial t} - \frac{mc}{\hbar}\psi_4^0 = 0, \\
&\frac{\partial\psi_3^0}{\partial x} - \frac{\partial\psi_1^0}{\partial y} - \frac{\partial\psi_4^0}{\partial z} + \frac{1}{c}\frac{\partial\psi_4^0}{\partial t} + \frac{mc}{\hbar}\psi_3^0 = 0.
\end{aligned}\right\} \tag{5.5.9}$$

Ең ақырында бизиң толқын функцияларымыз бенен Дирак бойынша [5-4 параграфтағы (5.4.24)-аңлатпа] сайлап алынған α_k' матрицаларына сәйкес келиўши ψ_k' толқын функциялары арасындағы байланысты жазамыз. Биз мынадай қатнасларға ийемиз:

$$\left.\begin{aligned}
\psi_1' &= \frac{\psi_1 - \psi_4}{\sqrt{2}}, \quad \psi_2' = \frac{\psi_2 + \psi_3}{\sqrt{2}}, \\
\psi_3' &= \frac{\psi_1 + \psi_4}{\sqrt{2}}, \quad \psi_4' = \frac{\psi_2 - \psi_3}{\sqrt{2}}.
\end{aligned}\right\} \tag{5.5.10}$$

$$\psi' = S\psi \tag{5.5.11}$$

түрлендириўине сәйкес келиўши унитар матрица S мынаған тең:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1 - i\rho_2}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1 + i\sigma_2}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1 - i\rho_3\sigma_2}{\sqrt{2}}. \tag{5.5.12}$$

Ал

$$\psi^0 = T\psi \tag{5.5.13}$$

түрлендириўине сәйкес келиўши ψ^0 ҳәм ψ арасындағы байланысқа келетуғын болсақ, онда бундай байланыс

$$\left.\begin{aligned} \psi_1^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - i\psi_3), & \psi_2^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2 - i\psi_4), \\ \psi_3^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\psi_3 + i\psi_1), & \psi_4^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\psi_4 + i\psi_2). \end{aligned}\right\} \tag{5.5.14}$$

формулаларының жәрдеминде жазылады. $T^2 = 1$ болғанлықтан бундай формулалар ψ_i ди ψ_i^0 арқалы аңлатыўға мүмкиншилик береди. Биз мынаған ийе боламыз:

$$\left.\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^0 - i\psi_3^0), & \psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2^0 - i\psi_4^0), \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\psi_3^0 + i\psi_1^0), & \psi_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\psi_4^0 + i\psi_2^0). \end{aligned}\right\} \tag{5.5.15}$$

5-6. **Лоренц түрлендириўлери**

Биз енди толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығын ҳәм $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ функцияларының геометриялық қәсийетлерин үйрениў менен шуғылланамыз.

$$x = x_1, \quad y = x_2, \quad z = x_3, \quad ct = x_0 \tag{5.6.1}$$

деп болжайық ҳәм

$$e_0 = 1, \quad e_1 = e_2 = e_3 = -1 \tag{5.6.2}$$

төрт санын киргиземиз. Буны биз төрт өлшемли қашықлықтың квадратын

$$\pm\, ds^2 = c^2dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 = \sum_{k=0}^{3} e_k\, dx_k^2 \tag{5.6.3}$$

түринде жазыў ушын иследик.

Лоренц түрлендириўлерин

$$x_i' = \sum_{k=0}^{3} e_k a_{ik} x_k \tag{5.6.4}$$

түринде жазамыз. Бул аңлатпада a_{ik} арқалы

$$\sum_{i=0}^{3} e_i a_{ik} a_{il} = e_k \delta_{kl} \tag{5.6.5}$$

шәртин қанаатландыратуғын ҳақыйқый санлар белгиленген. Бул (5.6.4)-түрлендириўдиң ds^2 шамасын инвариант етип қалдыратуғынлығынан келип шығады. Бул жағдайлардың орын алыўының себебинен (5.6.4)-теңлеме x_i шамасына қарата былайынша жазылады:

$$x_i = \sum_{k=0}^{3} e_k a_{ki} x'_k. \tag{5.6.6}$$

Буннан өз гезегинде

$$\sum_{i=0}^{3} e_i a_{ki} a_{li} = e_k \delta_{kl} \tag{5.6.7}$$

теңлемеси келип шығады. 5-5 параграфтағы (5.5.1)-теңлемени $\frac{i}{\hbar c}$ шамасына көбейтип егер α_0 ди бирлик матрица деп түсинсек былайынша жазамыз:

$$\sum_{k=1}^{3} \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi + \frac{\partial \psi}{\partial x_0} = 0 \tag{5.6.8}$$

ямаса

$$\sum_{k=0}^{3} \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi = 0. \tag{5.6.9}$$

Енди биз (5.6.6)- өзгериўшилерди алмастырамыз. Мынаған ийе боламыз:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_k} = \sum_{l=0}^{3} e_k a_{lk} \frac{\partial \psi}{\partial x'_l}.$$

Сонлықтан

$$\sum_{l=0}^{3} \sum_{k=0}^{3} e_k a_{lk} \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x'_l} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi = 0. \tag{5.6.10}$$

Егер бизге

$$\alpha'_l = S^+ \alpha_l S = \sum_{k=0}^{3} e_k a_{lk} \alpha_k \qquad (l = 0,\ 1,\ 2,\ 3), \tag{5.6.11}$$

$$S^+ \alpha_4 S = \alpha_4 \tag{5.6.12}$$

түриндеги S матрицасын (улыўма айтқанда унитар емес матрицасын) табыў сәти түссе, онда (5.6.10)-теңлемени

$$\sum_{l=0}^{3} S^+ \alpha_l S \frac{\partial \psi}{\partial x'_l} + \frac{imc}{\hbar} S^+ \alpha_4 S \psi = 0 \tag{5.6.13}$$

түринде жазыўға мүмкин болар еди. Буннан кейин

$$\psi' = S\psi \tag{5.6.14}$$

деп болжап ҳәм (5.6.13)-аңлатпаның шеп тәрепин $(S^+)^{-1}$ ге көбейтип [яғный (5.6.13)-төрт теңлеме үстинен S^+ ке кери болған орын алмастырыўды ислеп]

$$\sum_{k=0}^{3} \alpha_k \frac{\partial \psi'}{\partial x_k'} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi' = 0 \tag{5.6.15}$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлеме дәслепки (5.6.9)-теңлеме сыяқлы теңлеме болып табылады. Бул теңлеме бурынғы α_k матрицаларына, бирақ жаңа x_0', x_1', x_2', x_3' ғәрезсиз өзгериўшилерине ҳәм жаңа ψ_1', ψ_2', ψ_3', ψ_4' функцияларына ийе. Солай етип егер Лоренц түрлендириўлерин функциялары үстинен (5.6.14)-подстановка жәрдеминде исленсе толқын теңлемесиниң өзиниң дәслепки түрин сақлайтуғынлығы дәлилленди. Басқа сөзлер менен айтқанда толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығы дәлилленеди.

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

Биз бизге керек қәсийетлерге ийе S матрицасының бар екенлигин ҳәм α_k матрицаларын бизлер сайлап алған жағдайда

$$S = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \gamma & \delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\alpha} & \bar{\beta} \\ 0 & 0 & \bar{\gamma} & \bar{\delta} \end{pmatrix} \tag{5.7.1}$$

түрине ийе болатуғынлығын көрсетемиз. Бул аңлатпада α, β, γ, δ лар арқалы бир бири менен

$$\alpha\delta - \beta\gamma = 1 \tag{5.7.2}$$

аңлатпасы арқалы байланысқан ҳәм Кэйлей-Клейн (Cayley – Klein) улыўмаласқан параметрлери деп аталатуғын төрт комплексли параметр белгиленген. Түйинлес S^+ матрицасы

$$S^+ = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} & \bar{\gamma} & 0 & 0 \\ \bar{\beta} & \bar{\delta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & \gamma \\ 0 & 0 & \beta & \delta \end{pmatrix} \tag{5.7.3}$$

түрине ийе болады.

Ең дәслеп (5.7.2)-қатнасқа байланыслы 5-6 параграфтың (5.6.12)-формуласының орынланатуғынлығын аңсат тексерип көриўге болады. Буның ушын избе-из үш подстановка ислеймиз: дәслеп S, буннан кейин α_4 ҳәм ең кейнинен S^+ ти. Усының менен бир қатарда

$$S^+ \alpha_5 S = \alpha_5 \tag{5.7.4}$$

теңлигиниң орныланатуғынлығын да аңғарамыз.

5-6 параграфтың (5.6.11)-аңлатпасының орынланатуғындай етип Лоренцтиң қәлеген түрлендириўи ушын α, β, γ, σ параметрлерин сайлап алыўдың мүмкиншилигине исениў мақсетинде Лоренц түрлендириўлериниң де, S потдстановкаларының да группаны пайда ететуғынлығынан пайдаланамыз (яғный избе-из орынланатуғын бир неше түрлендириўлер сол типтеги бир түрлендириў менен алмастырылады). Лоренцтиң ең улыўмалық түрлендириўин дара типтеги түрлендириўлерди избе-из қолланыў менен алыў мүмкин. Мысалы бундай жағдайды әмелге асырыў ушын координаталар системасын x, y, z көшерлери дөгерегинде бурыў ҳәм

$$z' = \frac{z - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad t' = \frac{t - \frac{v}{c^2} z}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \tag{5.7.5}$$

түрлендириўлерин орынлаў мүмкин.

Егер бизлер усы дара түрлендириўлердиң ҳәр бири ушын сәйкес S подстановкасын тапсақ, онда улыўма жағдай ушын болған S подстановкасы бул дара постановкаларды избе-из қолланыў жолы менен алынады.

Биз дәслеп z көшери дөгерегиндеги бурыўды қараймыз. Себеби бундай жағдайда S матрицасы ең әпиўайы түрге ийе болады. Көшерлердиң бурылыўы ушын формулалар былайынша жазылады:

$$\left.\begin{aligned} x_1' &= x_1 \cos\varphi - x_2 \sin\varphi, \\ x_2' &= x_1 \sin\varphi + x_2 \cos\varphi, \\ x_3' &= x_3, \\ x_0' &= x_0. \end{aligned}\right\} \tag{5.7.6}$$

Бул бурылыўларға

$$\alpha = e^{-i\frac{\varphi}{2}}, \quad \beta = 0, \quad \gamma = 0, \quad \delta = e^{i\frac{\varphi}{2}} \tag{5.7.7}$$

параметрлериниң сәйкес келетуғынлығын көрсетемиз. S матрицасы мынадай болады:

$$S = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}. \tag{5.7.8}$$

Бул матрицаны

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} - i \sin\frac{\varphi}{2} \rho_3 \sigma_3 \tag{5.7.9}$$

түринде де жаза аламыз ямаса 5-4 параграфтағы (5.4.25)-аңлатпа тийкарында

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2}\sigma_z \qquad (5.7.10)$$

аңлатпасын жазамыз. Жоқарыда келтирилген аңлатпалар тийкарында

$$\begin{aligned} S^{+}\alpha_1 S = S^{+}\rho_a\sigma_x S = \\ = \rho_a\left(\cos\frac{\varphi}{2} + i\sin\frac{\varphi}{2}\sigma_z\right)\sigma_x\left(\cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2}\sigma_z\right) = \\ = \rho_a(\cos\varphi + i\sin\varphi\sigma_z)\sigma_x = \rho_a(\sigma_x\cos\varphi - \sigma_y\sin\varphi), \end{aligned}$$

демек

$$\alpha_1' = S^{+}\alpha_1 S = \alpha_1\cos\varphi - \alpha_2\sin\varphi. \qquad (5.7.11)$$

Тап сол сыяқлы

$$\left.\begin{aligned} \alpha_2' = S^{+}\alpha_2 S = \alpha_1\sin\varphi + \alpha_2\cos\varphi, \\ \alpha_3' = S^{+}\alpha_3 S = \alpha_3, \\ \alpha_0' = S^{+}\alpha_0 S = \alpha_0. \end{aligned}\right\} \qquad (5.7.11')$$

теңлиги дәлилленеди.

Солай етип x_k' түрлендирилген координаталарының дәслепки x_k координаталары арқалы аңлатылғанындай, түрлендирилген α_k' матрицалары да дәслепки α_k матрицалары арқалы аңлатылады екен. Басқа сөз бенен айтқанда 5-6 параграфтың (5.6.11)-аңлатпасы орынланады екен.

Енди $x = x_1$ көшери дөгерегиндеги бурыўды қараймыз:

$$\left.\begin{aligned} x_1' = x_1, \\ x_2' = x_2\cos\varphi - x_3\sin\varphi, \\ x_3' = x_2\sin\varphi + x_3\cos\varphi, \\ x_0' = x_0. \end{aligned}\right\} \qquad (5.7.12)$$

Бул аңлатпада

$$\alpha = \cos\frac{\varphi}{2}, \quad \beta = -i\sin\frac{\varphi}{2}, \quad \gamma = -i\sin\frac{\varphi}{2}, \quad \delta = \cos\frac{\varphi}{2} \qquad (5.7.13)$$

ҳәм S матрицасы

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2}\rho_3\sigma_1 \qquad (5.7.14)$$

түрине ямаса

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2}\sigma_x \qquad (5.7.14^*)$$

түрине ийе болады.

5-6 параграфтағы (5.6.11)-аңлатпа жоқарыда келтирилген жағдайдағыдай түрде дәлилленеди.

Eң aқырында $y = x_2$ көшери дөгерегиндеги бурыўға

$$\left.\begin{aligned} x_1' &= x_1\cos\varphi + x_3\sin\varphi, \\ x_2' &= x_2, \\ x_3' &= -x_1\sin\varphi + x_3\cos\varphi, \\ x_0' &= x_0, \end{aligned}\right\} \tag{5.7.15}$$

параметрлердиң мәнислери

$$\alpha = \cos\frac{\varphi}{2}, \quad \beta = -\sin\frac{\varphi}{2}, \quad \gamma = \sin\frac{\varphi}{2}, \quad \delta = \cos\frac{\varphi}{2} \tag{5.7.16}$$

ҳәм усы параметрлерден қуралған S матрицасы былайынша жазылады:

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_2 \tag{5.7.17}$$

ямаса

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_y. \tag{5.7.17*}$$

Барлық үш жағдайда да x_k көшериниң дөгерегинде оң бағытта φ мүйешине бурыўға

$$S = \cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2}\,\sigma_{x_k} \tag{5.7.18}$$

унитар матрицасы сәйкес келеди. Соның менен бирге бул нәтийже α_k матрицаларын сайлап алыўдан ғәрезли емес. Бул нәтийжелерди улыўмаластырамыз ҳәм l, m, n бағытлаўшы косинусларына ийе көшердиң дөгерегинде ω мүйешине бурған жағдай ушын

$$S = \cos\frac{\omega}{2} - i\sin\frac{\omega}{2}\,(l\sigma_x + m\sigma_y + n\sigma_z) \tag{5.7.19}$$

матрицасының сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз.

Енди Лоренцтиң (5)-меншикли түрлендириўлерин қараймыз. Бул түрлендириўлер былайынша жазылады:

$$\left.\begin{aligned} x_1' &= x_1, \qquad & x_2' &= x_2, \\ x_3' &= \frac{x_3 - \frac{v}{c}x_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}, \qquad & x_0' &= \frac{x_0 - \frac{v}{c}x_3}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}. \end{aligned}\right\} \tag{5.7.20}$$

$$\frac{v}{c} = \operatorname{th} u \tag{5.7.21}$$

түриндеги белгилеў қабыл етемиз. Усыған байланыслы

$$\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}=\operatorname{ch}u, \quad \frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}=\operatorname{sh}u. \tag{5.7.21*}$$

Бул жағдайда параметрлер мыналарға тең болады:

$$\alpha=e^{-\frac{1}{2}u}, \quad \beta=0, \quad \gamma=0, \quad \delta=e^{\frac{1}{2}u} \tag{5.7.22}$$

ҳәм *S* матрицасы енди унитар матрица болмайды, бирақ α_k матрицалары бизлердиң сайлап алғанымыздай етип сайлап алынса бурынғысынша (5.7.1)-түрге ийе болады ҳәм

$$S=\operatorname{ch}\frac{u}{2}-\operatorname{sh}\frac{u}{2}\sigma_3 \tag{5.7.23}$$

ямаса

$$S=\operatorname{ch}\frac{u}{2}-\operatorname{sh}\frac{u}{2}\alpha_3 \tag{5.7.24}$$

түринде жазылады. Енди 5-6 параграфтағы (5.6.11)-қатнастың орынланатуғынлығын да аңсат тексерип көриўге болады.

x_k көшериниң бағытында $v=c\operatorname{th}u$ тезлиги менен қозғалысқа сәйкес келетуғын *S* матрицасы былайынша жазылады:

$$S=\operatorname{ch}\frac{u}{2}-\operatorname{sh}\frac{u}{2}\alpha_k, \tag{5.7.25}$$

ал косинуслары l, m, n болған бағыттағы қозғалыс ушын *S* матрицасы былайынша жазылады

$$S=\operatorname{ch}\frac{u}{2}-\operatorname{sh}\frac{u}{2}(l\alpha_1+m\alpha_2+n\alpha_3). \tag{5.7.26}$$

Солай етип барлық жағдайда да 6-параграфтағы (11)-шәртти қанаатландыратуғын (1)-түрдеги *S* матрицасының түрин табыў мүмкин екен. Усының менен толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығы дәлилленди.

Кэйлей-Клейн параметрлери, демек *S* матрицасы да берилген бурылыў ушын белгиге шекемги дәлликте анықланатуғынлығын аңғарамыз. Бизиң формулаларымызда *S* матрицасының белгиси шексиз киши бурыўға ямаса шексиз киши тезликли Лоренц түрлендириўлерине *S* = + 1 ден шексиз киши шамаға айрылатуғын (парыққа ийе) болатуғындай етип сайлап алынған.

