Квантлық механика бойынша конспектлер

А.С.Компанеец. Курс теоретической физики. Том I. Элементарные законы. Издательство "Просвещение". Москва. 1972. 512 с.

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = \boldsymbol{F}. \tag{1.1}$$

§ 2. ЛАГРАНЖ ТЕҢЛЕМЕЛЕРИ

(1.1)-теңлеме декарт координаталар системасында жазылған. Бирақ қәлеген координаталар системасы еркин сайлап алыўдың нәтийжеси болып табылады. Бундай системада тәбияттың базы бир нызамын тәрийиплеп, биз тәрийплеўимизге ықтыярлықтың белгили болған элементин қосамыз. Координаталар системасын сайлап алыўдан басқа есаплаў системасы бойынша да еркинлик болады. Материаллық бөлекшелердиң ҳәр қыйлы есаплаў системаларына салыстырғандағы тезликлери ҳәр қыйлы. Бирақ, усындай жағдайдың орын алыўына қарамастан, тәбияттың нызамларын ашқанда (ямаса келтирип шығарғанда) оларға мүмкиншилиги болғанынша анықламасы бойынша бақлаўшыға тийисли болған шамалардың кирмеўи керек (мысалы, координаталар). Басқа сөзлер менен айтқанда тәрийиплеўдеги ықтыярлық элементин жоқ етиў керек.

Оның ушын (1.1)-дифференциаллық нызамнан интеграллық нызамға өтиў керек. Интегралдың мәниси усы интеграл есапланған өзгериўшилерден ғәрезсиз (мысалы, базы бир фигураның майданы туўры сызықлы, поляр ҳ.т.б. қәлеген координаталарда есаплаўдан ғәрезсиз. Сонлықтан қозғалыстың базы бир шекли участкасындағы механикалық қозғалыстың нызамларын интеграллық аңлатпаларда келтирип шығарыўға умытылыў керек болады.

Буны төмендегидей шараятларда жүзеге келтириўге болады:

1. Байланыслар идеал түрде қатты, яғный сүйкелис күшлери жоқ.
2. Материаллық ноқатлардың арасындағы өз-ара тәсирлесиў күшлерин былайынша жазыўға болғанда:

$$\boldsymbol{F}_i = -\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_i}. \tag{2.1}$$

Бул теңликтеги i индекси бөлекшеге тийисли, ал векторлық шама $\boldsymbol{r}_i$ бойынша алынған туўындының өзи қураўшылары $\frac{\partial U}{\partial x_i}$, $\frac{\partial U}{\partial y_i}$, $\frac{\partial U}{\partial z_i}$ болған векторды береди. U шамасы барлық механикалық система ушын бирдей. Оның әҳмийети ҳаққында кейинирек гәп етиледи.

Гамильтон принципи. (2.1)-шәрттиң шекленген болып көриниўи мүмкин. Бирақ ондай емес. Бул аңлатпадағы күштиң орнында салмақ күшиниң, электростатикалық күштиң, яғный Ньютон механикасы қолланылатуғын күшлердиң барлығы турыўы мүмкин. Буннан былай биз күшти (2.1) формасында беремиз. Буннан кейинги формулалардың әпиўайы болыўы ушын бир тек бир қатты байланыс бар деп есаплаймыз. Бул шеклеў итибар бергендей әҳмийетке ийе емес, себеби бир неше байланыс болған жағдайға тиккелей өтиледи. Байланыс шәртин теңлеме түринде жазамыз:

$$F(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \dots, \boldsymbol{r}_i, \dots) = 0. \tag{2.2}$$

Енди системаның материаллық ноқатларының координаталарының базы бир $\delta\boldsymbol{r}_i$ өзгерисин қараймыз ҳәм өзгеристи шексиз киши деп есаплаймыз. Бул өзгерис ноқатлардың қозғалысына байланыслы емес, ал оны тек спекулятивлик операция деп есаплаў мүмкин. Бирақ, оның (2.2)-шәртти бузбаўы керек, яғный оны системада орын алған байланыс пенен сәйкес келеди деп ойлаймыз. Мысалы, егер ноқатлар бет бойынша қозғалыўға мәжбүр болса, онда $\delta\boldsymbol{r}_i$ өзгерислери беттиң бағытында алынады. Егер ноқатлар аўысыўлардың нәтийжесинде (2.2)-теңлеме бойынша анықланатуғын бетте қалған болса, онда аўысыўлар айқын көринип турған шәртти қанаатландырады:

$$F(\dots \boldsymbol{r}_i + \delta\boldsymbol{r}_i \dots) - F(\dots \boldsymbol{r}_i \dots) = \sum_i \frac{\partial F}{\partial r_i} \delta\boldsymbol{r}_i. \tag{2.3}$$

Бул аңлатпада $\delta\boldsymbol{r}_i$ шамаларының шексиз киши екенлиги пайдаланылған, демек F функциясы Тейлор қатарына биринши туўындыға шекем жайылған.

Қосымша (2.2)-шәрти қойылған жағдайдағы (1.1)-дифференциаллық теңлемелер системасын қараймыз. Бул шәрт $\boldsymbol{r}_i$ өзгериўшилериниң барлығының ғәрезсиз емес екенлигин аңғартады. Системаның бир биринен ғәрезсиз болған өзгериўшилер санын теңлемелердиң санына тең етиў ушын ҳәр бир теңлемени сәйкес $\delta\boldsymbol{r}_i$ шамасына көбейтемиз ҳәм оларды қосамыз. F_i күшин еки қураўшыға ажыратамыз: $\boldsymbol{F}_i = -\frac{dU}{dr_i} + \boldsymbol{F}'_i$. Биринши қосылыўшы материаллық ноқатлардың арасындағы өз-ара тәсирлесиўлердиң салдарынан пайда болған, ал екинши қосылыўшы байланыслардың тәсиринде пайда болатуғын күшлерди тәрийиплейди.

Енди байланыслардың идеаллық екенлигинен пайдаланыўымыз керек. Материаллық ноқат қозғалатуғын тегис ҳәм өзгериссиз қалатуғын әпиўайы жағдайдан баслаймыз. Бундай жағдайда реакция күшиниң бағыты бетке перпендикуляр, яғный $\boldsymbol{F}'_i$ ҳәм $\delta\boldsymbol{r}_i$ шамаларының скаляр көбеймесиниң нолге тең болыўы керек. Себеби бул көбейме ноқаттың бет бойынша орын алмастырғандағы исленген жумысты аңғартады (яғный сүйкелис күшлериниң жумысын, ал биз байланысты идеаллық деп есаплап, сүйкелис күшлериниң жумысын есапқа алмадық).

Еки ямаса бир неше ноқат болған жағдайда $\boldsymbol{F}'_i\delta\boldsymbol{r}_i$ көбеймесиниң шамасы өз алдына нолге тең болмаўы, себеби ноқатлардың бир бириниң үстинен жумыс ислеўи мүмкин. Мысалы, егер еки ноқат бир бири менен созылмайтуғын байланыс арқалы бириктирилген болса, онда ноқаттың биреўиниң тезлениўи екиншисиниң тезлениўине алып келеди. Бундай жағдайда бир ноқат екиншисиниң үстинен жумыс ислейди. Демек, бир бири менен қатты байланыс пенен бекитилген бир неше материаллық ноқаттан туратуғын системада байланыслардың реакциясының күшлерине мынадай шәрт қойылады:

$$\sum_i \boldsymbol{F}'_i \delta\boldsymbol{r}_i = 0. \tag{2.4}$$

Орын алмастырыў болса (2.3)-теңликке бағынады.

Бирақ, бундай жағдайда (1.1)- ҳәм (2.4)-шәртлерден байланыслар орын алған, яғный (2.3)-теңликти қанаатландыратуғын ноқатлардың барлық орын алмастырыўлары ушын

$$\sum_i \left(m_i \frac{d^2\boldsymbol{r}_i}{dt^2} + \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_i} \right) \delta \boldsymbol{r}_i = 0 \qquad (2.5)$$

теңлигиниң орынлы екенлиги келип шығады. Бул теңлемеден қандай да бир $\delta\boldsymbol{r}_i$ орын алмастырыўын жоғалтыў ҳәм оны (2.5) ке қойыў керек. Буннан кейин қалған орын алмастырыўлардың барлығы бир биринен ғәрезсиз болып шығады.

Анық емес көбейтиўшилер усылын пайдаланған қолайлырақ, себеби ол формулалардың барлық $\delta\boldsymbol{r}_i$ лерге қарата симметриясын сақлаўға мүмкиншилик береди. (2.3) теңлигин базы бир α көбейтиўшисине көбейтемиз ҳәм оны (2.5) ке қосамыз:

$$\sum_i \left(m_i \frac{d^2\boldsymbol{r}_i}{dt^2} + \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_i} + \alpha \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{r}_i} \right) \delta \boldsymbol{r}_i = 0. \qquad (2.6)$$

α көбейтиўшиси ықтыярлы түрде алынғанлықтан, биз теңлемеге артық параметрди киргиздик ҳәм усының салдарынан барлық орын алмастырыўларды бир биринен пүткиллей ғәрезсиз деп есаплай аламыз. Демек, бир $\delta\boldsymbol{r}_i$ ден басқа барлық $\delta\boldsymbol{r}_k$ $(k \neq i)$ лерди нолге тең деп есаплаўға болады. Бундай жағдайда

$$\left(m_i \frac{d^2\boldsymbol{r}_i}{dt^2} + \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_i} + \alpha \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{r}_i} \right) \delta \boldsymbol{r}_i = 0 \qquad (2.6')$$

ғана қалады. Енди $\delta\boldsymbol{r}_i$ векторы пүткиллей ықтыярлы деп есапланады, α параметрине байланыслы $\delta\boldsymbol{r}_i$ ге ҳеш бир байланыстыратуғын шәртлер қойылмайды. Бирақ, бундай жағдайда x_i векторының қәлеген еки қураўшысын, мысалы y_i менен z_i ди нолге тең деп алыўға ҳәм нолге тең болмаған қураўшысын қысқартыўға болады. Бул қураўшы ушын мынаны аламыз:

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} + \frac{\partial U}{\partial x_i} + \alpha \frac{\partial F}{\partial x_i} = 0. \qquad (2.7)$$

Усындай жоллар менен қәлеген қураўшы ушын сәйкес теңлемени аламыз. Векторлық формада теңлеме былайынша жазылады:

$$m_i \frac{d^2\boldsymbol{r}_i}{dt^2} + \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_i} + \alpha \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{r}_i} = 0. \qquad (2.8)$$

Бул теңлемеде i механикалық системаның барлық материаллық ноқатларын номерлейди. (2.8)-теңлеме (2.2)-теңлеме менен биргеликте α параметрин ҳәм барлық $\boldsymbol{r}_i$ лерди ўақыттың функциясы түринде анықлаўға мүмкиншилик береди. $-\alpha \frac{\partial F}{\partial x_i}$ шамасының байланыслардың (2.3) ке сәйкес келетуғын реакция күши екенлигин аңғарамыз.

Енди интеграллық принципти келтирип шығарыўға өтемиз. Усындай мақсетте (2.5)-теңликтиң биринши қосылыўшысын бөлеклерге бөлип түрлендиремиз (ҳәзирше бир ағза менен шекленемиз):

$$m_i \frac{d^2\boldsymbol{r}_i}{dt^2} \delta\boldsymbol{r}_i = \frac{d}{dt}\left(m_i \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} \delta\boldsymbol{r}_i \right) - m_i \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} \frac{d}{dt} \delta\boldsymbol{r}_i.$$

$\delta\boldsymbol{r}_i$ шамасының бир ўақыт моментиндеги еки радиус-векторлардың айырмасы екенлигин аңғарамыз. Айырмадан алынған туўынды туўындылардың айырмасына тең, сонлықтан

$$\frac{d}{dt} \delta\boldsymbol{r}_i = \delta \frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}.$$

δ белгисиниң шексиз киши айырмаға тийисли екенлигинен пайдаланып, алынған теңликти былайынша көширип жазамыз:

$$m_i\frac{d^2\boldsymbol{r}_i}{dt^2}=\frac{d}{dt}\left(m_i\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}\delta\boldsymbol{r}_i\right)-\delta\frac{m_i}{2}\left(\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}\right)^2.$$

Алынған аңлатпаны материаллық бөлекшелер, яғный i бойынша суммалаймыз. $\delta\boldsymbol{r}_i$ шамасының киши екенлигине байланыслы алынған

$$\sum_i\frac{\partial U}{\partial\boldsymbol{r}_i}\delta\boldsymbol{r}_i=\delta U$$

теңликти координатаның дифференциалы сыпатында қараўға болады.

Жоқарыда тәрийипленген түрде түрлендирилген (2.5)-теңликтиң айырым ағзаларын жыйнап, δ белгисин сумманың сыртына шығарып, мынаны аламыз:

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_i m_i\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}\delta\boldsymbol{r}_i\right)-\delta\left[\sum_i\frac{m_i}{2}\left(\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}\right)^2-U\right]=0. \quad (2.9)$$

Енди система механиканың нызамлары бойынша орын алмастырады, яғный ол $t=t_0$ ўақыт моментинде ийелеген берилген басланғыш орнынан жылысып, t_1 ўақыт моментинде берилген басқа орынды ийеледи деп есаплаймыз. Бул орынлар берилген болғанлықтан, барлық $\delta\boldsymbol{r}_i$ лерди нолге тең деп есаплаўға болады:

$$(\delta\boldsymbol{r}_i)_{t=t_0}=(\delta\boldsymbol{r}_i)_{t=t_1}=0. \quad (2.10)$$

(2.9) дың шеп тәрепинде турған аңлатпаны t_0 моментинен t_1 моментине шекем интеграллаймыз. Бундай жағдайда ўақыт бойынша толық туўынды

$$\sum_i m_i\left[\left(\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}\delta\boldsymbol{r}_i\right)_{t=t_1}-\left(\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}\delta\boldsymbol{r}_i\right)_{t=t_0}\right]-\int_{t_0}^{t_1}\delta\left[\sum_i\frac{m_i}{2}\left(\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}\right)^2-U\right]\delta t=0 \quad (2.11)$$

шеклериндеги дифференциалланатуғын шаманың мәнислериниң айырмасына алып келинеди ал, жоқарыда айтылып өтилгениндей, $\delta\boldsymbol{r}_i$ диң шеклеринде нолге айланады. Функцияның бир ўақыт моментиндеги айырмасын аңғартатуғын δ символын ўақыт бойынша алынатуғын интеграл менен орынларын алмастырып қойыўға болады. Себеби δ шамасын ўақыт бойынша туўынды менен орынларын алмастырып қойыўға болады. Енди интегралдың өзин S арқалы белгилеп, мынадай теңликке келемиз:

$$\delta S=\delta\int_{t_0}^{t_1}\left[\sum_i\frac{m_i}{2}\left(\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt}\right)^2-U\right]\delta t. \quad (2.12)$$

S ушын жазылған аңлатпадағы интеграл қозғалыстың ҳақыйқый траекториясы бойлап алынады, себеби (2.12)-теңликти келтирип шығарғанда (1.1)-теңлеме пайдаланылды. Интегралдың алдындағы δ символы усы интеграл менен бир қатарда басқа, i-бөлекше ушын ҳақыйқый траекториядан $\delta\boldsymbol{r}_i$ қашықлыгында жайласқан шексиз жақын траектория бойынша алынған интегралының қаралғанын аңғартады. Усындай жақын жайласқан траекторияны вариацияланған, ал δ символы берилген шаманың вариациясы деп аталады.

Вариация дифференциалға салыстырғанда пүткиллей басқа мәниске ийе. Дифференциал системаның қозғалысының траекториясы бойындағы шаманың өзгерисине тийисли, ал вариация болса траекторияның оған жақын болған, система ушын байланыслардың өзгешелиги бойынша қойылған шәртке сәйкес келетуғын басқа траекторияға өтиўди аңғартады. Дифференциал қозғалыс теңлемесинен анықланады, ал вариация тек байланысларға бойсынады, ал қалған шәртлер бойынша ықтыярлы мәниске ийе болады.

(2.12)-теңлиги системаның ҳақыйқый траекториясы бойынша алынған S интегралының экстремумға ийе екенлигин көрсетеди. Себеби ол жақын жайласқан қәлеген траекторияға өткенде өзгериске ушырамайды. Усыған уқсас, экстремумның қасында функция аргументтиң өзгериўи менен өзгериске ушырамайды.

(1.1)-теңлемениң орнына механиканың тийкарғы позициясы сыпатындағы (2.12)-теңлемеден келип шығыўға болады. Бундай ҳәрекет етиўдиң жасалма түрдеги ҳәрекет етиўдей болып көриниўи мүмкин. Ал, шынында, биз көп узамай бул жағдайда жүдә кең улыўмаластырыўға жолдың ашылатуғынлығын көремиз. Усының менен бирге, (2.12)-шәрттен келтирип шығарылатуғын қозғалыс теңлемесиниң (1.1)-теңлемелер системасына салыстырғанда әдеўир қолайлы болып шығады. S шамасы механикалық системаның *ҳәрекети*, ал ҳақыйқый траектория бойынша S тиң экстремаллығы ҳаққындағы тастыйықлаў *Гамильтон принципи* деп аталады. Базы бир жағдайларда бул принцип әпиўайырақ болған формулировкаға ийе болады ҳәм оны *ең киши ҳәрекет принципи* деп атайды (қараңыз: 21-параграфтағы шынығыўдың ақыры, Эйлер-Мопертюидиң ең киши ҳәрекет принципи).

Механикалық системаның еркинлик дәрежелери. Туўры мүйешли координаталар системасынан базы бир механикалық мәселелерди шешиў ушын қолайлырақ болған басқа координаталар системасына өтиў ушын дәслеп зәрүрли болған улыўмалық анықламларды келтирип шығарамыз.

Механикалық системаның *еркинлик дәрежеси* деп усы системаның кеңисликтеги орнын беретуғын параметрлердиң ишиндеги ғәрезсиз болған параметрге айтады. Усындай ғәрезсиз параметрлердиң саны системаның еркинлик дәрежесиниң саны деп аталады.

Кеңисликтеги бир материаллық ноқаттың орны базы бир есаплаў системасына салыстырғанда өлшенген үш ғәрезсиз параметрдиң (оның координаталарының) жәрдеминде анықланады. Бир бири менен қатты байланыспаған N дана материаллық ноқатлардың орны бир биринен ғәрезсиз болған $3N$ параметрлердиң жәрдеминде анықланады.

Бирақ, егер ноқатлардың орынлары қандай да бир жоллар менен бекитилген болса, онда еркинлик дәрежелериниң саны $3N$ нен киши болыўы мүмкин. Мысалы, егер еки ноқат ара қашықлығы өзгермейтуғын қатты байланыс пенен бириктирилген болса, онда бул ноқатлардың алты декарт координаталарына $(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$ мынадай шәрт қойылады:

$$(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 = R_{12}^2.$$

Бул аңлатпада R_{12} арқалы ноқатлардың арасындағы қашықлық белгиленген. Демек, барлық декарт координаталары енди ғәрезсиз параметрлер болып табылмайды; алты шаманың тек бесеўи бир биринен ғәрезсиз. Басқа сөзлер менен айтқанда, бир биринен өзгермейтуғын қашықлықта жайласқан еки материаллық ноқаттан туратуғын система бес еркинлик дәрежесине ийе болады.

Егер бир бири менен үш мүйешлик түринде беккем түрде тутастырылған үш материаллық ноқатты алып қарайтуғын болсақ, онда үшинши ноқаттың координаталары жоқарыда келтирилгендей еки теңликти қанаатландырыўы керек. Бундай жағдайда теңликтиң оң тәрепинде R_{13}^2 ҳәм R_{23}^2 шамалары турады. Солай етип, қатты үш мүйешликтиң төбелериниң тоғыз координатасы үш теңликке бағынады ҳәм тек алты параметр бир биринен ғәрезсиз болады. Үш мүйешлик алты еркинлик дәрежесине ийе

Қатты денениң кеңисликтеги орны бир туўрының бойынша жатпайтуғын үш ноқаттың жәрдеминде анықланады. Жоқарыда көрсетилгендей, усындай үш ноқат алты еркинлик дәрежесине ийе. Демек, ықтыярлы түрде алынған қатты дене алты еркинлик дәрежесине ийе. Усының менен бирге қатты дене деформацияланбайтуғын қозғалыслар ғана қаралады. Мысал ретинде шырылдаўықтың айланыўын көрсетиўге болады.

Улыўмаластырылған координаталар. Бир бири менен байланыслар арқалы бириктирилген ноқатлардың мысалынан орынды декарт координаталарында бериўдиң барлық ўақытта қолайлы болмайтуғынлығы көринди. Бундай жағдайда байланыслар тәрепинен келип шығатуғын қосымша шәртлерди жазыўға туўры келеди. Механикалық системаның барлық ноқатларының орынларын белгилеў ушын параметрлерди сайлап алыў мақсетке муўапықлығы бойынша анықланады. Мысалы, егер күшлер бөлекшелердиң арасындағы қашықлықлардан ғана ғәрезли болса, онда динамиканың теңлемелерине бул қашықлықларды декарт координаталары арқалы емес, ал айқын түрде киргизиў керек

Механикалық системаны саны еркинлик дәрежелериниң санына тең параметрлердиң жәрдеминде тәрийиплеўге болады. Бул параметрлер гейпара жағдайларда анаў ямаса мынаў ноқаттың декарт координаталарына сәйкес келиўи мүмкин. Мысалы, қатты байланыс пенен бекитилген еки ноқат системасында параметрлерди былайынша сайлап алыўға болады: ноқатлардың биреўиниң орнын декарт координаталарында бериў, бундай жағдайда екинши ноқат орайы биринши ноқат турған орында жайласқан шардың бетинде жайласады. Егер узынлық пенен кеңлик берилген болса, онда шардағы екинши ноқаттың орны белгили деген сөз. Биринши ноқаттың үш декарт координаталары ҳәм екинши ноқаттың узынлығы менен кеңлиги арқалы берилген системаның кеңисликтеги орны толық анықланады.

Жоқарыда келтирилген усыл менен бир бирине қатты бекитилген үш ноқат ушын үш мүйешликтиң бир қапталы ҳәм үшинши төбениң усы қапталдың дөгерегиндеги бурылыў мүйеши алынады.

Кеңисликтеги механикалық системаның орнын анықлайтуғын бир биринен ғәрезсиз шамалар оның *улыўмалыстырылған координаталары* деп аталады. Бизлер оны q_α символының жәрдеминде анықлаймыз, бул символдағы төмендеги α индексиниң мәниси берилген системаның еркинлик дәрежелериниң санына тең.

Лагранж теңлемелери. Улыўмаластырылған координаталар ғәрезсиз болғанлықтан, оларға байланыс шәртлерин қойыўдың кереги болмайды. Бул динамиканың мәселелерин шешкендеги олардың декарт координаталарына салыстырғандағы артықмашлығының бири болып табылады. Биз қарап атырған системаның симметрия қәсийетине улыўмаластырылған координаталар сәйкес келетуғын жағдайларда олардың екинши артықмашлық көринеди. Ноқаттың орайлық күшлер майданында қозғалыўында сфералық координаталар усындай артықмашлыққа ийе. Енди улыўмаластырылған координаталарда қозғалыс теңлемелериниң қалайынша жазылатуғынлығын көрсетемиз.

(1.1)-теңлемесин қарағанда усындай теңлемелерге туўрыдан-туўры келиўге болады. Бирақ бул жүдә қурамалы ҳәм көргизбелиги кем процедура болып табылады. (2.12) Гамильтон принципинен келип шығыў әдеўир қолайлы. Системаның улыўмаластырылған координаталары оның кеңисликтеги орнын толық беретуғын болғанлықтан, олар арқалы ноқатлардың декарт координаталарын да аңғартыўға болады. Мейли, декарт координаталарынан улыўмаластырылған координаталарға өтиў мынадай формула бойынша әмелге асырылатуғын болсын:

$$x_i = x_i(\dots\ q_\alpha \dots). \tag{2.13}$$

Бул формулаларды дифференциаллап, биз $\frac{dq_\alpha}{dt}$ туўындылар арқалы тезликтиң декарт қураўшыларын аламыз ҳәм оларды *улыўмаластырылған тезликлер* деп атаймыз. $\frac{dq_\alpha}{dt}$ аңлатпасының орнына қысқаша $\dot{q}_\alpha$ белгилеўин қолланады. Бундай жағдайда

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_\alpha \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha \tag{2.14}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Суммалаў α ның барлық мәнислери, яғный системаның барлық еркинлик дәрежелери бойынша жүргизиледи.

Суммалаў жүргизилетуғын белгиниң (2.14)-теңлемениң оң тәрепинен еки рет киретуғынлығын аңғарамыз: дара туўынды да ҳәм улыўмаластырылған тезликте. Усының менен бирге сол еки шама бир бири менен көбейтиледи. Бундай жағдайларда буннан былай биз сумма белгисин қоймаймыз ҳәм белги еки рет ушырасатуғын болса, онда сол белги бойынша суммалаўдың әмелге асырылатуғынлығын нәзерде тутамыз. Усындай жазыў тек экономиялық ғана емес, ал белгили бир көнликпелерге ийе болғанда көргизбелилиги жоқары болады. Суммалаў жүргизилетуғын белгини үнсиз белги деп атайды. Екинши тәрепти өзгерпей, оны теңликтиң бир тәрепинде басқа белгиге өзгертиў мүмкин:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial x_i}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha \equiv \frac{\partial x_i}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta. \tag{2.14'}$$

Мәселе соннан ибарат, α менен β лардың екеўи де мәнислердиң бир қатарын қабыл етеди, сонлықтан қандай ҳәрипти пайдаланыўдың айырмасы жоқ.

Енди x_i ды, $\frac{dx_i}{dt}$ ды, интеграл астындағы аңлатпаға кириўши S ти (2.13)- ҳәм (2.14') формулалар улыўмаластырылған координаталар ҳәм улыўмаластырылған тезликлер бойынша аңғартамыз. Бул аңлатпа (қәлеген координаталардағы) механикалық системаның *Лагранж функциясы* деп аталады ҳәм L арқалы белгиленеди. Солай етип, системаның ҳәрекети S берилген ҳәм $L = L(\dots\ q_\alpha \dots\ \dot{q}_\alpha \dots)$ болғанда

$$S = \int_{t_0}^{t_0} L(\, q_\alpha, \dot{q}_\alpha)dt \tag{2.15}$$

теңлиги орынлы болады.

Системаның ҳақыйқый траекториясы ушын ол экстремумға ийе, бул қәсийет координаталарды сайлап алыўдан ғәрезли бола алмайды, себеби белгили физикалық нызамды аңғартады. Енди S ти декарт координаталарында емес, улыўмаластырылған координаталарда вариациялаймыз. Улыўмаластырылған координаталар ғәрезсиз болғанлықтан, олардың вариациядлары да тап сондай қәсийетлерге ийе болады. Мынаған ийе боламыз:

$$\delta S = \delta \int_{t_0}^{t_1} L\, dt = \int_{t_0}^{t_1} \delta L\, dt = \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta \dot{q}_\alpha\right) dt = 0. \tag{2.16}$$

Вариациялаў менен дифференциаллаўдың белгилерин алмастырып қойыўды пайдаланып, мынаны жазамыз:

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta \dot{q}_\alpha \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta \frac{dq_\alpha}{dt} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\frac{d}{dt}\delta q_\alpha = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta q_\alpha\right) - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)\delta q_\alpha. \tag{2.17}$$

Толық туўындыны ўақыт бойынша интеграллаймыз ҳәм шеклерин қоямыз. Бирақ координаталардың вариациясының шеклеринде, бурынғыдай, нолге айланады, сонлықтан мынадай теңлик қалады:

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)\right] \delta q_\alpha\, dt = 0. \tag{2.18}$$

Вариациялар өз-ара ғәрезсиз ҳәм ықтыярлы. Дәслеп ∂q_α лардың ∂q_1 ден басқаларының барлығы нолге тең деп болжаймыз. Бундай жағдайда (2.18)-теңликте α бойынша суммадағы тек биринши ағза қалады:

$$\delta S = \int_{t_0}^{t_1} \left[\frac{\partial L}{\partial q_1} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}\right)\right] \delta q_1\, dt = 0. \tag{2.19}$$

Енди δq_1 вариациясының ықтыярлы екенлигинен пайдаланамыз. Қаўсырманың ишиндеги δq_1 көбейтилетуғын шама қандай да бир жол менен белгини ҳәм абсолют мәнисти өзгертеди, бирақ интеграллаў интервалында нолге тең емес деп болжайық. Енди δq_1 ди оны квадрат қаўсырмадағы аңлатпа қандай белгиге ийе болса тап сондай белгиге ийе болатуғындай етип сайлап алайық Бундай жағдайда интегралдың астында турған шама оң болып шығады, сонлықтан δS нолге тең бола алмайды. Демек, Гамильтон принципи орынланды, δq_1 ге көбейтилетуғын аңлатпаның зәрүрлик пенен нолге айланыўы керек. Ықтыярлы δq_α лар ушын тап сондай таллаўларды қайталап, мынаны табамыз:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0. \tag{2.20}$$

Бул улыўмаластырылған координаталар ушын жазылған қозғалыс теңлемеси болып табылады. (2.20)-теңлемелер системасы *Лагранж теңлемелери* деп аталады.

Егер системаның еркинлик дәрежелериниң саны n болса, онда ўақыт бойынша екинши тәртипли туўындыға ийе Лагранж теңлемелерин интеграллаў ушын $2n$ дана басланғыш шәртлерди бериўге туўры келеди: t_0 ўақыт моментиндеги n дана улыўмаластырылған координаталарды ҳәм соншама дана улыўмаластырылған тезликлерди. Бундай жағдайда ҳәр бир улыўмаластырылған координата ўақыттың, басланғыш тезликлердиң, басланғыш координаталардың функциясы түринде аңлатылады:

$$q_\alpha = q_\alpha(t;\ q_{01}, \dots, q_{0n};\ \dot{q}_{01}, \dots, \dot{q}_{0n}). \qquad (2.21)$$

Бул теңликти ўақыт бойынша дифференциаллап, тап сол шамаларға ғәрезлилик түриндеги улыўмаластырылған тезликлерди де аламыз:

$$\dot{q}_\alpha = \dot{q}_\alpha(t;\ q_{01}, \dots, q_{0n};\ \dot{q}_{01}, \dots, \dot{q}_{0n}). \qquad (2.22)$$

Бул аңлатпадан координаталар менен тезликлердиң барлық басланғыш мәнислерин жоқ етип, яғный (2.21)- ҳәм (2.22)-теңлемелерди басланғыш координаталар менен тезликлерге қарата шешип

$$\dot{q}_{0\alpha}(t;\ q_1, \dots, q_n;\ \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n) = 0 \qquad (2.23)$$

түриндеги $2n$ дана теңлеме аламыз.

Қозғалыстың барысында турақлы болып қалатуғын координаталар менен тезликлердиң усындай функциялары *қозғалыс интеграллары* деп аталады. Оң бөлиминде олар басланғыш координаталар менен тезликлер болыўы шәрт емес қәлеген турақлыға ийе бола алады. Қозғалыс интегралларын излеп табыў механиканың миннетли мәселесин қурайды.

Лагранж функциясының исенимлиги. Лагранж функциясының анықламасынан оның еки қосылыўшыдан туратуғынлығы көринип тур:

$$L = \sum_i \frac{m_i}{2}\left(\frac{dr_i}{dt}\right)^2 - U. \qquad (2.24)$$

Тезликлердиң координатасынан ғәрезли болған бириншиси системаның кинетикалық энергиясы, ал бөлекшелердиң арасындағы өз-ара тәсирлесиўди тәрийиплейтуғын екиншиси потенциаллық энергия деп аталады. Бул атамалардың мәниси 4-параграфта айқын болады.

(2.20)-Лагранж теңлемелерине L функциясының өзи емес, ал оның туўындысы киреди. Усыған байланыслы L диң исенимлиги ҳаққындағы мәселе пайда болады (яғный оған қосылатуғын, бирақ теңлемени өзгертпейтуғын қосымша ағзалар ҳаққындағы). Мысалы, турақлы қосымша ағзаның қозғалыс теңлемесинде сәўлесин таппайтуғыны айқын, бирақ Лагранж функциясына (2.20)-теңлемелерди қандай да бир өзгериске ушыратпайтуғын барлық q_α ҳәм t лардың қәлеген функциясының ўақыт бойынша алынған толық туўындысын қосыўға болады.

Бул жағдайдың дурыс екенлигин тиккелей орнына қойыў менен де, мынадай усыл менен де тексерип көриўге болады. Толық туўындының түрине ийе болған $\frac{df(q_\alpha,t)}{dt}$ қосындыны интеграллаўға болады, бундай жағдайда ол ҳәрекетке функцияның мәнислериниң айырмасы болған

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \left(L + \frac{df}{dt}\right) dt = \int_{t_0}^{t_1} L dt + f(q_\alpha, t)\Big|_{t_0}^{t_1} \qquad (2.25)$$

шама сыпатында қосылады.

Бирақ q_α ны вариациялағанда бул мәнислер өзгериссиз қалады, себеби шеклерде координаталардың вариациялары нолге айланады. Демек, координаталар менен ўақыттың функциясының туўындысы ҳәрекеттиң вариациясына кирмейди ҳәм қозғалыс теңлемелерине тәсирин тийгизбейди. Егер L ди алдын-ала (2.24) түринде бермесе, ал Гамильтон принципинен ямаса механиканың басқа улыўмалық қағыйдаларынан келип шығатуғын болса, онда усы қәсийетти оның түрин анықлаў ушын пайдаланыўға болады.

Салыстырмалық принципи. Жоқарыда инерциялық есаплаў системасы түсиниги келтирип шығарылды. Бундай системадағы бөлекшелердиң барлық тезлениўлери олардың арасындағы өз-ара тәсирлесиўдиң нәтийжесинде келип шығатуғын еди. Усындай система табылды деп есаплайық. Бундай жағдайда басқа барлық инерциаллық есаплаў системалары оған салыстырғанда туўры сызықлы ҳәм тең өлшеўли қозғалады. Егер бундай болмағанда басланғыш инерциаллық есаплаў системасына салыстырғанда шамасы бойынша да, бағыты бойынша да турақлы тезлик пенен қозғалатуғын денелер басқа есаплаў системасына салыстырғанда тезлениў менен қозғалады. Бирақ, бундай жағдайда басқа есаплаў системасы интерциаллық болмайды.

Демек, барлық инерциаллық системалар бир бирине салыстырғанда туўры сызықлы ҳәм тең өлшеўли қозғалады. Олардың қәлегенин тынышлықта турыпты, ал қалғанларының барлығын қозғалыстағы деп есаплаўға болады. Инерциаллық есаплаў системаларының қәлегениндеги механикалық системаның қозғалыс теңлемелери бирдей түрге ийе болады. Мысал сыпатында әдетте тең өлшеўли қозғалып киятырған поезддағы пассажирди келтиреди: вагонның ишиндеги барлық физикалық қубылыслар поезд тоқтап турғандағы физикалық кубылыслардай болады. Буны еки инерциаллық есаплаў системасының бирдей екенлигин көрсететуғын мысалы емес, ал *салыстырмалық принципи* деп аталатуғын әҳмийети жоқары болған механикалық принциптиң тәжирийбедеги дәлиллениўи деп айтқан жақсырақ. Күнделикли турмыстан белгили болған фактлерди сәўлелендиретуғын бул принципти Ньютон механикасы ушын қолланғанда алынатуғын нәтийжелер әдет бойынша өзи өзинен айқын болып көринеди. Бирақ, электромагнетизм ушын бул принципти қолланыў физикалық түсиниклердиң түпкиликли дәрежеде қайта қурылыўына алып келди (қараңыз: II бөлим).

Қозғалыс нызамларының симметриясы. Белгили физикалық қатнастың базы бир түрлендириўлердиң нәтийжесинде өзиниң формасын сақлап қалыў қәбилетлигин усы түрлендириўге қарата симметрия деп атайды. Салыстырмалық принципи қозғалыс теңлемелериниң бир инерциаллық есаплаў системасын екиншиси менен алмастырыўға қарата симметриялы екенлигин тастыйықлайды. Тәжирийбе механиканың нызамларының симметрияның басқа да түрлерине ийе екенлигин көрсетеди.

Барлық басқа денелерден жеткиликли дәрежеде алыста жайластырылған механикалық системадағы қозғалыс усы системаны қайсы орынға жайластырғаннан ғәрезсиз пүткиллей бирдей болады. Мейли, қозғалыстың бирдей болған басланғыш шәртлерине ийе болған еки бирдей механикалық система бар болсын. Олардың екеўи де оған тәсир ете алатуғын басқа денелерден жүдә үлкен қашықлықларда жайласқан. Бундай жағдайда, егер оларды бир есаплаў системасында қарайтуғын болсақ, онда олардағы қозғалыс қатаң түрде бирдей болады. Басқа сөзлер менен айтқанда, егер барлық қозғалатуғын денелерди бир ўақыт моментинде параллель кесиндирердиң бойынша бирдей қашықлыққа жылыстырғанда қозғалыс өзгериске ушырамайды. Әлбетте, бул тастыйықлаў механика тәрепинен оның барлық раўажланыў тарийхының барысында топланған тәжирийбелерде алынған материалларға тийкарланған. Қысқарақ формада оны *кеңисликтиң бир теклилиги қәсийети* деп атайды.

Биз жоқарыда тәрийплеген еки механикалық системаны тек бир биринен жылыстырылған түрде ғана емес, ал бир бирине салыстырғанда қәлеген мүйешке бурылған етип те алыўға болады. Бул жағдайда да, егер берилген еки система оларға тәсир ете алатуғын басқа барлық денелерден жеткиликли дәрежеде алыслатылған болса, онда бул системалардағы қозғалыс бирдей болып өтеди. Басқа сөз бенен айтқанда кеңисликтеги барлық бағытлар бирдей. Кеңисликтиң бул қәсийетин оның изотропиясы деп атайды. Кеңисликтиң изотропиясы да оның бир теклилиги сыяқлы тәжирийбелерде алынған мағлыўматлардың улыўмаластырылыўы болып табылады. Олар қозғалыс нызамларының белгили болған қәсийетлерин — олардың жылыстырыўларға ҳәм бурыўларға қарата симметриясын аңғартады.

Қозғалыс нызамларының симметриясының және бир түри бар — олардың ўақыттың өтиўи менен өзгермей қалыўы: қозғалыс нызамлары ўақыттың өтиўине байланыслы өзгермейди. Егер механикалық системалардың қозғалыс нызамлары орынланбайтуғын болғанда ҳеш бир машинаны соғыўдың мүмкиншилиги болмаған болар еди.

Лоренц функциясының түрин анықлаў. Жоқарыда айтылып өтилген қозғалыстың симметриясы нызамларын, яғный кеңислик пенен ўақыттың бир теклилигинен, кеңисликтиң изотропиясынан, салыстырмалық принципинен ҳәм Гамильтон принципинен алдын-ала (1.1)-теңлемени пайдаланбай-ақ Лагранж функциясының түрин анықлаўға болады.

Барлық басқа денелерден узақлатылған еркин бөлекшеден баслаймыз (бул еркин бөлекшениң анықламасы болып табылады). Кеңисликтиң бир тел и екенлигинен Лагранж функциясы айқын түрде координаталардан ғәрезли бола алмайды. Бундай болмағанда кеңисликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында бөлекше ҳәр қыйлы нызамлар бойынша қозғалған болар еди. Тап усыған усаған себеп бойынша Лагранж функциясына ўақыт та айқын түрде кирмейди. Бул жағдай тек айырым алынған еркин бөлекшеге ғана тийисли болып қалмай, сыртқы тәсир тиймейтуғын бөлекшелердиң қәлеген жыйнағына да тийисли. Солай етип, еркин бөлекшениң Лагранж функциясы тек оның тезлигинен ғәрезли бола алады. Бирақ, L скаляр шама болып табылады. Вектордан скалярды еки усыл менен алады: вектордың абсолют мәнисин алады ямаса векторды басқа базы бир вектор менен скаляр көбейтеди. Бирақ изотроп кеңисликте бундай айырып алынған вектордың болыўы мүмкин емес: ондағы барлық бағытлар бирдей. Солай етип, еркин бөлекшениң Лагранж функциясының бирден-бир мүмкин болған түри $L = L(|\dot{\boldsymbol{r}}|)$ аңлатпасындай болады.

Бул функцияның қандай екенлигин анықлаў қалады. Салыстырмалық принципи бойынша қозғалыстың характериниң бир инерциаллық есаплаў системасынан екиншисине өткенде өзгермеўи керек. Жоқарыда көрсетилип өтилгениндей, бул системаның басланғыш системаға салыстырғанда туўры сызықлы ҳәм тең өлшеўли қозғалыўы керек. Егер оның тезлиги $\boldsymbol{V}$ ға тең болса, онда биз қарап атырған ноқат оған салыстырғанда $\boldsymbol{V}+\dot{\boldsymbol{r}}$ тезлиги менен қозғалыўы керек. Биз тезликлерди қосыўдың әпиўайы нызамын пайдаландық. Бул нызамның тек $|\boldsymbol{V}|$ менен $|\dot{\boldsymbol{r}}|$ шамалары жақтылықтың тезлигинен әдеўир киши болғанда дурыс болатуғынлығын II бөлимде көрсетиледи. Жаңа инерциаллық есаплаў системасындағы Лагранж функциясының $L=L(|\boldsymbol{V}+\dot{\boldsymbol{r}}|)$ түрине ийе болатуғынлығы келип шығады. Қозғалыс нызамының өзгермеўи ушын аңлатпалардың екеўиниң айырмасы координаталар менен ўақыттың базы бир функциясының толық туўындысына тең болыўы керек. Бундай жағдайда еркин бөлекше ушын тек бир мүмкиншиликтиң қалатуғынлығы дәрҳәл көринеди:

$$L=\frac{m}{2}|\dot{\boldsymbol{r}}|^2. \qquad (2.26)$$

Бул аңлатпада m турақлы шама.

Бундай жағдайда мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

$$\frac{m|\boldsymbol{V}+\dot{\boldsymbol{r}}|^2}{2}-\frac{m|\dot{\boldsymbol{r}}|^2}{2}=m\boldsymbol{V}\dot{\boldsymbol{r}}+\frac{m|\boldsymbol{V}|^2}{2}=\frac{d}{dt}\left(m\boldsymbol{r}\boldsymbol{V}+\frac{m|\boldsymbol{V}|^2t}{2}\right).$$

m ниң белгиси қандай? Оны анықлаймыз. Дәслеп Гамильтон принципиниң дәллигин бираз жоқарылатыў керек: жолдың киши кесиндилеринде ҳәрекеттиң экстремаль болыўын емес, ал ең киши мәниске ийе болыўын талап етемиз. Бундай жағдайда m ниң белгиси оң болады. m ниң белгиси терис болғанда $|\dot{\boldsymbol{r}}|$ диң өсиўи менен ҳәрекеттиң шамасы шекке ийе болмай кемейген болар еди. Усындай жоллар менен еркин бөлекше ушын Лагранж функциясының биринши қосылыўшысы түпкиликли түрде анықланды.

Егер бир бири менен тәсирлесетуғын бөлекшелер системасын алатуғын болсақ, онда олардың өз-ара тәсирлесиўин тәрийиплеў ушын Лагранж функциясына қосымша қосылыўшыларды қосыў керек.

Биз бөлекшелердиң бир бирине тәсири олардың ўақыттың берилген моментиндеги орынлары менен анықланады деп болжадық. Бирақ усы тәсирдиң бөлекшелердиң ҳәр қайсысының орынлары бойынша емес, ал олардың салыстырмалы орынлары менен анықланатуғынлығы, яғный тек векторлардың айырмасы $\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k$ менен анықланатуғынлығы әҳмийетке ийе. Координаталар системаларын бир орыннан екинши орынға алып өткенде тек векторлардың айырмасы ғана өзгериссиз қалады. Усының менен бирге тек $\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k$ айырмасы ғана салыстырмалық принципин қанаатландырады: бир инерциаллық есаплаў системасынан екиншисине өткенде ҳәр бир $\boldsymbol{r}_i$ ҳәм $\boldsymbol{r}_k$ векторына қосылатуғын $\boldsymbol{V}t$ көбеймеси қысқарады.

Лагранж функциясы скаляр шама болғанлықтан, ол тек $\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k$ айырмасының абсолют мәниси $|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|$ ден, ямаса $(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k)(\boldsymbol{r}_l-\boldsymbol{r}_m)$ типиндеги скаляр көбеймеден ғәрезли болыўы мүмкин. Бирақ, соңғы жағдай практикада ушыраспайды ҳәм биз оны қарамаймыз. Демек, басқа денелер менен тәсирлеспейтуғын материаллық ноқатлар системасының Лагранж функциясы мынадай түрге ийе болады:

$$L=\sum_i\frac{m_i}{2}(\boldsymbol{r}_i)^2-U(\dots\ |\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|\ \dots). \qquad (2.24')$$

Биз Лоренц теңлемелерин (1.1)-теңлемемелерден келтирип шығарыў менен шекленбедик, ал (2.24')-формуланы келтирип шығарыў ушын зәрүрли болған барлық қурамалы таллаўларды өткердик. Себеби, усы жол менен ғана Эйнштейнниң салыстырмалы принципи менен электромагнит майдан теориясы талап ететуғын зәрүрли болған улыўмаластырыўларға аңсат келиўге болады.

Механикадағы Гамильтон принципиниң айрықша әҳмийети мынадан ибарат: ол механикалық системаның симметриялық қәсийетлерин ең қысқа ҳәм айқын түрде сәўлелендириўге мүмкиншилик береди. Олардың қозғалыстың дифференциаллық теңлемелеринен де алыныўы мүмкин болса да, интеграллық принцип оларды жоқары көргизбелилик пенен аңғартады. Қозғалыстың шәртлериниң симметриясы тәжирийбелерде анықланған базы бир нызамлықларды улыўмаластыратуғын болғанлықтан, Гамильтон принципи механиканың барлық улыўмалық нызамларын келтирип шығарыўға қолайлы болған усылды береди. Әлбетте, келтирип шығарыўдың мүмкин болғанынша қысқарақ ҳәм қолайлырақ болып жазылыўына алып келетуғын тенденцияны сәўлелендиретуғын болса да, тәбияттың ҳәрекеттиң минималлыққа "умтылыўын" пүткиллей сәўлелендирмейди.

Симметрия қәсийетлери механикалық системаның мүмкин болған қәсийетлерине жүдә әдеўир шеклерди қояды. Төменде (4-параграфта) симметрияның ҳәр қыйлы түрлери менен қозғалыстың барысында ўақыттың басланғыш моментинде берилген турақлы мәнисин сақлайтуғын базы бир шамалардың (динамикалық өзгериўшилерден ғәрезли болған) байланыслы екенлиги көрсетиледи. Сонлықтан, қарап шығылатуғын мәселелердеги өзгериўшилердиң өзгериў областы әдеўир шекленеди. Бир қатар жағдайларда бул шамалар өзинде бар симметрия қәсийетлери бойынша вариациялық принциптиң жәрдеминде жүдә аңсат табылады.

Гамильтон принципи симметрияның талапларын есапқа алған жағдай менен бирге Лагранждың вариацияланатуғын функциясының, усыған байланыслы қозғалыс теңлемелериниң түрин анықлаўға мүмкиншилик береди. Бундай мәнисте ол үлкен эвристикалық күшке ийе, яғный улыўмалық қағыйдалар тийкарында еле белгисиз болған шамаларды анықлай алады.

Ең ақырында, вариациялық принциптиң Лагранж теңлемелерин вариациялаў жолы менен механиканың айқын мәселелерин шешиў ушын жүдә қолайлы екенлигин атап өтемиз.

III БӨЛИМ

КВАНТЛЫҚ МЕХАНИКА

§ 21. КЛАССИКАЛЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ ЖЕТКИЛИКСИЗЛИГИ. КЛАССИКАЛЫ МЕХАНИКА МЕНЕН ГЕОМЕТРИЯЛЫҚ ОПТИКА АРАСЫДАҒЫ БАЙЛАНЫС

Классикалық көз-қараслар бойынша атомның турақлы емес екенлиги. Резерфорд тәжирийбелеридне атомның жеңил электронлардан ҳәм атомның өзиниң өлшемлеринен жүдә киши болған оң зарядланған ядродан турады. Усындай системаның орнықлы болыўы ушын электронлардың планеталардың

Қуяштың дөгерегинде айланғанындай ядроның дөгерегинде айланыўы керек: тынышлықта турған ҳәр қыйлы белгиге ийе зарядлар дәрҳәл бир бирине тартылады.