5-8. Тоқ векторы

Биз жоқарыда Лоренцтиң ҳәр бир түрлендириўине $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ функцияларының белгили бир (белгиге шекемги дәлликтеги) түрлендириўиниң сәйкес келетуғынлығын көрдик. «Ярым рангалы тензор» ямаса «ярым вектор» деп атаўға болатуғын тензор ямаса вектор сыяқлы бул функциялар өзине тән геометриялық фигураны береди (көрсетеди). Бул атаманың дурыслығы ψ фунциясының базы бир квадратлық комбинацияларының төрт өлшемли вектор сыпатында түрленетуғынлығы менен байланыслы. Ҳақыйқатында да

$$A_k = \bar{\psi}\alpha_k\psi \qquad (k = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5) \tag{5.8.1}$$

деп ямаса толығырақ (α_k шамаларын бизиң сайлап алғыўымыз жағдайында)

$$\left.\begin{aligned}
A_0 &= \bar{\psi}_1\psi_1 + \bar{\psi}_2\psi_2 + \bar{\psi}_3\psi_3 + \bar{\psi}_4\psi_4,\\
A_1 &= \bar{\psi}_1\psi_2 + \bar{\psi}_2\psi_1 + \bar{\psi}_3\psi_4 + \bar{\psi}_4\psi_3,\\
A_2 &= -i\bar{\psi}_1\psi_2 + i\bar{\psi}_2\psi_1 + i\bar{\psi}_3\psi_4 - i\bar{\psi}_4\psi_3,\\
A_3 &= \bar{\psi}_1\psi_1 - \bar{\psi}_2\psi_2 + \bar{\psi}_3\psi_3 - \bar{\psi}_4\psi_4,\\
A_4 &= -\bar{\psi}_1\psi_4 + \bar{\psi}_2\psi_3 + \bar{\psi}_3\psi_2 - \bar{\psi}_4\psi_1,\\
A_5 &= -i\bar{\psi}_1\psi_4 + i\bar{\psi}_2\psi_3 - i\bar{\psi}_3\psi_2 + i\bar{\psi}_4\psi_1.
\end{aligned}\right\} \tag{5.8.2}$$

деп қабыл етемиз. Бундай жағдайда 5-6 параграфты (5.6.11)-формуласы мынаны береди:

$$A'_l = \bar{\psi}'\alpha_l\psi' = \bar{\psi}S^{+}\alpha_l S\psi = \bar{\psi}\alpha'_l\psi = \sum_{k=0}^{3} e_k a_{kl} A_k \qquad (l = 0,\ 1,\ 2,\ 3), \tag{5.8.3}$$

ал бул теңлик A_0, A_1, A_2, A_3 лердиң төрт өлшемли вектордың қураўшыларындай болып түрленетуғынлығын көрсетеди. 5-6 параграфтың (5.6.12)- ҳәм 5-7 параграфтың (5.7.4)-формуласы бул жағдайда

$$A'_4 = A_4, \quad A'_5 = A_5 \tag{5.8.4}$$

екенлигин береди. Бул жағдай A_4 пенен A_5 шамаларының төрт өлшемли инвариантлар екенлигин аңғартады. A_k шамалары

$$A_1^2 + A_2^2 + A_3^2 + A_4^2 + A_5^2 = A_0^2 \tag{5.8.5}$$

аңлатпасы арқалы байланысқан.

Егер A_k шамалары толқын теңлемесин қанаатландыратуғын ψ функцияларынан туратуғын болса, онда

$$\frac{\partial A_1}{\partial x} + \frac{\partial A_2}{\partial y} + \frac{\partial A_3}{\partial z} + \frac{1}{c}\frac{\partial A_0}{\partial t} = 0 \tag{5.8.6}$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын көрсетемиз. Буның ушын 5-6 параграфтағы (5.6.9)-аңлатпаны ҳәм оған түйинлести жазамыз:

$$\sum_{k=0}^{3} \alpha_k \frac{\partial\psi}{\partial x_k} + \frac{imc}{\hbar}\alpha_4\psi = 0 \tag{5.8.7}$$

$$\sum_{k=0}^{3} \frac{\partial\bar{\psi}}{\partial x_k}\alpha_k - i\frac{mc}{\hbar}\bar{\psi}\alpha_4 = 0. \tag{5.8.7*}$$

Бул теңлемелердиң бириншисиниң оң тәрепин $\bar{\psi}$ ге, ал екиншисиниң оң тәрепин ψ ге көбейтемиз ҳәм нәтийжелерди бир бирине қосамыз. Теңлемелердеги екинши ағзалар қысқарады ҳәм (5.8.6)-теңлеме болған

$$\sum_{k=0}^{3} \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\psi} \alpha_k \psi) = 0 \quad (5.8.8)$$

теңлемесин аламыз.

(5.8.6)-теңлемени базы бир σ бети мене шекленген V көлеми бойынша интеграллап

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V A_0 \, d\tau = -c \int [A_1 \cos(n, x) + A_2 \cos(n, y) + A_3 \cos(n, z)] \, d\tau \quad (5.8.9)$$

аңлатпасын аламыз.

A_0 шамасының физикалық мәниси итималлықтың тығызлығы болып табылады. Бул шама Шредингер теориясындағы $\bar{\psi}\psi$ көбеймесиниң орнын тутады. (5.8.6)- ҳәм (5.8.9)- формулаларды III баптың II бөлиминиң 2-параграфындағы (9)- ҳәм (7)-формулалар менен салыстырсақ cA_k векторының Шредингер теориясындағы $\boldsymbol{S}$ векторының орнын ийелейтуғынлығын ҳәм электронлар ағысының тығызлығының аналогы болып табылатуғынлығын көриўге болады. Классикалық электр зарядларының тығызлығы ρ ның ҳәм ρv тоқ векторының квантлық аналоглары төмендегилер болып табылады:

$$\rho \to -e\bar{\psi}\psi = -eA_0, \quad (5.8.10)$$

$$\rho v_k \to -eS_k = -ec\bar{\psi}\alpha_k\psi = -ecA_k \qquad (k = 1, 2, 3). \quad (5.8.11)$$

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

Жоқарыдағы параграфларда еркин электрон ушын келтирилип шығарылған толқын теңлемеси

$$H\psi - i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad (5.9.1)$$

түрине ийе еди. Бул теңлемеде энергия операторы H мынаған тең

$$H = c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z) + mc^2\alpha_4. \quad (5.9.2)$$

Биз усы теңлемени электромагнит майданы бар жағдай ушын улыўмаластырыўымыз керек. Майдан ушын Гамильтон функциясы болған (5.2.9)-функция (5-2 параграфтағы) майданы жоқ функциядан потенциал энергия $-e\varphi$ шамасын қосыў ҳәм p_x, p_y, p_z «моментлерин» 5-2 параграфтағы (5.2.7)-формула бойынша қозғалыс муғдарының P_x, P_y, P_z қураўшылары менен алмастырыў арқалы алынады. Тап усындай алмастырыўды биз Паули теориясында орынладық. Усындай алмастырыўды (5.9.2)-релятивистлик квантлық операторнда ислеп көремиз ҳәм

$$H = c[\alpha_1 P_x + \alpha_2 P_y + \alpha_3 P_z] + mc^2\alpha_4 - e\varphi \quad (5.9.3)$$

деп болжаймыз. Бул аңлатпада

$$P_x = p_x + \frac{e}{c} A_x, \quad P_y = p_y + \frac{e}{c} A_y, \quad P_z = p_z + \frac{e}{c} A_z \tag{5.9.4}$$

ҳәм бул жерде p_x, p_y, p_z шамаларын бурынғыдай

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

операторлары деп түсинемиз.

Майдан жоқ теңлемеден электоромагнит майданындағы электрон ушын теңлемеге усындай өтиўдиң баслы тийкары төмендегидей көз-қарастан ибарат. Электр майданы $\mathscr{E}$ менен магнит майданы $\mathscr{H}$ тиккелей бақланатуғын физикалық шамалар болып табылады. Потенциаллар болса

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \operatorname{grad} f, \quad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t} \tag{5.9.5}$$

түрлендириўине шекемги дәлликте анықланатуғын жәрдемши математикалық шамалар болып табылады. Олар майданды өзгериссиз қалдырады. Усыған байланыслы $\boldsymbol{A}$ менен φ ди $\boldsymbol{A}'$ пенен φ' ке түрлендиргенде толқын теңлемесинен келип шығатуғын барлық нәтийжелердиң өзгериссиз қалыўын талап етиўимиз керек. Бул талап бундай алмастырыўға операторлардың ҳәм толқын функцияларының унитарлық түрлендириўи сәйкес келген жағдайда ғана орынланады. Егер энергия операторы (5.9.3) түрине ийе болса бул жағдайдың ҳақыйқатында да орын алатуғынлығын көрсетемиз.

$\boldsymbol{A}$ менен φ лер $\boldsymbol{A}'$ пенен φ' лер менен (5)-формула жәрдеминде алмастырылған (5.9.3)-түрдеги операторды H' арқалы белгилеймиз.

$$\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c}\left(\mathscr{A}_x + \frac{\partial f}{\partial x}\right)\right]\psi' = e^{-\frac{ie}{\hbar c}f}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c}\mathscr{A}_n\right]e^{\frac{ie}{\hbar c}f}\psi' \tag{5.9.6}$$

түриндеги теңсизликтиң тийкарында егер ψ функциясы (5.9.1)-теңлемени қанаатландыратуғын болса, онда

$$\psi' = e^{-\frac{ief}{\hbar c}}\psi \tag{5.9.7}$$

функциясының

$$H'\psi' - i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = 0 \tag{5.9.8}$$

теңлемесиниң шешими болатуғынлығын көрсетиў қыйын емес.

Солай етип вектор-потенциалға градиентти қосыўға толқын функциясына фазалық көбейтиўшини киргизиўге сәйкес келеди екен (яғный унитарлық түрлендириўдиң дара жағдайы). (5.9.3)-энергия операторы бар (5.9.1)-толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант екенлиги анық. Себеби вектор-потенциал градиент түрленетуғын нызам бойынша түрленеди, ал скаляр потенциал $-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}$ шамасындай болып түрленеди. Усының менен бир қатарда 5-8 параграфтағы (5.8.6)-теңлик те бурынғыдай болып орын алатуғынлығын тексерип көриў қыйын емес.

Формаллық жақтан қозғалыс теңлемеси жаңа толқын теңлемесин тексерип көриўши бола алады. Базы бир L операторының толық туўындысы ушын

$$\frac{dL}{dt}=\frac{\partial L}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}(HL-LH) \tag{5.9.9}$$

формуласының бар екенлиги еске аламыз ҳәм сол L операторының орнына избе-из $x,\ y,\ z,\ P_x,\ P_y,\ P_z$. шамаларын қоямыз. Усындай жол менен Шредингер теориясынан алынғандай классикалық қозғалыс теңлемесиниң алынатуғынлығын ямаса алынбайтуғынлығын көремиз.

$$L=x,\ y,\ z$$

деп алып

$$\dot{x}=\frac{dx}{dt}=c\alpha_1,\quad \dot{y}=\frac{dy}{dt}=c\alpha_2,\quad \dot{z}=\frac{dz}{dt}=c\alpha \tag{5.9.10}$$

аңлатпаларын аламыз. Электронның тезликлериниң қураўшылары ушын операторлар усындай болады. Олар бир бири менен коммутацияланбайды ҳәм олардың ҳәр бириниң квадраты c^2 қа, яғный жақтылықтың тезлигиниң квадратына тең. Олардың ҳәр қайсысының меншикли мәнис $\pm\ c$ ға тең. Демек электронның тезлигиниң өлшенетуғын ҳәр бир қураўшысы тек $\pm\ c$ ға тең болып шығады. Бул парадокслық нәтийжениң физикалық мәниске ийе болыў мәселесин ашық қалдырамыз. Бул Дирак теориясының кемшилиги болса керек.

Енди

$$L=P_x=p_x+\frac{e}{c}A_x$$

теңлигин аламыз ҳәм $\frac{dP_x}{dt}$ туўындысын есаплаймыз. Буның ушын дәслеп

$$\left.\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar}(P_yP_z-P_zP_y)&=\frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_z}{\partial y}-\frac{\partial A_y}{\partial z}\right)=\frac{e}{c}\mathscr{H}_x,\\
\frac{i}{\hbar}(P_zP_x-P_xP_z)&=\frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_x}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial z}\right)=\frac{e}{c}\mathscr{H}_y,\\
\frac{i}{\hbar}(P_xP_y-P_yP_x)&=\frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)=\frac{e}{c}\mathscr{H}_z.
\end{aligned}\right\} \tag{5.9.11}$$

аңлатпаларын табамыз. Бул аңлатпалар тийкарында

$$\frac{dP_x}{dt}=\frac{e}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}+\frac{ic}{h}[\alpha_2(P_yP_x-P_xP_y)+\alpha_3(P_zP_x-P_xP_z)]-$$
$$-\frac{ie}{\hbar}(\varphi P_x-P_x\varphi)=e\left(\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}+\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)-e\alpha_2\mathscr{H}_z+e\alpha_3\mathscr{H}_y$$

ямаса

$$\frac{dP_x}{dt}=-e(\alpha_2\mathscr{H}_z-\alpha_3\mathscr{H}_y)-e\mathscr{E}_x \tag{5.9.12}$$

теңлигине ийе боламыз. Енди (5.9.10)-формула бойынша $\dot{x},\ \dot{y},\ \dot{z}$ шамаларын киргиземиз ҳәм $\frac{dP_y}{dt}$ пенен $\frac{dP_z}{dt}$ ушын жазылған теңлемелерди (5.9.12) ге байланыстырамыз. Нәтийжеде биз

$$\left.\begin{aligned} \frac{dP_x}{dt} &= -\frac{e}{c}(\dot{y}\mathcal{H}_z - \dot{z}\mathcal{H}_y) - e\mathcal{E}_x = F_x, \\ \frac{dP_y}{dt} &= -\frac{e}{c}(\dot{z}\mathcal{H}_x - \dot{x}\mathcal{H}_z) - e\mathcal{E}_y = F_y, \\ \frac{dP_z}{dt} &= -\frac{e}{c}(\dot{x}\mathcal{H}_y - \dot{y}\mathcal{H}_x) - e\mathcal{E}_z = F_z. \end{aligned}\right\} \quad (5.9.13)$$

теңлемелер системасын аламыз. Бул теңлемелер 5-2 параграфтағы (5.2.2)-классикалық теңлемелерге дәл сәйкес келеди.

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

Енди улыўмаласқан Паули операторларын көрсететуғын σ_x, σ_y, σ_z операторларынан ўақыт бойынша туўынды аламыз. Бул туўындыларды есаплаў ушын 5-9 параграфтағы (5.9.3)-энергия операторындағы α_k матрицаларын 5-4 параграфтағы (5.4.5)- ҳәм (5.4.10)-формулалар бойынша ρ ҳәм σ арқалы аңлатып былайынша жазыўға болады

$$H = c\rho_a(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z) + mc^2\rho_c - e\Phi. \quad (5.10.1)$$

σ операторының ρ операторы менен коммутацияланатуғынлығын еске алып 5-9 параграфтағы (5.9.9)-улыўмалық формула бойынша ўақыт бойынша туўынды ушын

$$\frac{d\sigma_x}{dt} = \frac{ic\rho_a}{\hbar}[(\sigma_y\sigma_x - \sigma_x\sigma_y)P_y + (\sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z)P_z].$$

Буннан 5-4 параграфтағы σ матрицасының (5.4.6)-қәсийетиниң тийкарында

$$\frac{d\sigma_x}{dt} = \frac{2c}{\hbar}\rho_a(\sigma_z P_y - \sigma_y P_z) \quad (5.10.2)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпаны ҳәм усы аңлатпаға сәйкес келетуғын еки аңлатпаны 5-4 параграфтағы (5.4.10)-аңлатпалар (бул аңлатпаларда α_k матрицалары ρ ҳәм σ лар арқалы аңлатылған) 5-9 параграфтағы қозғалыс теңлемелери тийкарында

$$\left.\begin{aligned} \frac{\hbar}{2}\frac{d\sigma_x}{dt} &= -\dot{y}P_z + \dot{z}P_y, \\ \frac{\hbar}{2}\frac{d\sigma_y}{dt} &= -\dot{z}P_x + \dot{x}P_z, \\ \frac{\hbar}{2}\frac{d\sigma_z}{dt} &= -\dot{x}P_y + \dot{y}P_x. \end{aligned}\right\} \quad (5.10.3)$$

түринде жазамыз.

Классикалық механикада P_x, P_y, P_z шамалары $\dot{x}$, $\dot{y}$, $\dot{z}$ шамаларына пропорционал. (5.10.3)-теңлемелердиң оң тәреплери нолге тең. Соның менен бирге классикалық механикаға өтиў ħ = 0 шәрти бойынша әмелге асырылатуғын болғанлықтан (5.10.3)-теңлемелердиң шеп тәреплери де нолге тең болыўы керек.

(5.10.3)-теңлемелердиң оң бөлимлериндеги көбейтиўшилердиң тәртибиниң әҳмийетиниң жоқ екенлигин аңғарамыз.

(5.10.3)-теңлемелердиң биринши теңлемесиниң оң бөлимин былайынша жазыў мүмкин:

$$-\dot{y}P_z + \dot{z}P_y = -\frac{d}{dt}(yP_z - zP_y) + y\frac{dP_z}{dt} - z\frac{dP_y}{dt}.$$

Егер $\dot{P}_y$ ҳәм $\dot{P}_z$ шамаларын 5-9 параграфтағы (5.9.13)-қозғалыс теңлемесиндеги олардың аңлатпалары менен алмастырсақ, онда (5.10.3)-теңлемелер мынаны береди:

$$\frac{d}{dt}\left(yP_z - zP_y + \frac{\hbar}{2}\sigma_x\right) = yF_z - zF_y \qquad (5.10.4)$$

Тап усындай жоллар менен

$$\left.\begin{aligned} \frac{d}{dt}\left(zP_x - xP_z + \frac{\hbar}{2}\sigma_y\right) &= zF_x - xF_z, \\ \frac{d}{dt}\left(xP_y - yP_x + \frac{\hbar}{2}\sigma_z\right) &= xF_y - yF_x \end{aligned}\right\} \qquad (5.10.4^*)$$

аңлатпаларын да аламыз.