Бирақ, турақлылықтың усындай шәрти пүткиллей жеткиликсиз. Егер гәп газ ҳаққында айтылса, онда атомлардың бир бири менен турақлы түрде соқлығысатуғынлығы белгили, ал конденсацияланған орталықларда болса (суйықлықлар менен қатты денелер) атомлар барлық ўақытта да тығыз контактта болады. Усындай жағдайларда ҳәр бир элементтиң атомларының өзлериниң бир бири менен теппе-теңлигин қалайынша сақлайтуғынлығын көз алдыға келтириў қыйын. Мысалы, Қуяш системасы басқа бир жулдыз системасы менен соқлығысса, онда еки системадағы соқлығысқаннан кейинги жағдайдың соқлығысыўға шекемги жағдайдан пүткиллей басқаша болатуғынлығы түсиникли.

Усының менен бирге, жоқарыдағы параграфта көрсетилип өтилгениндей, атомдағы электронның қозғалысы электромагнит толқынларының шығарылыўына алып келген болар еди. Нурланыў ушын энергиясын жумсап, электронның ядроға қулап түсиўи керек. Бул атомлардың айқын түрде көринип турған орнықлығы менен қарама-қарсы келеди.

Бор теориясы. 1913-жылы жағдайдан шығыў ушын Н.Бор базы бир компромислик жолды усынды. Бор бойынша, атомда белгили болған орнықлы орбиталар болады ҳәм усындай орбиталар бойынша қозғалатуғын электронлар электромагнит толқынларын нурландырмайды. Үлкен энергияға сәйкес келетуғын орбитадан киши энергияға ийе орбитаға өткенде электрон нур шығарады. Нурланыў жийилиги еки орбитадағы электронның энергияларының айырмасы менен

$$\hbar\omega = E_1 - E_2$$

аңлатпа арқалы байланысқан. Бул аңлатпада $\hbar$ арқалы мәниси 1,054·10^{-27} эрг·сек шамасына тең универсаллық турақлы белгиленген.

Бор усынған еки жағдай постулатлар характерине ийе. Бирақ, олардың жәрдеминде водород атомының, соның менен водород атомын еске түсиретуғын бир қатар атомлар менен ионлардың тәжирийбелерде бақланатуғын спектрин жүдә жақсы түсиндириўге болады (мысалы, ядро менен бир электроннан туратуғын гелийдиң оң зарядланған ионы).

Бордың еки квантлық постулаты да классикалық физика ушын жат болса да ҳәм оның жәрдеминде түсиндириўдиң мүмкиншилиги болмаса да, усындай ишки қарама-қарсылыққа ийе болған модель атом ҳаққындағы илимди әдеўир алға жылыстырды.

Биринши постулат атомның ақылға сәйкес келетуғын қәлеген ҳалларының емес, ал тек базы бир айырым ҳалларының орнықлы екенлигин тастыйықлайды. Ҳәзирги ўақытлары биз бул тастыйықлаўдың аўҳалға сәйкес келетуғынлығын ҳәм Ньютон механикасынан планеталардың эллипс тәризли орбиталарының тиккелей келип шығатуғынлығы сыяқлы, квантлық механикадан тиккелей келип шығатуғынлығын билемиз.

Бор теориясы водородтың ҳәм оған уқсас болған атомлық системалардың спектрин түсиндириўде зор жеңиске еристи. Бирақ, еки электронға ийе болған гелий атомының спектрин Бор теориясының жәрдеминде түсиндириўдиң мүмкиншилиги болмады. Ал водород молекуласының орнықлы екенлигин түсиндириўде бул теория оннан да ҳәлсиз болып шықты. Сонлықтан, Бор теориясының оғада жақсы табысларына қарамастан физикадағы аўҳал қанаатландырарлықтай емес еди. Усы жағдайлар менен бир қатарда Бор теориясы эклектикалық болып, ол классикалық ҳәм квантлық көз-карасларды байланыстырды.

Жақтылық квантлары. Атомның орнықлығы мәселеси менен бир қатарда жүдә көп санлы жағдайларда классикалық физиканың тәжирийбелерде алынған фактларды түсиндире алмайтуғынлығы көринип турды. 1900-жылдың өзинде М.Планк нурланыўдың классикалық нызамларына сүйенип майдан менен материя арасындағы жыллылық тең салмақлығы ҳалын түсиндириўдиң мүмкин емес екенлигин түсиндирди. Классикалық физика бойынша затлардың нурланыўы үзликсиз жүзеге келиўи керек. Керисинше, Планкке нурландырыўшылар электромагнит майданына энергияны порциялар ямаса квантлар түринде береди деп есаплаўға туўры келди. Ҳәр бир квант оның жийилигине пропорционал болған энергияға ийе, ал пропорционаллық коэффициенти жоқарыда еслетип өтилген $\hbar$ турақлысы болып табылады. Бор өзиниң екинши постулатында Бордың усы усынысын пайдаланды.

Жақтылық квантлары ҳаққындағы гипотеза көп санлы қубылысларды түсиндириўде жемисли болып шықты. Эйнштейн тәрепинен усынылған сыртқы фотоэффектти квантлық түсиндириў жүдә әҳмийетли болды. Вакуум менен шегараға ийе металдың бетин жақтыландырғанда металдан электронлар ушып шығады. Ҳәр бир айырым электронның энергиясы түсиўши жақтылықтың улыўмалық энергиясынан пүткиллей ғәрезсиз, ал оның жийилигинен ғәрезли екен. Ушып шығатуғын электронның энергиясы еки шаманың энергиясы түринде көрсетиледи: энергия кванты $\hbar\omega$ ҳәм электронды металдан шығарыў жумысы.

Планктың идеяларын раўажландырып, Эйнштейн электромагнит нурларын тек шығарылғанда ҳәм жутылғанда ғана емес, ал тарқалғанда да айырым квантлар түринде тарқалады деп болжады.

Кванттың энергиясы $\hbar\omega$, ал оның тезлиги c ға тең болғанлықтан, ол $\hbar\omega/c$ импульсине де ийе болыўы керек (қараңыз: § 14, 18). Демек, квант ноллик массаға ийе бөлекше болып табылады, оның бар болыўының мүмкин екенлиги релятивистлик механикадан келип шығады.

Квантлардың импульске ийе екенлиги Комптон эффектинде табылды. Егер электронды классикалық теорияның жәрдеминде қарасақ, онда еркин электронлардағы электромагнит толқынлардың шашыраўы былайынша түсиндирилиўи керек: түсиўши толқын электронды тербелиўге мәжбүрлейди, усының салдарының оның өзи нурландырыўшыға айланады (қараңыз: § 20, 3-шынығыў). Бундай жағдайда электрон тәрепинен шашыратылған нурдың жийилиги оған келип түсетуғын нурдың жийилигине тең болыўы керек.

Заттағы электронды еркин деп қараў ушын келип түсетуғын нурдың жийилиги усы электронның қозғалысының меншикли жийилигинен жүдә үлкен болыўы керек. Сонлықтан жүдә қысқа толқын узынлығына ийе болған нурланыўды (рентген нурланыўын) бақлаў керек. Бундай жағдайда электронлардың оптикалық областта жатқан тербелислириниң меншикли жийиликлери шашыраған жақтылықтың жийилигин сезилерликтей жылжыта алмайды (классикалық теория бойынша усындай жағдайдың күтилиўи керек).

Классикалық механиканың принциплеринде турып таллаған жағдайда заттың атомларындағы электронларындағы шашыраўдағы рентген нурларының жийилигиниң салыстырмалы өзгерисиниң жийилик жоқары болған сайын (яғный толқын узынлығы киши болған сайын) киши болатуғынлығын күтиў керек. Берилген толқын узынлығында қәлеген мүйешке болған шашыраў нурланыўдың жийилигиниң өзгерисине алып келмеўи керек, себеби шашыраў бир тербелиўши электрон тәрепинен түсиўши толқынның электромагнит майданы менен бирдей тактте шығарылады.

Комптонның тәжирийбелери (1923-жыл) пүткиллей басқа жағдайды көрсетти. Затқа қаншама өткир (яғный қысқа толқынлы) нур келип түссе, түсиўши нурдың жийилигине салыстырғанда шашыраған нурдың жийилиги көбирек киширейеди екен (берилген шашыраў мүйешинде). Түсиўши нурдың белгили болған жийилигинде шашыраған нурдың жийилиги шашыраў мүйеши үлкен болған сайын киширек болып шыққан. Түсиўши рентген нурлары еркин өткен экранда жеткиликли дәрежеде үлкен мүйешлерге шашыраған толқынларды дерлик толық ириккен.

Классикалық теория бойынша бул нәтийжелерди түсиндириў мүмкин емес, бирақ нәтийже квантлық көз-қараслар бойынша жүдә аңсат түсиндириледи. Рентген нурларының еркин электронлардағы шашыраўын еки бөлекшениң соқлығысыўы сыпатында қараўға болады. Олардың бири болған электронды соқлығысқанша тынышлықта турды, ал екиншиси болған жақтылық квантын энергия менен импульске ийе болған әдеттеги бөлекше деп қараў керек. Квантлық айрықша болған қәсийети оның импульсин энергияны жақтылықтың тезлиги c ға бөлгенге тең деп есаплаўда көринеди.

Квант пенен соқлығысыўдағы энергия менен импульстиң сақланыў нызамлары қәлеген бөлекшелердиң соқлығысыўындағы энергия менен импульстиң сақланыў нызамлары менен бирдей (қараңыз § 6). Электрон менен соқлығысқанда квант оған базы бир импульсти береди, нәтийжеде өзиниң меншикли импульси киширейеди, усыған сәйкес энергиясы да кемейеди, ал шашыраған нурлардың жийилиги түсиўши нурлардың жийилигинен киши.

Бөлекшелердиң шашыраўы ҳаққындағы қәлеген мәселедегидей, басқа барлық шамалардың анықланыўы ушын бир шаманы билиў жеткиликли. Әдетте дәслеп келип түскен бөлекшениң аўысыў мүйеши бериледи. Биз бундай мәселени 14-параграфтағы 2-шынығыўда қарап өттик. Бул мәселениң нәтийжесин пайдаланып ҳәм түсиўши кванттың энергиясының $E_0 = \hbar\omega_0$, шашыраған кванттың энергиясының $E = \hbar\omega$ ға тең екенлигин есапқа алып, мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

$$\omega = \frac{\omega_0}{1 + \frac{\hbar\omega_0}{mc^2}(1 - \cos\theta)}.$$

Усындай жоллар менен шашыраған нурдың жийилигиниң шашыраў мүйеши θ дан ғәрезлиги анықланады. Алынған формула тәжирийбелерде алынған нәтийжелерге толық сәйкес келеди.

Бөлекшелердиң ағысынан туратуғын жақтылық ҳаққындағы көз-қарас физика ушын пүткиллей жаңа көз-қарас емес еди. Бирақ жақтылық квантлары ҳаққындағы гипотезалар пайда болған моментке шекем жақтылықтың толқынлық теориясы бәрше тәрепинен мойынланған теория болып есапланатуғын еди, ал корпускулалық теория ("корпускула" - бөлекше) болса нәзерден пүткиллей шығарып тасланғандай болып көринди. Жақтылықтың дифракциясы менен интерференциясы сыяқлы қубылыслар классикалық теорияда тек толқынлық картинаның тийкарында түсирилди, ал бул жағдай корпускулалық көз-қарасларға пүткиллей қайшы келди. Бирақ, фотоэффект ҳәм комптон-эффект болса классикалық толқынлық теорияға сәйкес келмейди.

Солай етип, ХХ әсирдиң жигирмаланшы жылларының басында физика илими әдеттегидей болмаған жағдайға түсти: бул илим бир электромагнит майданға тийисли болған ҳәр қыйлы қубылысларды түсиндириў ушын мазмуны пүткиллей қарама-қарсы болған еки теорияны пайдаланыўға мәжбүр болды.

Пайда болған жағдайдан шығыў жолы қәлеген қозғалыс базы бир толқынлық қәсийетлерге ийе болатуғын квантлық теорияда табылды.

Ньютонның классикалық механикасын пайдаланыў тек макроскопиялық денелерди қарағанда дурыс нәтийжелерди беретуғынлығы көпшиликке мәлим. Бирақ, микроскопиялық объектлерге өткенде бул классикалық механика көпшилик жағдайларда дурыс нәтийжелерди бермейтуғындай болып көринди. Мысалы Ньютон механикасын атомдағы электронлар ямаса жақтылық квантлары ушын пайдаланыўға пүткиллей болмайды екен. Квантлық механика өзиниң ишине классикалық көз-карасларды пайдаланыўдың дәл критерийин алады.

Квантлық механиканы баянлаўға өтпестен бурын бир объекттиң принципинде қалайынша бир жағдайларда корпускулалық, ал екинши жағдайда толқынлық қәсийетти көрсететуғынлығын түсиндириў керек.

Геометриялық оптика менен классикалық механика арасындағы сәйкеслик. Бир текли орталықларда жақтылық нурлары сырттан ҳеш қандай күшлер тәсир етпейтуғын бөлекшелердиң қозғалысы сыяқлы туўры сызықлы тарқалады. Усындай жағдайдың орын алыўының салдарынан жақтылықтың корпускулалық теориясы дөретилген болса керек. Бирақ, шексиз бир текли орталықта тегис электромагнит толқынлары да тап сондай болып туўры сызық бойлап тарқалады: толқын фронтына түсирилген нормаль өзиниң нормаль өзиниң бағытын өзгертпей сақлайды. Бундай жағдайда корпускулалық ҳәм толқынлық картиналардың арасында базы бир өз-ара сәйкесликтиң бар екенлиги көринеди. Олардың арасындағы айырма қандай да бир шекленген кеңисликте тарқалғанда көринеди. Толқын фронты менен толқынлық нормалдың бағыты арасындағы бир мәнисли сәйкеслик (19.10)-қатнаслар тәрепинен бузылады[1]. Егер идеал болған тегис толқын ушын кеңисликтиң ҳәр бир ноқатында толқын нормалы ушын бөлекшениң траекториясы менен салыстырыў мүмкин болған тек бир айқын сызық түсирилетуғын болса, "жайылған" толқын фронты болған жағдайда берилген

---

[1] (19.10)-қатнаслар баҳалаў формулалары болып табылады ҳәм олар былайынша жазылады:

$$\left.\begin{aligned}\Delta k_x\cdot\Delta x\sim 2\pi,\\ \Delta k_y\cdot\Delta y\sim 2\pi,\\ \Delta k_z\cdot\Delta z\sim 2\pi.\end{aligned}\right\}$$

Бул формулаларда k_x, k_y, k_z лер толқын векторы болған $\boldsymbol{k}$ ның қураўшылары болып табылады.

ноқатта бағытлардың конусы пайда болады ҳәм бундай жағдайда корпускуланың "ҳақыйқый" траекториясын көрсетиўдиң физикалық усылы болмайды. Конустағы барлық бағытлардың барлығын теңдей пайдаланыўға болады, ал қатаң түрде айтқанда, олардың ҳеш қайсысы да пайдаланыў ушын жарамайды.

Жақтылық нурларын қурыў менен геометриялық оптика шуғылланады. Бирақ, егер толқын нормалының бағыты киши дәлликте анықланатуғын болса бундай қурыўдың бир мәнисли болмайтуғынлығын көремиз. Ал бул жағдай электромагнит толқын тарқалатуғын областтың өлшемлериниң қандай екенлигинен ғәрезли. Область барлық өлшемлери бойынша жақтылық толқынының узынлығынан үлкен болған жағдайларда ҳеш қандай дифракциялық, яғный толқынлық эффектлер сезилмейди. Областтың өлшемлери жақтылық толқынының узынлығына жақынласқанда жақтылық нуры түсиниги кем-кемнен өзиниң мәнисин жоғалтады.

Солай етип, толқынлық көз-қараслардан келип шығып нур түсинигин (яғный корпускулалық картинаны) қолланыў критерийин анықлаўға ҳәм толқынлық түсиниклерден механикалық түсиниклерге өтиўдиң шеклик қағыйдаларын табыўға болады. Бул өз гезегинде Ньютон механикасының корпускулалық түсиниклеринен квантлық механиканың толқынлық түсиниклерине "кери бағытта" өтиўдиң жолларын көрсетеди.

Ең дәслеп механикалық ҳәм толқынлық шамалар арасындағы сәйкесликти табыў керек.

Турақлы фазалар бетлери. Ең дәслеп жақтылық нурлары оптикасы ушын толқынның фазасының әҳмийетин анықлаймыз. Геометриялық оптика ушын фаза түсиниги толығы менен жат болып көринеди, бирақ, биз ҳәзир фазаға анық болған механикалық мәнисти бериўдиң мүмкин екенлиги көрсетиледи.

Тарқалатуғын электромагнит толқыны майданы ушын аңлатпадан баслаймыз. Оны былайынша жазамыз:

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r}, t) \cos \frac{\chi(\boldsymbol{r}, t)}{\lambda}. \tag{21.1}$$

Бул аңлатпада λ арқалы толқын узынлығы белгиленген, оның шамасы майдан тәрепинен ийелеген областтың сызықлы өлшемлеринен киши деп есапланады. Тегис толқын ушын шеклик жағдайда фаза мынаған тең:

$$\frac{\chi}{\lambda} = \boldsymbol{kr} - \omega t. \tag{21.2}$$

[(18.25) ҳәм (18.26) аңлатпаларын салыстырыңыз]. $\boldsymbol{k} = \frac{2\pi \boldsymbol{n}}{\lambda}, \omega = \frac{2\pi u}{\lambda}$ қатнаслары орынлы болғанлықтан [u арқалы фазалық тезлик белгиленген], фазаны $\varphi \equiv \frac{\chi}{\lambda}$ түринде жазып, λ ден ғәрезликти айырып көрсетиў қолайлы.

Нурлық, яғный геометриялық оптика жаўықлаўына өтиў ушын алып тасланатуғын барлық ағзалардың мәнислерининиң шамаларын баҳалаў ушын майданды фаза арқалы анықлаў аңлатпасын толқын теңлемесине қойыў керек:

$$\Delta \boldsymbol{E} - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} = 0. \tag{21.3}$$

t менен r бойынша дифференциаллаўда бөлимде дәрежеси үлкен болмаған λ ни қалдырыў керек, себеби шәрт бойынша λ - киши шама. Сонлықтан толқын пакетиниң амплитудасы болған $\boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r}, t)$ ның шамасын пүткиллей дифференциалламаў керек. Демек,

$$\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} \cong -\frac{\boldsymbol{E}_0}{\lambda}\frac{\partial \chi}{\partial t}\sin\frac{\chi}{\lambda},$$
$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} = -\frac{\boldsymbol{E}_0}{\lambda}\frac{\partial^2 \chi}{\partial t^2}\sin\frac{\chi}{\lambda} - \frac{\boldsymbol{E}_0}{\lambda^2}\left(\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)^2 \cos\frac{\chi}{\lambda}.$$

Екинши қатардағы биринши ағзаның бөлиминде λ^2 бар екинши ағзаға салыстырғанда алып тасланыўы керек. Буннан

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} \cong -\frac{\boldsymbol{E}_0}{\lambda^2}\left(\frac{\partial \chi}{\partial t}\right)^2 \cos\frac{\chi}{\lambda}$$

ҳәм усыған сәйкес

$$\Delta E \cong -\boldsymbol{E}_0\left(\frac{1}{\lambda}\nabla\chi\right)^2 \cos\frac{\chi}{\lambda}$$

аңлатпаларына ийе боламыз.

Алынған шаманы (21.3)-аңлатпаға қойып, $\varphi \equiv \frac{\chi}{\lambda}$ фазасы ушын биринши тәртипли дифференциаллық теңлеме аламыз:

$$(\nabla\varphi)^2 - \frac{1}{u^2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2 = 0. \qquad (21.4)$$

Тегис толқынның шеклик жағдайында (21.2)-теңлемеден

$$\boldsymbol{k} = \nabla\varphi \equiv \frac{\partial\varphi}{\partial \boldsymbol{r}} \qquad (21.5)$$

ҳәм

$$\omega = -\frac{\partial\varphi}{\partial t} \qquad (21.5)$$

аңлатпалары келип шығады. Ал тегис толқын ушын

$$k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = 0$$

қатнасы орынлы.

Бирақ, (21.4) ке сәйкес бул теңлемени дерлик тегис толқын (21.1) деги $\nabla\varphi$, $-\frac{\partial\varphi}{\partial t}$ шамалары да қанаатландырады. Демек, (21.5) ҳәм (21.6) теңлемелерин дерлик тегис ҳәм дерлик монохромат толқынның толқын векторының анықламасы сыпатында қабыл етиў керек (Биз (21.1)-теңлеме тәрепинен көрсетилген толқынлық процесстиң ўақыт бойынша узынлығын тербелис дәўири 2π/ω дан әдеўир үлкен деп қабыл еттик).

(21.5) тен көринип турғанындай, толқын векторы турақлы фаза $\varphi = \varphi_0$ бетине түсирилген нормалдың бағыты менен бағытлас екенлиги көринип тур (яғный кеңисликтиң берилген ноқатындағы жақтылық нурының бағытын береди). Дерлик тегис толқынның тарқалыўы кеңисликтеги турақлы фазалар бетлериниң семействосының жылжыўы түринде көрсетиледи.

t ўақыттың ҳәр қыйлы моментлеринде фаза белгили болған $\varphi = \varphi_0$ мәнисине ийе бет кеңисликте

$$\varphi(\boldsymbol{r}, t) = \varphi_0$$

теңлемесине сәйкес ҳәр кеңисликтеги ҳәр қыйлы орынларды ийелейди. Усы беттиң тарқалыў тезлигин анықлаймыз. Мына шәрттен баслаў керек:

$$d\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial t}dt + \frac{\partial\varphi}{\partial \boldsymbol{r}}d\boldsymbol{r} = 0.$$

Мейли, $\boldsymbol{dr}$ векторы бетке түсирилген нормал менен бағытлас болсын. Бундай жағдайда $\left|\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right|$ шамасы $|k|$ ның абсолют мәниси болып табылады. Фазалық тезликтиң анықламасы болған (19.7)-аңлатпаға сәйкес, (21.5)- ҳәм (21.6)-аңлатпалардан мынаны аламыз:

$$\left|\frac{d\varphi}{d\boldsymbol{r}}\right| = \frac{\left|\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right|}{\left|\frac{\partial\varphi}{\partial\boldsymbol{r}}\right|} = \frac{\omega}{k} = u.$$

(21.1)-толқын пакетиниң тарқалыўының группалық тезлиги (19.5)тиң жәрдеминде

$$\boldsymbol{v} = \frac{d\omega}{dk}. \tag{21.7}$$

Дерлик тегис толқын ушын $\boldsymbol{v}$ группалық тезликтиң k ның функциясы түринде көрсетилетуғынлығына итибар бериў керек (тегис толқын ушын тап усындай етип анықланады).

Оптикалық-механикалық аналогиядағы уқсас шамалар. 10-параграфта дәсте бойындағы траектория бойынша қозғалатуғын бир бири менен теппе-тең бөлекшелер системасының турақлы ҳәрекетиниң бетиниң тарқалыўы қаралды. Басланғыш ўақыт моментинде усындай бөлекшениң ҳәр бири ушын басланғыш шәртлер берилди. Бөлекшелердиң қозғалысының барысында олардың ҳәр қайсысының ҳәрекетиниң шамасы

$$S = \int_{t_0}^{t} L dt$$

теңлемеси бойынша өзгереди.

$S = const$ бетлериниң тарқалыўының (10.20) түриндеги дара туўындылы биринши тәртипли теңлеме менен тәрийипленетуғынлығы анықланған. Егер каноникалық түрлендириўди жүзеге келтиретуғын функция сыпатында бөлекшелердиң ҳәрекетиниң өзин алатуғын болсақ, онда бул теңлемеге $V = S$ ти қойыў керек болады.