Бул теңлемелерди классикалық механиканың нызамына аналог сыпатында түсиндириў мүмкин. Бул нызам бойынша қозғалыс муғдарының моментинен (импульс моментинен) ўақыт бойынша алынған туўынды тәсир ететуғын күшлердиң моментине тең. Бул жерде қозғалыс муғдарының моменти (импульс моменти) мынадай түрге ийе:

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{M}_x &= yP_z - zP_y + \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \\ \mathcal{M}_y &= zP_x - xP_z + \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \\ \mathcal{M}_z &= xP_y - yP_x + \frac{\hbar}{2}\sigma_z. \end{aligned}\right\} \qquad (5.10.5)$$

Егер вектор-потенциалды нолге тең деп есапласақ (демек $P_x = p_x$, $P_y = p_y$, $P_z = p_z$ теңликлери орынланады) ҳәм σ_x, σ_y, σ_z операторларын Паулидиң еки қатарлы матрицалары түринде жазсақ, онда бул жағдай Паули теориясын үйренгенимизде алынған нәтийжелердиң улыўмаластырылыўы болып табылады.

$$P = \sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z \qquad (5.10.6)$$

операторының сәйкес улыўмаластырылыўын қараймыз (бул аператорды Паули теориясын баянлағанда үйрендик). (5.10.1)-энергия операторына сәйкес келиўши P операторынан ўақыт бойынша туўынды аламыз. Энергия операторын P арқалы былайынша аңлатамыз:

$$H = c\rho_a P + mc^2\rho_c - e\Phi. \qquad (5.10.7)$$

Бул жерде энергия операторында P менен коммутацияланбайтуғын бирден бир ағзаның скаляр потенциал екенлиги көринип тур. Сонлықтан

$$\frac{dP}{dt}=\frac{\partial P}{\partial t}+\frac{ie}{\hbar}(P\Phi-\Phi P)=$$
$$=\frac{e}{c}\left(\sigma_x\frac{\partial A_x}{\partial t}+\sigma_y\frac{\partial A_y}{\partial t}+\sigma_z\frac{\partial A_z}{\partial t}\right)+e\left(\sigma_x\frac{\partial\Phi}{\partial x}+\sigma_y\frac{\partial\Phi}{\partial y}+\sigma_z\frac{\partial\Phi}{\partial z}\right)$$

ямаса

$$\frac{dP}{dt}=-e(\sigma_x\mathscr{E}_x+\sigma_y\mathscr{E}_y+\sigma_z\mathscr{E}_z). \tag{5.10.8}$$

Солай етип P дан ўақыт бойынша алынған туўынды электро майданының спин векторы σ ға көбеймесине туўры пропорционал екен ҳәм электр майданы нолге тең болғанда P қозғалыс интегралы болып табылады. P операторы ушын тап усындай қозғалыс теңлемеси Паули теориясында да алынған болар еди. Бул теорияда оператор энергия операторына сызықлы емес ал квадратлық болып киреди.

Паули теориясында биз

$$\mathscr{M}=\sigma_x m_x+\sigma_y m_y+\sigma_z m_z+\hbar \tag{5.10.9}$$

операторы менен ушырасқан едик. Биз сол жерде бул оператордың P операторы менен коммутацияланатуғынлығын көрсеткен едик. Сонлықтан Дирак теориясында $\mathscr{M}$ операторы ҳәтте еркин электрон ушын да қозғалыс интегралы бола алмайды. Бирақ ρ_c матрицасы H ушын жазылған (5.10.7)-аңлатпаның биринши ағзасына киретуғын ρ_a матрицасы менен антикоммутацияланатуғын ҳәм басқа барлық ағзалар менен коммутацияланатуғын болғанлықтан майдан болмаған жағдайда $\mathscr{M}_D=\rho_c\mathscr{M}$ операторы H операторының барлық ағзалары менен коммутацияланады ҳәм сонлықтан қозғалыс теңлемелериниң интегралы бола алады.

Майдан болмаған жағдайда $\mathscr{M}$ операторы мына түрде жазылады

$$\mathscr{M}=\sigma_x\mathscr{M}_x+\sigma_y\mathscr{M}_y+\sigma_z\mathscr{M}_z-\frac{\hbar}{2}. \tag{5.10.10}$$

Бул аңлатпада $\mathscr{M}_x, \mathscr{M}_y, \mathscr{M}_z$ шамалары (5.10.5)-аңлатпадағы мәнислерге ийе. $\mathscr{M}$ операторы ҳаққында гәп еткенде (5.10.5)-формулаға кириўши қозғалыс муғдарының операторлары (импульс операторлары) P_x, P_y, P_z лер вектор-потенциалға ийе болса да (5.10.10)-аңлатпаны түсинемиз. Бул (улыўмалық) жағдайда $\mathscr{M}_D=\rho_c\mathscr{M}$ операторының ўақыт бойынша алынған толық туўындысы ушын аңлатпа дүземиз. Биз мынаған ийе боламыз:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathscr{M}_D}{dt}&=\frac{d}{dt}(\rho_c\mathscr{M})=\\&=-e\rho_c[\sigma_x(y\mathscr{E}_z-z\mathscr{E}_y)+\sigma_y(z\mathscr{E}_x-x\mathscr{E}_z)+\sigma_z(x\mathscr{E}_y-y\mathscr{E}_x)]+\\&+e\rho_b[\sigma_x(y\mathscr{H}_z-z\mathscr{H}_y)+\sigma_y(z\mathscr{H}_x-x\mathscr{H}_z)+\sigma_z(x\mathscr{H}_y-y\mathscr{H}_x)].\end{aligned} \tag{5.10.11}$$

Бул аңлатпаның оң тәрепи тек ғана майдан болмаған жағдайда нолге айланып қоймайды, ал магнит майданы нолге, ал электр майданы радиус-вектор бағытында бағытланған жағдайда да (орайлық майдан) нолге тең болады (бул көп физикалық мәселелерди шешкенде үлкен әҳмийетке ийе). Орайлық симметрияға ийе майдандағы электрон ҳаққындағы мәселени биз кейинирек келеси бапта қараймыз.

5-11. Электронның кинетикалық энергиясы

Егер электронның толық энергиясы операторы ушын жазылған 5-9 параграфтағы (5.9.3)-аңлатпадан ҳәм (5.10.1)-аңлатпадан потенциал энергияға ийе ағзаны алып тасласақ, онда

$$T = c(\alpha_1 P_x + \alpha_2 P_y + \alpha_3 P_z) + mc^2\alpha_4 \tag{5.11.1}$$

ямаса

$$T = c\rho_a(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z) + mc^2\rho_c \tag{5.11.2}$$

операторын аламыз. Бул аңлатпалардағы T шамасын кинетикалық энергия ушын оператор деп түсинемиз. Бул оператордың классикалық аналогы былайынша жазылады:

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = c\sqrt{m^2c^2 + p^2}. \tag{5.11.3}$$

Бул аңлатпада v арқалы электронның тезлиги, ал p арқалы қозғалыс муғдары (импульси) белгиленген. Бундай түсиндириў еки себепке байланыслы тастыйықланады: бириншиден T шамасынан ўақыт бойынша алынған туўындының классикалық ҳәм квантлық аңлатпалары арасындағы аналогиядан, екиншиден T операторының меншикли мәнисиниң абсолют шамасы бойынша mc^2 шамасынан үлкенлигинде. Егер бизлер классикалық шамалар менен оператордың өзлерин салыстырмай, ал бул оператор ушын дүзилген Гейзенберг матрицасының орташаланған мәнисин қойсақ, онда аналогия жүдә жақын болады.

Ең дәслеп T операторынан ўақыт бойынша туўынды аламыз. Биз улыўмалық формула бойынша мынаған ийе боламыз:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(HT - TH) \tag{5.11.4}$$

ҳәм соның менен бирге

$$H = T - e\Phi. \tag{5.11.5}$$

Бирақ T операторы ўақыттан анық тек P_x, P_y, P_z операторларына кириўши вектор-потенциал арқалы ғана байланысқан. Екинши тәрептен H операторындағы T менен коммутацияланатуғын бирден бир ағза $e\Phi$ болып табылады. Сонлықтан

$$\frac{dT}{dt} = e\left(\alpha_1\frac{\partial A_x}{\partial t} + \alpha_2\frac{\partial A_y}{\partial t} + \alpha_3\frac{\partial A_z}{\partial t}\right) + ec\left(\alpha_1\frac{\partial \Phi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial \Phi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial \Phi}{\partial z}\right) \tag{5.11.7}$$

ямаса

$$\frac{dT}{dt} = -ec(\alpha_1\mathscr{E}_x + \alpha_2\mathscr{E}_y + \alpha_3\mathscr{E}_z) \tag{5.11.6*}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бирақ 5-9 параграфта биз Дирак теңлемесине сәйкес

$$\dot{x} = c\alpha_1, \quad \dot{y} = c\alpha_2, \quad \dot{z} = c\alpha_3 \tag{5.11.7}$$

екенлигин көрдик. Сонлықтан (5.11.6*)-аңлатпаны формаллық жақтан былайынша жазыўға болады:

$$\frac{dT}{dt} = -e\left(\dot{x}\mathscr{E}_x + \dot{y}\mathscr{E}_y + \dot{z}\mathscr{E}_z\right). \tag{5.11.8}$$

Формаллық жақтан бул аңлатпа (5.2.3)-теңлемеге сәйкес келеди.

T операторының меншикли мәнисиниң абсолют шамасы бойынша mc^2 шамасынан үлкен екенлигине исениў ушын оның квадратын дүземиз. (5.11.2)-формуланы ҳәм ρ матрицаларының қәсийетлерин пайдаланып

$$T^2 = m^2c^4 + c^2P^2 \tag{5.11.9}$$

аңлатпасын аламыз. Екинши ағза болса бизге Паули теориясынан белгили болған c^2 шамасына көбейтилген өзи өзине түйинлес

$$P = \sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z \tag{5.11.10}$$

операторының квадраты болып табылады. Егер биз оның меншикли мәнислерин P' арқалы белгилесек, онда T^2 операторының меншикли мәнислери

$$T'^2 = c^2\left(m^2c^2 + P'^2\right) \tag{5.11.11}$$

шамасына тең болады. Сонлықтан

$$T' = \pm c\sqrt{m^2c^2 + P'^2} \tag{5.11.12}$$

ҳәм усыған сәйкес

$$|T'| \geqslant mc^2. \tag{5.11.13}$$

(5.11.12)-формулада квадрат түбирге ийе аңлатпаның алдына қос белги қойдық. Ҳақыйқатында да кинетикалық энергия ушын теорияның еки белгиге де ийе мәнислерди береди. T операторының меншикли функциялары ушын теңлеме жазамыз

$$T\psi = c\rho_a\left(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z\right)\psi + mc^2\rho_c\psi = T'\psi. \tag{5.11.14}$$

Егер ψ функциясы бул теңлемениң T' меншикли мәниси ушын шешими болатуғын болса, онда

$$\psi^* = \rho_b\psi \tag{5.11.15}$$

функциясы $-T'$ ушын шешим болып табылады. Ҳақыйқатында да ρ_b матрицасы σ_x, σ_y, σ_z матрицалары менен коммутацияланатуғын ҳәм ρ_a ҳәм ρ_c матрицалары менен антикоммутацияланатуғын болғанлықтан биз мынаны жаза аламыз:

$$T\psi^* = T\rho_b\psi = -\rho_b T\psi = -\rho_b T'\psi = -T'\rho_b\psi,$$

яғный

$$T\psi^* = -T'\psi^* \tag{5.11.16}$$

екенлигине ийе боламыз. Бул аңлатпа бизиң тастыйықлаўымыздың дурыс екенлигин дәлиллейди.

VI бөлим

Релятивистлик квантлық механика

6-1. Скаляр релятивистлик Клейн-Гордон теңлемеси

а) Классикалық релятивистлик механика ҳәм Клейн-Гордон теңлемеси. Биз жоқарыда үйренген Шредингер теңлемеси v тезлиги жақтылықтың тезлиги c дан әдеўир киши болған бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплеў ушын қолланылады. Релятивистлик емес Шредингер теңлемеси Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант емес. Себеби ўақыт ҳәм кеңислик координаталары Шредингер теңлемесине бирдей ҳуқық пенен кирмейди: теңлеме ўақыт бойынша алынған биринши тәртипли туўындыны ҳәм координаталар бойынша алынған екинши тәртипли туўындыны өз ишине алады. Ал арнаўлы салыстырмалық теориясы болса теңлемеге ўақытлық ҳәм кеңисликлик координаталардың бирдей тийкарда кириўин талап етеди.

Релятивистлик толқын теңлемесин алыў ушын масса менен энергия арасындағы классикалық релятивистлик қатнастан пайдаланамыз. Бул қатнас еркин бөлекше ушын былайынша жазылады:

$$E = \sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}. \tag{6.1.1}$$

Буннан кейин релятивистлик емес Шредингер теңлемесин алғандағы усылдан, яғный энергия менен импульстиң орнына

$$E \to \mathrm{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}, \quad \boldsymbol{p} \to \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla \tag{6.1.2}$$

операторларын киргизгенде болар еди. Бирақ квадрат түбир белгиси астындағы операторлардың толқын функциясына қалай тәсир ететуғынлығы бизге мәлим емес. Сонлықтан классикалық толқын функциясынан релятивистлик толқын функциясына өтерде биринши гезекте биз квадрат түбирден қутылыўымыз керек. Буны еки жол менен әмелге асырыўға болады: теңликтиң еки тәрепин де квадратқа көтерип Клейн-Гордонның скаляр теңлемеси алыў ямаса матрицалардың жәрдеминде квадрат түбирден шығарыў ҳәм Дирактың спинорлық теңлемесин алыў. Дирактың бул спинорлық теңлемеси релятивистлик эффектлерди де есапқа алады (Клейн-Гордон теңлемеси сыяқлы), спинлик эффектлерди де есапқа алады.

Бул параграфта биз биринши усылды қарап шығамыз (бул усыл Клейн, Гордон ҳәм Фок тәрепинен раўажландырылған). (1)-теңлемениң еки тәрепин де квадратқа көтерип биз

$$E^2 - c^2p^2 - m_0^2c^4 = 0 \tag{6.1.3}$$

теңлемесине ийе боламыз.

Бул теңлемеге (2)-аңлатпадан операторлардың мәнислерин қоятуғын болсақ биз еркин бөлекше ушын Клейн-Гордон теңлемесин аламыз[3]:

---

[3] (4)-теңлемеде ψ толқын функц иясы тек *r* радиус-векторынан ғана ғәрезли емес, ал ўақыт *t* дан да ғәрезли. Бирақ оқыўшы толқын функциясының *t* дан ғәрезли екенлигин өзи түсиниўи керек (мысалы

$$\left(c^2\hbar^2\nabla^2 - \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2} - m_0^2c^4\right)\psi = 0. \qquad (6.1.4)$$

Электромагнит майданы қатнасатуғын жағдайда (6.1.2)-аңлатпаның орнына төмендегидей улыўмаласқан операторларды қойыў керек болады[4]:

$$E \to \mathrm{F} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi,$$
$$p \to \mathbf{P} = \frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}. \qquad (6.1.5)$$

Бундай жағдайда майдан бар болған жағдай ушын релятивистлик теңлемени аламыз

$$\left[\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi\right)^2 - c^2\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - m_0^2c^4\right]\psi = 0. \qquad (6.1.6)$$

(6)-релятивистлик толқын теңлемеси Лоренц түрлендириўлерина қарата инвариант. Себеби бул теңлемеге ўақыт та, кеңисликлик координаталар да теңдей тийкарда киреди ҳәм бул (6)-теңлемени релятивитлик жақтан инвариант формада жазыў мүмкин.

$$\left(\mathrm{P}_t^2 - \mathbf{P}^2 - m_0^2c^2\right)\psi = 0.$$

Бул аңлатпада

$$\mathrm{P}_t = \frac{\mathrm{F}}{c}.$$

б) Зарядтың ҳәм тоқтың тығызлығы. Зарядтың ҳәм тоқтың тығызлығы ушын аңлатпаны электромагнит майданлары болмаған жағдай ушын табамыз ($\Phi = \boldsymbol{A} = 0$).

Шредингер теориясындағыдай жуўмақларымыздың тийкарына үзликсизлик теңлемесин қоямыз

$$\operatorname{div} \boldsymbol{j} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0. \qquad (6.1.7)$$

Бул теңлеме релятивистлик инвариант формаға ийе болады. (6.1.4)-теңлемениң шеп тәрепин ψ^* функциясына, ал комплексли-түйинлес теңлемени (бул жағдайда сол теңлемедеги ψ функциясы ψ^* функциясы менен алмастырылады) ψ ге көбейтип, буннан кейин биринен бирин алып төмендегидей аңлатпаға ийе боламыз:

$$\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* - \frac{1}{c^2}\left(\psi^*\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi - \psi\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi^*\right) = 0. \qquad (6.1.8)$$

Соңғы теңликти

теңлемеде ўақыт бойынша туўынды тур). Сонлықтан буннан былай ψ менен t арасындағы байланысты тек бул байланыс анық көринип турмаған жағдайда көрсетип өтемиз.

[4] Классикалық жағдайда майдан бар болған жағдайда (1)-аңлатпаның орнына табамыз:

$$E = \sqrt{c^2P^2 + m_0^2c^4} \text{ ямаса } F = \sqrt{c^2\boldsymbol{P}^2 + m_0^2c^4}.$$

Бул жағдай (5)-оператордың киргизилиўине эквивалент.

$$\operatorname{div}\{\psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi\} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left\{\psi^* \frac{\partial}{\partial t}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right\} = 0 \qquad (6.1.9)$$

түрине түрлендириў мүмкин.