Гамильтон-Якоби теңлемеси (21.4) түриндеги турақлы фазаның бетиниң тарқалыўының теңлемесине жүдә усайды. Мысалы, турақлы фазаның бетиниң тарқалыўының теңлемесин былайынша жазыўға болады:

$$\sqrt{u^2(\nabla\varphi)^2} = -\frac{\partial\varphi}{\partial t}.$$

Бундай жағдайда теңликтиң шеп бөлими импульстиң орнына толқын векторы $\boldsymbol{k} = \nabla\varphi$, ал координаталық ғәрезлик u шамасы арқалы киретуғын гамильтонианға усайды. Егер еркин бөлекшениң Гамильтон функциясы (14.2) ге $m = 0$ ди қойса ҳәм H ты $-\frac{\partial S}{\partial t}$, ал $\boldsymbol{p}$ ны ∇S пенен алмастырса, онда (21.4) теңлеме релятивистлик формадағы Гамильтон-Якоби теңлемесин оннан да жақсырақ еске түсиретуғын болады.

Солай етип, орталықтығы жақтылық нурларының таркалыўы массасы ноллик болған бөлекшелердиң қозғалысына усайды екен. "Әдеттеги" материаллық бөлекшелердиң механикасы Гамтльтон-Якоби теңлемеси менен қалайынша тәрийипленетуғын болса, усындай бөлекшелердиң механикасы (21.4)-теңлемениң жәрдеминде анықланады.

Механикадағы қәлеген шамаға геометриялық оптикада соған усаған шама жуўап береди. Усындай уқсас шамаларды табыў ушын фазаны ҳәрекет пенен салыстырыўдан баслаў керек. Бундай жағдайда энергияға жийилик, импульске толқын векторы жуўап береди. Ҳақыйкатында да, (10.26) ҳәм (21.6) ға сәйкес E ниң ω ға сәйкес келетуғынлығы көринип тур:

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t}, \qquad \omega = -\frac{\partial \varphi}{\partial t}.$$

Ал, (10.24) пенен (21.5) тен $\boldsymbol{k}$ менен $\boldsymbol{p}$ ның арасындағы сәйкеслик көринеди:

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial S}{\partial \boldsymbol{r}}, \qquad \boldsymbol{k} = \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{r}}.$$

Бирақ, бул жағдайда (10.27) ге сәйкес турақлы ҳәрекет бетиниң тезлиги менен турақлы фазаның тезлиги ушын бир бирине жүдә усаған аңлатпалар алынады:

$$\frac{E}{|\boldsymbol{p}|} \text{ ҳәм } \frac{\omega}{|\boldsymbol{k}|}.$$

Ең ақырында, толқын пакетиниң тезлигиниң бөлекшелердиң өзлериниң қозғалыс тезлигине уқсас екенлигин көремиз:

$$\boldsymbol{v}_{\text{бөлекше}} = \frac{dE}{d\boldsymbol{p}}, \qquad \boldsymbol{v}_{\text{пакет}} = \frac{d\omega}{d\boldsymbol{k}}.$$

18-параграфта бир есаплаў системасынан екиншисине өткендеги энергия менен импульстиң түрлениў нызамына сәйкес келетуғын жийилик пенен толқын векторының түрлениў нызамы табылды.

Бир бирине сәйкес келетуғын жағдайдағы оптикалық ҳәм механикалық шамалар бек бирликлери бойынша айрылады. Фаза ноллик өлшемге, ал ҳәрекет болса $\int Ldt$ бирлигине, яғный $g \cdot sm^2/sek$ бирлигине ийе. Усыған сәйкес, толқын векторы менен импульс те, жийилик пенен энергия да өзиниң бирликлери менен айрылады. Барлық жағдайларда да пропопрционаллық коэффициентиниң мәниси бирдей болыўы керек, егер бундай болмағанда оптикалық-механикалық аналогия релятивистлик инвариантлық характерге ийе болмаған болар еди. Биз кейинирек бул коэффициенттиң ҳәрекет кванты ямаса Планк турақлысы h екенлигин көремиз.

Келеси параграфта оптикалық-механикалық аналогияның квантлық механиканың толқын теңлемесинен классикалық механиканың теңлемесине өтиў менен байланыслы болған шеклик жағдай екенлигин көремиз. Тап усындай шеклик жағдайды электродинамиканың толқын теңлемесинен жақтылық нурларының тарқалыў теңлемесине өткенде көриўге болады.

ШЫНЫҒЫЎ

Фазаның ҳәрекетке уқсас екенлигинен келип шыққан ҳалда берилген жийиликке ийе жақтылықтың турақлы фазаның тарқалыў ўақыты ең киши мәниске ийе болатуғын траектория бойынша қозғалатуғынлығын көрсетиңиз (Ферма принципи).

Шешими. Турақлы жийиликте ўақыттың бир моментине келтирилген 1-ноқаттан 2-ноқатқа тарқалатуғын толқынның фазасының өзгериси мынаған тең:

$$\varphi = \int_1^2 \boldsymbol{k}\, d\boldsymbol{r} = \omega \int_1^2 \frac{\boldsymbol{n}\, d\boldsymbol{r}}{u}.$$

$\boldsymbol{n}\, d\boldsymbol{r}$ көбеймеси оған перпендикуляр болған беттиң орын алмасыўы, ал $\frac{\boldsymbol{n}\, d\boldsymbol{r}}{u}$ шамасы орын алмасыў ушын кеткен ўақыт болып табылады. Вариациялық принципке сәйкес (бул принципти ҳәрекеттиң шамасы қандай болып қанаатландырса, оған уқсас болған фаза да қанаатландырады) ўақыт $t = \int_1^2 dt$ ең киши мәниске ийе болыўы керек.

Механикада усындай принцип бөлекшениң энергиясы турақлы болған жағдайда орын алады. Бундай жағдайда ҳәрекетти былайынша жазыў керек

$$S = \int \boldsymbol{p}\, d\boldsymbol{r}.$$

Бирақ, импульс $\boldsymbol{p}$ ны әдетте турақлы ҳәрекет бети менен емес, ал бөлекшениң өзиниң тезлиги менен байланыстырады (Эйлер—Мопертюидиң ең киши ҳәрекет принципи).

§ 36. НУРЛАНЫЎДЫҢ КВАНТЛЫҚ ТЕОРИЯСЫ

Вакуумдағы электромагнит майданын механикалық системасы сыпатында қараўға болады (бул "Электромагнит майданы ушын ҳәрекет" деп аталатуғын 15-параграфта көрсетилди). Бундай майдан Лагранж функциясына, ҳәрекетке ҳ.т.б. ийе. Сонлықтан электромагнит майданының квантланыўы, яғный оған квантлық механиканы пайдаланыў машқаласын қойыў нызамлы ис болып табылады.

Электродинамиканың ноқатлық массалар механикасынан тийкарғы өзгешелиги электромагнит майданының еркинлик дәрежесиниң үзликсиз тарқалыўында: берилген ўақыт моментиндеги майданды бериў ушын оның кеңисликтиң ҳәр бир ноқатындағы мәнисин бериў керек. Бундай мәнисте электродинамика суйықлықтың ямаса серпимли денениң механикасына усайды (егер оны тутас дене деп есапласа ҳәм заттың атомлық қурылысына итибар берилмесе). Кеңисликтиң ноқатларының координаталары майданның еркинлик дәрежесин номерлегендей болады, ал потенциалдың амплитудаларының мәнислери улыўмаласқан координаталарды береди.

Усындай жоллар менен анықланған электромагнит майданның координаталары бир биринен ғәрезсиз болмайды. Ҳақыйқатында да, электромагнит майданның теңлемелери координаталар бойынша туўындыларға ийе болады (яғный бир бирине шексиз киши болған ноқатлардағы майданның айырмалары). Бундай мәнисте майданның теңлемеси байланысқан тербелислер ушын жазылған теңлемелерди еске салады: олар сызықлы, бирақ кеңисликтиң шексиз жақын ноқатлары ушын алынған бир емес, ал бир неше улыўмаласқан координаталарға ийе болады. Байланысқан тербелислердиң теңлемелери өз-ара ғәрезсиз болған нормаль координаталарға алып келинеди ("Киши тербелислер" деп аталатуғын § 7). Тап усындай математикалық операцияларды электродинамиканың теңлемелери менен де ислеўге ҳәм усының менен бирге олардағы ғәрезли болған өзгериўшилерди ажыратыўға болады. Бул квантлық механиканы нурланыўға қолланыўды жүдә әпиўайыластырады.

Бул жерде аналитикалық механиканың усылларының улыўмалығы айқын көринеди: олар кейин квантлық механиканы бир мәнисли қолланыў ушын улыўмаластырылған координаталар менен импульслерди анықлаўға мүмкиншилик береди.

Туйық көлемдеги электромагнит майданы. Ең алды менен электромагнит майданды базы бир жабық система деп қараў зәрүрли, себеби квантлық механиканы тап усындай системалар ушын қолланыў қолайлы. Мысалы, электромагнит майданын шағылыстырыўшы дийўаллары бар қутының ишине салынған деп болжаў мүмкин. Ойымыздағы усындай қутының дийўалларында ($x = 0$ ямаса $x = a_1$, $y = 0$ ямаса $y = a_2$, $z = 0$ ямаса $z = a_3$) Пойнтинг векторының нормаль қураўшылары нолге айланады.

Барлық кеңисликти усындай қутылар менен толтырамыз ҳәм ҳәр бир қутының сәйкес ноқатында майдан тек бир мәниске ийе болады деп болжаймыз. Бундай майдан кеңисликтеги барлық үш бағыт бойынша дәўирли:

$$\boldsymbol{A}(x, y, z) = \boldsymbol{A}(x + a_1, y, z) = \boldsymbol{A}(x, y + a_2, z) = \boldsymbol{A}(x, y, z + a_3) \qquad (36.1))$$

Бирақ, егер дийўалларды алып тасласақ, майдан бәрибир дәўирли болып қала береди. Себеби оның ҳәр бир мәниси кеңисликтиң ҳәр бир ноқатында бирдей болған фундаменталлық тезлик c менен қозғалады. Сонлықтан майдан ушын (36.1) дәўирлик шәртин қойыў жеткиликли, ал дийўаллардан пүткиллей бас тартыў керек. Бул есаплаўларды сезилерликтей әпиўайыластырады, ал ең ақырғы нәтийжелер анаў ямаса мынаў жәрдемши усыллардан ғәрезли бола алмайды.

Бослықтағы электромагнит майданын тәрийиплейтуғын теңлемелердиң шешими "Тегис электромагнит майданы" деп аталатуғын § 18 де табылды. Майданға дәўирлик шәрти қойылғанлықтан, оны барлық үш бағыт бойынша Фурье қатарына жайыўға болады (яғный айырым гармоникалық қураўшылар арқалы көрсетиўге болады). Бул қураўшылардың ҳақыйқый шамалар болыўы керек. Оларда тек координаталардан айқын ғәрезликти аңғартып, (18.25) ке сәйкес бир гармоникалық қураўшы ушын мынаны жаза аламыз:

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) = \boldsymbol{A}_k e^{i\boldsymbol{kr}} + \boldsymbol{A}_k^* e^{-i\boldsymbol{kr}}. \qquad (36.2)$$

Бул жазыўдан векторлық $\boldsymbol{A}$ потенциалының затлық екенлиги көринип тур.

Бослықтағы майдан қарап атырғанлықтан (зарядлар жоқ болған жағдайда) скаляр потенциалды нолге тең деп алыўға болады[2]. Бундай жағдайда векторлық потенциал ушын (12.42)-Лоренц шәрти $\operatorname{div} A = 0$, яғный (см. (11.27)):

---

[2] Улыўма айтқанда векторлық потенциал - магнит майданын есаплаў ушын пайдаланылатуғын векторлық майдан, ал скаляр потенциал болса электр майданын есаплаў ушын қолланылатуғын скаляр майдан болып табылады. Олардың екеўи де электромагнит майданды есаплаўдағы әҳмийетли шамалар болып табылады. Басқа сөзлер менен айтқанда, векторлық таллаўдағы векторлық потенциал - роторы берилген векторлық майданға тең векторлық майдан болып табылады. Скаляр потенциал болса градиенти берилген векторлық майданға тең скаляр майдан сыпатында анықланады.

Егер $\boldsymbol{v}$ векторлық майдан болса, онда векторлық потенциал деп

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}$$

$$\operatorname{div} A(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}) = \operatorname{div}\,(\boldsymbol{A}_k e^{i\boldsymbol{kr}}) + \operatorname{div}\,(\boldsymbol{A}_k^* e^{-i\boldsymbol{kr}}) =$$
$$= (\boldsymbol{A}_k \nabla e^{i\boldsymbol{kr}}) + (\boldsymbol{A}_k^* \nabla e^{i\boldsymbol{kr}}) = i(\boldsymbol{kA}_k)e^{i\boldsymbol{kr}} - i(\boldsymbol{kA}_k^*)e^{-i\boldsymbol{kr}} = 0.$$

Бул теңликтиң барлық $\boldsymbol{r}$ лерде орынланыўы ушын ҳәр бир экспонентаның алдында турған коэффициенттиң нолге тең болыўы керек. Басқа сөз бенен айтқанда $\boldsymbol{A}_k$ ҳәм $\boldsymbol{A}_k^*$ векторлары $\boldsymbol{k}$ толқын векторына перпендикуляр:

$$(\boldsymbol{kA}_k) = 0, \qquad (\boldsymbol{kA}_k^*) = 0. \tag{36.3}$$

Ҳәр бир $\boldsymbol{k}$ ушын толқынның мүмкин болған еки поляризациясына сәйкес келетуғын өз-ара перпендикуляр болған еки $\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}^{\sigma}$ $(\sigma = 1{,}2)$ вектор болады. $\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}^{(1)}$ менен $\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}^{(2)}$ векторларын өз-ара перпендикуляр етип сайлап алған тәбийий. $\boldsymbol{k}$ ға перпендикуляр болған тегисликтеги қәлеген векторды $\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}^{(1)}$ менен $\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}^{(2)}$ векторларына жайыўға болады.

Енди, дәўирлилик шәрти болған (36.1) ди (36.2) теги ҳәр бир қосылыўшыға айырым түрде қолланамыз. Нәтийжеде мынаны аламыз:

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}} e^{i[k_x(x+a_1) + k_y y + k_z z]} =$$
$$= \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}} e^{i[k_x x + k_y(y+a_2) + k_z z]} = \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}} e^{i[k_x x + k_y y + k_z(z+a_3)]}.$$

Буннан

$$e^{ik_x a_1} = e^{ik_y a_2} = e^{ik_z a_3} = 1$$

теңликлери келип шығады. Сонлықтан, толқын векторының қураўшылары мынаған тең:

$$k_x = \frac{2\pi n_1}{a_1}, k_y = \frac{2\pi n_2}{a_2}, k_z = \frac{2\pi n_3}{a_3}. \tag{36.4}$$

Бул аңлатпада n_1, n_2 ҳәм n_3 арқалы қәлеген белгиге ийе пүтин санлар белгиленген.

Демек, ҳәр бир гармоникалық тербелис үш n_1, n_2, n_3 пүтин санлары ҳәм еки мәнисти қабыл ететуғын σ поляризация менен бериледи екен. Жоқарыда айтылғанындай, улыўмаласқан координата болып $\boldsymbol{A}_{n_1,n_2,n_3}^{\sigma}$ шамалары хызмет етеди. Бундай координаталардың саны шексиз үлкен, бирақ, олар үзликсиз жыйнақты емес, ал кеңисликтиң барлық ноқатларының жыйнағына усаған есаплағандай көпликти пайда етеди.

Дәўирлилик шәрти менен киргизилетуғын тийкарғы әпиўайыластырыўдың мәниси усыннан ибарат. Бул шәрттиң тек математикалық қолайлықты пайда етиў ушын ғана келип шыққанлығы түсиникли: тийкарғы дәўирлер болған a_1, a_2, a_3 шамаларының ҳеш қайсысы ең ақырғы нәтийжелерге кирмейди.

Электромагнит майданы берилген болып табылады, егер n_1, n_2, n_3 шамаларының барлық мәнислери ушын оның тербелислериниң амплитудалары

түринде анықланатуғын $\boldsymbol{A}$ векторлық майданына айтамыз. Мысалы, СИ системасында жазылған

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}$$

теңлемесинде $\boldsymbol{E}$ векторлық майдан болып табылады. Бундай жағдайда $-\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}$ шамасы векторлық потенциалдың хызметин атқарады. $\boldsymbol{E} = -grad\,\varphi$ теңлигинде φ арқалы векторлық $\boldsymbol{E}$ майданның скаляр функциясы (скаляр потенциалы) белгиленген (аўдарыўшы).

белгили болса. Электродинамиканың теңлемелериниң сызықлы екенлигине байланыслы олардың улыўмалық шешими дара шешимлердиң суммасына тең (36.2):

$$A(\boldsymbol{r}) = \sum_{k,\sigma} A_k^\sigma(\boldsymbol{r}) = \sum_{k,\sigma} (A_k^\sigma e^{i\boldsymbol{kr}} + A_k^{\sigma*} e^{-i\boldsymbol{kr}}). \tag{36.5}$$

Бул биз излеп атырған Фурье қатары болып табылады.

Майданның энергиясы. Нормаль координаталарды қурыў ушын (36.5) қатардың зәрүрли болған барлық мағлыўматларды беретуғынлығын көрсетемиз. Оның ушын майданның энергиясын A_k^σ арқалы көрсетиў керек. Электр майданы улыўмалық болған (12.35)-формула бойынша есапланады[3]. Бул формуладан $\varphi = 0$ болған жағдайде электр майданы ушын:

$$\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} = -\frac{1}{c}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\left(\dot{A}_k^\sigma e^{i\boldsymbol{kr}} + \dot{A}_k^{\sigma*} e^{-i\boldsymbol{kr}}\right), \tag{36.6}$$

ал магнит майданы ушын

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H} = rot\,\boldsymbol{A} &= \sum_{\boldsymbol{k},\sigma}([\nabla e^{i\boldsymbol{kr}}, A_k^\sigma] + [\nabla e^{-i\boldsymbol{kr}}, A_k^\sigma]) = \\ &= i\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}([\boldsymbol{k}, A_k^\sigma]e^{i\boldsymbol{kr}} - [\boldsymbol{k}, A_k^\sigma]e^{-i\boldsymbol{kr}}) \end{aligned} \tag{36.7}$$

түриндеги аңлатпаға ийе боламыз.

Енди мәниси (15.24'')-аңлатпаға сәйкес

$$E = \frac{1}{8\pi}\int(|\boldsymbol{E}|^2 + |\boldsymbol{H}|^2)dV \tag{36.8}$$

шамасына тең болған электр майданының энергиясын есаплаймыз. $|\boldsymbol{E}|^2$ ушын k, k', σ, σ' бойынша төртлик сумманы есаплаймыз:

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{E}|^2 = \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} \frac{1}{c^2}(&\dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma \dot{\boldsymbol{A}}_{k'}^{\sigma'} e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}} + \dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma \dot{\boldsymbol{A}}_{k'}^{\sigma'^*} e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}} + \\ &+\dot{\boldsymbol{A}}_{k'}^{\sigma'^*} \dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}} + \dot{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma^*} \dot{\boldsymbol{A}}_{k\prime}^{\sigma\prime} e^{i(\boldsymbol{k}+)\boldsymbol{r}}). \end{aligned} \tag{36.9}$$

$|\boldsymbol{E}|^2$ шамасын көлем бойынша интеграллағанда интегралды сумма белгисиниң ишине өткериў керек Бундай жағдайда ҳәр бир интеграл төмендегидей түрдеги үш интегралдың көбеймесине бөлинеди:

$$\int_0^{a_1} e^{i(k_x+k_x')x}dx = \int_0^{a_1} e^{\frac{2\pi ix}{a_1}(n_1+n_1')}dx = \frac{a_1\left[e^{\frac{2\pi ix}{a_1}(n_1+n_1')} - 1\right]}{2\pi i(n_1+n_1')} = 0. \tag{36.10}$$

Егер $n_1 + n_1' = 0$ теңлиги орынланатуғын жағдайларда бул интеграл a_1 шамасына тең болады. Сонлықтан үшлик интеграл мынадай аңлатпаға алып келинеди:

---

[3] (12.23)-формула мынадай түрге ийе:

$$\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \nabla\varphi.$$

Бул формулада $\boldsymbol{A}$ арқалы векторлық потенциал, ал φ арқалы скаляр потенциал белгиленген.

$$\int_0^{a_1} e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}}dr = a_1a_2a_3\delta_{n_1,-n_1'}\delta_{n_2,-n_2'}\delta_{n_3,-n_3'} = V\delta_{\boldsymbol{k},-\boldsymbol{k}'}. \qquad (36.11)$$

Демек, $\int|\boldsymbol{E}|^2dV$ аңлатпасындағы $\boldsymbol{k}$ ҳәм $\boldsymbol{k}'$ бойынша қос сумма бир қайтара алынатуғын суммаға алып келинеди, бундай жағдайда $\dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma\dot{\boldsymbol{A}}_{k'}^{\sigma'}$ көбеймеси бар болған ағзаларда $\boldsymbol{k}'$ ты $-\boldsymbol{k}$ ға алмастырыў, ал $\dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma\dot{\boldsymbol{A}}_{k'}^{\sigma'^*}$ көбеймеси бар болған көбеймедеги $\boldsymbol{k}'$ ты $\boldsymbol{k}$ ға алмастырыў керек болады. Себеби $\dot{\boldsymbol{A}}_{k'}^{\sigma'^*}$ шамасының алдында $e^{-i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}}$ көбейтиўшиси турады. Солай етип,

$$\int|\boldsymbol{E}|^2dV = \frac{V}{c^2}\sum_{k,\sigma,\sigma'}(\dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma\dot{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma'^*} + \dot{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*}\dot{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma'} + \dot{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma'}\dot{\boldsymbol{A}}_{-k}^{\sigma'} + \dot{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*}\dot{\boldsymbol{A}}_{-k}^{\sigma'^*}). \qquad (36.12)$$

Бирақ, егер $\sigma = \sigma'$ теңлиги орынланатуғын болса, онда $\dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma$ ҳәм $\dot{\boldsymbol{A}}_{-k}^{\sigma'}$ векторлары перпендикуляр. Сонлықтан, σ менен σ' бойынша қос сумманың орнына σ бойынша бир сумма қалады:

$$\int|\boldsymbol{E}|^2dV = \frac{V}{c^2}\sum_{k,\sigma,\sigma'}(2\dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma\dot{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma'^*} + \dot{\boldsymbol{A}}_k^\sigma\dot{\boldsymbol{A}}_{-k}^\sigma + \dot{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*}\dot{\boldsymbol{A}}_{-k}^{\sigma'^*}). \qquad (36.13)$$

Магнит майданының квадратынан алынған интегралды есаплағанда да (36.11)-формуладан пайдаланыў керек. Бирақ, $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k}$ теңлиги орынлы болатуғын жағдайларда $[\boldsymbol{kA}_{k'}^{\sigma'}]$ көбеймеси $-[\boldsymbol{kA}_{-k}^{\sigma'}]$ кобеймеси менен алмастырылады. Сонлықтан

$$\int|\boldsymbol{V}|^2dV = V\sum_{k,\sigma,\sigma'}([\boldsymbol{kA}_k^\sigma][\boldsymbol{kA}_{-k}^\sigma] + [\boldsymbol{kA}_k^{\sigma*}]\big[\boldsymbol{kA}_{-k}^{\sigma'^*}\big] + 2[\boldsymbol{kA}_k^\sigma][\boldsymbol{kA}_{-k}^{\sigma'^*}]). \qquad (36.14)$$

Векторлық көбеймелер белгили болған формулалар бойынша аңлатылады

$$[\boldsymbol{kA}_k^\sigma]\big[\boldsymbol{kA}_k^{\sigma'^*}\big] = k^2\boldsymbol{A}_k^\sigma\boldsymbol{A}_k^{\sigma'^*} - (\boldsymbol{kA}_k^\sigma)\big(\boldsymbol{kA}_k^{\sigma'^*}\big) = k^2\boldsymbol{A}_k^\sigma\boldsymbol{A}_k^{\sigma'^*}. \qquad (36.15)$$

Бул аңлатпада (36.3) тиң көлденеңлиги есапқа алынған. $\sigma \neq \sigma'$ теңсизлиги орынланғанда (36.15) нолге айланады. Демек,

$$\int|\boldsymbol{V}|^2dV = V\sum_{k,\sigma,\sigma'}k^2(2\boldsymbol{A}_k^\sigma\boldsymbol{A}_k^{\sigma*} + \boldsymbol{A}_k^{\sigma*}\boldsymbol{A}_{-k}^{\sigma*} + \boldsymbol{A}_k^\sigma\boldsymbol{A}_{-k}^\sigma). \qquad (36.16)$$

Егер $\boldsymbol{A}_k^\sigma$ пенен $\boldsymbol{A}_k^{\sigma*}$ ларды квантлық операторлар деп қарайтуғын болсақ ҳәм оларды

$$\widehat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma = \sqrt{\frac{\pi c^2}{V}}\left(\widehat{Q}_k^\sigma + \frac{i\widehat{P}_k^\sigma}{\omega_k}\right)\boldsymbol{e}_k^\sigma, \qquad (36.17)$$

$$\widehat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*} = \sqrt{\frac{\pi c^2}{V}}\left(\widehat{Q}_k^\sigma - \frac{i\widehat{P}_k^\sigma}{\omega_k}\right)\boldsymbol{e}_k^\sigma \qquad (36.17')$$

формулаларына сәйкес сызықлы гармоникалық осциллятордың координаталары менен импульслери арқалы көрсетсек, онда электромагнитлик майдан (36.8) диң энергиясы бир биринен ғәрезсиз болған сызықлы гармоникалық осцилляторлардың энергиясының қосындысына алып келинеди. (36.17)- ҳәм (36.17')-формулалардағы $\boldsymbol{e}_k^\sigma$ арқалы электромагнит майданының поляризациясының бирлик векторы белгиленген, $\omega_k = ck$.

Егер $\hat{Q}_k^\sigma$ менен $\hat{P}_k^\sigma$ лар сызықлы гармоникалық осциллятордың координаталары менен импульслериниң операторы болатуғын болса, онда $m = 1$ теңлиги орын талатуғын квантлық қозғалыс теңлемелери болған (27.18)- ҳәм (27.19)-теңлемелерди қанаатландырады:

$$\dot{\hat{Q}}_k^\sigma = \hat{P}_k^\sigma \tag{36.18}$$

$$\dot{\hat{P}}_k^\sigma = -\omega_k^2 \hat{Q}_k^\sigma \tag{36.19}$$

Бундай жағдайда (36.17)- ҳәм (36.17')-формулалардан мыналар келип шығады:

$$\dot{\hat{\boldsymbol{A}}}_k^\sigma = \sqrt{\frac{\pi c^2}{V}}\left(\dot{\hat{Q}}_k^\sigma + \frac{i\dot{\hat{P}}_k^\sigma}{\omega_k}\right)\boldsymbol{e}_k^\sigma = i\omega_k\sqrt{\frac{\pi c^2}{V}}\left(\hat{Q}_k^\sigma + \frac{i\hat{P}_k^\sigma}{\omega_k}\right)\boldsymbol{e}_k^\sigma = \\ = -i\omega_k \hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma, \tag{36.19'}$$

$$\dot{\hat{\boldsymbol{A}}}_k^{\sigma*} = \sqrt{\frac{\pi c^2}{V}}\left(\dot{\hat{Q}}_k^\sigma + \frac{i\dot{\hat{P}}_k^\sigma}{\omega_k}\right)\boldsymbol{e}_k^\sigma = i\omega_k\sqrt{\frac{\pi c^2}{V}}\left(\hat{Q}_k^\sigma - \frac{i\hat{P}_k^\sigma}{\omega_k}\right)\boldsymbol{e}_k^\sigma = \\ = i\omega_k \hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma, \tag{36.19''}$$

Егер бул аңлатпаларды (36.13) ке қойсақ, онда қаўсырманың ишиндеги соңғы еки ағза мынаны береди:

$$\dot{\hat{\boldsymbol{A}}}_k^\sigma \dot{\hat{\boldsymbol{A}}}_{-k}^\sigma + \dot{\hat{\boldsymbol{A}}}_k^{\sigma*} \dot{\hat{\boldsymbol{A}}}_{-k}^{\sigma*} = -\omega_k^2\left(\hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma \hat{\boldsymbol{A}}_{-k}^\sigma - \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*} \hat{\boldsymbol{A}}_{-k}^{\sigma*}\right).$$

$\int |\boldsymbol{E}|^2 dV$ интегралындағы бул еки ағзаны толық энергия ушын формулаға қойған жағдайда $\int |\boldsymbol{H}|^2 dV$ интегралындағы, яғный (36.14)-аңлатпадағы соңғы еки ағза менен қысқарады. $\hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma$ операторы менен $\hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*}$ операторларының көбеймедеги орынларын алмастырып қойыўға болады. Сонлықтан, энергияның классикалық аңлатпасынан квантлық аңлатпаға өтиў ушын $\hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*}$ ны $\frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*} + \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*} \hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma)$ менен алмастырыў керек. Оған (36.17)- ҳәм (36.17')-аңлатпаларды қойып, мынаны аламыз:

$$\frac{1}{8\pi}V\left(\frac{\hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*} + \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*} \hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma}{2c^2} + k^2\frac{\hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*} + \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*} \hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma}{2}\right) = \\ = \frac{(\hat{P}_k^\sigma)^2 + \omega_k^2(\hat{Q}_k^\sigma)^2}{2}. \tag{36.20}$$

Демек, массасы бирге тең болған сызықлы гармоникалық осциллятор ушын жазылған аңлатпаға ийе болдық.

Егер $\hat{\boldsymbol{A}}_k^\sigma \hat{\boldsymbol{A}}_k^{\sigma*}$ көбеймесин симметрияластырмасақ, онда энергия буннан былай әҳмийетке ийе болмайтуғын турақлы қосындыға ийе болады. Бирақ, (36.20)-форму осциллятордың гамильтонианы ушын стандарт. Гамильтонианды усындай формаға алып келгенде гамильтониан ушын жазылған (36.20)-формуладан қозғалыстың квантлық теңлемеси сыпатында алынатуғын (36.18)- ҳәм (36.19)-теңлемелердиң дурыс екенлигин ақладық.

Квантлар. Биз жоқарыда зарядларға ийе болмаған электромагнит майданның гамильтонианының толқын векторы $\boldsymbol{k}$ менен бир σ поляризацияға жуўап беретуғын сызықлы гармоникалық осцилляторлардың гамильтонианларының суммасы түринде анлатылатуғынлығын көрдик. Бул осцилляторларға 27-параграфта алынған барлық квантланыў қағыйдаларын қолланыўға болады. Басқа сөзлер менен айтқанда олар ҳәр бир осциллятордың энергиясы болған диагоналлық болған көринисте тәрийипленеди.

Айырым осциллятордың меншикли энергиясының мәниси (27.23)- ҳәм (27.23')-формулалардың жәрдеминде анықланады:

$$E_k^\sigma = \hbar\omega_k \left(N_{k,\sigma} + \frac{1}{2}\right). \qquad (36.21)$$

Бул аңлатпада $\frac{\hbar\omega_k}{2}$ қосылыўшысы осциллятордың тийкарғы ҳалына жуўап береди, ал $N_{k,\sigma}$ саны болса майданда жийилиги ω ҳәм толқын векторы $\boldsymbol{k}$, поляризациясы ω болған квантлардың санын көрсетеди.

Энергияны қалайынша есаплаған болсақ, тап сондай жоллар менен электромагнит майданның импульсин де есаплаўға болады (2-шынығыў). Бундай жағдайда $\boldsymbol{k}$, σ осцилляторына $p_k^\sigma = \hbar\boldsymbol{k}\left(N_{k,\sigma} + \frac{1}{2}\right)$ импульсиниң де сәйкес келетуғынлығы, яғный квант ушын бурынырақ алынған энергия менен импульс арасындағы қатнас тастыйықланады. Солай етип, квантлар электромагнит майданның қәсийетлери ҳаққындағы қосымша гипотеза емес, ал квантлық қозғалыс нызамларын майданға қолланыўдың нәтийжеси болып табылады.

Квантлар "жақтылықтың тәбиятын түсиндиреди" деп ойлаў дурыс емес. Тап усындай табыс пенен $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ аңлатпасы тербелмели қозғалыстың тәбиятын түсиндиреди деп болжаўға болады.

Квантты бизди (36.21)-формулаға алып келген қандай да бир математикалық ҳийлениң нәтийжеси деп қараўға пүткиллей болмайды. Квант электрон сыяқлы тап сондай болған ҳақыйқый бөлекше. Мысалы, электронлардағы рентген нурларының квантлары шашырағанда ҳәр бир айырым кванттың энергиясы $\hbar\omega$ менен импульси $\hbar$k қәлеген басқа бөлекшелердиң соқлығысыўындағыдай энергия менен импульстиң сақланыў нызамына киреди. Кванттың жийилиги шашырағанда оның энергиясына пропорционал түрде кемейеди. Ишки спинлик еркинлик дәрежесине ийе электрондай, квант та поляризациялық еркинлик дәрежесине ийе. Бирақ оны ½ ге тең спин менен теңлестириўге болмайды, себеби квант векторлық шама болған вектор-потенциал менен тәрийипленеди, ал ½ спин болса тәрийиплениўи ушын спинорларды талап етеди (§ 30).

Бул жағдай және бир әҳмийетли жағдай менен байланыслы: квант ямаса электрон ушын белгили болған шеклердеги классикалық теорияға өтиў пүткиллей ҳәр қыйлы болып орынланады. Классикалық механикаға өткенде квантқа ҳеш нәрсе жуўап бермейди: $\hbar$ тың шамасы нолге умтылғанда кванттың энергиясы да, импульси де, яғный $\hbar\omega$ менен $\hbar$k шамалары нолге умтылады. Электрон ушын жағдай басқаша оның энергиясы менен импульси квантлық шамалардан классикалық шамаларға өтеди.

Қозғалыстың толқынлық қәсийети менен байланыслы болған жағдай басқаша. Классикалық теорияға шеклик өтиўде ҳәр бир кванттың энергиясын шексиз киши, ал олардың саны $N_{k,\sigma}$ ны шексиз үлкен деп есапланады. Нәтийжеде толқынның амплитудасы шекли болып қала береди.

Электронлардың спини ярым пүтин болғанлықтан Паули принципине бағынады: ҳәр бир ҳалда бирден көп болған электронның жайласыўы мүмкин емес. Усыған сәйкес, классикалық шеклик өтиўде электронның толқын функциясына (сонлықтан оның қозғалысының толқынлық қәсийетине) ҳеш нәрсе жуўап бермейди. Толқынлық қозғалыс тек квантлық теорияда пайда болады.

Электромагнит толқынның амплитудасын квантлық толқын функциясы менен теңлестириўге болмайтуғынлығын ҳәм бундай жағдайда электрон ушын итималлықтың амплитудасының не екенлигин атап өтиў керек. Толқынның амплитудасының квадраты арқалы майданның энергиясының тығызлығы аңғартылады, ал квантлардың тығызлығы аңғартылмайды. Егер биз квантлардың тығызлығына өтетуғын болсақ, онда бул шаманы ҳәр бир жийилик ушын ω ның сәйкес мәнисине бөлиў керек болады. Импульслик көринисте квантлардың тығызлығы усылай аңғартылған болар еди. Бирақ, импульслик көринистен Фурье түрлендириўиниң жәрдеминде алынатуғын координаталарық көринисте квантлардың тығызлығының толқынның амплитудасының квадраты ямаса оның туўындылары арқалы аңлатылыўы мүмкин емес. Себеби координаталық көриниске өткендеги жийиликке бөлиў операторы δ-функцияны ямаса оннан алынған туўындыларды бермейди.

Енди барлық $N_{k,\sigma} = 0$ болған жағдайдағы майданның ҳалын қараймыз. Бул майданның тийкарғы ҳалы екенлиги ҳәм оның вакуум деп аталатуғынлығы (квантларға қатнасы бойынша) айқын. Бул ҳалда майдан көрсетилетуғын барлық айырым осцилляторлар тийкарғы ҳалда турады. Бирақ, § 28 де көрсетилип өтилгениндей, осциллятордың тийкарғы ҳалында оның координатасы нолге тең емес: ол қатаң түрде белгили болған мәниске ийе емес. Координатаның базы бир мәнисиниң итималлығы болған Q_k^σ шамасы осцилляторлық толқын функциясының квадраты $[\psi_0(Q_k^\sigma)]^2$ ның жәрдеминде тәрийипленеди (бул толқын функциясының квантларға қатнасы жоқ - ол майданның белгили мәнислериниң итималлығын береди!).

Солай етип, электромагнит майданның тийкарғы ҳалында (вакуумда) квантлар болмаған жағдайда майданның өзи нолге айланбайды. Оның амплитудасы A осцилляторлардың координаталары Q_k^σ арқалы бериледи. Бул буннан кейинги параграфта гәп етилетуғын бақланатуғын эффектлерге алып келинеди.

Электромагнит майдан менен зарядланған бөлекше арасындағы өз-ара тәсирлесиў. Буннан былай биз радиациялық өтиўлерди, яғный зарядланған бөлекшелер менен өз-ара тәсирлесиўдиң барысында квантты шығарыў ҳәм жутыў процесслери менен танысамыз. Оның ушын өз-ара тәсирлесиўди тәрийиплейтуғын операторды табыў керек. Айырым заряд ушын сәйкес классикалық шама $\varphi = 0$ болған жағдайда (17.32)-теңлемеден алынады:

$$H' = -\frac{e}{mc}(\boldsymbol{pA}). \qquad (36.22)$$

Ол зарядтың қозғалысына қатнасы бойынша релятивистлик болмаған жақынласыўға жуўап береди: оның тезлиги жақтылықтың тезлигине салыстырғанда жүдә киши деп есапланады.

Операторларға өтиў ушын әдеттегидей $\boldsymbol{p}$ ны $\frac{\hbar}{i}\Delta$ менен алмастырыў, ал векторлық потенциалдың орнына (36.5) ке сәйкес келетуғын операторлық аңлатпаны қойыў керек. Бундай жағдайда (36.5) теги айырым гармоникалық толқынлардағы амплитудаларды (36.19')- ҳәм (36.19'')-операторлар менен алмастырылады.

Бул операторларды барлық ҳаллардағы квантлардың саны диагоналлық болатуғындай етип көрсетиўди келистик. Оның ушын $\hat{Q}_k^\sigma$ ҳәм $\hat{P}_k^\sigma$ операторларының орнына олардың матрицалық аңлатпалары (27.28) ди қойыў керек.

(27.28)-матрицалық аңлатпаларды еске түсиремиз:

$$x_{n,n'} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix},$$

$$p_{n,n'} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\begin{vmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{4} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \qquad (27.28)$$

Әпиўайылық ушын тийкарғы көлемди 1 ге тең деп есаплап, (36.19') ҳәм (36.19") операторларын (36.5)-аңлатпа болған векторлық потенциалдың жайылған қатарына қоямыз (себеби олар ақырғы формулалардан бәри бир түсип қалады):

$$\hat{A} = \sum_{k,\sigma}\sqrt{\pi c^2}\, e_k^\sigma\left[\left(\hat{Q}_k^\sigma + \frac{i\hat{P}_k^\sigma}{\omega_k}\right)e^{i\boldsymbol{kr}} + \left(\hat{Q}_k^\sigma - \frac{i\hat{P}_k^\sigma}{\omega_k}\right)e^{-i\boldsymbol{kr}}\right]. \qquad (36.23)$$

Демек, $\hat{Q}_k^\sigma + \frac{i\hat{P}_k^\sigma}{\omega_k}$ ҳәм $\hat{Q}_k^\sigma - \frac{i\hat{P}_k^\sigma}{\omega_k}$ шамаларының матрицаларын қурыў керек болады. (27.28)-матрицалардың жәрдеминде мыналарды табамыз:

$$\hat{Q}_k^\sigma + \frac{i\hat{P}_k^\sigma}{\omega_k} = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_k}}\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

$$\hat{Q}_k^\sigma - \frac{i\hat{P}_k^\sigma}{\omega_k} = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_k}}\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}. \qquad (36.24)$$

Буннан төмендегидей түрде белгиленетуғын матрицалардың өзлерин сайлап алыў қолайлы:

$$a_{k,\sigma} \equiv \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}, \qquad (36.25)$$

$$a_{k,\sigma}^{+} \equiv \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

Өтиўдиң итималлығын анықлайтуғын матрицалық элементте қатар системаның басланғыш ҳалына, ал бағана ақырғы (32.42) ҳалға жуўап береди. Солай етип, $a_{k,\sigma}^{+}$ матрицалық элементлер квантлардың саны 1 ге өзгеретуғын өтиўлерге, ал $a_{k,\sigma}$ матрицалық элементлер квантлар саны 1 ге кемейетуғын өтиўлерге жуўап береди. Усыған сәйкес $a_{k,\sigma}^{+}$ ны *квантты шығарыў операторы*, ал $a_{k,\sigma}$ ны *квантты жутыў операторы* деп атайды.

Егер базы бир ҳалда $N_{k,\sigma}$ квант бар болса, онда шығарыўдың матрицалық элементи $\sqrt{N_{k,\sigma}+1}$ шамасына, ал жутыўдың матрицалық элементи $\sqrt{N_{k,\sigma}}$ шамасына пропорционал. Өтиўдиң итималлығына матрицалық элементтиң квадраты киреди ҳәм шығарыў менен жутыўдың итималлығы $N_{k,\sigma}+1$ ҳәм $N_{k,\sigma}$ шамаларына ийе болады.

Демек, ҳәтте электромагнит майданының берилген ҳалында квантлар болмаған жағдайда да ($N_{k,\sigma}=0$) олардың нурландырыўшы система тәрепинен шығарылыўы мүмкин. Усындай шығарыўды *спонтан* (өзинен-өзи) шығарыў деп атайды. Шығарыў итималлығындағы $N_{k,\sigma}$ шамасына пропорционал болған қосылыўшы оның мәжбүрий бөлимин тәрийиплейди. Классикалық теорияға шеклик өтиў $N_{k,\sigma} \to \infty$ шамасына сәйкес келеди ҳәм квантты спонтан шығарыў бөлими есапқа алмастай киши шамаға айланады.

Енди базы бир зарядлар системасының квантты спонтан шығарыўының итималлығын табамыз. Егер (36.22)-аңлатпадағы $\widehat{\boldsymbol{p}}$ шамасын оператор деп қарайтуғын болсақ, онда оны векторлық потенциалға қатнасы бойынша қалайынша жазыўға болады деген сораўдың пайда болыўы мүмкин: (36.23)-аңлатпаға сәйкес векторлық потенциал координаталардан ғәрезли ҳәм, усы жағдайға байланыслы, улыўма жағдайда көбеймеде $\widehat{\boldsymbol{p}}$ менен орнын алмастырып қойыўға болады. Бирақ, көлденеңлик шәртине бвйланыслы $\widehat{\boldsymbol{p}}$ менен $\widehat{\boldsymbol{A}}$ ның тәртибиниң әҳмийетке ийе емес екенлиги келип шығады. Ҳақыйқатында да, $\operatorname{div}\widehat{\boldsymbol{A}}=0$ теңлиги орынлы болғанлықтан

$$\widehat{\boldsymbol{p}}\widehat{\boldsymbol{A}}\psi = \left(\frac{\hbar}{i}\operatorname{div}\widehat{\boldsymbol{A}}\right)\psi + \widehat{\boldsymbol{A}}\widehat{\boldsymbol{p}}\psi = 0$$

нәтийжесине келемиз.

Солай етип, дәслеп ψ_m толқын функциясы менен тәрийипленетуғын зарядлар системасы толқын векторы $\boldsymbol{k}$, поляризациясы σ болған $\hbar\omega_k$ квантын шығаратуғын болса, онда өтиўдиң матрицалық элементи мынаған тең болады:

$$H'_{n,\hbar\omega_k;m,0} = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\hbar\omega_k}}\int \psi_n^{*}(\boldsymbol{e}_k^{\sigma}\widehat{\boldsymbol{p}})e^{-i\boldsymbol{kr}}\psi_m dV. \tag{36.26}$$

Шығарыўдың матрицалық элементинде (36.26)-аңлатпаға 1 ге тең болған $(a_{k,\sigma}^{+})_{10}$ элементи жуўап береди. (36.26) ның қалған көбейтиўшилери (36.22)—(36.24) лерден табылады.

Шығарылатуғын кванттың энергиясы нурландырыўшы системаның энергияларының айырмасына тең деп есаплап өтиўдиң матрицалық элементи (36.26) ны улыўмалық (32.42)-формулаға қойыў керек:

$$\hbar\omega_k = E_m - E_n \equiv \hbar\omega_{mn}. \tag{36.27}$$

(32.42)-формулаға системаның ақырғы ҳалының "салмағы" да киреди (яғный майданда берилген толқын векторы k ға ийе болған бир квант болған жағдайдағы электромагнит майданның бир бирлик энергияға сәйкес келетуғын ҳалларының саны). Бул шаманы базы бир V көлеминдеги қәлеген тәбиятқа ийе болған тербелислердиң саны ушын келтирип шығарылған (28.23)-формула бойынша табыўға болады (бир оны 1 ге тең болады деп болжадық). Буннан кейин dp_x ты $\hbar dk_x$ пенен алмастырамыз. Усының менен бирге толқын векторлары кеңислигиндеги сфералық координаталарға өтемиз. Бундай жағдайда (28.23)-теңлемеден мынаны аламыз:

$$dN_k = \frac{k^2 dk\, d\Omega}{(2\pi)^3}. \tag{36.28}$$

Бул аңлатпада k ны ω/c ға алмастырыў ҳәм энергияның дифференциалына, яғный $\hbar d\omega$ шамасына бөлиў керек. Солай етип, биз ўақыт бирлигиндеги $\boldsymbol{k}$ бағытында, жийилиги $\omega = c|\boldsymbol{k}|$ ҳәм поляризациясы σ болған квантты шығарыўдың итималлығын табамыз:

$$\begin{gathered}\frac{dW}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|H'_{n,\hbar\omega_k;m,0}\right|^2 \frac{\omega_k^2\, d\Omega}{(2\pi)^3 c^3 \hbar} = \\ = \left|\int \psi_n^* \psi_n^* (\boldsymbol{e}_k^\sigma \hat{\boldsymbol{p}}) e^{-i\boldsymbol{kr}} \psi_m dV\right|^2 \frac{e^2 \omega_k\, d\Omega}{(2\pi)^3 c^3 \hbar}.\end{gathered} \tag{36.29}$$

Ўақыт бирлигинде шығарылған энергияның шамасы (36.29)-аңлатпадан $\hbar\omega$ ға көбейтиў жолы менен алынады.

...

§ 37. ДИРАК ТЕҢЛЕМЕСИ

Төрт өлшемли спинорлар. Буннан алдыңғы параграфта релятивистлик бөлекше болған жақтылық квантының квантлық теориясы қурылған еди. Бундай жағдайда теңлемелердиң релятивистлик инвариантлығы мәселесине итибар берилмеди. Себеби инвариантлық басланғыш классикалық система болған Максвелл теңлемелеринде бар еди. Электрон ушын бундай басланғыш толқын теңлемесиниң бар болыўы мүмкин емес - классикалық шекте оның толқын функциясына ҳеш нәрсе сәйкес келмейди (§ 36). Оның ушын теңлемелердиң релятивистлик инвариантлығын ең бастан баслап талап етиў керек.

Барлық жағдайларда Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант болған электронның толқын теңлемесиниң спинниң бар екенлигин есапқа алыўы керек. Себеби спин-орбиталық тәсирлесиў релятивистлик эффект болып табылады. 30-параграфта көрсетилип өтилгениндей, спини ½ ге тең болған бөлекшениң толқын функциясы спинорлық еки қураўшыға ийе шама. Координата көшерлерин бурғанда бул шама ярым мүйешлер арқалы түрленеди. Лоренц түрлендириўлерин координата системасының бурылыўына уқсас болғанлықтан (§ 13) спинордың анықламасын да төрт өлшемдеги бурыўларға уқсатыў мүмкин (вектордың анықламасы төрт қураўшы шамаларға тарқатылғанда усындай исленген еди).