Енди заряд пенен тоқтың тығызлықларын сәйкес

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2m_0c^2}\left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right)\psi\right], \qquad (6.1.10)$$

$$j = \frac{e\hbar}{2im_0}\left[\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*)\psi\right]. \qquad (6.1.11)$$

аңлатпаларының жәрдеминде анықлап олардың (6.1.7)- үзликсизлик теңлемесин қанаатландыратуғынлығын ҳәм усының менен бирге төрт өлшемли

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{2m_0 i}\left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} - \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu}\right)\psi\right] \qquad (6.1.12)$$

векторын пайда ететуғынлығын аңғарамыз. Бул аңлатпада

$$x_4 = ict, \quad j_4 = ic\rho. \qquad (6.1.13)$$

Тоқтың тығызлығы ушын (6.1.11)-формула релятивистлик емес

$$j = \frac{i\hbar e}{2m_0}(\psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi)$$

формула менен бирдей болады екен. Зарядтың тығызлығы ушын жазылған аңлатпа $v \ll c$ болғанда релятивистлик емес $\rho = e\psi^*\psi$ аңлатпасына өтеди. Ҳақыйқатында да $i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to E$ алмастырыўын пайдаланып [(6.1.4)-формулаға қараңыз] (6.1.10)-аңлатпаның жәрдеминде зарядтың тығызлығы ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз

$$\rho = \frac{eE}{m_0c^2}\psi^*\psi. \qquad (6.1.14)$$

Бул формула болса $E \approx m_0c^2$ релятивистлик жақынласыўында әдеттеги $\rho = e\psi^*\psi$ формуласына өтеди. Бирақ релятивистлик теорияда E ниң терис мәнислерине ийе екинши шешимның болыўы мүмкин $(E < 0)$. Бундай жағдайда ρ тығызлығы ушын е ниң белгисине қарама-қарсы белгини қоямыз.

Солай етип релятивистлик теңлеме принципинде тек терис белгиге ийе зарядқа ийе емес, ал оң белгиге ийе зарядланған бөлекшелерди де тәрийиплей алады екен (мысалы зарядланған пи-мезонлар ушын бул теңлемени қолланыўға болады).

Бөлекшелердиң тығызлығы түсиниги болса (зарядтың тығызлығынан басқа)

$$\rho_0 = \frac{\rho}{e} = \frac{i\hbar}{2m_0c^2}\left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi\right] \qquad (6.1.15)$$

улыўма жағдайда өзиниң мәнисин жоғалтады. Себеби бул аңлатпа оң анық шама болмайды ҳәм бул жағдай оның релятивистлик емес теориядағы аңлатпа болған

$$\rho_0 = \psi^*\psi \qquad (6.1.16)$$

аңлатпасынан тийкарғы айырмасы болып табылады.

в) Водород тәризли атомның релятивистлик теориясы (спинди есапқа алмаған жағдай). Бул мәселени (6.1.6)-толқын теңлемесиниң жәрдеминде шешиўимиз керек. Бул теңлемеде

$$\boldsymbol{A}=0, \quad e\Phi = V = -\frac{Ze_0^2}{r} \tag{6.1.17}$$

Бундай жағдайда төмендегидей теңлемеге ийе боламыз:

$$\nabla^2\psi + \frac{1}{c^2\hbar^2}\left\{(E-V)^2 - m_0^2c^4\right\}\psi = 0. \tag{6.1.18}$$

Соңғы теңлемеде потенциал энергия ўақыттан ғәрезсиз болғанлықтан стационар жағдайға өтиўге болады. Оның ушын улыўма энергиядан (улыўма $E+m_0c^2>0$ энергияны биз оң шама деп есаплаймыз) бөлекшениң меншикли энергиясы болған m_0c^2 энергиясын айырып аламыз:

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E+m_0c^2)t\right]. \tag{6.1.19}$$

Буннан кейин энергия операторы болған

$$\mathrm{E}\psi(\boldsymbol{r}, t) = (E+m_0c^2)\psi(\boldsymbol{r})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E+m_0c^2)t\right] \tag{6.1.20}$$

операторының тәсирин есапқа алып (6.1.18)-теңлемени

$$\nabla^2\psi + \frac{1}{c^2\hbar^2}\left[\left(E+m_0c^2+\frac{Ze_0^2}{r}\right)^2 - m_0^2c^4\right]\psi = 0 \tag{6.1.21}$$

түрине алып келемиз.

Шредингер теориясындағыдай соңғы теңлемениң шешимин

$$\psi = R(r)\,Y_l^m(\vartheta, \varphi) \tag{6.1.22}$$

формасында излеймиз. Бундай жағдайда радиаллық бөлим ушын

$$\left(\nabla_r^2 - A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1)-\alpha^2Z^2}{r^2}\right)R = 0 \tag{6.1.23}$$

теңлемесин аламыз. Бул жерде $\alpha = \frac{e_0^2}{c\hbar} \simeq \frac{1}{137}$ шамасы бирлиги жоқ шама болып табылады ҳәм оны жуқа структура турақлысы деп атаймыз.

$$A = \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\left[1-\left(1+\frac{E}{m_0c^2}\right)^2\right], \qquad B = \frac{m_0Ze_0^2}{\hbar^2}\left[1+\frac{E}{m_0c^2}\right]. \tag{6.1.24}$$

$c^2 \to \infty$ шегинде соңғы аңлатпа релятивистлик емес теорияның сәйкес аңлатпасына дәл өтеди.

Релятивистлик эффектлерди есапқа алыў менен A ҳәм B турақлыларының мәнислериниң дәллигин арттырыў релятивистлик толқын теңлемесиниң шешиминиң характерине қандай да бир тәсир жасай алмайды (Шердингер теңлемесиниң шешимине салыстырғанда). (6.1.23)-теңлемеде қосымша $\frac{Z^2\alpha^2}{r^2}$ қосымша ағзасының пайда болыўын тартысыўға сәйкес келетуғын қосымша релятивистлик потенциал энергиясын киргизилиўи сыпатында қараўға болады. Қашықлыққа кери пропорционал бул потенциал энергия айырым жағдайларда шешимниң характерин өзгерте алады. Бул ҳаққында кейинирек гәп етемиз.

Ең дәслеп $r \to 0$ шегиндеги асимптотикалық R_0 шешимин изертлеймиз.

Бул жағдайда (6.1.23)-теңлеме мынадай түрге ийе болады:

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(rR_0)}{dr^2} - \frac{l(l+1) - Z^2\alpha^2}{r^2}R_0 = 0. \qquad (6.1.25)$$

Бул теңлемениң шешимин

$$R_0 = Cr^s$$

түринде излеймиз. Бундай жағдайда s ти анықлаў ушын шешими

$$s_{1,2} = -{}^1/_2 \pm \sqrt{(l + {}^1/_2)^2 - Z^2\alpha^2} \qquad (6.1.26)$$

түриндеги

$$s(s+1) - l(l+1) + Z^2\alpha^2 = 0 \qquad (6.1.27)$$

теңлемесин шешемиз. Бул жағдайда

$$R_0 = C_1 r^{s_1} + C_2 r^{s_2}. \qquad (6.1.28)$$

Егер

$$Z\alpha < {}^1/_2$$

теңсизлиги орынланатуғын болса еки s_1 ҳәм s_2 түбири де $l = 0, 1, 2, \ldots$ шамасының қәлеген мәнисинде ҳақыйқый түбирге ийе болады. Бул жағдайда биз rR_0 шамасы нолге тарқалмайтуғын R_0 шешими менен шекленсек болады (яғный бул жағдайда $C_2 = 0$ шәрти орынланады). Усының менен бирге $E < 0$ ($A > 0$ теңсизлиги орынланғанда) $r \to \infty$ шегинде толқын функциясы ушын аңлатпада экспоненциаллық түрде кемейетуғын шешим менен шеклениўге болады.

Еки тәрептен де кемейетуғын шешимлер менен шеклениў энергияның спектри ушын Шредингер теориясында алынғандай аңлатпаны береди (бул жағдайда $\frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + l + 1 = n$ теңлемесиндеги l ди s_1 шамасына алмастырыў керек). Бундай жағдайда меншикли мәнислерди анықлаў ушын

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + {}^1/_2 + \sqrt{(l + {}^1/_2)^2 - Z^2\alpha^2} \qquad (6.1.29)$$

теңлемесине ийе боламыз. Бул теңлемеге A ҳәм B турақлыларының (6.1.24)-аңлатпа бойынша алынған мәнислерин қойып ($n = n_r + l + 1$)

$$E_{nl} = m_0c^2\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{(n_r + {}^1/_2 + \sqrt{(l + {}^1/_2)^2 - Z^2\alpha^2})^2}\right]^{-{}^1/_2} - m_0c^2 \qquad (6.1.30)$$

формуласын аламыз. Бул аңлатпаны $Z^2\alpha^2$ бойынша қатарға жайып ҳәм нолге айланбайтуғын дәслепки еки ағзасын қалдырып энергия спектрин табамыз:

$$E_{nl} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2}\left(\frac{n}{l+{}^1/_2} - {}^3/_4\right)\right]. \qquad (6.1.31)$$

Биринши ағза релятвистлик емес теорияның сәйкес аңлатпасына сәйкес келеди; $\alpha \approx 1/137$ жуқа структура турақлысының квадратына туўры пропорционал болған екинши ағза релятивистлик дүзетиўлерди береди.

Водород атомы (Z = 1) ушын релятивистлик дүзетиўлерди есапқа алыўдың қызықлы тәрепи l бойынша айныўдың алып тасланыўында. Усының себебинен n ниң берилген мәнисиндеги қәддилер (α^2 шамасының киши екенлигине байланыслы) бир бирине жақын жайласқан n дана қәддиге ажыралады. Себеби l квантлық сан n дана мәниске ийе болады (l = 0, 1, 2, ..., n - 1).

Эксперимент пенен салыстырыў ушын Бальмер сериясы ушын дублетлик бөлиниўди (дублетное расщепление) есаплаў мүмкин ($n = 2$). Бундай бөлиниўдиң (спектр сызығының бөлиниўиниң) шамасы ушын (6.1.31)-формуланың жәрдеминде мынаны аламыз

$$\Delta\omega = \frac{E_{21} - E_{20}}{\hbar} = \frac{8}{3}\,\frac{R\alpha^2}{16}. \qquad (6.1.32)$$

Экспериментте алынған мағлыўматлар менен салыстырыў Бальмер сериясы ушын сызықларға бөлиниўдиң ҳақыйқый кеңлигиниң (6.1.32)-формула бойынша алынған шамадан үш еседей киши екенлигин көрсетеди. Бундай қарама-қарсылықтың себеби мынадан ибарат: водород атомының қәддилериниң жуқа структурасы тек ғана энергия менен тезлик арасындағы байланыс пенен байланыслы емес. Төменде көрсетилетуғындай бул жағдайда электронның спинин де, яғный меншикли механикалық моментин де есапқа алыў керек болады. Дәслеп Клейн-Гордон теңлемеси релятивистлик электронды тәрийиплеў ушын жарамлы деп есапланды. Бирақ бул спини нолге тең болған бөлекшениң қозғалыс теңлемеси болып табылады. Ал электронның спини болса ½ ге тең. Клейн-Гордон теңлемесин спинлери нолге тең пи-мезонлар ушын қолланыўға болатуғын болса керек. Мысалы, бул теңлеме дара жағдайда терис пи-мезонлардың ядроның дөгерегинде айланыўын тәрийиплей алады. Тап усындай пи-мезоатомлар экспериментте алынды.

Ескериў. Ең ақырында (6.1.27)-теңлемеде

$$Z\alpha > {}^1/_2 \qquad (6.1.33)$$

болған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда принципиаллық жақтан пүткиллей жаңа шешим алынады.

Ҳақыйқатында да l = 0 болғанда s_1 және s_2 түбирлериниң екеўи де комплексли болады ҳәм сонлықтан (6.1.28)-асимптотикалық шешими мына түрге ийе болады

$$R_0 = \frac{1}{\sqrt{r}}\left(C_1 r^{i\gamma} + C_2 r^{-i\gamma}\right). \qquad (6.1.34)$$

Бул аңлатпада $\gamma = \sqrt{Z^2\alpha^2 - {}^1/_4}$. Биз мәселемизди $C_2 = 0$ ҳәм $C_1 = 0$ шәрти менен шеклей алмаймыз. Себеби еки шешим де $r \to 0$ шегинде бирдей сингулярлыққа ийе болады.

Сонлықтан l = 0 болғанда үзликсиз спектр алынады. Бул дара жағдай бөлекшениң орайға "қулап түсиўине" мүмкиншилик береди.

6-2. **Дирак теңлемеси**

Алдыңғы параграфта релятивистлик квантлық механика дүзиўдиң тийкарында бөлекшениң энергиясы E, импульси $\boldsymbol{p}$ ҳәм массасы m_0 арасындағы белгили релятивистлик қатнастың ($E = \sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}$ формуласы) жататуғынлығы атап өтилди.

Квадрат түбирден қутылыў ушын теңликтиң еки тәрепин де квадратқа көтериў керек. Усындай усыл менен спинге ийе емес бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплейтуғын Клейн-Гордон теңлемеси алынған еди. Сонлықтан оны спини ½ ге тең (ħ бирлигинде) электронлар ушын қолланыўға болмайды.

Басқа жол 1928-жылы Дирак тәрепинен усынылды. Бул усыл (6.1.1)-қатнастың «линеаризациясына» алып келинеди. Бул спини ½ ге тең болған электрон ушын релятивистлик толқын теңлемесиниң ашылыўын тәмийинледи. Классикалық Максвелл-Лоренц электродинамикасынан соңғы электрон ҳаққындағы тәлиматтың раўажланыўының әҳмийетли басқышы Дирактың теңлемеси менен байланыслы екенлигин атап өтемиз. Шредингердиң релятивистлик емес квантлық механика менен Паули теңлемеси Дирак теңлемесиниң базы бир жақынласыўлары болып табылады.

а) Энергия операторының «линеаризациясы». Энергия менен импульс арасындағы релятивистлик қатнасты «линеаризация» қылыў ушын, яғный төрт ағзалыдан квадрат түбир алыў ушын (6.1.1)-теңлемени былайынша жазамыз:

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2} = c\sum_{\mu=0}^{3} \alpha_\mu p_\mu. \qquad \text{(D.1)}$$

Бул аңлатпада

$$p_0 = m_0c, \quad p_1 = p_x, \quad p_2 = p_y, \quad p_3 = p_z. \qquad \text{(D.2)}$$

Бундай жағдайда биз мынаған ийе боламыз:

$$E^2 = c^2\sum_{\mu=0}^{3} p_\mu p_\mu = c^2(p^2 + m_0^2c^2). \qquad \text{(D.3)}$$

α_μ шамаларының қандай шәртлерди қанаатландыратуғынлығын табыў ушын (D.1) қатнасының еки тәрпин де квадратқа көтеремиз. Егер усындай жағдайда p_μ операторы менен $p_{\mu'}$ операторының орныларын алмастырып қойыўға болатуғын болса (яғный коммутацияланатуғын болса), онда мынадай аңлатпаны табамыз

$$E^2 = c^2\sum_{\mu}\sum_{\mu'} p_\mu p_{\mu'}\alpha_\mu\alpha_{\mu'} = \frac{c^2}{2}\sum_{\mu}\sum_{\mu'} p_\mu p_{\mu'}(\alpha_\mu\alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'}\alpha_\mu). \qquad \text{(D.4)}$$

Егер

$$\alpha_\mu\alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'}\alpha_\mu = 2\delta_{\mu\mu'} \qquad \text{(D.5)}$$

теңлиги орынланатуғын болса, онда (D.4) аңлатпасы (D.3)-аңлатпаға сәйкес келеди, яғный төрт α_μ шамасы бир бири менен антикоммутацияланатуғын

$$\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu = 0, \qquad \mu \neq \mu' \tag{D.6}$$

болса олардың ҳәр бириниң квадраты 1 ге тең болады

$$\alpha_\mu^2 = 1. \tag{D.7}$$

Тап усындай қәсийетлерге Паулидиң еки қатарлы матрицаларының да ийе екенлигин еске түсиремиз:

$$\sigma_1' = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2' = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{D.8}$$

ал атап айтқанда олардың барлығы да бир бири менен коммутацияланады және олардың ҳәр бириниң квадраты 1 ге тең.

Бирақ төрт ағзалыдан квадрат түбирди алыў ушын үш қатнас керек болады.

Бул қыйыншылықтан өтиў ушын Дирак төрт қатарлы σ_n ҳәм ρ_n матрицаларының жыйнағын алыўды усынды. Бул матрицалар еки қатарлы матрицалар менен

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} \sigma_n' & 0' \\ 0' & \sigma_n' \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, 3), \tag{D.9}$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0' & I' \\ I' & 0' \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0' & -iI' \\ iI' & 0' \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix} \tag{D.10}$$

қатнасларының жәрдеминде байланысқан. σ_n' арқалы Паули матрицалары белгиленген.

$$0' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{D.11}$$

Паули матрицалары қандай шәртлерди қанаатландыратуғын болса, бул төрт қатарлы матрицалар да тап сондай шәртлерди қанаатландырады:

$$\sigma_n^2 = \rho_n^2 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{D.12}$$

$$\sigma_1 \sigma_2 = -\sigma_2 \sigma_1 = i\sigma_3 \text{ ҳ.т.б.} \tag{D.13}$$

$$\rho_1 \rho_2 = -\rho_2 \rho_1 = i\rho_3 \text{ ҳ.т.б.} \tag{D.14}$$

Соңғы қатнасты биз былайынша жаза аламыз:

$$\sigma_n \sigma_{n'} + \sigma_{n'} \sigma_n = \rho_n \rho_{n'} + \rho_{n'} \rho_n = 2\delta_{nn'}. \tag{D.15}$$

Бул теңликлерге биз σ_n ҳәм $\rho_{n'}$ шамаларының коммутативлигин қосыўымыз керек:

$$\sigma_n \rho_{n'} = \rho_{n'} \sigma_n. \tag{D.16}$$

Бул коммутативликтиң ҳақыйқатында да орын алатуғынлығын (D.9)- ҳәм (D.10)-

аңлатпалар бойынша тиккелей есаплар жүргизиў жолы менен исениўге болады.

(D.1) аңлатпасындағы α_μ матрицасы сыпатында Дирак

$$\alpha_n = \rho_1\sigma_n = \begin{pmatrix} 0' & \sigma'_n \\ \sigma'_n & 0' \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, 3), \qquad (D.17)$$

$$\alpha_0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}$$

матрицаларын алыўды усынды. Бул матрицалар (D.15)- ҳәм (D.16)-аңлатпаларға сәйкес (D.15)-шәртти қанаатландырады. Ҳақыйқатында да

$$\alpha_1^2 = \rho_1^2\sigma_1^2 = I, \quad \alpha_0^2 = \rho_3^2 = 1, \qquad (D.18)$$

$$\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_2 = \rho_1^2(\sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_2) = 0,$$

$$\alpha_0\alpha_1 + \alpha_1\alpha_0 = \sigma_1(\rho_3\rho_1 + \rho_1\rho_3) = 0$$

ҳәм тағы басқалар.