Ең улыўмалық жағдайда координаталар системасын бурғанда спинордың түрлендирилиўи усындай нызам бойынша әмелге асырылады:

$$\xi_1' = \alpha\xi_1 + \beta\xi_2, \qquad (37.1)$$
$$\xi_2' = \gamma\xi_1 + \delta\xi_2.$$

Бундай жағдайда, тиккелей көринип турғанындай, ҳәр қыйлы болған еки ξ ҳәм η спинорларының төмендегидей комбинациясы орын алады:

$$\xi_1'\eta_2' - \xi_2'\eta_1' = \xi_1\eta_2 - \xi_2\eta_1. \qquad (37.2)$$

Бул теңлик анықлаўшы ушын

$$\alpha\delta - \beta\gamma = 1 \qquad (37.3)$$

теңлиги орынланғанда орын алады.

Егер ξ_1 менен ξ_2 спинорлық толқын функциясының қураўшылары болса, онда $|\xi_1|^2 + |\xi_2|^2$ шамасы бөлекшени кеңисликтиң берилген ноқатында табыўдың итималлығының тығызлығына тең. Үш өлшемде бул шама скаляр шама болып табылады. Бул жағдай түрлендириў коэффициентлерине белгили болған шеклерди қояды (атап айтқанда $\alpha^* = \delta, \beta^* = -\gamma$ түриндеги).

Төрт өлшемде итималлықтың тығызлығы вектордың төртинши қураўшысы сыпатында қаралыўы керек. Сонлықтан, егер координаталар көшерлериниң әдеттеги айланыўлары менен бирге Лоренцлик түрлендириўлерди де есапқа алған жағдайда базы бир ξ_1, ξ_2 спинордың түрлениўи менен оларға түйинлес болған спинордың түрлениўи үш өлшемли кеңисликтеги сыяқлы усындай қатнаслар арқалы байланыспаған. Усыған сәйкес, биз буннан былай усындай спинорларды жулдызша менен белгилеймиз (жулдызшаның орнына спинорлық белгиниң үстиндеги ноқатты қолланыў да қабыл етилген).

Тангенси $i\frac{V}{c}$ ға тең болған жормал мүйешке Лоренцлик айланыў жүзеге келтирилген болсын. Бундай жағдайда (30.42)-аңлатпадан көринип турғанындай, ξ_1 менен ξ_2 шамалары $\xi_1 e^{i\frac{\omega}{2}}$ ҳәм $\xi_2 e^{i\frac{\omega}{2}}$ шамалары менен алмастырылады:

$$\xi_1' = \xi_1 e^{-\frac{|\omega|}{2}}, \xi_2' = \xi_2 e^{\frac{|\omega|}{2}}. \qquad (32.4)$$

Дирак теориясының стандарт белгилеўлерине тезирек өтиў ушын есаплаў системасының салыстырмалы V тезлиги z көшериниң бағыты менен бағытлас деп есаплаймыз. Бундай жағдайда Лоренц түрлендириўлери (13.17) пенен (13.18) былайынша аңлатылады:

$$z' = \frac{z - Vt}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}, \qquad t' = \frac{t - Vx/c^2}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}.$$

Сызықлы комбинацияларды пайда етемиз:

$$ct' \pm z' = (ct \pm z)\frac{1 \pm \frac{V}{c}}{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}.$$

Бул аңлатпаға $\frac{V}{c} = -i\,\mathrm{tg}\,\omega$ ны қойып ҳәм ω ның жормал шама екенлигин есапқа алсақ, онда мынадай аңлатпаны табамыз:

$$ct' \pm z' = (ct \pm z)e^{\mp i\omega} = (ct \pm z)e^{\mp|\omega|}. \qquad (37.5)$$

Бул жағдайда ξ_1^* диң ξ_1 сыяқлы түрленетуғынынан пайдаланып (себеби $e^{-|\omega|/2}$ ҳақыйқый шама) спинордың қураўшыларының көбеймесмин сайкес спинорға түрлендириўлер менен вектордың кураўшыларының арасындағы төмендегидей сәйкесликке келемиз:

$$\xi_1'^*\xi_1' = \xi_1^*\xi_1 e^{-|\omega|}, \qquad ct' + z' = (ct + z)e^{|\omega|},$$
$$\xi_2'^*\xi_2' = \xi_2^*\xi_2 e^{|\omega|}, \qquad ct' - z' = (ct - z)e^{-|\omega|}.$$

Бул Лоренц түрлендириўи x ҳәм y координаталарына тәсир тийгизбейди ҳәм $\xi_2^*\xi_1$ ҳәм $\xi_1^*\xi_2$ көбеймелерин өзгертпейди. Олардың арасындағы сәйкесликти табыў ушын z көшериниң дөгерегиндеги кеңисликлик бурыўды қараймыз:

$$x' = x\cos\varphi + y\sin\varphi,$$
$$y' = -x\sin\varphi + y\cos\varphi.$$

Екинши теңлемени $\pm i$ ге көбейтемиз ҳәм биринши теңлемеге қосамыз:

$$x' \pm iy' = (x \pm iy)e^{\mp\varphi}. \qquad (37.6)$$

Буннан сәйкесликке келемиз:

$$\xi_2^{*'}\xi_1' = \xi_2^*\xi_1 e^{i\varphi}, x' + iy' = (x + iy)e^{-i\varphi},$$
$$\xi_1^{*'}\xi_2' = \xi_1^*\xi_2 e^{-i\varphi}, x' - iy' = (x - iy)e^{i\varphi}.$$

Солай етип, егер төрт өлшемли импульс векторы p_t, p_x, p_t, p_z ($p_t \equiv E/c$) ҳәм ξ_1 менен ξ_2 берилген болса, онда олардан төмендегидей релятивистлик инвариант шама қурылады:

$$\xi_1^*(p_t + p_z)\xi_1 + \xi_2^*(p_t - p_z)\xi_2 + \xi_2^*(p_x + ip_y)\xi_1 + \xi_1^*(p_x - ip_y)\xi_2 \qquad (37.7)$$

Бул аңлатпада биз $\boldsymbol{p}$ спинорының қураўшылары арасындағы p_t қураўшыларын жаздық, себеби буннан былай $\boldsymbol{p}$ ны оператор деп қараў керек.

Релятивистлик инвариант шама (37.7) арқалы Лагранждың релятивистлик инвариант функциясы аңғартылыўы керек. Оннан электронның толқын теңлемеси келип шығады. Бирақ Лагранж функциясы импульстен басқа электронның массасына да ийе болыўы керек. Массаның өзи релятивистлик инвариант шама болып табылады ҳәм сонлықтан оның тап усындай шамаға көбейтилиўи керек.

Биз усы параграфтың басында скалярды еки спинор ξ менен η ның қураўшыларынан, олар менен түйинлес болған ξ^* ҳәм η^* спинорларының қураўшыларынан дүзиўдиң мүмкин екенлигин көрдик. Мәниси бойынша бул скалярлар $\xi_1\eta_2 - \xi_2\eta_1$ ҳәм $\xi_1^*\eta_2^* - \xi_2^*\eta_1^*$ лер болып табылады. Бундай жағдайда Лагранж функциясына η спинорының қураўшыларынан пайда етилген (37.7) түриндеги аңлатпа да киреди.

Қураўшыларды жулдызша менен белгилеў олардың (37.1) ге қатнасы бойынша түрлендириўдиң комплексли түйинлес нызамын атап көрсетиў ушын қолланылады. Әдеттегидей квантлық-механикалық белгилеўлерге өтиў ушын төмендегидей теңликлерди орынлы деп есаплаған қолайлы:

$$\xi_1 \equiv \psi_1, \xi_1^* \equiv \psi_1^*,$$
$$\xi_2 \equiv \psi_2, \xi_2^* \equiv \psi_2^*,$$
$$\eta_1^* \equiv \psi_4, \eta_1 \equiv \psi_4^*,$$
$$\eta_2^* \equiv \psi_3, \eta_2 \equiv \psi_3^*.$$

Бундай жағдайда ψ_3 пенен ψ_4 тиң ψ_1 менен ψ_2 дей болып түрленбейтуғынлығын, ал комплексли түйинлес теңлемелер бойынша түрленетуғынлығын есте сақлаў керек.

Енди толқын функциясын ψ_1, ψ_2, ψ_3 ҳәм ψ_4 арқалы белгилеп Лагранж функциясын жазамыз:

$$\begin{gathered}
L = \psi_1^*(p_t + \hat{p}_z)\psi_1 + \psi_2^*(p_t - \hat{p}_z)\psi_2 + \psi_2^*(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_1 + \\
+\psi_1^*(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_2 + \psi_4^*(p_t + \hat{p}_z)\psi_4 + \psi_3^*(p_t - \hat{p}_z)\psi_3 + \\
+\psi_4^*(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_3 + \psi_3^*(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_4 - \\
-mc(\psi_1\psi_3^* - \psi_2\psi_4^*) - mc(\psi_1^*\psi_3 - \psi_2^*\psi_4).
\end{gathered} \tag{37.8}$$

ψ диң алдындағы көбейтиўшилерди мақсетке муўапық сайлап алыў жолы менен m коэффициентлерин бирдей етип алыўға болады. Сонлықтан, бундай мәнисте (37.8)-аңлатпа улыўмалыққа шекке ийе болмайды.

Дирак теңлемеси. Енди L ди $\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*$ ҳәм ψ_4^* бойынша вариациялаймыз ҳәм вариацияларды нолге теңлестиремиз. Эрмитлигинен пайдаланып, функцияларға тәсир ететуғын операторларды шеп тәрепке жазамыз:

$$\left.\begin{aligned}
(p_t + \hat{p}_z)\psi_1 + (\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_2 - mc\psi_3 = 0,\\
(p_t - \hat{p}_z)\psi_2 + (\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_1 - mc\psi_4 = 0,\\
(p_t - \hat{p}_z)\psi_3 + (\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\psi_4 - mc\psi_1 = 0,\\
(p_t + \hat{p}_z)\psi_4 + (\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\psi_3 - mc\psi_2 = 0.
\end{aligned}\right\} \tag{37.9}$$

Бул биз излеп атырған Дирак теңлемеси болып табылады. (37.9)-теңлемениң ашылған формасын сийрек қолланады ҳәм, әдетте, символлық матрицалық жазыўға өтеди. Оның ушын (30.31)-Паули матрицалары қолланылады. Бул матрицалар ψ_1, ψ_2 ҳәм ψ_3, ψ_4 қураўшыларына бирдей тәсир етеди деп есаплаймыз. Нәтийжеде (30.32) ге сәйкес төмендегилер алынады:

$$\begin{gathered}
\hat{\sigma}_x\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_2\\ \psi_1\end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = i\begin{pmatrix}-\psi_2\\ \psi_1\end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_1\\ -\psi_2\end{pmatrix},\\
\hat{\sigma}_x\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_4\\ \psi_3\end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = i\begin{pmatrix}-\psi_4\\ \psi_3\end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_3\\ -\psi_4\end{pmatrix}.
\end{gathered}$$

(37.9) дан көринип турғанындай, өз-ара қураўшылардың жубын, яғный ψ_1, ψ_2 ҳәм ψ_3, ψ_4 лерди көрсететуғын матрицалар да керек болады. Бундай матрицаларды $\hat{\rho}_1$, $\hat{\rho}_2$ ҳәм $\hat{\rho}_3$ арқалы белгилеймиз.

Егер $\psi_1 = \psi_1^1, \psi_2 = \psi_2^1, \psi_3 = \psi_1^2, \psi_4 = \psi_2^2$ жазыўлары пайдаланылатуғын болса, онда ҳәр бир жупқа қатнасы бойынша олар $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ ҳәм $\hat{\sigma}_z$ сыяқлы тәсир етеди. Басқа сөзлер менен айтқанда олар тек жоқарғы тамғаға тәсир етеди. Буннан $\hat{\boldsymbol{\rho}}$ менен $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ ның көбеймедеги орынларын алмастырып қойыўға болатуғынлығы жақсы көринеди. Бирақ биз еки тамғаға ийе болған жазыўды пайдаланбаймыз. Бундай жазыў көбеймедеги $\hat{\boldsymbol{\rho}}$ менен $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ шамаларының орынларын алмастырып қойыўға болатуғынлығын көргизбели түрде көрсетиў ушын ғана келтирилген.

Енди (37.9) системасын қараймыз. p_t ның қасындағы ψ дың қураўшылары дурыс тәртипте жазылады. Демек, бул жерде жазылмайтуғын бирлик матрица тур. ψ менен $\hat{p}_z$ қураўшылары да дурыс тәртипке, бирақ ҳәр қыйлы белгилерге ийе. Бул жерде $\hat{\rho}_z\hat{\sigma}_z$ ти жазыў керек, бундай жағдайда ψ_2 менен ψ_3 лер минусларды алады. $\hat{\rho}_x$ тың алдында қураўшылардың биринши жубын екиншиси менен орынларын алмастырып қоймайтуғын $\hat{\sigma}_x$ матрицасы, ал $\hat{p}_y$ тың алдында тап сондай себеплер менен $\hat{\sigma}_y$ тур. Ең ақырында m ниң алдында $-\hat{\rho}_1\hat{\sigma}_z$ матрицасы турыпты. Енди төмендегидей қысқартылған белгилеўлерди киргиземиз:

$$\hat{\alpha}_x = -\hat{\sigma}_x, \hat{\alpha}_y = -\hat{\sigma}_y, \hat{\alpha}_x = -\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_z, \hat{\beta} = \hat{\rho}_1\hat{\sigma}_z. \tag{37.10}$$

Бундай жағдайда (37.9) символлық, қысқартылған түрде былайынша жазылады:

$$p_t\psi = \left(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y + \hat{\alpha}_z\hat{p}_z + \hat{\beta}mc\right)\psi = \widehat{\boldsymbol{\alpha}}\widehat{\boldsymbol{p}}\psi + \hat{\beta}mc\psi. \tag{37.11}$$

$\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ ҳәм $\hat{\sigma}_z$ операторлары, соның менен бирге $\hat{\rho}_x$, $\hat{\rho}_y$ ҳәм $\hat{\rho}_z$ операторлары төмендегидей қәсийетлерге ийе (қараңыз § 30):

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1;\ \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x =$$
$$= \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = 0;$$

Усы теңликлерди пайдаланып $\hat{\alpha}$ ҳәм $\hat{\beta}$ операторлары ушын жоқарыдағыға усаған қәсийетлерди табамыз:

$$\hat{\alpha}_x^2 = \hat{\alpha}_y^2 = \hat{\alpha}_z^2 = \hat{\beta}^2 = 1; \tag{37.12}$$

$$\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y + \hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x = \hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_z + \hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_x = \hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z + \hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_y =$$
$$= \hat{\alpha}_x\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_x = \hat{\alpha}_y\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_y + \hat{\alpha}_z\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_z = 0. \tag{37.13}$$

(37.11) диң шеп тәрепине $p_t = -\frac{\hbar}{ic}\frac{\partial}{\partial t}$ операторы менен, ал оң тәрепине $\widehat{\boldsymbol{\alpha}}\widehat{\boldsymbol{p}} + \hat{\beta}mc$ операторы менен тәсир етемиз[4]. Бундай жағдайда (37.12) ҳәм (37.13) лерден пайдаланып, мынаны табамыз:

$$p_t^2\psi = \hat{p}^2\psi + m^2c^2\psi. \tag{37.14}$$

Себеби, бирдей емес болған α_i, β операторларының барлық көбеймелери шығып қалады, ал бирдейлериниң квадратлары 1 ге тең. Солай етип, функцияларға сәйкес келетуғын барлық операторлар жоғалады ҳәм толқынлық типтеги дифференциаллық теңлеме алынады:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \Delta\psi = -\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi. \tag{37.15}$$

Алынған теңлемениң релятивистлик инвариантлығы айқын. Егер оны еркин бөлекше ушын қолланатуғын болсақ, онда шешимди тегис толқын түринде излеў керек:

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{iEt}{\hbar}+\frac{i\boldsymbol{pr}}{\hbar}}. \tag{37.16}$$

Буннан энергия менен импульс арасындағы дурыс релятивистлик қатнас келип шығады

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4. \tag{37.17}$$

(37.15)-теңлемеден спин де түсип қалды, теңлеме бир қураўшыға ийе толқын функциясына тийисли. Сонлықтан Шредингер, Фок, Кляйн ҳәм Гордон тәрепинен бир биринен ғәрезсиз усынылған биринши рет қарағанда релятивистлик емес толқын теңлемесиниң улыўмаластырылыўы болып көринетуғын (37.15)-теңлеме электронға тийисли емес [егер Дирактың улыўмалық (37.11)-теңлемесин нәзерде тутпайтуғын болсақ].

---

[4] Биз p_t ның үстине қалпақ ($\widehat{\ }$) белгисин қоймаймыз ҳәм усындай жол менен бул шаманың әдеттеги квантлық-механикалық оператор емес екенлигин атап көрсетемиз. Егер оны c ға бөлинген гамильтониан түринде түсинетуғын болса, онда операторлық белгилеў орынлы болады.

Енди Дирак теңлемесиниң тек айланыўлар менен Лагранждың релятивистлик инвариант функциясынан келтирилип шығарылған сыпатындағы Лоренц түрлендириўлерине ғана қарата инвариант болып қалмай, координаталар системасының инверсиясына қарата да инвариант екенлигин көрсетемиз. Инверсия $\boldsymbol{p}$ ны $-\boldsymbol{p}$ ға өзгертеди, сонлықтан Дирак теңлемеси мынадай түрге ийе болады:

$$p_t\psi = -\hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\boldsymbol{p}}\psi + mc\hat{\beta}\psi.$$

Бул теңлемениң еки бөлимин де $\hat{\beta}$ ға көбейтемиз ҳәм (37.13) бойынша $\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\beta}$ теңлигиниң орынлы екенлигинен пайдаланамыз. Бундай жағдайда

$$p_t(\hat{\beta}\psi) = \hat{\boldsymbol{\alpha}}\hat{\boldsymbol{p}}(\hat{\beta}\psi) + mc\hat{\beta}(\hat{\beta}\psi) \tag{37.18}$$

теңлиги орынлы болады.

Демек, $\hat{\beta}\psi$ функциясы басланғыш ψ функциясы қанаатландыратуғын теңлемени қанаатландырады екен. Бирақ принципинде $\hat{\beta}\psi$ функциясы ψ функциясы менен тең болғанлықтан, Дирак теңлемеси өзиниң дәслепки түрине алып келинди деп тастыйықлаўға болады. $\hat{\beta}$ ға көбейтиў толқын функциясының үстинен исленген базы бир арнаўлы унитарлық түрлендириў болып табылады.

Белгили болған унитарлық түрлендириў былайынша орынланады: $\hat{\alpha}$ ҳәм $\hat{\beta}$ матрицалары өзлериниң (37.12) ҳәм (37.13) қәсийетлерин сақлаўы, бундай болмаған жағдайда $\hat{\rho}$ ҳәм $\hat{\sigma}$ матрицалары арқалы аңғартылыўы керек. Биз түрлендириў операциясын орынламаймыз, ал (37.10) ға уқсас болған жаңа аңлатпаны жазамыз:

$$\hat{\alpha}_x = \hat{\rho}_1\hat{\sigma}_x, \hat{\alpha}_y = \hat{\rho}_1\hat{\sigma}_y, \hat{\alpha}_z = \hat{\rho}_1\hat{\sigma}_z, \hat{\beta} = \hat{\rho}_3. \tag{37.10'}$$

$\hat{\alpha}$ ҳәм $\hat{\beta}$ матрицалары сыяқлы матрицалар пайдаланылатуғын Дирак теңлемеси релятивистлик емес толқын теңлемесине өтиў ушын ең қолайлысы. (37.10)-аңлатпаның жәрдеминде анықланған $\hat{\alpha}$ ҳәм $\hat{\beta}$ операторлары (37.12)- ҳәм (37.13)-қәсийетлерге ийе екенлигине исениў қыйын емес. Ал бул жағдай энергия менен импульстиң арасындағы дурыс (37.17)-қатнасының алыныўы ушын зәрүрли.

Энергияның меншикли мәнислери. (37.17)-формуладан

$$E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4} \tag{37.19}$$

Дирак теңлемесинен анықланған электронның энергиясының меншикли мәнислериниң белгиси тек оң емес, ал терис те болыўы мүмкин. Классикалық механикада тек "плюс" белгиси қабыл етиледи, себеби еркин электронның терис белгиге ийе энергиясы болмайды.

(37.19)-аңлатпадан алынған квадрат түбирдиң абсолют мәниси mc^2 шамасынан киши емес. Демек, кеңлиги $2mc^2$ болған энергия областының болады деген сөз, ал электронның энергиясының шамасының бул областқа кириўи мүмкин емес. Классикалық теңлемелерде барлық шамалар үзликсиз өзгереди, сонлықтан бир ўақытлары оң мәниске ийе болып анықланған энергия қадаған етилген $2mc^2$ областы арқалы өте алмайды ҳәм барлық ўақытта өзиниң белгисин сақлайды. Басқа сөзлер менен айтқанда, басланғыш шәртлер бойынша оң мәниске ийе энергия қозғалыс теңлемелери бойынша оң мәниске ийе болып қала береди.

Квантлық теорияда ҳәр қыйлы ҳаллардың арасындағы секирмели өтиўлердиң жүзеге келиўи мүмкин. Мысалы, mc^2 шамасынан үлкен энергияға ийе электрон жақтылық квантын шығарып, энергиясы $-mc^2$ шамасынан киши энергияға ийе болып қала алады. Бирақ, тәбиятта терис энергияға ҳәм терис массаға ийе болған электрон бақланбайды. Олардың қәсийетлери жүдә ерси болған болар еди: жақтылықты шығарып, жақтылық шығарып, ол энергиясы $E = -\infty$ шамасына тең болған ҳалға шекем "қулап түскен" болар еди. Бизиң әтирапта көрип турғанымызға қарамастан, бундай ҳалға көп узамай әлемдеги барлық электронлардың түсиўин күтиўге болады.

Демек, Дирак теңлемеси усындай ҳаллардың жүзеге келиўиниң мүмкин екенлигин көрсетеди. Бир тәрептен бундай ҳаллардың бар екенлигин нәзерден тыста қалдырыўға болмайды. Себеби электронлар бундай ҳалларға басқа бақланатуғын ҳаллардан өте алады. Ал, екинши тәрептен, бәри бир, тәбиятта терис энергияға ийе электронлар жоқ. Усының менен бирге Дирак теңлемеси электронның бир қатар қәсийетлерин пүткиллей дурыс түсиндиреди: биз теңлемениң тәжирийбелердиң нәтийжелери менен сәйкес келетуғын электронның спини менен магнит моменти арасындағы қатнасты береди, водород атомларының жуқа структурасының дәл формуласына алып келеди ҳ.т.б. Усының менен бирге өткерилген математикалық изертлеўлер спини ½ ге ҳәм нолге тең емес массаға ийе бөлекше ушын айта қалғандай басқа релятивистлик инвариант теңлемениң жоқ екенлигин көрсетеди. Бизиң спинорлардан қурылған инвариант Лагранж функциясының аңлатпасы тийкарында Дирак теңлемесин алыўымыз бул жағдайдың дурыс екенлигин жеткиликли дәрежеде исенимли түрде дәлиллейди. Сонлықтан, Дирак теңлемесинен әйтеўирден-әйтеўир бас тартыўға болмайды: оны сәйкес келетуғын қандай да бир физикалық гипотеза менен толтырыў керек.

Дирак вакуум түсинигине қайтадан анықлама бериўди усынды. Бурын вакуум дегенде электр зарядлары жоқ болған электромагнит майданының ҳалын түсинетуғын еди. Ол вакуумлық ҳал деп мынадай ҳалды атаўды усынды: вакуумда энергияның терис мәнислерине ийе болған ҳаллардың барлығы электронлар менен толған. Бул анықламаның тек сөз бенен айтылған анықлама емес, ал физикалық анықлама екенлиги көп узамай айқын болады.

Егер терис энергияға ийе болған барлық қәддилер ийеленген болса, онда Паули принципине сәйкес, бундай ҳалларға оң энергияға ийе ҳаллардан электронлардың өтиўи мүмкин емес. Солай етип, релятивистлик теорияның электронлардың қәсийетлерин тәрийиплей алыўы ушын Паули принципи зәрүрли. Квантлық механиканың зәрүр болған элементи сыпатындағы Паули принципиниң тийкарланыўы усыннан ибарат. Релятивистлик емес теорияда Паули принципи көп денелер мәселесиндеги қосымша постулат болып табылады.

36-параграфта электромагнит майданының вакуумы деп квантлар жоқ болған оның ҳалына айтқан едик (басқа сөзлер менен айтқанда майданның мүмкин болған энергиялардың ең кишисине ийе болған тийкарғы ҳалы). Дәл усы сыяқлы, егер терис энергияларға ийе барлық ҳаллар ийеленген болса, онда басқа барлық электронлар терис энергиялы ҳалға өтиў жолы менен энергиясын киширейте алмайды. Демек, тек ийеленген терис қәддилер бар болған ҳал ең киши энергияға ийе болады. Бундай ҳалды электронлық майданның вакуумы деп атаў тәбийий.

Жуплардың туўылыўы. Электромагнит майданына уқсас түрде "электронлық майдан" анықламасының қолланылыўының себеби төмендегилерден ибарат: Шын мәнисинде Дирак теңлемеси ҳеш ўақытта бир электрон ушын қолланылмайды: барлық ўақытты "фонның" бар екенлиги, яғный басқа электронлар тәрепинен ийеленген терис энергияға ийе ҳаллардың бар екенлиги нәзерде тутылады. Егер бундай болмағанда электронның өзи терис энергияға ийе болған ҳалға өткен болар еди.

Бирақ "фон" электронды тек "қулап түсиўден" "сақлап қалыў" менен бирге өзиниң бар екенлигин ҳақыйқый физикалық процессте көрсетеди. Сыртқы электромагнит майданда (мысалы ядроның қасында) энергиясы $2mc^2$ шамасынан үлкен болған квант электронды терис энергияға ийе ҳалдан оң энергияға ийе ҳалға "өткериўге" уқыплы. Сыртқы майдан импульстиң сақланыў нызамын қанаатландырыў ушын зәрүрли. Бул әпиўайы тастыйықлаўдың дәлили 1-шынығыўда келтирилген.

Бирақ, терис энергияға ийе ҳалдан электрон жулып алынғаннан кейин сол ҳалда "тесик", яғный ийеленбеген қәдди қалады (салыстырыңыз: § 33). Терис массаға ийе электрон электр майданында (энергияның белгиси қандай болса, массаның белгиси де сондай болады) майданға қарсы бағытта емес (анодқа қарай), ал майдан бағытында (катодқа қарай) қозғалады. Олар менен бирге "тесик" те орын алмастырады, ол оң зарядқа ҳәм оң массаға ийе болған электронның қәсийетиндей қәсийетке ийе болады.

Электронды терис энергияға ийе болған ҳалдан жулып алатуғын эксперименттиң еки зарядтың (оң ҳәм терис) пайда болатуғынлығын көрсетиўи керек. Бул болжаў кейинирек Андерсон тәрепинен тастыйықланды.

Позитрон электрон менен ушырасқанда (яғный электрон терис энергияға ийе болған ҳаллардағы ийеленбеген қәддиге өткенде) бир бирин жоқ ете алады (ямаса аннигиляцияланады). Оның энергиясы еки ямаса үш квант түринде электромагнит нурланыўға бериледи. Бос кеңисликте аннигиляцияның салдарынан бир кванттың алыныўы мүмкин емес, себеби бундай жағдайда импульстиң сақланыў нызамы орынланбайды. Тап сол сыяқлы бир квант бос кеңисликте жупты (электрон + позитрон) пайда ете алмайды. Ядроның майданында бир квантлық аннигиляцияның жүзеге келиўи де мүмкин.

Бир бири менен аннигиляцяланатуғынлығына байланыслы электрон менен позитронды бөлекше ҳәм антибөлекше деп атаў қабыл етилген. Ҳәзирги ўақытлары протон менен антинейтрон да белгили[5].

"Фонның" бар екенлигине байланыслы электронның релятивистлик квантлық теориясы бир бөлекшениң теориясы емес, бөлекшелердиң саны анықланбаған майданның теориясы болып табылады. Бар болған энергияға байланыслы майданда электромагнит майданда квантлардың шығарылғанындай бир электроннан басқа бир ямаса бир неше жуптың пайда болыўы мүмкин. Тек толық заряд ғана қатаң түрде сақланады, бирақ бөлекшелердиң саны сақланбайды.

Егер энергия жуплардың ҳақыйқый түрдеги пайда болыўы ушын жеткиликли болмаған жағдайларда жуплардың дәслеп пайда болыўы, ал кейининен жоқ болыўы орын алады. Аралықлық ҳаллардың жасаў ўақыты жүдә киши болып, олардың энергиясы пүткиллей анықланбаған (усындай жағдай альфа-бөлекшениң ядродан

---

[5] Ҳәзирги ўақытлары белгили болған бөлекшелердиң дерлик барлығының антибөлекшелери бақланды ҳәм барлық бөлекшелердиң антибөлекшелериниң бар екенлигине гүман жоқ (Аўдарыўшы).

ушып шығыўының алдында потенциаллық барьердиң астында орын алады). Усындай аралықлық ҳаллар бақланатуғын физикалық эффектлерде өзлерин көрсетеди. Мысалы, ядроның кулонлық майданында вакуумның поляризациясы, яғный жуплардың туўылыўы менен жоғалыўына алып келетуғын "фонның" аўысыўы орын алады. Усының салдарынан ядроға жақын қашықлықлардағы электронға тәсир ететуғын майдан (шама менен 10^{-10} см) қатаң түрдеги кулонлық емес. Бул жағдай атомдағы электронлардың энергия қәддилериниң орынларына тәсир етеди (қараңыз: төменде).

Солай етип, Дирак теңлемесинен квантлық механиканың релятивистлик областтағы дәллигин жоқарылатыўға салыстырғанда әдеўир көп нәрсе келип шығады екен. Майдан концепциясы бөлекшелерге өткерилди, ал бул антибөлекшелердиң бар екенлигин болжаўға алып келди.

Зарядлық түйинлеслик. Позитрон ҳаққында айтылғанлардан оның тәбиятының электронның тәбиятынан пүткиллей басқаша деп жуўмақ шығарыўға болады: электрон — бөлекше, ал позитрон болса — "тесик". Еки белгиге ийе болған зарядлардың арасында көзге түсетуғын асимметрия пайда болады. Бирақ, теорияның электрон менен позитронның арасындағы симметрия толық тикленетуғын формулировкасының бар болыўы мүмкин.

Жоқарыда айтылып өтилгениндей, (37.11)-теңлеме оң ҳәм терис энергияларға сәйкес келетуғын шешимлерди береди. Усының менен бирге энергияның ҳәр бир мәнисине спинниң проекциясының еки белгиси сәйкес келеди. Нәтийжеде төрт шешим алынады. Энергияның оң мәнисине жуўап беретуғын шешимлер физикалық мәниске ийе болады. Тәбиятта ҳеш нәрсе жуўап бермейтуғын екинши еки шешимлердиң ҳақыйқатында да пайда болатуғынлығынан қутылыў мақсетинде толтырылған "фон" түсиниги ойлап табылды.

Позитронды тәрийиплейтуғын теңлеме электронды тәрийиплейтуғын теңлеме менен пүткиллей бирдей болатуғындай етип Дирак теңлемесин түрлендириўге болады. Бул жерде гәп "тесик" ҳаққында емес, ал позитрон, яғный энергиясы оң болған өз алдына бөлекше ҳаққында айтылып атыр. Усының менен бирге теорияның электрон-позитронлық жуптың туўылыўы менен аннигиляциясы ҳәм вакуумның поляризациясы сыяқлы болжаўлары өзиниң күшинде қалады. Себеби, теңлемелер айырым бөлекшеге емес, ал ең бастан баслап майданға қолланыўға арналған.

Нәтийжесинде позитронның толқын функциясы алынатуғын Дирак теңлемесиниң түрлендирилиўин қараймыз.

Егер Лагранж функциясын ψ^* қураўшылары бойынша емес, ал ψ қураўшылары бойынша вариацияласақ, онда (37.8)-аңлатпадан түйинлес функция ушын Дирак теңлемеси алынады. Бул теңлемеде дәслеп толқын функциясы операторлардың шеп тәрепине жазыў қолайлы (лагранжианда функция тап усындай болып жайласқан). Вариацияда түрлендириўди бөлеклер бойынша ислеў керек, себеби L функциясының ҳәрекет ушын жазылған $S = \int Ld^4\tau$ аңлатпасындағы интегралдың астында турғанлығын нәзерде тутыў керек. Усындай түрлендириў жолы менен p_t ҳәм $\boldsymbol{p}$ ға киретуғын дифференциаллаў белгилери вариация менен изленип атырған функцияларға алып өтиледи ҳәм усыған сәйкес p_t шамасы $-p_t$ менен, ал $\boldsymbol{p}$ болса $-\boldsymbol{p}$ менен алмастырылады. Комплексли түйинлес теңлемеде бул операторлар шептен оң тәрепке карай тәсир етпейди, ал қойылған шәрт бойынша оңнан шеп тәрепке тәсир етеди:

$$\psi^{*}\left(-p_t+\hat{\alpha}\hat{p}-mc\hat{\beta}\right)=0. \qquad (37.20)$$

$\hat{\alpha}$ ҳәм $\hat{\beta}$ операторлары да оңнан шепке қарай тәсир етеди, яғный ψ_k^{*} толқын функциясының қураўшылары матрицаның k —қатарының матрицалық элементлерине көбейеди (ал k —бағананың матрицалық элементлерине емес). Формула түриндеги жазыўды булардың барлығы мынадай түрге ийе болады:

$$\sum_{k=1}^{4}\alpha_{ik}\psi_k=(\hat{\alpha}\psi)_i, \sum_{k}\psi_k^{*}\alpha_{ki}=(\psi^{*}\hat{\alpha})_i. \qquad (37.21)$$

Демек, егер әдеттеги жазыўға қайтып келиў керек болса, онда $\hat{\alpha}$ ҳәм $\hat{\beta}$ матрицаларының бағаналары менен қатарларының орынларын алмастырып қойыў керек болады. Бундай жағдайда оларды $\tilde{\hat{\alpha}}$ ҳәм $\tilde{\hat{\beta}}$ арқалы белгилеў керек ҳәм теңлемемиз мынадай түрге ийе болады:

$$\left(-p_t+\tilde{\hat{\alpha}}\hat{p}-mc\tilde{\hat{\beta}}\right)\psi^{*}=0. \qquad (37.20')$$

(37/21)-теңлемени Дирак теңлемесиниң басланғыш түрине толық қайтарып алып келетуғын түрлендириў де бар. C арқалы белгиленетуғын усындай түрлендириўди табамыз. Оны (37.20)-теңлемеге оператор сыпатында шеп тәрептен қолланыў керек ҳәм $\tilde{\hat{\alpha}}$ ҳәм $\tilde{\hat{\beta}}$ операторлары менен орын алмастырыўдың нәтийжесинде $C\psi^{*}$ функциясы ушын формасы бойынша (37.11) менен теппе-тең болған теңлемениң алыныўын талап етиў керек. Басқа сөзлер менен айтқанда, C орын алмастырып қойыўлардың төмендегидей қатнасын қанаатландырыўы керек:

$$C\tilde{\hat{\alpha}}=\alpha C \qquad (37.22)$$

$$C\tilde{\hat{\beta}}=-\beta C. \qquad (37.23)$$

C ның айқын түри α ҳәм β матрицаларының қалай етип сайлап алынғанлығы менен байланыслы. Олар (37.10')-қатнасты қанаатландырады деп қабыл етемиз. ρ менен σ матрицалары эрмитлик. Демек, егер олар ҳақыйқый элементлерден туратуғын болса, онда қатарлар менен бағаналардың орынларын алмастырып қойыў ҳеш нәрсени де өзгертпейди. Егер олар ρ_2 ҳәм σ_y сыяқлы жормал элементлерден туратуғын болса, онда орын алмастырыў матрицаның алдындағы белгини өзгертеди. Енди $\alpha_x,\alpha_y,\alpha_z$ ҳәм β қураўшыларының орнына қураўшылар бойынша теңликлер түринде олардың (37.10')-аңлатпасын қоятуғын болсақ, онда

$$C\rho_1\sigma_x=\rho_1\sigma_x C=-\rho_1\sigma_y C, C\rho_1\sigma_z=\rho_1\sigma_z C, C\rho_3=-\rho_3 C. \qquad (37.24)$$

теңликлерине ийе боламыз. Буннан

$$C=\rho_2\sigma_y \qquad (37.25)$$

теңлигиниң орынлы екенлиги келип шығады.

ρ_2 менен ρ_1 антикоммутацияланатуғын, ал σ_x пенен σ_y антикоммутацияланатуғын болғанлықтан, (37.2) деги биринши теңлик орынланады[6]. Тап усындай усылдың жәрдеминде теңликлердиң басқаларының да тексерип көрилиўи мүмкин.

---

[6] Биз "көбеймедеги орынларын алмастырып қойыўға болады" деген сөзлердиң орнына "коммутацияланатуғын", ал "көбеймедеги орынларын алмастырып қойған жағдайда

Солай етип, (37.21)-теңлемеге C операторын қолланып ҳәм оны $\tilde{\alpha}$ ҳәм $\tilde{\beta}$ операторлары менен орынларын алмастырып қойыў жолы менен мынаны аламыз:

$$(p_t - (\boldsymbol{\alpha p}) - mc\beta)C\psi^* = 0. \qquad (37.26)$$

Бул теңлеме (37.11)-теңлеме менен теппе-тең. Бирақ, түйинлес функция ψ^* координаталар менен ўақыттан мынадай нызам бойынша ғәрезли:

$$\psi^* = \psi^*(0)e^{i\frac{Et}{\hbar}-i\frac{\boldsymbol{pr}}{\hbar}}. \qquad (37.27)$$

Оған да энергияның еки белгиси жуўап береди: $E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$. Егер (37.27)-аңлатпаға энергияны терис белги менен қойсақ, ал $\boldsymbol{p}$ ның орнына қарама-қарсы бағыттағы импульсти алсақ және $\psi^*(0)$ ди C түрлендириўи менен түрлендирсек, онда электрон ушын дүзилгендей оң энергияға ийе болған бөлекшениң толқын функциясы алынады. Толқын функциясының бирдей кеңисликлик-ўақытлық ғәрезлигине ийе болыў мақсетинде электронға қатнасы бойынша импульстиң белгиси сыпатында қарама-қарсы бағыт қабыл етилген.

Усының менен биз $C\psi^*$ функциясын оң энергияға ийе оң электронға (импульстиң белгиси бойынша) тийисли екенлигин дәлилледик. Басқа сөз бенен айтқанда $C\psi^*_{-E}(-\boldsymbol{p})$ функциясы электронға салыстырғанда қарама-қарсы бағытта қозғалатуғын позитронның функциясы болып табылады.

C түрлендириўи электроннан позитронға өтиўди жүзеге келтиреди. Бирақ $C^2 = 1$ теңлиги орынлы болғанлықтан, тап сол түрлендириў "позитронлық" теңлемени "электронлық" теңлемеге өткереди. Нәтийжеде бөлекшелердиң екеўиниң арасындағы симметрия тикленеди.

C операциясы *зарядлық түйинлеслик* деп аталады: ол бөлекшени антибөлекшеге "өткереди".

Паули менен Вайскопфлар спинге ийе болмаған бөлекшелердиң де антибөлекшелериниң болатуғынлығын көрсетти. Кейинирек усындай бөлекшелерди ҳақыйқатында да тапты: бул π-мезон болып табылады. π^+- ҳәм π^--мезонлар бөлекше менен антибөлекшениң қәсийетлерине ийе.

Егер C-түрлендириў бөлекшениң толқын функциясының түрин өзгертпейтуғын болса, онда бөлекше менен антибөлекше бир бирине теппе-тең болады. Ҳәзирги ўақытлары усындай бөлекшелерди ҳақыйқый нейтраль деп атаў қабыл етилген (буған антибөлекшеге ийе болса да нейтрон кирмейди). π^0 мезон менен жақтылық кванты ҳақыйқый нейтраль бөлекшелер болып табылады.

Релятивистлик емес толқын функциясына өтиў. Релятивистлик толқын теңлемесин Шредингер теңлемеси менен салыстырыў ушын шеклик өтиўди әмелге асырыў көп нәрсени үйретеди. Биринши гезекте бизди электронның сыртқы майдандағы қозғалысы қызықтыратуғын болғанлықтан, биз дәслеп электромагнит майданы менен тәсирлесетуғын электронға сәйкес келетуғын Дирак теңлемесин жазамыз. Оның ушын $\boldsymbol{p}$ импульсин $\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$ менен алмастырамыз (қараңыз: § 14). Солай етип, бундай жағдайда Дирак теңлемеси былайынша жазылады:

$$p_t\psi = \left(\hat{\alpha}, \hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi + mc\hat{\beta}\psi + e\varphi\psi. \qquad (37.28)$$

белгиси өзгереди" сөзлериниң орнына "антикоммутацияланатуғын" сөзин пайдаланамыз (Аўдарыўшы).

$\hat{\alpha}$ менен $\hat{\boldsymbol{p}}$ операторлары (37.10')-аңлатпаға сәйкес сайлап алынған деп есаплаймыз. $\hat{\sigma}$ операторларын ашпаймыз, ал тек $\hat{\rho}$ операторларын ашамыз. Басқа сөзлер менен айтқанда биринши жуп ψ_1, ψ_2 лерди ҳәм екинши жуп ψ_3, ψ_4 лерди бир пүтин деп есаплаймыз:

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \qquad \chi_2 = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \tag{37.29}$$

Оларға белгили усыл менен ρ_1 менен ρ_3 тәсир етеди. Буны айқын түрде жазып χ_1 менен χ_2 ушын (37.28)-теңлемени аламыз:

$$\begin{gathered} \frac{E}{c}\chi_1 = p_t\chi_1 = \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi_2 + mc\chi_1 + \frac{e\varphi}{c}\chi_1, \\ \frac{E}{c}\chi_2 = p_t\chi_2 = \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi_1 - mc\chi_2 + \frac{e\varphi}{c}\chi_2. \end{gathered} \tag{37.30}$$

Екинши теңлемеден төмендеги аңлатпа келип шығады:

$$\chi_2 = \frac{1}{\frac{E}{c} + mc - \frac{e\varphi}{c}}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi_1. \tag{37.31}$$

Релятивистлик емес жақынласыўда $v \ll c$ ҳәм бөлекшениң энергиясы E ниң мәниси mc^2 шамасына жүдә жақын. Сонлықтан, (37.31) диң бөлиминиң барлығы биринши, басланғыш жақынласыўда $2mc$ шамасы менен алмастырылады. Енди χ_2 ни (37.30) дың биринши теңлемесине қойып еки қураўшыға ийе χ_1 функциясының мынадай теңлемени қанаатландыратуғынлығы келип шығады:

$$(E - mc)\chi_1 = (p_t - mc)\chi_1 = \frac{1}{2mc}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\chi_1 + \frac{e\varphi}{c}\chi_1. \tag{37.32}$$

Теңлемениң шеп тәрепиндеги $E - mc$ айырмасы бөлекшениң c ға бөлинген релятивистлик емес гамильтонианы $\widehat{H}$ болып табылады. (37.32) ниң оң тәрепиндеги χ_1 диң алдындағы биринши аңлатпаны түрлендиремиз. Бул аңлатпаны $2mc$ ға көбейткеннен кейин былайынша жазамыз:

$$\begin{gathered} \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\boldsymbol{p}})^2 + \frac{e^2}{c^2}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{A})^2 - \\ -\frac{e}{c}[(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\boldsymbol{p}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{A}) + (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\boldsymbol{p}})]. \end{gathered} \tag{37.33}$$

Бул аңлатпада биринши қосылыўшы:

$$\begin{gathered} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\boldsymbol{p}})^2 = \hat{\sigma}_x^2\hat{p}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2\hat{p}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2\hat{p}_z^2 + \left(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\right)\hat{p}_x\hat{p}_y + \\ +(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x)\hat{p}_x\hat{p}_z + \left(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\right)\hat{p}_y\hat{p}_z = \\ = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = \hat{p}^2. \end{gathered} \tag{37.34}$$

Усыған сайкес:

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{A})^2 = A^2. \tag{37.35}$$

$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ ның қураўшыларының антикоммутацияланатуғынлығын пайдаланып, (37.33) теги соңғы қосылыўшыны мынадай формаға алып келемиз:

$$\begin{gathered} (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\boldsymbol{p}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{A}) + (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\boldsymbol{p}}) = (\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}}) + (\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{A}) + \\ +\left[\left(\hat{p}_xA_y - A_y\hat{p}_x\right) - \left(\hat{p}_yA_x - A_x\hat{p}_y\right)\right]i\hat{\sigma}_z + \\ +[(\hat{p}_zA_x - A_x\hat{p}_z) - (\hat{p}_xA_z - A_z\hat{p}_x)]\, i\hat{\sigma}_y + \\ +\left[\left(\hat{p}_yA_z - A_z\hat{p}_y\right) - \left(\hat{p}_zA_y - A_y\hat{p}_z\right)\right]i\hat{\sigma}_x. \end{gathered} \tag{37.36}$$

Бул жерде Паули матрицаларының қәсийети (30.34) ҳ.т.б. қолланылған.

$\hat{p}_x A_y - A_y \hat{p}_x$ коммутаторы мынаған тең:

$$\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}A_y - A_y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial A_y}{\partial x}. \qquad (37.37)$$

Сонлықтан $\hat{\sigma}_x$ тың алдында $\boldsymbol{H}$ магнит майданының проекциясы тур:

$$\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) = H_z$$

ҳ.т.б.

Енди (37.32) ниң барлық ағзаларын жыйнап, мынаны аламыз:

$$\widehat{H}\chi_1 = \frac{1}{2m}\left(\widehat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 \chi_1 + e\varphi\chi_1 - \frac{e\hbar}{2mc}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{H}). \qquad (37.38)$$

(37.38)-аңлатпаның оң бөлиминдеги биринши еки қосылыўшы сыртқы электромагнит майданындағы спинге ийе емес бөлекшениң релятивистлик емес гамильтонианы, ал соңғы қосылыўшы сыртқы $\boldsymbol{H}$ магнит майданындағы

$$\hat{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc}\hat{\sigma} \qquad (37.39)$$

магнит моментиниң энергиясы болып табылады. Солай етип, Дирак теңлемесинен электронның (30.51) ге жуўап беретуғын магнит ҳәм механикалық моментлериниң арасындағы дурыс қатнасты береди.

Электронның магнитлик спинлик моменти менен магнитлик орбиталық моментиниң өз-ара тәсирлесиўи энергиясы ушын формуланы табыў қызықлы болып табылады. Бул шама бөлиминде жақтылықтың тезлигиниң квадратына ийе ҳәм сонлықтан (37.38) жақынласыўынан соңғы жақынласыўда алынады. Бирақ, биз бул жақынласыўдың барлық ағзаларын излеп отырмаймыз, ал олардың бизди қызықтыратуғынларын алдын-ала сайлап аламыз. (37.31)-формуладан c^{-2} бойынша келеси тәртиптеги ағзаның

$$\chi_2' = \frac{e\varphi}{4m^2c^2}\left(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \widehat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi_1 \qquad (37.40)$$

екенлиги анықланады.

(37.40)-дүзетиўди (37.30) ға қойып, биз электр майданын ҳәм спинди өзиниң ишине алатуғын оператордың тек

$$(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{\boldsymbol{p}})e\varphi(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{\boldsymbol{p}}) \qquad (37.41)$$

аңлатпасынан алынатуғынлығын көремиз.