Бул матрицаларды жазыў арқалы биз төмендегилерди табамыз:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (D.19)$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \alpha_0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

b) Дирак теңлемеси. Тоқ пенен зарядтың тығызлығы. α_μ матрицаларының жәрдеминде линеаризация қылынған энрегия менен импульс арасындағы (D.1) қатнасына өтиў арқалы биз еркин бөлекше ушын Дирак теңлемесин аламыз

$$(\mathrm{E} - \mathrm{H})\psi = 0. \qquad (D.20)$$

Бул аңлатпада E ҳәм $\mathbf{p}$ операторлары әдеттегидей төмендеги аңлатпалар түринде жазылады

$$\mathrm{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} = -i\hbar\nabla,$$

ал гамильтониан H

$$\mathrm{H} = c(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}) + \rho_3 m_0 c^2 \qquad (D.21)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Электрон векторлық ҳәм скаляр потенциаллары $(\boldsymbol{A}, \Phi)$ болған электромагнит майданында қозғалатуғын болса да биз (D.20)- ҳәм (D.21)-теңлемелерден пайдалана беремиз. Бирақ бул жерде толқын механикасының улыўма қағыйдаларына сәйкес энергия менен импульс операторлары сыпатында олардың улыўмаластырылған мәнислери алыныўы керек [Еске түсиремиз, олардың улыўмаластырылған мәнислери

$$E \to \mathrm{F} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi,$$
$$p \to \mathbf{P} = \frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}.$$

схемасы бойынша табылатуғын еди (6.1.5)-аңлатпаға қараңыз]:

$$\mathrm{F} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \quad \mathbf{P} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}. \qquad (D.22)$$

Сонлықтан Дирак толқын теңлемесин электромагнит майданы бар болған жағдай ушын мына түрде жазамыз:

$$(\mathrm{F} - c(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{P}) - \rho_3 m_0 c^2)\psi = 0. \qquad (D.23)$$

α ҳәм ρ_3 матрицаларының қатар ҳәм бағаналар санына сәйкес ψ толқын функциясы төрт қураўшыға ийе болыўы керек. Толқын функциясының бул төрт қураўшыларды бир бағанадан туратуғын бир матрицаға бириктиремиз:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \qquad (D.24)$$

Бул матрицаға түйинлес функция сыпатында бир қатардан туратуғын эрмитлик-түйинлес матрицаны түсинемиз:

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*). \qquad (D.25)$$

Солай етип (D.23)-Дирактың матрицалық теңлемеси төмендегидей төрт теңлемеден туратуғын системаға эквивалент екен:

$$\begin{aligned}
(\mathrm{F} - m_0c^2)\psi_1 - c(\mathrm{P}_x - i\mathrm{P}_y)\psi_4 - c\mathrm{P}_z\psi_3 = 0,\\
(\mathrm{F} - m_0c^2)\psi_2 - c(\mathrm{P}_x + i\mathrm{P}_y)\psi_3 + c\mathrm{P}_z\psi_4 = 0,\\
(\mathrm{F} + m_0c^2)\psi_3 - c(\mathrm{P}_x - i\mathrm{P}_y)\psi_2 - c\mathrm{P}_z\psi_1 = 0,\\
(\mathrm{F} + m_0c^2)\psi_4 - c(\mathrm{P}_x + i\mathrm{P}_y)\psi_1 + c\mathrm{P}_z\psi_2 = 0.
\end{aligned} \qquad (D.26)$$

Комплексли түйинлес теңлеме де төмендегидей матрицалық теңлеме түринде көрсетилиўи мүмкин:

$$\psi^+(\mathrm{F} - c(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{P}) - \rho_3 m_0 c^2) = 0. \qquad (D.27)$$

Бул теңлемеде $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ ҳәм $-i\hbar\nabla$ операторларының өзиниң шеп тәрепинде турған толқын функциясына тәсирин әдеттегидей емес түсиниў керек:

$$-\psi^+ i\hbar\nabla \to i\hbar\nabla\psi^+, \quad \psi^+ i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^+. \qquad (D.28)$$

Солай етип (D.28)- ҳәм (D.27)-теңлемелерди былайынша жазыўға болады екен:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi\right)\psi - c\left(\alpha\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right)\psi - \rho_3 m_0 c^2\psi = 0, \qquad (D.29)$$

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\psi^{+}-c\left(\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi^{+}\boldsymbol{\alpha}\right)-m_0c^2\psi^{+}\rho_3=0. \quad \text{(D.30)}$$

(D.29)-теңлемени шеп тәрептен ψ^{+} ке, ал (D.30)-теңлемени оң тәрептен ψ ге көбейтсек ҳәм екинши теңлемени биринshiден алсақ төмендегидей қатнасты аламыз:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\psi^{+}\psi+\operatorname{div}\psi^{+}\boldsymbol{\alpha}\psi=0 \quad \text{(D.31)}$$

ҳәм бул теңлемени итималлықтың тығызлығы ρ ушын ҳәм тоқтың тығызлығы j ушын үзликсизлик теңлемеси сыпатында қараўымызға болады:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho+\operatorname{div}\boldsymbol{j}=0. \quad \text{(D.32)}$$

Бул жерде

$$\rho=e\psi^{+}\psi,\quad \boldsymbol{j}=ec\psi^{+}\boldsymbol{\alpha}\psi.$$

Соңғы формуладан $c\boldsymbol{\alpha}$ матрицасын тезлик операторы деп түсиндирсе болатуғынлығы көринип тур.

Егер (D.32) теңлигин ашсақ төмендегини табамыз:

$$\rho_0=\frac{\rho}{e}=\psi^{+}\psi=(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\psi_1^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2+\psi_3^*\psi_3+\psi_4^*\psi_4, \quad \text{(D.33)}$$

яғный ρ_0 бир элементтен туратуғын матрица болып табылады ҳәм сонлықтан ол әдеттеги функцияға сәйкес келеди.

Тап сол сыяқлы, төмендегидей аңлатпаның орын алатуғынлығын аңсат көрсетиўге болады

$$\frac{j_x}{ec}=\psi^{+}\alpha_1\psi=(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*)\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*)\begin{pmatrix}\psi_4\\ \psi_3\\ \psi_2\\ \psi_1\end{pmatrix}= \quad \text{(D.34)}$$
$$=\psi_1^*\psi_4+\psi_2^*\psi_3+\psi_3^*\psi_2+\psi_4^*\psi_1.$$

Бул жерде Клейн-Гордон теңлемесинен айырмаға ийе жағдай сыпатында ρ_0 тығызлығының оң мәнисте анықланатуғын шама екенлигин көремиз. Бирақ бул жағдайдың өзи Дирак теориясында ρ_0 шамасын бөлекшелердиң тығызлығы деп қараўға болмайтуғынлығын көрсетеди. Клейн-Гордон теориясындағыдай Дирак теориясында да электронлар менен бирге оң зарядқа ийе бөлекшелер болған позитронлардың бар болыўы мүмкин. Бул ҳаққында кейинирек гәп етиледи (Дирак теңлемесиниң толық шешимлерин изертлегенде).

в) Лоренц түрлендириўлериндеги ҳәм кеңисликтеги айландырыўлардағы толқын функциясының трансформациялық қәсийетлери. Арнаўлы салыстырмалық теориясы бойынша физикалық нызамлар координаталар системасын Лоренц бойынша сайлып алыўдан ғәрезли емес болыўы керек. Сонлықтан Максвелл теңлемелери сыяқлы Клейн-Гордон теңлемеси де, Дирак теңлемеси де Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант болыўы керек.

Дирак толқын функциясының трансформациялық қәсийетлерин изертлеймиз.

Бунның ушын ең дәслеп Лоренц түрлендириўлерин жазамыз

$$ct' = ct\,\mathrm{ch}\,\gamma - x\,\mathrm{sh}\,\gamma, \quad x' = x\,\mathrm{ch}\,\gamma - ct\,\mathrm{sh}\,\gamma, \quad y' = y, \quad z' = z. \tag{D.35}$$

Бул аңлатпада

$$\mathrm{ch}\,\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \mathrm{sh}\,\gamma = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Бул түрлендириўди қәлеген төрт өлшемли вектор, соның ишинде зарядтың тығызлығы да, тоқтың тығызлығы да қанаатландырады:

$$c\rho' = c\rho\,\mathrm{ch}\,\gamma - j_x\,\mathrm{sh}\,\gamma, \quad j'_x = j_x\,\mathrm{ch}\,\gamma - c\rho\,\mathrm{sh}\,\gamma, \quad j'_{y,z} = j_{y,z}.$$

Бул шамалардың анықламасынан келип шыққан ҳалда Дирак теориясы бойынша төмендегилерге ийе боламыз:

$$\begin{aligned} \psi'^+\psi' &= \psi^+(\mathrm{ch}\,\gamma - \alpha_1\,\mathrm{sh}\,\gamma)\,\psi = \psi^+ e^{-\gamma\alpha_1}\psi, \\ \psi'^+\alpha_1\psi' &= \psi^+(\alpha_1\,\mathrm{ch}\,\gamma - \mathrm{sh}\,\gamma)\,\psi = \psi^+\alpha_1 e^{-\gamma\alpha_1}\psi, \\ \psi'^+\alpha_{2,3}\psi' &= \psi^+\alpha_{2,3}\psi. \end{aligned} \tag{D.36}$$

Биз бул жерде $\alpha_1^{2n} = 1, \ \alpha_1^{2n+1} = \alpha_1$, ал n пүтин сан болғанлықтан

$$e^{-\gamma\alpha_1} = \mathrm{ch}\,\gamma\alpha_1 - \mathrm{sh}\,\gamma\alpha_1 = \mathrm{ch}\,\gamma - \alpha_1\,\mathrm{sh}\,\gamma$$

теңликлериниң орын алатуғынлығын инабатқа алдық.

Соңғы қатнасларды қанаатландырыў ушын биз

$$\begin{aligned} \psi' &= \left(\mathrm{ch}\,\frac{\gamma}{2} - \alpha_1\,\mathrm{sh}\,\frac{\gamma}{2}\right)\psi = e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1}\psi, \\ \psi'^+ &= \psi^+\left(\mathrm{ch}\,\frac{\gamma}{2} - \alpha_1\,\mathrm{sh}\,\frac{\gamma}{2}\right) = \psi^+ e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1} \end{aligned} \tag{D.37}$$

деп есаплаўымыз керек. Бундай жағдайда

$$\alpha_1 e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1} = e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1}\alpha_1, \quad \alpha_2 e^{-\frac{\gamma}{2}\alpha_1} = e^{\frac{\gamma}{2}\alpha_1}\alpha_2 \tag{D.38}$$

екенлигин есапқа алып (D.36)-қатнастың дурыслығын аңсат көрсетиўге болады. (D.37)-аңлатпадан толқын функцияларының вектор сыпатында емес (пүтин γ мүйешлери), тензор сыпатында да емес (еки еселенген γ муйешлери), түрлениўи $\gamma/2$ мүйеши менен характерленетуғын ярым векторы сыпатында түрленетуғынлығы көринип тур. (D.37)- нызам бойынша түрленетуғын шамалар *спинорлар* ямаса *ярым рангалы тензорлар* атамасын алды.

Жоқарыда келтирилгендей усыллар менен әдеттеги кеңисликтик түрлендириўлерде (мысалы z көшериниң дөгерегинде мүйешине бурғанда) спинордың

$$\psi' = e^{i\sigma_3\frac{\varphi}{2}}\psi, \quad \psi'^+ = \psi^+ e^{-i\sigma_3\frac{\varphi}{2}} \tag{D.39}$$

нызамы бойынша түрленетуғынлығын көрсетиўге болады. Соңғы аңлатпалар тоқ векторы ушын исленген түрлендириўлерден келип шығады:

$$j'_x = j_x \cos\varphi + j_y \sin\varphi,$$
$$j'_y = j_y \cos\varphi - j_x \sin\varphi, \qquad (D.40)$$
$$j'_z = j_z,$$

ал бул шамалардың Дирак теориясында былайынша көрсетилиўи мүмкин:

$$\psi'^{+}\alpha_1\psi' = \psi^{+}(\alpha_1\cos\varphi + \alpha_2\sin\varphi)\psi, \qquad (D.41)$$
$$\psi'^{+}\alpha_3\psi' = \psi^{+}\alpha_3\psi$$

ҳәм тағы басқалар. Бул аңлатпаға (D.39) дан ψ' тың мәнисин қойып ҳәм

$$\alpha_1 e^{i\sigma_3\frac{\varphi}{2}} = \alpha_1\left(\cos\frac{\varphi}{2} + i\sigma_3\sin\frac{\varphi}{2}\right) = \left(\cos\frac{\varphi}{2} - i\sigma_3\sin\frac{\varphi}{2}\right)\alpha_1 =$$
$$= e^{-i\sigma_3\frac{\varphi}{2}}\alpha_1, \quad \alpha_3 e^{i\sigma_3\frac{\varphi}{2}} = e^{i\sigma_3\frac{\varphi}{2}}\alpha_3$$

екенлигин есапқа алып (D.40) қатнасына келемиз.

6-3. Дирак электронының орайлық күшлер майданындағы қозғалысы

а) Қозғалыс муғдарының орбиталық, спинлик ҳәм толық моментлери. Ең дәслеп орайлық күшлер майданындағы қозғалыс муғдары моментиниң сақланыў нызамын изертлеймиз:

$$V = e\Phi(r). \qquad (6.3.1)$$

Шредингердиң релятивистлик емес теориясында бундай жағдайда қозғалыс муғдарының орбиталық моментиниң сақланатуғынлығы белгили

$$\mathbf{L} = [\boldsymbol{r}\mathbf{p}].$$

Бирақ электронның спини де есапқа алынатуғын Дирак теориясында қозғалыс муғдарының орбиталық моменти операторы гамильтониан менен коммутацияланбайды, яғный қозғалыс интегралы болып табылмайды. Ҳақыйқатында да гамильтонианды

$$\mathrm{H} = c\alpha_1\mathrm{p}_x + c\alpha_2\mathrm{p}_y + c\alpha_3\mathrm{p}_z + \rho_3 m_0 c^2 + V(r) \qquad (6.3.2)$$

түринде көрсетип $\mathrm{L}_z = (x\mathrm{p}_y - y\mathrm{p}_x)$ қураўшысының биринши еки ағзасы менен коммутацияланбайтуғынлығын көремиз:

$$\mathrm{HL}_z - \mathrm{L}_z\mathrm{H} = c\alpha_1\mathrm{p}_y(\mathrm{p}_x x - x\mathrm{p}_x) - c\alpha_2\mathrm{p}_x(\mathrm{p}_y y - y\mathrm{p}_y). \qquad (6.3.3)$$

Буннан кейин

$$(p_x x - x p_x) = (p_y y - y p_y) = \frac{\hbar}{i}$$

екенлигин есапқа алып

$$HL_z - L_z H = \frac{c\hbar}{i}(\alpha_1 p_y - \alpha_2 p_x) \neq 0 \qquad (6.3.3а)$$

аңлатпасын аламыз.

Спинге ийе бөлекшелердиң моментиниң сақланыўы нызамын табыў ушын

$$H\sigma_3 - \sigma_3 H = c p_x \rho_1 (\sigma_1\sigma_3 - \sigma_3\sigma_1) + c p_y \rho_1 (\sigma_2\sigma_3 - \sigma_3\sigma_2) = \\ = \frac{2c}{i}(\alpha_2 p_x - \alpha_1 p_y) \qquad (6.3.4)$$

аңлатпасын да пайдаланамыз.

Орбиталық $\mathbf{L}$ ҳәм спинлик

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\sigma \qquad (6.3.4а)$$

моментлердиң қосындысынан туратуғын қозғалыс муғдарының толық моменти ушын оператор

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \qquad (6.3.4)$$

түсинигин киргизип (6.3.3а) ҳәм (6.3.36) теңликлеринен қозғалыс муғдарының тек қураўшысының ғана (бул жағдайда J_z қураўшысының) гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын, яғный сақланыў нызамын қанаатландыратуғынлығын көриўге болады.

б) Момент операторлары ушын орын алмастырыў қатнаслары. Орбиталық моменттиң қураўшыларының бир бири менен коммутацияланбайтуғынлығы және

$$L_x L_y - L_y L_x = i\hbar L \qquad (6.3.5)$$

ҳәм тағы басқа да $(x \to y \to z \to x \ldots)$ орын алмастырыў қатнасларына бағынатуғынлығы мәлим .

Меншикли момент операторы (спин) Дирак матрицаларына пропорционал

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\sigma. \qquad (6.3.6)$$

Сонлықтан оның қураўшылары өз-ара коммутацияланбаўы керек. Паулидиң еки қатарлы матрицалары $\boldsymbol{\sigma}'$ ҳәм Дирактың төрт қатарлы матрицалары бирдей коммутацияланыў қағыйдаларына бағынатуғын болғанлықтан биз Дирак спини ушын Паули спини ушын табылғандай орын алмастырыў қатнасларын табамыз, яғный

$$S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z \qquad (6.3.6а)$$

ҳәм тағы басқалар.

Орбиталық ҳәм спин моментлериниң қураўшылары операторлар болып табылатуғын ҳәм бирдей болған орын алмастырыў қатнасларына бағынатуғын болса да олар бири бири менен коммутацияланады. Себеби бул қураўшыларды пайда ететуғын операторлар пүткиллей ҳәр қыйлы ҳәм ғәрезсиз характерлерге ийе (туўындылары ҳәм матрицалар).

Толық момент операторының қураўшылары ушын бул ескертиўлерди есапқа алып (19.5)- ҳәм (19.6а)-орын алмастырыўлары қатнасларына сәйкес орын алмастырыў қатнасларын аламыз

$$J_xJ_y - J_yJ_x = (L_x + S_x)(L_y + S_y) - (L_y + S_y)(L_x + S_x) = \\ = i\hbar(L_z + S_z).$$

Буннан төменги аңлатпаларды табамыз:

$$\begin{aligned} J_xJ_y - J_yJ_x &= i\hbar J_z, \\ J_yJ_z - J_zJ_y &= i\hbar J_x, \\ J_zJ_x - J_xJ_z &= i\hbar J_y. \end{aligned} \qquad (6.3.7)$$

Кейинги еки орын алмастырыў қатнаслары биринишиден $x \to y,\ y \to z,\ z \to x, \ldots$ цикллық орын алмастырыў жолы менен алынды.

Толық моменттиң квадраты операторы

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2(LS) \qquad (6.3.8)$$

үш ағзаға ийе. Биринши ағза

$$L^2 = -\hbar^2\nabla^2_{\vartheta,\varphi} \qquad (6.3.9)$$

Y_l^m шар функциясына тәсир еткенде оның меншикли мәнислери төмендегилерге тең болады:

$$L^2 \to \hbar^2 l(l+1), \qquad (6.3.9a)$$

яғный орбиталық момент l ге тең болған (ħ бирликлериндеги) жағдайлардағы ҳалларды тәрийиплейди.

Екинши ағза

$$S^2 = \frac{1}{4}\hbar^2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) = \frac{3}{4}\hbar^2 = s(s+1)\hbar^2 \qquad (6.3.10)$$

сан болып табылады ҳәм ħ бирликлериндеги спинди тәрийиплейди. Оның мәниси $s = {}^1/_2$.

Ең ақырында үшинши ағза

$$2(LS) = 2(L_xS_x + L_uS_u + L_zS_z) \qquad (6.3.10a)$$

спин-орбиталық байланыс деп аталатуғын байланысты характерлейди. L_z ҳәм S_z моментлериниң қураўшылары айырым түрде (6.3.9)- оператор менен де, (6.3.10)-оператор менен де коммутацияланбайтуғынлығын атап өтемиз.

Ҳақыйқатында да (6.3.5)- ҳәм (6.3.6а)-теңликлерди есапқа алған ҳалда

$$\mathrm{L}_z(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})\,\mathrm{L}_z = i\hbar(\mathrm{L}_y\mathrm{S}_x - \mathrm{L}_x\mathrm{S}_y),$$
$$\mathrm{S}_z(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})\,\mathrm{S}_z = i\hbar(\mathrm{L}_x\mathrm{S}_y - \mathrm{L}_y\mathrm{S}_x) \qquad (6.3.11)$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын аңсат көрсетиўге болады.

Буннан усы ағза менен тек толық моменттиң коммутацияланыўының кереклиги

$$(\mathrm{L}_z + \mathrm{S}_z)(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})(\mathrm{L}_z + \mathrm{S}_z) = 0, \qquad (6.3.12)$$

ал соның менен бирге толық моменттиң квадраты

$$\mathrm{J}_z\mathrm{J}^2 - \mathrm{J}^2\mathrm{J}_z = 0 \qquad (6.3.)$$

коммутацияланатуғынлығы көринип тур.

Жоқарыда айтылғанларға байланыслы қозғалыс муғдарының толық моменти сақланатуғын мәселелерде (мысалы орайлық күшлер майданындағы спинлик бөлекше) толық моменттиң квадраты ҳәм оның қураўшыларының қәлегени (мысалы z көшерине түсирилгени) улыўмалық меншикли функцияға ийе бола алады. Толық моменттиң еки қураўшысының бир ўақытта улыўмалық толқын функциясына ийе бола алмайтуғынлығын аңғарамыз. Себеби олар бир бири менен коммутацияланбайды [(6.3.7)-аңлатпаға қараңыз].

в) Моментлерди қосыў. Толық момент ушын сақланыў нызамын қанаатландыратуғын толқын функциясының мүйешлик бөлимин қараймыз. Толық момент орбиталық ҳәм спинлик моментлердиң қосындысына тең болғанлықтан бундай мәселе момнетлерди қосыўға байланыслы мәселе деп аталады

Әпиўайылық ушын Паули жақынласыўы менен шекленемиз. Бул жағдайда спин $\boldsymbol{\sigma}'$ еки қатарлы матрицалар жәрдеминде тәрийипленеди. Бул жағдайда шешимди еки қураўшыға ийе матрица түринде излеймиз

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \qquad (6.3.14)$$

ал бул матрицаның элементлери арасында қозғалыс муғдарының толық момнетиниң сақланыў нызамын есапқа алатуғын байланыстың орнатылыўы керек:

$$\mathrm{J}^2\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \left(\mathbf{L} + \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'\right)^2\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1)\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \qquad (6.3.15)$$
$$\mathrm{J}_z\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \left(\mathrm{L}_z + \frac{1}{2}\hbar\sigma_3'\right)\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar m_j\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}.$$

Бул аңлатпада $\mathbf{L} = [\boldsymbol{r}\mathbf{p}]$ арқалы орбиталық момент операторы, ал $\boldsymbol{\sigma}'$ арқалы Паулидиң еки қураўшыға ийе матрицалары белгиленген. (6.3.15)-теңлемелердиң шешимлерин

$$\Psi_1 = C_1 Y_l^{m'}, \quad \Psi_2 = C_2 Y_l^m \qquad (6.3.16)$$

түринде излеймиз[5]. Бул аңлатпада Y_l^m арқалы шар функциялары белгиленген. Бундай жағдайда

[5] m менен m' тың ҳәр қыйлы мәнислеринде тек орбиталық моменттиң квадраты ғана сақланады, бирақ оның z көшерине түсирилген проекциясы сақланбайды.

$$L^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l(l+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \tag{6.3.17}$$

екенлигин есапқа алып (6.3.15), (19.12) ҳәм (19.13) аңлатпаларына сәйкес

$$\frac{1}{\hbar}(\sigma' L) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = [j(j+1) - l(l+1) - {}^3/_4] \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \tag{19.18}$$

аңлатпасына ямаса

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\hbar}[(L_x - iL_y)\Psi_2 + L_z\Psi_1] = q\Psi_1, \\ &\frac{1}{\hbar}[(L_x + iL_y)\Psi_1 - L_z\Psi_2] = q\Psi_2 \end{aligned} \tag{6.3.18}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада

$$q = j(j+1) - l(l+1) - {}^3/_4. \tag{6.3.18a}$$

Буннан кейин

$$L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m$$

ҳәм

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar \sqrt{(l+1\pm m)(l\mp m)}\, Y_l^{m\pm 1}$$

аңлатпалардан пайдаланамыз. Нәтийжеде төмендигилерге ийе боламыз:

$$L_z Y_l^m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m = m\hbar Y_l^m, \tag{6.3.19}$$

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar \sqrt{(l+1\pm m)(l\mp m)}\, Y_l^{m\pm 1}. \tag{6.3.20}$$

Буннан, егер биз $m' = m - 1$ деп есапласақ (6.3.18)-аңлатпаданың оң ҳәм шеп тәреплериндеги шар функцияларын қысқарта алатуғынымыз көринип тур. Бундай жағдайда коэффициентлер арасындағы мынадай қатнасларды аламыз

$$\begin{aligned} &(q - m + 1) C_1 + \sqrt{(l+1-m)(l+m)}\, C_2 = 0, \\ &\sqrt{(l+1-m)(l+m)}\, C_1 + (q+m) C_2 = 0. \end{aligned} \tag{6.3.21}$$

Детерминанттың нолге тең болыў шәртинен шешимлердиң мүмкин болған еки типине сәйкес келетуғын q шамасының еки мәнисин табамыз[6]:

$$q = l, \quad j = l + \frac{1}{2}, \quad C_2 = -\sqrt{\frac{l-m+1}{l+m}}\, C_1, \tag{6.3.22}$$

$$q = -(l+1), \quad j = l - \frac{1}{2}, \quad C_2 = \sqrt{\frac{l+m}{l-m+1}}\, C_1. \tag{6.3.23}$$

[6] Усының менен бир қатарда *j* шамасының терис мәниске ийе болған жағдайдағы да шешим бар. Бул шешимди биз есапқа алмаймыз.

Моментерди қосқанда шар функциялары арасындағы қатнасты анықлайтуғын C_1 ҳәм C_2 коэффициентлерин Клебш — Гордан коэффициентлери деп атайды.

$C_1^2+C_2^2=1$ нормировка шәртин пайдаланып, $j=l+{}^1/_2,\ l=0, 1, \ldots$ болған жағдайда биринши типтеги шешимди былайынша жазамыз[7]:

$$\Psi^{(j=l+{}^1/_2)}=\begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l+m}{2l+1}}\,Y_l^{m-1} \\ -\sqrt{\dfrac{l+1-m}{2l+1}}\,Y_l^m \end{pmatrix}=Y_{l,m}^{(j=l+{}^1/_2)}. \tag{6.3.24}$$

$j=l-{}^1/_2,\ l=1,\ 2,\ \ldots$ болған жағдайда болса (шешимниң екинши типи) толқын функциясы мынаған тең:

$$\Psi^{(j=l-{}^1/_2)}=\begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l-m+1}{2l+1}}\,Y_l^{m-1} \\ \sqrt{\dfrac{l+m}{2l+1}}\,Y_l^m \end{pmatrix}=Y_{l,m}^{(j=l-{}^1/_2)}. \tag{6.3.25}$$

Бул аңлатпада $Y_{lm}^{(j)}$ арқалы шар спинорлары белгиленген. Олар ушын ортонормировка шәрти

$$\oint d\Omega Y_{l'm'}^{(j')+}Y_{lm}^{(j)}=\delta_{jj'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{6.3.26}$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада $j=l+{}^1/_2$ болған жағдай спинлик ҳәм орбиталық моментлер өз-ара параллель, ал $j=l-{}^1/_2$ болған жағдай спинлик ҳәр орбиталық моментлер өз-ара антипараллель болған жағдайға сәйкес келеди. Егер $Y_{lm}^{(j)+}$ шар спиноры бир қатарға ийе матрица болса ҳәм шар функцияларының ортонормировкаланғанлығын дыққатқа алсақ (6.3.26)-шәрт аңсат алынады. (6.3.24) ҳәм (6.3.25) шар спинорлары әдеттеги шар функцияларының спинорлық улыўмаластырылыўы болып табылады орайлық күшлер майданындағы ярым шешимниң мүйешлик бөлеги болып табылады.

Ψ функциясы ушын бул шешимлерди (6.3.4)-аңлатпаға қойсақ қозғалыс муғдарының толық моментиниң J_z проекциясының $J_z=\hbar m_j$ мәнислерин қабыл ететуғынлығын табамыз. Усының менен бирге m_j квантлық сан $m_j=m-{}^1/_2$ мәнислерине тең. (6.3.24)-аңлатпадан көринип турғанындай биринши тип шешимлери ушын $(j=l+{}^1/_2)$ m саны $-l$ $(m_j=-l-{}^1/_2=-j)$ ден $l+1$ $(m_j=l+{}^1/_2=j)$ шамасына шекем өзгереди. Тап сол сыяқлы (6.3.25)-аңлатпаға сәйкес екинши тип шешим ушын $(j=l-{}^1/_2)$ m саны $-l+1$ $(m_j=-j)$ шамасынан l шамасына $(m_j=j)$ шекем өзгереди[8]. Солай етип бизиң нәтийжелеримиз мыналарға алып келинеди: қозғалыс муғдарының толық моментиниң квадраты

$$J^2=\hbar^2 j(j+1),\quad j=\begin{cases} l\pm{}^1/_2, & l\neq 0, \\ {}^1/_2, & l=0 \end{cases} \tag{6.3.26a}$$

меншикли мәнислерине ийе, яғный орбиталық момент сыяқлы квантланады, бирақ бул жағдайда *ишки квантлық сан* деп аталатуғын j саны ярым пүтин мәнислерди

---

[7] Биз шар функциялары арасындағы байланыстың тек спин-орбиталық тәсирлесиў бар болған жағдайда ғана орын алатуғынлығын аңғарамыз.

[8] Бул шеклердиң орын алыўындағы себеп мынадан ибарат: $|m|>l$ шеклеринде Y_l^m шар функциясы нолге айланады.

қабыллайды[9]. Моменттиң z көшерине түсирилген проекциясының меншикли мәнислери де ярым пүтин квантлық санлар менен характерленеди:

$$J_z = \hbar m_j, \quad m_j = -j, \ldots, +j. \tag{6.3.27}$$

(6.3.8)-(6.3.10) қатнаслардан ҳәм (6.3.26а) квантланыў қағыйдасынан келип шыққан халда спектроскопияда әҳмийетли болған скаляр көбеймелердиң квантланыў формулаларын алыўға болады

$$(\mathbf{LS}) = \frac{1}{2}(\mathrm{J}^2 - \mathrm{L}^2 - \mathrm{S}^2) = \frac{\hbar^2}{2}\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\} \tag{6.3.28}$$

ҳәм

$$(\mathbf{JS}) = \frac{1}{2}(\mathrm{J}^2 - \mathrm{L}^2 + \mathrm{S}^2) = \frac{\hbar^2}{2}\{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)\}. \tag{6.3.29}$$

г) Спини бар бөлекшелердиң орайлық күшлер майданындағы қозғалысы Ротатор. Егер бизлер спинлик эффектлерди есапқа алып бөлекшениң орайлық күшлер майданындағы қозғалысын релятивистлик емес жақынласыўда изертлегимиз келсе, онда қозғалыс муғдарының орбиталық моменти сақланатуғын қатнасларды характерлейтуғын Y_l^m шар функцияларының орнына биз қозғалыс муғдарының толық моменти (орбиталық плюс спинлик) сақланатуғын ҳалларды характерлейтуғын $Y_{lm}^{(l)}$ шар спинорларын қолланыўымыз керек болады.

Релятивистлик емес жақынласыўларда шар спинорлары l квантлық санларның бирдей мәнисине ийе шар функцияларынан қуралатуғын болғанлықтан бундай жағдайда радиаллық бөлими ушын спинге ийе емес, релятивистлик емес бөлекшеге тийисли болған теңлемени аламыз, яғный

$$\nabla_r^2 R + \left(\frac{2m_0 E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R = 0. \tag{6.3.30}$$

Солай етип орайлық күшлер майданындағы электронлар ушын толқын функциялары

$$\Psi = R Y_{lm}^{(l)} \tag{6.3.31}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпадағы $Y_{lm}^{(l)}$ спиноры (6.3.24)- ямаса (6.3.25)-аңлатпаның жәрдеминде анықланады.

Дара жағдайда ротатор ушын биз $r = a = \mathrm{const}$ деп, ал толқын функциясының радиаллық бөлимин бирге тең $(R = 1)$ деп алыўымызға болады. Бундай жағдайда спинлик эффектлер ротатордың энергиясы ушын ҳеш қандай қосымша ағзаларды бермейди. Ал ротатордың энергиясы спинсиз бөлекше ушын келтирилип шығарылған аңлатпа менен анықланады, яғный

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 a^2}. \tag{6.3.32}$$

Ал толқын функциясына келетуғын болсақ, онда ол $Y_{lm}^{(l)}$ шар спиноры менен характерленеди. Сонлықтан бизлер ең дәслеп l, m_j ҳәм j квантлық санлар ушын

---

[9] Бул атама мәселениң тарийхы менен байланыслы: j саны спектроскопистлер тәрепинен спин ашылмастан бурын эмперикалық түрде киргизилген еди. Ал "ишки" деген термин сол ўақытлары анық емес болған бөлекшелердиң қандай да бир ишки қәсийетин сәўлелендирди.

таңлап алыў қағыйдасын (правило отбора) табыўымыз керек. Бул таңлап алыў қағыйдалары тек ғана ротатор ҳаққындағы мәселеде орын алып қоймай, орайлық күшлер майданында қозғалатуғын бөлекшеге тийисли қәлеген мәселеде, соның ишинде водород атомына арналған мәселеде де орын алыўы керек.

Спинге ийе емес бөлекшелер ушын табылған таңлап алыў қағыйдаларының орнына енди төмендегидей қағыйдаларды жазамыз:

$$\langle l'm'j' \,|q|\, lmj\rangle = \oint \left(Y^{(j')}_{l'm'}\right)^{+} qY^{(j)}_{lm}\, d\Omega, \tag{6.3.33}$$

ал кейинги формуладағы q шамасы үш мәниске ийе болады:

$$q = z = \cos\vartheta, \quad q = x \pm iy = \sin\vartheta e^{\pm i\varphi}. \tag{6.3.34}$$

Бул формулада әпиўайылық ушын ротатордың радиусын бирге тең деп аламыз: $a=1$.

Егер шар спинорларының орнына (6.3.24) ямаса (6.3.25) мәнислерин қойсақ, онда бул матрицалық элемент ушын төмендегини аламыз

$$\langle l'm'j' \,|\, q \,|\, lmj\rangle = \tag{6.3.35}$$
$$= D^{(l'l)} \oint \left(Y^{m'-1}_{l'}\right)^{*} qY^{m-1}_{l}\, d\Omega + C^{(l'l)} \oint \left(Y^{m'}_{l'}\right)^{*} qY^{m}_{l}\, d\Omega.$$

Бул жерде (6.3.35)-аңлатпадағы еки интегралдың да

$$\langle l'm' \,|\, z \,|\, lm\rangle = \oint \left(Y^{m'}_{l'}\right)^{*} \cos\vartheta Y^{m}_{l}\, d\Omega,$$
$$\langle l'm' \,|\, x+iy \,|\, lm\rangle = \oint \left(Y^{m'}_{l'}\right)^{*} \sin\vartheta e^{i\varphi} Y^{m}_{l}\, d\Omega,$$
$$\langle l'm' \,|\, x-iy \,|\, lm\rangle = \oint \left(Y^{m'}_{l'}\right)^{*} \sin\vartheta e^{-i\varphi} Y^{m}_{l}\, d\Omega$$

интегралларына дәл сәйкес келетуғынлығы көремиз (бул формулалар релятивистлик емес ротатор ушын тығызлықтың тарқалыўына тийисли). Сонлықтан l ҳәм m квантлық санлар ушын спини жоқ ротатор ушын табылған таңлаў қағыйдаларын табамыз, яғный

$$\Delta m_j = 0, \ \pm 1. \tag{6.3.37}$$

Егер j ушын таңлап алыў кағыйдасын анықлағанда бирдей типтеги шешимлер менен характерленетуғын ҳаллар арасында өтиўлер болатуғын болса ($j' = l' + {}^1/_2 \to j = l - {}^1/_2$ ямаса $j' = l' - {}^1/_2 \to j = l + {}^1/_2$) (6.3.24) ҳәм (6.3.25) аңлатпаларынан $D^{(l'l)}$ ҳәм $C^{(l'l)}$ коэффициентлериниң оң мәниске ийе болатуғынлығы ҳәм бундай өтиўлердиң руқсат етилгенлиги көринеди. Бул жағдайда j квантлық санының мүмкин болған өзгериси орбиталық квантлық сан l диң де өзгериси менен бирге жүзеге келиўи керек, яғный $\Delta j = \Delta l = \pm 1$.

Егер өтиўлер шешимлердиң ҳәр қыйлы типлери менен характерленетуғын ҳаллар арасында жүзеге келетуғын болса ($j' = l' + {}^1/_2 \to j = l - {}^1/_2$ ямаса $j' = l' - {}^1/_2 \to j = l + {}^1/_2$), онда $\Delta l = \pm 1$ ҳәм $\Delta j = 0, +2, -2$ ушын үш мүмкин болған мәнислерди аламыз. Бирақ бул жерде $D^{(l'l)}$ менен $C^{(l'l)}$ коэффициентлериниң ҳәр қыйлы белгилерге ийе болатуғынлығын есапқа алыў керек. Соның менен бирге $\Delta j = \pm 2$ болған жағдайда ағзалардың екеўи де бир бирин компенсация қылады ҳәм сонлықтан бундай өтиў қадаған етиледи. $\Delta j = 0$ болған жағдайда бул айырма нолге айланбайды, бирақ еки ағза ҳәр қыйлы белгилер менен киретуғын болғанлықтан бирдей типтеги шешимлерге сәйкес келетуғын ҳаллар арасындағы өтиўлердеги ($\Delta j=\pm 1$ болған жағдай) нурланыў интенсивлигине қарағанда нурланыў интенсивлиги жүдә ҳәлсиз болады.

Солай етип спин есапқа алынған жағдайда орайлық күшлер майданындағы квантлық санлар ушын таңлап алыў қағыйдалары төмнедегидей болады:

$$\Delta l=\pm 1, \quad \Delta m_j=0, \ \pm 1,$$
$$\Delta j=\begin{cases} \pm 1 & \text{(әдеттегидей интенсивлик)}, \\ 0 & \text{(ҳәлсиреген интенсивлик)}. \end{cases} \qquad (6.3.38)$$

6-4. Дирак теңлемесиниң толық шешими

Бул параграфта бизлер тек оң энергияға ийе ҳалларды емес, ал терис энергияға ийе ҳалларды есапқа алып Дирак теңлемесиниң толық шешимин толығырақ изертлеймиз. Усыған байланыслы терис мәнисли энергияға ийе ҳалдың талланыўы позитронның бар екенин болжаўға, яғный элементар бөлекшелердиң жаңа фундаменталлық қәсийетиниң ашылыўына, атап айтқанда антибөлекшелердиң бар екенлигиниң ҳәм бир элементар бөлекшелердиң басқа элементар бөлекшелерге айланыўының ашылыўына алып келди.

а) Оң ҳәм терис энергияларды есапқа алып еркин бөлекше ушын Дирак теңлемесиниң шешими. Биринши гезекте еркин бөлекше ушын жазылған Дирак теңлемесин изертлеймиз. Ол былайынша жазылады:

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-\mathrm{H}\right)\psi=0, \qquad (6.4.1)$$

ал бул аңлатпадағы гамильтониан

$$\mathrm{H}=\frac{\hbar c}{i}(\boldsymbol{\alpha}\nabla)+\rho_3 m_0 c^2 \qquad (22.2)$$

формуласының жәрдеминде бериледи.

Еркин қозғалысты орайлық күшлердиң тәсириндеги қозғалыстың дара жағдайы сыпатында қараўға болады ҳәм сонлықтан толық моменттиң сақланыў нызамы орынланады [(6.3.4)-аңлатпаға қараңыз]

$$\mathbf{J}=[\boldsymbol{r}\mathbf{p}]+\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{const}. \qquad (6.4.3)$$

Квантлық механиканың тилинде бул жағдай қозғалыс муғдарының толық моментиниң гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын аңғартады

Егер биз толық моменттиң импульстиң бағытындағы проекциясын алатуғын болсақ $[\boldsymbol{r}\mathbf{p}]$ орбиталық моменттен қутыла аламыз. Себеби орбиталық моменттиң импульстиң бағытындағы проекциясы нолге тең:

$$(\mathbf{p}[\boldsymbol{r}\mathbf{p}])=\mathrm{p}_x(y\mathrm{p}_z-z\mathrm{p}_y)+\mathrm{p}_y(z\mathrm{p}_x-x\mathrm{p}_z)+\mathrm{p}_z(x\mathrm{p}_y-y\mathrm{p}_x)=0.$$

Буннан былай орынланатуғын есаплаўлар ушын импульс бағытындағы қозғалыс муғдарының моментиниң проекциясының операторын киргизген қолайлы (½ħ бирликлеринде)

$$S = 2\frac{(\mathbf{Jp})}{\hbar p} = \frac{(\sigma\nabla)}{\sqrt{\nabla^2}} = \frac{(\sigma\nabla)}{ik}. \qquad (6.4.4)$$

Бул аңлатпада импульс $p = \hbar k$, ал ∇^2 операторының меншикли мәниси $-k^2$ шамасына тең.

Бул оператордың (6.4.2)-гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығы анық. Буның ушын тиккелей $HS - SH = 0$ теңлигин пайдаланып тексерип көриўге болады.

Дирак теңлемесиниң дара шешимин

$$\psi(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{L^{3/2}} be^{-ic\varepsilon Kt + i\boldsymbol{kr}} \qquad (6.4.5)$$

түринде излеймиз. Бул аңлатпада

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} \qquad (6.4.6)$$

төрт қатарлы матрица болып табылады. L^3 арқалы тийкарғы параллелопипедтиң көлеми белгиленген, ал $\boldsymbol{k}(k_1, k_2, k_3)$ толқын векторының қураўшылары $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$ пүтин санлары менен $k_1 = \frac{2\pi}{L} n_1$ ҳәм тағы усы сыяқлы аңлатпалар арқалы байланысқан

E энергиясы

$$K = \sqrt{k^2 + k_0^2}$$

шамасы менен

$$E = c\hbar\varepsilon K \qquad (6.4.7)$$

аңлатпасы арқалы байланысқан. Бул аңлатпаларда $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$ ҳәм $k_0 = \frac{m_0 c}{\hbar}$. ε параметри ҳәзирше белгисиз болып қалады.

S операторының (6.4.2)-гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын есапқа алып биз толқын фунциясынан қосымша шәртти бағындыра аламыз:

$$\frac{(\sigma\nabla)}{ik}\psi(\boldsymbol{k}) = s\psi(\boldsymbol{k}). \qquad (6.4.8)$$

Бул аңлатпада s шамасы (6.4.4)-оператордың меншикли мәниси болып табылады.

(6.4.5)-толқын функциясын (6.4.8)- ҳәм (6.4.1)-теңлемелрге қойып биз b матрицасын анықлаў ушын еки теңлеме табамыз:

$$(ks - (\sigma\boldsymbol{k}))\, b = 0, \qquad (6.4.9)$$
$$(\varepsilon K - s\rho_1 k - \rho_3 k_0)\, b = 0. \qquad (6.4.10)$$

(D.9)- ҳәм (D.10)-аңлатпалардағы σ_n ҳәм ρ_n матрицаларының мәнислерин жәнe (6.4.6)-теңликти есапқа алып соңғы еки матрицалық теңлемени теңлемелер системасы түринде жазамыз:

$$\begin{aligned}(sk-k_3)\,b_{1,3}&=k_{12}^{*}b_{2,4},\\ (sk+k_3)\,b_{2,4}&=k_{12}b_{1,3},\\ (\varepsilon K-k_0)\,b_{1,2}&=skb_{3,4},\\ (\varepsilon K+k_0)\,b_{3,4}&=skb_{1,2}.\end{aligned} \tag{6.4.11}$$

Бул аңлатпада

$$k_{12}=k_1+ik_2,\quad k_{12}^{*}=k_1-ik_2.$$

Егер

$$b=\begin{pmatrix}b_1\\ b_2\\ b_3\\ b_4\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}A_1B_1\\ A_1B_2\\ A_2B_1\\ A_2B_2\end{pmatrix} \tag{6.4.12}$$

деп болжасақ соңғы теңлемелерди биз қанаатландыра аламыз. Бундай жағдайда $A_{1,2}$ ҳәм $B_{1,2}$ шамаларын анықлаў ушын төмендегилерге ийе боламыз:

$$\begin{aligned}(sk-k_3)\,B_1&=k_{12}^{*}B_2,\\ (sk+k_3)\,B_2&=k_{12}B_1,\end{aligned} \tag{6.4.13}$$

$$\begin{aligned}(\varepsilon K-k_0)\,A_1&=skA_2,\\ (\varepsilon K+k_0)\,A_2&=skA_1.\end{aligned} \tag{6.4.13a}$$

(6.4.13)-теңликтен s ушын меншикли мәнислерди аңсат табыўға болады:

$$s=\pm 1, \tag{6.4.14}$$

ал (6.4.13а) теңлигинен ε ниң мәнисин аңсат табамыз:

$$\varepsilon=\pm 1. \tag{6.4.14a}$$

Демек ε параметри энергияның белгисин анықлайды екен.

Буннан кейин

$$\begin{aligned}b^{+}b&=b_1^{*}b_1+b_2^{*}b_2+b_3^{*}b_3+b_4^{*}b_4=\\ &={}^{1}/_{4}\,(A_1^{*}A_1+A_2^{*}A_2)\,(B_1^{*}B_1+B_2^{*}B_2)=1\end{aligned} \tag{6.4.15}$$

нормировка шәртин есапқа алып

$$\begin{aligned}A_1=\sqrt{1+\varepsilon\frac{k_0}{K}},\quad A_2&=\varepsilon s\sqrt{1-\varepsilon\frac{k_0}{K}},\\ B_1&=se^{-{}^{1}/_{2}i\varphi}\sqrt{1+s\cos\vartheta},\\ B_2&=e^{{}^{1}/_{2}i\varphi}\sqrt{1-s\cos\vartheta}\end{aligned} \tag{6.4.16}$$

екенлигин табамыз. Бул аңлатпаларда ϑ менен φ шамалары $\boldsymbol{k}$толқын векторының сфералық мүйешлери болып табылады ($k_{12}=k\sin\vartheta e^{i\varphi}$, $k_3=k\cos\vartheta$).

Алынған нәтийжелердиң анализи ушын улыўмалықты бузбай биз импульсти z көшери бағытында жайластырамыз ($\vartheta=0,\ \varphi=0,\ k_x=k_y=0,\ k_z=k$). төрт шешим сәйкес келеди. Бул шешимлер энергияның ($\varepsilon = \pm 1$) ямаса спинниң ($s = \pm 1$) белгиси менен айрылады. Олар b матрицасы ушын төмендегидей мәнислерди береди:

$$b(k,\ s=1,\ \varepsilon=\pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 \pm \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \pm\sqrt{1 \mp \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{6.4.17}$$

$$b(k,\ s=-1,\ \varepsilon=\pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 \pm \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \mp\sqrt{1 \mp \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix}.$$

$s = 1$ шешими спин импульске бағытланған жағдайды, ал $s = -1$ болған жағдай спин импульске қарама-қарсы бағытланған жағдайды тәрийиплейди. ε шамасының белгиси энергияның белгисин анықлайды. Бул матрицалардың

$$b^+(k,\ s',\ \varepsilon')\, b(k,\ s,\ \varepsilon) = \delta_{ss'}\delta_{\varepsilon\varepsilon'}$$

ортонормировка шәртин қанаатландыратуғынлығын көрсетиў қыйын емес.

б) Еркин электронның спинлик қәсийетлерин изертлеў. Тек оң мәнисли энергиялар менен шекленип бөлекшелердиң спинлик қәсийетлерин изертлеймиз (ε = 1). Импульс z көшери менен бағытлас болған жағдайдағы толқын функциясы төмендегидей түрге ийе болады:

$$\psi(k,\ \varepsilon=1) = \frac{1}{L^{3/2}\sqrt{2}}\left[C_1 \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix} + C_{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ -\sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix}\right] e^{-icKt + ikz}. \tag{6.4.18}$$

Спинниң қураўшысы импульс пенен бағытлас болған жағдайда ғана емес, ал спинниң қәлеген қураўшысы (орбиталық моментсиз) қозғалыс интегралы болып қалатуғын жағдайда да спин түсинигин киргизиў мүмкин болып шығады. Еркин қозғалыў орын алған жағдайда бул сақланатуғын спин мынаған тең (½ħ бирлигинде):

$$\boldsymbol{\sigma}^0 = \frac{\boldsymbol{k}(\boldsymbol{\sigma k})}{k^2} + \rho_3 \frac{\boldsymbol{\sigma} k^2 - \boldsymbol{k}(\boldsymbol{\sigma k})}{k^2}. \tag{6.4.19}$$

(6.4.19)-аңлатпа бойынша анықланған спинниң сақланыўы оның қәлеген қураўшысының гамильтониан менен коммутацияланыўына байланыслы келип шығады

Егер импульс z көшери бағытында бағытланған болса, онда $\boldsymbol{\sigma}^0$ операторының σ_z^0 импульси бағытындағы ҳәм импульске перпендикуляр бағытланған σ_x^0 ҳәм σ_y^0 қураўшылары сәйкес төмендегилерге тең:

$$\sigma_z^0 = \frac{(\boldsymbol{\sigma k})}{k} = \sigma_3,\ \sigma_x^0 = \rho_3\sigma_1,\ \sigma_y^0 = \rho_3\sigma_2.$$

Бул оператордың меншикли мәнислерин s^0 арқалы белгилеп төмендегилерди табамыз:

бойлық қураўшысы ушын

$$s_3^0 = \int \psi^+ \sigma_3 \psi d^3x = C_1^* C_1 - C_{-1}^* C_{-1};$$

көлденең қураўшылар ушын

$$s_1^0 = \int \psi^+ \rho_3 \sigma_1 \psi d^3x = C_{-1}^* C_1 + C_1^* C_{-1},$$
$$s_2^0 = i\left(C_{-1}^* C_1 - C_1^* C_{-1}\right).$$

Егер биз толқын функциясын ҳәр қыйлы энергияларға ийе (соның ишинде ҳәм терис энергияға да ийе) ҳаллардың қосындысы сыпатында сайлап алатуғын болсақ, онда орташа мәнислерди есаплағанда ўақытлық ағзалар жоғалады, себеби улыўмаласқан спин операторы гамильтониан менен коммутацияланады. Усының менен бирге қозғалыс интеграллары да (яғный гамильтаниан менен коммутацияланатуғын) болып табылатуғын ҳәр қыйлы операторлардың коммутативлик емеслиги системаның айныған система екенлигин билдиреди (берилген импульс пенен энергияға спинниң ҳәр қыйлы бағытлары сәйкес келеди). Усыған байланыслы s^0 векторының орташа мәниси C_1 ҳәм C_{-1} амплитудаларының ҳәр қыйлы комбинацияларынан ғәрезли болады. s^0 векторының үш өлшемли бирлик вектор екенлигин көрсетиўге болады. Себеби $(s_1^0)^2 + (s_2^0)^2 + (s_3^0)^2 = (C_1^* C_1 + C_{-1}^* C_{-1})^2 = 1$, ал оның қураўшылары Лоренц бурыўларында

$$s_3'^0 = s_3^0 \cos\gamma + s_1^0 \sin\gamma, \qquad (6.4.20)$$
$$s_1'^0 = s_1^0 \cos\gamma - s_3^0 \sin\gamma, \quad s_2'^0 = s_2^0$$

нызамы бойынша түрленеди. Бул аңлатпада

$$\cos\gamma = \frac{\beta_1 - \beta\cos\vartheta}{B}, \quad \sin\gamma = -\frac{\beta\sqrt{1-\beta_1^2}\,\sin\vartheta}{B}, \qquad (6.4.21)$$
$$B = \sqrt{(\beta_1 - \beta\cos\vartheta)^2 + \beta^2\left(1-\beta_1^2\right)\sin^2\vartheta}.$$

Бул аңлатпада бөлекшениң дәслепки координаталар системасындағы тезлиги болған $c\beta_1 = c\frac{k}{K}$ шамасы z көшери бағытында бағытланған. z көшери менен арасындағы мүйеш ϑ болған штрихланған координаталар системасының тезлиги $c\beta$ шамасына тең. Штрихланған координаталар системасының тезлиги zx тегислигинде жатыўы керек. $s_3'^0$ шамасы болса импульстиң жаңа бағытына салыстырғандағы спинниң бойлық қураўшысы. Буннан үш өлшемли бирлик вектордың Лоренц түрлендириўлеринен кейин де үш өлшемли бирлик вектор болып қалатуғынлығы келип шығады.

Енди спираллықты анықлаймыз. Спираллық деп $s_3^0 = 1\ (C_1 = 1,\ C_{-1} = 0)$ шәрти орынланғанда импульске салыстырғандағы поляризиция векторының айланыўын айтамыз. Бул жағдайда (6.4.18)-аңлатпадан көринип турғанындай

$$\sigma_x^0 \psi = -i\sigma_y^0 \psi. \qquad (6.4.\ 21а)$$

Усының менен бирге толқын функциясының ўақыттан ғәрезлигин есапқа алып (яғный $\psi \sim e^{-icKt}$ ғәрезлигин) айланыўдың xy тегислигинде (x көшеринен y көшерине қарай) жүзеге келетуғынлығын табамыз (бул тегислик импульске, яғный z көшерине перпендикуляр). Демек оң координаталар системасында $s_3^0 = 1$ болған жағдай оң бурғы бойынша спираллықты, ал шеп координаталар системасында шеп бурғы болйынша спираллықты тәрийиплейди. Бул нәтийже тәбийий нәтийже болып табылады. Себеби $s_3^0 = (\boldsymbol{s}^0\boldsymbol{k}^0)$ скаляр көбеймесинде $\boldsymbol{k}^0$ импульстиң бирлик поляр векторы, ал $\boldsymbol{s}^0$ болса спинниң бирлик аксиаллық векторы болып табылады. Оң координаталар системасынан терис координаталар системасына өткенде $\boldsymbol{k}^0$ векторының бағыты қарама-қарсы бағытқа өзгереди, ал $\boldsymbol{s}^0$ аксиаллық бирлик векторы бағытын өзгертпейди (яғный бул жағдайда тек спираллықтың математикалық формасы ғана өзгереди).

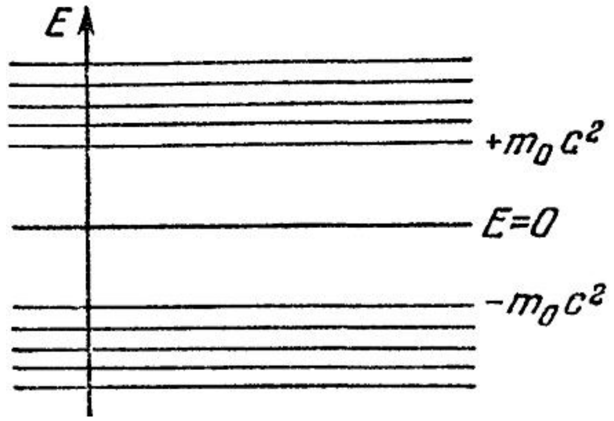
в) Терис энергияға ийе ҳаллар. «Тесикшелердиң» Дирак теориясы. Позитронның ашылыўы. Оң мәниске ийе энергияға ийе ҳаллар менен (ε = 1) [(6.4.18) шешимин қараңыз] Дирак теориясы терис мәнисли энергияларға сәйкес келетуғын (ε = -1) шешимлерге ийе:

$$E = -c\hbar K. \tag{6.4.21б}$$

Бизлер терис энергияға ийе шешимлердиң тек Дирак теориясына тән емес екенлигин, бундай шешимлердиң қәлеген релятивистлик теорияда, ҳәтте классикалық теорияда да пайда болатуғынлығын аңғарамыз. Ҳақыйқатында да еркин бөлекшениң энергиясы оның массасы ҳәм импульси менен былайынша байланысқан

$$E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m_0^2c^4}$$

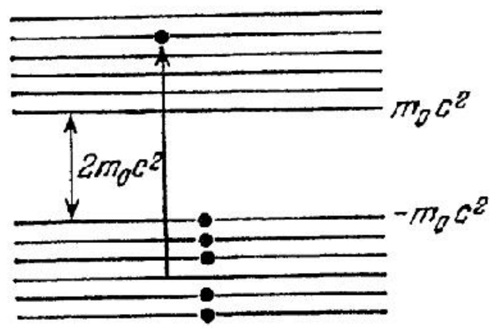
Демек еркин бөлекшениң энергиясы ушын теңдей ҳуқыққа ийе еки шешим орын алады деген сөз. Соның менен бирге энергияның мәнислериниң еки областы (оң ҳәм терис мәниске ийе энергиялар) $2m_0c^2$ шамасына тең интервалға айрылған (сүўретте келтирилген). Биринши рет қарағанда терис энергияға ийе ҳаллар ҳақыйқатлыққа сәйкес келмейтуғындай болып көринеди. Себеби терис энергиялар областы шексизликке шекем даўам етеди ($E = -\infty$) ҳәм сонлықтан ең төменги энергетикалық ҳал болмайды. Ондай болса әдеттеги ҳаллардың ҳеш қайсысы да орнықлы бола алмайды, себеби барлық ўақытта да төменирек энергетикалық ҳалға спонтан өтиўдиң жүзеге келиўи мүмкин. Соның менен бирге терис массаға (яғный терис мәнисли энергияға) ийе бөлекшениң қәсийетлери әдеттегидей болмайды: мысалы оң массаға ийе бөлекше менен тартысыўда ол сол оң массаға ийе бөлекшеден ийтерилиўи керек. Дара жағдайда қыялымызда массаларының белгилери ҳәр қыйлы болған электронлар бир бири менен тәсир етискенде оң массаға ийе электронның терис массаға ийе электроннаң қашыўы, ал терис массаға ийе электронның оң массаға ийе электронды қуўыўы керек болады. Себеби олардың салмақ орайының бир ноқатта қозғалмай қалыўы керек.



Еркин Дирак бөлекшесиниң энергиясының мүмкин болған қәддилери

Классикалық физикада терис мәниске ийе болған ҳаллар мәниске ийе емес ҳәм сонлықтан бундай ҳалларды қарамайды. Себеби бөлекше қозғалғанда оның энергиясы үзликсиз өзгереди ҳәм оң энергияға ийе ҳалдан терис мәнисли энергияға ийе ҳалға энергияның секирмели түрде $\Delta E \geqslant 2m_0c^2$ шамасына өзгериўи мүмкин емес. Сонлықтан ўақыттың баслағыш моментиндеги терис энергияға ийе ҳалларды жоқ етип, буннан кейин оларды пүткиллей итибарға алмаўымыз мүмкин.

Электрон-позитрон вакуумның ноллик ҳалының схемасы.



Электрон-позитрон жубының пайда болыў схемасы.

Квантлық теориядағы жағдай пүткиллей басқаша. Бул теория бойынша тек үзликсиз спектрге емес, ал дискрет спектрге ийе ҳаллар арасында да өтиўлердиң жүзеге келиўи мүмкин. Енди терис энергияға ийе ҳалларды механикалық түрде дыққаттан алып таслаўға болмайды. Себеби $+m_0c^2$ энергиясына ийе ҳалдан $-m_0c^2$ энергияға ийе ҳалға өтиўдиң итималлығы нолге тең болмай шығады.

Электронлардың терис энергияға ийе ҳалларға өтиўинен қутылыў ушын Дирак 1931-жылы терис энергияға ийе қәддилердиң барлығы толған деген идеяны усынды (сүўретте келтирилген). Усының нәтийжесинде әдеттеги жағдайларда оң энергияға ийе электронлар терис энергияға ийе қәддилерге өте алмайды.

Енди $E > 2m_0c^2$ энергияға ийе гамма-квант вакуумниң терис энергияға ийе электронына тәсир етип оны оң энергияға ийе ҳалға өткереди деп ойлайық. Бундай жағдайда мысалы ядро тәрепинен жутылған гамма-кванттың орнына оң энергияға ийе электрон ҳәм оның менен бирге электронлар тәрепинен толтырылған терис энергетикалық қәддилер фонында «тесикше» пайда болады (Электрон-позитрон жубының пайда болыў схемасы сүўретте көрсетилген).

Дирак гипотезасының ең әҳмийетли табысы соннан ибарат, ол бул «тесикшени» массасы оң ҳәм электронның массасына тең, бирақ заряды қарама-қарсы белгиге ийе бөлекше (позитрон) деп түсиндирди. Ҳақыйқатында да дәслепки моментте бөлекшелер болмаған болсын. Бундай жағдайда фонның ноллик энергиясы $E_{\text{вак}}$ терис энергиялық ҳаллардағы электронлардың n_- энергияларының қосындысына тең:

$$E_{\text{вак}} = \sum_{n'_-} E_{n'_-}, \tag{6.4.22}$$

ал ноллик заряд болса

$$e_{\text{вак}} = -\sum_{n'_-} e_0 \tag{6.4.23}$$

шамасына тең.

Солай етип ҳақыйкый бөлекше болмаған жағдайда «тесикшелер» теориясы көз-қараслары бойынша оң энергияға ийе барлық ҳаллардың бос екенлигин, ал терис энергияға ийе барлық ҳаллардың ийеленген екенлигин аңғартады. Бул ҳалды биз ноллик ҳал деп қабыл етемиз (Электрон-позитрон вакуумның ноллик ҳалының схемасы сүўретте көрсетилген).

Электрон n_- терис энергияға ийе ҳалдан n_+ оң энергияға ийе базы бир ҳалға өткен жағдайда системаның энергиясының улыўмалық өзгериси

$$\Delta E = E_{n_+} + \sum_{n'_-}{}' E_{n'_-} - \sum_{n'_-} E_{n'_-} \tag{6.4.24}$$

ямаса

$$\Delta E = E_{n_+} - E_{n_-} = E_{n_+} + |E_{n_-}| \tag{6.4.25}$$

шамалары пайда болған бөлекшелердиң оң энергияларының қосындысына тең болады[10].

Зарядқа қатнасы бар тап сондай таллаў «тесикшеге» сәйкес келетуғын бөлекшениң зарядының электронның зарядына қарама-қарсы болатуғынлығын көрсетеди:

$$e = -e_{n_+} - \sum_{n'_-}{}' e_0 + \sum_{n'_-} e_0 = -e_{n_+} + e_{n_-} = -e_0 + e_0. \qquad (6.4.)$$

Солай етип электронның энергиясы терис болған ҳалдан энергиясы оң болған ҳалға өтиўи (бундай өтиўдиң энергиясы $2m_0c^2$ шамасынан үлкен болмаған гамма-квант жутылғанда жүзеге келетуғынлығы түсиникли) еки бөлекшениң туўылыўына алып келеди. Бул жағдайда электронның терис энергияға ийе ҳалын («тесикше») оң $+e_0$ зарядқа ийе ҳәм оң энергияға ийе бөлекше тәрепинен ийеленген ҳал деп қараўға болады[11]. Дирак тәрепинен болжап айтылған усындай бөлекше Андерсон тәрепинен 1932-жылы космослық нурлардың қурамында ашылды.

Енди Дирак теориясы электрон менен бир қатарда толқын функциясы Дирак теңлемесин энергияның оң мәниси менен ҳәм зарядтың да оң мәниси менен қанаатландыратуғын позитронды да қосып алады.

---

[10] Сумма белгисиниң үстиндеги штрих (Σ') сумма алыўдың $n'_- = n_-$ ҳалдан басқа барлық n'_- ҳаллары бойынша алынатуғынлығын аңғартады.

[11] Майданның квантлық теориясының усылларын пайдаланып зарядтың белгисине қарата симметриялы болған электрон-позитрон вакуумның теориясын дөретиўге болатуғынлығын аңғарамыз. Бирақ ҳәтте биз қарап атырған электронлар менен позитронларға қарата симметриялы болмаған теория (электрон – бөлекше, ал позитрон "тесикше") тийкарында да бөлекшелердиң бир бирине айланыўыны менен байланыслы болған көп қубылысларды көргизбели түрде түсиндириўге болады.

Дирак теориясы биз қарап атырған процесске қарама-қарсы процессти де бийкарламайды: «тесикше» бар болса оң мәнисли энергияға ийе электрон терис энергияға ийе ҳалға өте алады. Бул жағдайда электрон ҳәм позитрон гамма-квантларына айланады. Бундай айланыста орын алатуғын энергия менен импульстиң сақланыўы нызамлары пайда болған гамма-квантларының санының екиден кем болмаўын талап етеди.

г) Электрон-позитронлық вакуум ҳаққында түсиник. Электромагнит вакуум менен бир қатарда электрон-позитронлық вакуум ҳәм басқа да бөлекшелердиң вакуумлери бар. Барлық майданлар ушын мәлим дәрежеде улыўмалық болған екинши гезектеги квантланыў усылы электрон-позитрон вакуумның тәсирин есапқа алыўға мүмкиншилик береди.

Ҳәзирги ўақытлардағы майданның квантлық теорияда ҳәр қыйлы бөлекшелердиң вакуумлериниң қәсийетлери оғада әҳмийетли орынды ийелейди. Вакуум биринши гезекте бөлекшелер арасындағы тәсирлесиўлерди тәмийинлейди. Мысалы электромагнит тәсирлесиўди (Кулон нызамын) еки зарядтың электромагнит вакуум арқалы тәсирлесиўиниң нәтийжеси деп қараўға болады. Бундай жағдайда бир электрон «псевдофотон» (оны көбинесе виртуаллық фотон деп атайды) шығарады, ал екиншиси оны жутады. Солай етип электр майданы электромагнит вакуумның қозған ҳалы болып табылады.

Екинши тәрептен вакуум өзине тән резервуар болып табылады. Вакуумнан ҳақыйқый бөлекшелерди (олар туўылғанда) алады (бөлип алады) ҳәм аннигиляцияның нәтийжесинде сол бөлекшелер вакуумге «өтеди» (ямаса «вакуумге айланады»). Электрон-позитронлық вакуум мәниси бойынша биз ушын таныс болған электронлардың терис энергиялы ҳаллардағы фоны болып табылады. тилекке қарсы бундай вакуум классикалық аналогқа ийе емес ҳәм сонлықтан электромагнитлик вакуум жағдайындағыдай ярым классикалық түсиндириўге мүмкиншилик бермейди. Ядроның Кулон майданы (электр майданы) бул вакуумды поляризациялай алады (яғный электрон диэлектрикте жайласқан жағдайдагыдай аўҳалда болады). Усының нәтийжесинде

$$V_{\text{э.}-\text{п}} = -\frac{4}{15} e_0^2 \alpha \left(\frac{\hbar}{m_0 c}\right)^2 \delta(\boldsymbol{r}) \tag{6.4.27}$$

аңлатпасы менен анықланатуғын қосымша тәсирлесиў энергиясы пайда болады.

Электрон-позитрон вакуум әсиресе электронның магнитлик қәсийетине күшли тәсир етеди. Усының салдарынан электронның магнит моменти Бор магнетонынан үлкен болатуғынлығын Швингер көрсетти:

$$\mu = -\mu_0 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi}\right). \tag{6.4.28}$$

Электронның магнит моментине қосылатуғын қосымта

$$\Delta\mu_{\text{э.}-\text{п}} = -\left(\frac{\alpha}{2\pi} - 0{,}328 \frac{\alpha^2}{\pi^2} + 0{,}13 \frac{\alpha^3}{\pi^3}\right) \mu_0 = -0{,}0011596\mu_0 \tag{6.4.29}$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады ҳәм алынған шама радиоспектроскопиялық усыллардың жәрдеминде алынған эксперименталлық нәтийжелерге жақсы сәйкес келеди [(20.35)-аңлатпаға қараңыз].

д) Позитрон ушын толқын теңлемеси. Энергия ушын терис мәниске ийе шешимлердиң электромагнит майданы бар болған жағдайлардағы шешимлердиң физикалық мәнисин анықлаў ушын Дирактың

$$\left\{-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi-c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)+\alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}-\frac{e}{c}A_y\right)+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}-\frac{e}{c}A_z\right)\right]-\rho_3 m_0 c^2\right\}\psi=0 \quad (6.4.30)$$

тийкарғы теңлемеси менен бир қатарда комплексли-түйинлес теңлемени де жазамыз:

$$\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi+c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{e}{c}A_x\right)-\alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}+\frac{e}{c}A_y\right)+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}+\frac{e}{c}A_z\right)\right]-\rho_3 m_0 c^2\right\}\psi^*=0. \quad (6.4.31)$$

Егер $\alpha_1^*=\alpha_1, \alpha_2^*=-\alpha_2, \ \alpha_3^*=\alpha_3, \ \rho_3^*=\rho_3$ екенлигин, ал

$$\psi^*=\begin{pmatrix}\psi_1^*\\ \psi_2^*\\ \psi_3^*\\ \psi_4^*\end{pmatrix} \quad (6.4.32)$$

комплексли-түйинлес толқын функциясының эрмитлик-түйинлес

$$\psi^+=(\psi_1^*\psi_2^*\psi_3^*\psi_4^*) \quad (6.4.33)$$

толқын функциясынан айырмаға ийе екенлигин есапқа алғанда (6.4.31)-аңлатпаны аңсат алыўға болады.

Комплексли-түмйнлес теңлемениң эрмитлик-түйинлес теңлемеге пүткиллей эквивалент екенлигин аңғарамыз:

$$\psi^+\left\{\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)-c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}-\frac{e}{c}A_y\right)+\alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}-\frac{e}{c}A_z\right)\right]-\rho_3 m_0 c^2\right\}=0. \quad (6.4.34)$$

Бул аңлатпаның дурыслығына (6.4.31)-теңлемени де, (6.4.34)-теңлемени де төрт теңлемелер системасы түринде жазсақ ҳәм толқын функциясынан соң турған оператордың

$$\psi^+\frac{\partial}{\partial t}\to-\frac{\partial\psi^+}{\partial t}, \quad \psi^+\frac{\partial}{\partial x}\to-\frac{\partial\psi^+}{\partial x} \quad (6.4.35)$$

тәсир етиў қағыйдаларын есапқа алсақ (6.4.34)-аңлатпаның дурыслығына аңсат исениўге болады

Дирактың комплексли-түйинлес теңлемесинде

$$\psi'=i\alpha_2\rho_o\psi \quad (6.4.36)$$

алмастырыўын әмелге асырамыз. Бундай жағдайда Дирак матрицаларының коммутация қағыйдаларын есапқа алып толқын функциясы ушын

$$\left\{-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}+e\Phi-c\left[\alpha_1\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{e}{c}A_x\right)+\alpha_2\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}+\frac{e}{c}A_y\right)+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\alpha_3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}+\frac{e}{c}A_z\right)\right]-\rho_3 m_0 c^2\right\}\tilde{\psi}=0, \tag{6.4.37}$$

теңлемесин табамыз. Бул теңлеме позитронның қозғалысын тәрийиплейди. Себеби бул теңлеме тийкарғы (6.4.30)-теңлемеден e зарядының $-e$ менен алмасқанлығы менен айрылады. Усының менен бирге $\psi(r,t)=e^{-i\frac{|E|}{\hbar}t}\psi(r)$ ҳалы оң энергиялы ҳал, ал $\psi^*(r,t)=e^{-i\frac{|E|}{\hbar}t}\psi^*(r)$ ҳалы терис энергияға ийе ҳал деп түсиндирилетуғын болғанлықтан биз $\tilde{\psi}$ функциясындағы энергияны ψ^* функциясындагы энергиядан басқа деп түсиниўимиз керек. Басқа сөзлер менен айтқанда (6.4.37)-теңлемедеги оң энергияға ийе ҳалларды позитронларға, ал терис энергияға ийе ҳалларды электронларға тийисли деп қараў керек.