φ потенциалы менен екинши $(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{\boldsymbol{p}})$ көбейтиўшиниң орынларын алмастырамыз. (37.37)-формалаға уқсас болған формуланы пайдаланып, былай жазыўға болады:

$$e\varphi(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{\boldsymbol{p}}) = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{\boldsymbol{p}})e\varphi - \frac{\hbar}{i}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\nabla\varphi) = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{\boldsymbol{p}})e\varphi - i\hbar(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{E}).$$

$(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{\boldsymbol{p}})(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{E})$ көбеймеси (30.36) улыўмалық қағыйда бойынша ашылады:

$$(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{\boldsymbol{p}})(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{E}) = (\widehat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{E}) + i(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}[\widehat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{E}]).$$

Бул аңлатпада биринши ағза спиннен ғәрезли емес ҳәм спин-орбиталық тәсирлесиў ушын әҳмийетке ийе емес. Екинши қосылыўшыда электронға тәсир ететуғын майданның орайлық майдан екенлигинен пайдаланамыз, сонлықтан $\boldsymbol{E} = -\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{d\varphi}{dr}$, ал $(\boldsymbol{r}\widehat{\boldsymbol{p}})$ ның электронның орбиталық моментиниң операторы $\hat{\boldsymbol{l}}$ екенлигин аңғарамыз. Оны $\hbar$ тың бирликлеринде аңғартып, спин-орбиталық өз-ара тәсирлесиўдиң энергиясы операторы ушын аңлатпаға ийе боламыз:

$$V = \frac{e\hbar^2}{4m^2c^2}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\boldsymbol{l}})\frac{1}{r}\frac{d\varphi}{dr}. \qquad (37.42)$$

(37.38)-теңлемени тек электрон ушын пайдаланыўға болады. Протонның спини ½ ге тең болса да, оның магнит моменти (37.38) ниң соңғы ағзасында алынатуғын шамадан 2,9 есе үлкен. Нейтрон да магнит моментине ийе ҳәм оның мәниси сол бирликлерде 1,9 ға тең. Ал Дирак теориясында болса зарядланбаған бөлекшеде магнит моментиниң пүткиллей болмаўы керек. Себеби (37.38) де e зарядты аңғартады.

Протон менен нейтронның Дирак теңлемесине бағынбайтуғынлығының себебин әдетте былайынша түсиндиреди: ядролық бөлекшениң екеўи де мезонлық майдан менен жүдә күшли тәсирлеседи. Усының салдарынан олар турақлы түрде мезонларды шығарады ҳәм жутады (электромагнит майданының тез аннигиляцияға ушырайтуғын электрон-позитрон жупларын пайда ететуғынлығы сыяқлы). Бирақ, егер усындай жуплар электромагнитлик эффектлердиң улыўмалық шамасына айрықша үлкен үлес қоспайтуғын болса (зарядлар менен майданның өз-ара тасирлесиўиниң өлшеми сыпатында $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ шамасына тең киши шама хызмет етеди), жүдә күшли болған ядролық тәсирлесиў протон менен нейтронды оларды қоршап турған мезонлық майданнан айырым түрде қараўды дурыс емес етеди.

Бул түсиндириў санлы есаплаўлар менен тастыйықланған жоқ. Себеби ядролық күшлердиң теориясы усы ўақытларға шекем дөретилмеди. Бирақ, протон менен нейтронның электромагнит майданын жүдә тез ушатуғын электронлар менен зондлаў ядролық бөлекшелердиң екеўиниң де ҳақыйқатында да өлшемлери 10^{-14} см болған зарядлар ҳәм тоқлар менен қоршалғанын көрсетеди.

Жуқа структураның формуласы. Келтирип шығармыў менен шуғылланбастан водород атомындағы ямаса Ze зарядының кулонлық майданындағы электронның энергиясының меншикли мәнислери ушын әҳмийетли болған формуланы келтиремиз:

$$\frac{E}{mc^2} - 1 = \left[1 + (\alpha Z)^2\left(n - \left(j + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^2}\right)^{-2}\right]^{-1/2} \qquad (37.43)$$

Бул аңлатпада n- бас квант саны, $j = l \pm \frac{1}{2}$ - электронның толық моменти, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$. Егер Ze ни 1 ге салыстырғанда киши шама деп есапласақ, онда релятивистлик емес (29.41)-формула алынады.

(37.43)-формула жүдә таң қаларлық дәрежеде 14-параграфтағы 9-шынығыўдың нәтийжесине сәйкес келеди. Егер, классикалық формулада ҳәрекет өзгериўшилерин Бордың квантлық шәртлери (31.42) менен алмастырсақ, онда туп усындай жоллар менен келтирип шығарылған, электронның спинин пүткиллей есапқа алмаған (37.43) Зоммерфельд формуласы келип шығады. Бирақ, спинди есапқа алмағанда атомдағы ҳаллардың саны, әлбетте, дурыс болмайды.

Радиациялық дүзетиўлер. (37.43)-формуладан $2s_{1/2}$ ҳәм $2p_{1/2}$ ҳалларының энергияларының бирдей болатуғынлығы келип шығады. Себеби олар бирдей n менен j ге сәйкес келеди. Ҳақыйқатында бундай еки ҳалдың энергиялары ҳәр қыйлы болады. Жийиликлер шкаласында олардың арасында 1043 мегациклға ($3{,}82\cdot10^{10}$ Гц ке, Аўдарыўшы) тең айырма бар.

Энергиядағы айырманың болыўы былайынша түсиндириледи: Жуқа структураның формуласы болған (37.43)-формуланы келтирип шығарғанда электромагнит майданның ноллик тербелислериниң тәсири есапқа алынған жоқ. Бул тербелислер s- ҳәм p-ҳаллардағы электронларға ҳәр қыйлы тәсир етеди ҳәм сонлықтан энергияның азғынған қәддин еки қәддиге ажыратады.

Энергия қәддилериниң бир неше қәддилерге ажыралыўына ноллик тербелислер менен бир қатарда жоқарыда еслетип өтилген электрон-позитрон жубының туўылыўы ҳәм аннигиляциясы менен байланыслы болған вакуумның поляризациясы да тәсир етеди. Вакуумның тийкарғы поляризациясы ядродан киши қашықлықларда жүзеге келетуғын болғанлықтан (шама менен $\hbar/mc$ қашықлықта), ал электрон болса ядродан әдеўир қашықлықта, яғный бир атомлық бирлик қашықлығында (яғный $\hbar^2/me^2$ шамасына тең қашықлықта) жайласатуғын болғанлықтан энергия қәддилериниң ажыралыўына поляризациялық үлес салыстырмалы киши ҳәм барлық эффекттиң 3 процентин ғана қурайды. Бирақ, усындай жағдайға қарамастан, эксперименталлық мағлыўматлардың дәллиги жүдә жоқары ҳәм ол электронлық вакуумның поляризациясының тәсириниң ҳақыйқат екенлигин толық тастыйықлайды.

Электромагнит майданының ноллик тербелислери ямаса жуплардың туўылыўы ҳәм аннигиляциясы менен байланыслы болған формулаларға қосылатуғын дүзетиўлер радиациялық дүзетиўлер деп аталатуғын дүзетиўлерди пайда етеди.

Оларды есаплағанда барлық ўақытта тарқалыўшы интеграллар пайда болады. Жағдайдан шығыў ушын былайынша ҳәрекет етеди: ноллик тербелислердиң тәсириндеги еркин электронның энергиясындағы жылжыў менен атомдағы байланысқан электронның энергиясындағы жылжыўды есаплайды. Дүзетиўлердиң екеўи де тарқалыўшы интегралларға алып келеди, бирақ, олардың айырмасын шекли етип анықлаўдың сәти түседи ҳәм усының менен бирге оның мәниси толық бир мәнисли түрде анықланады.

Алып таслаўдың мәниси мыналардан ибарат: электрон физикалық жақтан өзиниң зарядынан, яғный нурланыў майданынан айрылмайды. "Еркин" электрон ҳаққында гәп еткенде электронның нурланыў майданы менен тәсир етисетуғынлығын нәзерде тутады. Ал нурланыў майданы болса ҳәтте тийкарғы ҳалда да нолге тең емес. Сонлықтан, байланысқан электронның энергиясына қосылатуғын дүзетиўден еркин электронның энергиясы ушын дүзетиў алып тасланғанда еркин электрон түсинигиниң мәниси анықланады.

Ең ақырғы нәтийжеде шекли ҳәм үлкен болмаған жылжыў алынады. Оның салыстырмалы киши екенлиги жуқа структураның турақлысы $e^2/\hbar c$ ның 1 ден киши екенлиги менен байланыслы.

Тап усындай жоллар менен электронның магнитомеханикалық қатнасына да, яғный $e\hbar/2mc$ шамасына берилетуғын дүзетиўдиң мәнисин табыўдың да сәти түседи. Ол тәжирийбе менен $e^2/\hbar c$ шамасы бойынша кейинги еки жуўықлаўларда алынады.

Солай етип, квантлық электродинамика қәлеген физикалық теорияға қойылатуғын тийкарғы талапты қанаатландырады: ол қәлеген бақланатуғын эффектти қәлеген дәлликте есаплаўға қәбилетли, тәжирийбелердиң жуўмақлары менен бир мәнисли ҳәм ишки қарама-қарсылықларсыз байланыстыра алады.

Квантлық электродинамиканың ең әҳмийетли мәселелериниң бири бәршени сарсылатқан 1/137 санын теориялық жақтан келтирип шығарыў болып табылады. Бирақ, ҳәзирги ўақытлары тек бир электродинамиканың шеклеринде турып, электромагнит майданынан басқа майданларды қоспай усы санды келтирип шығарыўдың мүмкиншилигиниң бар ямаса жоқ екенлиги де белгисиз.

ШЫНЫҒЫЎЛАР

1) Кванттың бос кеңисликте қосымша сыртқы майдан болмаған жағдайда электрон-позитрон жубын пайда ете алмайтуғынлығын дәлиллеңиз.

Шешими. Майдан болмаған жағдайда сақланыў нызамлары былайынша жазылады:

$$-\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}+\hbar\omega=\sqrt{m^2c^4+c^2p_1^2}, \qquad \boldsymbol{p}+\frac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}_1.$$

Бул аңлатпаларда $\boldsymbol{p}$ арқалы электронның терис энергияға ийе болған ҳалындағы импульс, $\boldsymbol{n}$ арқалы кванттың импульси бағытындағы бирлик вектор, ал $\boldsymbol{p}_1$ болса электронның оң энергия ҳалындағы импульси белгиленген.

$\boldsymbol{p}_1$ ди биринши теңликке қойып ҳәм оның оң және шеп тәреплерин квадратқа көтерсек, бул теңликтиң орынланбайтуғынлығына аңсат көз жеткериўге болады.

Дәлиллеўдиң екинши усылы әпиўайы таллаўға тийкарланған. Басқа инерциаллық есаплаў системасына өтиў барлық ўақытта кванттың энергиясын $2mc^2$ шамасынан кем ете алады. Бундай системада квант "жупты" пайда ете алмайды, себеби оның энергиясы "жупты" пайда етиўге жетпейди. Бирақ, егер бир есаплаў системасында жүзеге келиўи мүмкин емес болған жағдайдың басқа есаплаў системасында да жүзеге келиўи мүмкин емес. Себеби ўақыяның жүзеге келиўиниң мүмкин ямаса мүмкин емес болыўы есаплаў системасын сайлап алыўдан ғәрезсиз.

Егер жуптың ядроның қасында пайда болыўын қарайтуғын болсақ, онда соңғы тастыйықлаў өзиниң күшин жоғалтады. Бул жағдайда бир есаплаў системасында ядро тынышлықта турады, ал екиншисинде қозғалады. Квантлық энергиясы $2mc^2$ шамасынан киши болған орынларда қозғалатуғын ядро оған "жупты" пайда етиўге "жәрдем береди".

Әлбетте, ядро тынышлықта туратуғын системасда электронның энергиясы $2mc^2$ шамасынан киши болатуғын жағдайларда "жуптың" туўылыўының пүткиллей мүмкин емес екенлиги түсиникли.

2) Дирак теңлемесиниң еркин электрон ушын шешимин табыў.

Шешими. ψ_1 қураўшысын нолге тең деп болжаймыз. Бундай жағдайда

$$\psi_3=Ac(p_x-ip_y),$$
$$\psi_4=-Acp_z$$

түриндеги функцияларды алсақ (37.11)-теңлемениң биринши қанаатландырылады. Бундай жағдайда $\hat{\alpha}$ ҳәм $\hat{\beta}$ операторлары (37.10) бойынша емес, ал (37.10') бойынша анықланады. (37.11) ниң екинши теңлемеси мынаны береди:

$$\psi_2 = \frac{Ac^2(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{E - mc^2} = \frac{A(E^2 - m^2c^4)}{E - mc^2} = A(E + mc^2).$$

(37.11) диң үшинши теңлемеси

$$(E + mc^2)\psi_3 = Ac(E + mc^2)\big(p_x - ip_y\big) =$$
$$= c\big(p_x - ip_y\big)\psi_2 = Ac\big(p_x - ip_y\big)(E + mc^2)$$

теппе-теңлигине алып келинеди.

Теппе-теңликке төртинши теңлеме де алып келинеди. A санын анықлаў ушын

$$|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 = 1$$

нормировкасын пайдаланыў керек ҳәм ол мынаны береди:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2E(E + mc^2)}}.$$

$v \ll c$ шәрти орынланғанда ψ_3 ҳәм ψ_4 қураўшылары ψ_1 ҳәм ψ_2 қураўшыларына салыстырғанда киши болады. Сонлықтан шешим оң энергияға жуўап береди. Егер $\psi_0 = 0$ теңлиги алынса оң белгиге ийе басқа шешим алынады. Егер $\psi_3 = 0$ ямаса $\psi_4 = 0$ теңликлери сайлап алынса, онда терис энергияға сәйкес кешетуғын шешимлер алынады.

3) Дирак теңлемесинен (23.15) ке сәйкес келетуғын зарядтың сақланыў теңлемесиниң келип шығатуғынлығын көрсетиңиз:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -div\,(\psi^* c\,\hat{\alpha}\,\psi),$$

бул теңликте

$$|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2.$$

Ескертиў. (37.11)-теңлемени ҳәм оған түйинлес болған теңлемени жазыў, буннан кейин бириншиси ψ^* ге, ал екиншисин ψ ге көбейтип, бириншисинен екиншисин алыў ҳәм $\hat{\alpha}$ менен $\hat{\beta}$ операторларының эрмитлигинен пайдаланыў керек.

4) Егер ψ оң E энергияға сәйкес келетуғын шешим болатуғын болса, онда $\hat{\rho}_2\psi$ диң терис $-E$ энергияға ийе шешим болатуғынлығын дәлиллеңиз.

Шешими. ψ ушын теңлеме

$$E\psi = c(\hat{\alpha}\,\hat{p}) + \hat{\beta}mc^2\psi$$

түринде жазылады. Буннан

$$E\hat{\rho}_2\psi = c\hat{\rho}_2(\hat{\alpha}\,\hat{p})\psi + mc^2\hat{\rho}_2\hat{\beta}\psi = -\big[c(\hat{\alpha}\,\hat{p}) + mc^2\hat{\beta}\big]\hat{\rho}_2\psi$$

теңлемеси алынады. Бул терис энергияға ийе шешимлерден қутылыўдың мүмкиншилигиниң жоқ екенлигин дәлиллейди.

5) Төрт қураўшыға ийе функцияларға тәсир ететуғын

$$\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x = \frac{\hbar}{2i}\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z, \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y = \frac{\hbar}{2i}\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x, \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z = \frac{\hbar}{2i}\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y$$

операторларының спинлик момент операторлары екенлигин дәлиллеңиз.

Шешими.

$$\frac{\hbar^2}{4}\hat{\sigma}_x^2 = -\frac{\hbar^2}{4}\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z = \frac{\hbar^2}{4}\hat{\alpha}_y^2 = \frac{\hbar^2}{4},$$

$$\frac{\hbar^2}{4}\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y = -\frac{\hbar^2}{4}\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_z\hat{\alpha}_x = -\frac{\hbar^2}{4}\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_z = i\frac{\hbar}{2}\hat{\alpha}_z,$$

$$\frac{\hbar^2}{4}\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x = -i\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$$

теңликлери орынлы болғанлықтан, бул жағдайда анықланған спин операторлары барлық керек болған қәсийетлерге ийе болады (қараңыз: § 30). Буны (37.10') дағы $\hat{\alpha}$ ның $\hat{\rho}$ ҳәм $\hat{\sigma}$ бойынша анықламаларынан да көриўге болады. Спин операторларының биринши жуптың ψ_1 ҳәм ψ_2 функциялары менен екинши жуптың ψ_3 ҳәм ψ_4 функциялары менен орынларын алмастырмайтуғынлығын, ал ҳәр бир жуптың ишинде ғана орынларын алмастырып қоятуғынлығын аңғарамыз.

6) Дирак теңлемесине сәйкес моментти сақланыў нызамын орбиталық ҳәм спинлик моментлердиң қосындысының қанаатландыратуғынлығы, ал олардың ҳәр қайсысының өз алдына қанаатландырмайтуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими. Толық момент былайынша анықланады:

$$\hat{j} = \hat{l} + \hat{s} = [\hat{r}\,\hat{p}] + \frac{\hbar}{2}\,\sigma,$$

$$\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x + \frac{\hbar}{2i}\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y.$$

Гамильтониан менен орын алмастырыўларды есаплаймыз:

$$\begin{gathered}\hat{H}\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{H} = \\ = \left[c\left(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y + \hat{\alpha}_z\hat{p}_z\right) + \hat{\beta}mc^2\right]\left(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x + \frac{\hbar}{2i}\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y\right) - \\ - \left(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x + \frac{\hbar}{2i}\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y\right)\left[c\left(\hat{\alpha}_x\hat{p}_x + \hat{\alpha}_y\hat{p}_y + \hat{\alpha}_z\hat{p}_z\right) + \hat{\beta}mc^2\right] = \\ = c\hat{\alpha}_x\hat{p}_y(\hat{p}_x x - x\hat{p}_x) - c\hat{\alpha}_y\hat{p}_x\left(\hat{p}_y y - y\hat{p}_y\right) + \\ + \frac{\hbar c}{2i}\hat{p}_x\left(\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y - \hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x\right) + \\ + \frac{\hbar c}{2i}\hat{p}_y\left(\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y - \hat{\alpha}_x\hat{\alpha}_y\hat{\alpha}_x\right) = \frac{\hbar c}{i}\left(\hat{\alpha}_x\hat{p}_y - \hat{\alpha}_y\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{\alpha}_y - \hat{p}_y\hat{\alpha}_x\right) = 0.\end{gathered}$$

Усындай жоллар менен гамильтонианның толық моменттиң квадраты болған $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ шамасының коммутацияланатуғынлығы дәлилленеди. $\hat{J}^2$ ҳәм $\hat{J}_z$ шамалары қозғалыс интеграллары болып табылады, ал $\hat{l}^2$ ҳәм $\hat{l}_z$ және $\hat{s}^2$ ҳәм $\hat{s}_z$ лер өз алдына қозғалыс интеграллары болып табылмайды.

7) Дирак теңлемесиниң t ны $-t$ менен алмастырыўға, яғный ўақыттың бағытының өзгериўине қарата инвариант екенлигин көрсетиңиз (T-түрлендириў).

Шешими. t ны $-t$ менен алмастырыў комплексли түйинлес теңлеме болған $\psi^*\left(-p_t - \hat{\alpha}\,\hat{p} - \hat{\beta}mc^2\right) = 0$ теңлемесин өтиў жуўап береди. Оны Дирак теңлемесиниң басланғыш формасына алып келетуғын түрлендириўди табыў керек.

Транспонирленген (орынлары алмастырып қойылған) операторларға өтемиз [қараңыз: (37.20')]:

$$\left(-p_t - \tilde{\hat{\alpha}}\,\hat{p} - \tilde{\hat{\beta}}mc^2\right)\psi^* = 0.$$

Биз излеп атырған түрлендириўдиң

$$T\tilde{\hat{\alpha}} = -\hat{\alpha}T, \qquad T\tilde{\hat{\beta}} = \hat{\beta}T$$

ямаса

$$T\hat{\alpha}_x = -\hat{\alpha}_x T, T\hat{\alpha}_y = \hat{\alpha}_y T, T\hat{\alpha}_z = -\hat{\alpha}_z T, T\hat{\beta} = -\hat{\beta} T$$

шәртлерин қанаатландырыўы керек. Буннан $T = \hat{\rho}_1 \hat{\alpha}_y = \hat{\alpha}_y$ теңлигиниң орынланатуғынлығы келип шығады. Демек, $CPT = i$, яғный Дирак теңлемесин өзгертпейди.

А.С.Компанеец. Что такое квантовая механика? Издательство "Наука". Москва. 1977. 216 стр.

9. ДИРАК ТЕОРИЯСЫ

Электромагнит майданының квантлық теориясы өзиниң мәниси бойынша релятивистлик теория болып табылады. Бул квантлық энергиясының оның импульси менен байланыслы екенлигинен жақсы көринип тур. Теорияның релятивистлик емес шегиниң болыўы мүмкин емес: кванттың массасы нолге тең. Усындай қәсийетке тек жақтылықтың тезлигиндей тезлик пенен қозғалатуғын бөлекше ғана ийе бола алады. Ал квант болса жақтылықтың тезлигиндей тезлик пенен қозғалады. Электрон болса шекли массаға ийе, сонлықтан электронның қозғалыў механикасы релятивистлик емес шекке ийе. Оған $E = p^2/2m$ теңлиги тийкарында қурылған Шредингердиң квантлық механикасы сәйкес келеди.

Бирақ, релятивистлик емес толқын теңлемеси барлық ўақытта жеткиликли болған нәтийжени бере бермейди. Биз аўыр атомларда электронның тезлигиниң жақтылықтың тезлигине қатнасының 0,6 ға жететуғынлығын көрдик. Тек усы бир жағдайдың өзи Шредингерден кейин дәрҳәл релятивистлик толқын теңлемесин излеўди баслаўға мәжбүрледи. Биринши вариант $E^2 = m^2c^4 + c^2p^2$ қатнасына тийкарланған еди. Квадрат кореннен аңсат әпиўайы усылдың жәрдеминде қутылды. Оның ушын $E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ теңлигин квадратқа көтериў керек болды.

Бирақ, әдетте ҳақыйқатлық бетте жатпайды ҳәм дәрҳәл көпшиликке айқын түрде көринбейди. Жоқарыда көрсетилген улыўмаластырыў электрон ушын жарамады, себеби ол спинди есапқа алмады. Спинниң орбита менен магнитлик өз-ара тәсирлесиўи релятивистлик эффект болып табылады ҳәм бул эффекттиң дурыс толқын теңлемесине сөзсиз кириўи керек (егер бул теңлеме салыстырмалық теориясына сәйкес келетуғын болса). Сонлықтан, электронның спинин есапқа алмайтуғын теңлеме оның релятивистлик областтағы қозғалысын тәрийиплей алмайды.

1928-жылы Диракқа $E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ қатнасына сәйкес келиўи бойынша квантлық аналогты табыўдың сәти түсти. Әлбетте, қәлеген оқыўшы суммадан квадрат түбирдиң алынбайтуғынлығын жақсы биледи. Дирак усынған теңлеме квадрат түбирден санлық шығарыўға емес, ал символлық шығарыўға жуўап береди. Бундай жағдайда электронда спинниң бар екенлигин пайдаланыў зәрүр болып шықты. Солай етип, спин органикалық түрде электронның орбиталық қозғалысы менен қосылды, ал оған $E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ формуласы тийисли. Дирактың жуўмақларының гөззалллығын сөз бенен жеткерип бериў мүмкин емес (музыкалы шығармаларды ноталарсыз, сессиз жеткерип бериўге болмайтуғын сыяқлы).

Дирак теңлемесинен автор дәслеп алғысы келген нәтийжелерге салыстырғанда оғада көп санлы нәтийжелер алынды. Ең қызықлы ҳәм алынатуғынлығы болжанбаған нәтийжелер алынғанда, олар өтиў мүмкин болмаған қыйыншылықлардай болып көринди.

Биз Дирактың $m^2c^4 + c^2p^2$ суммасынан квадарт түбирди айрықша усыл менен алғанлағын айтып өткен едик. Бирақ түбир барлық ўақытта еки белгиге ийе. Усы жағдайға байланыслы квантлық теорияда ҳеш қандай жаман нәрсе алынбайды: егер $E = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}$ теңлиги орынлы болса, онда ол энергияның $+mc^2$ шамасынан үлкен ямаса $-mc^2$ шамасынан киши болатуғынлығын аңғартады. Энергияның мәниси $+mc^2$ пенен $-mc^2$ шамаларының арасныда бола алмайды. Ал, классикалық механикада болса барлық шамалар үзликсиз түрде өзгереди, оң мәнисли энергия терис мәниске ийе энергияға айлана алмайды: оның ушын $2mc^2$ қа тең қадаған етилген интервал арқалы секирип өтиўи керек.

Квантлық механикада энергия секирмели өзгере алады. Электрон өзинен жақтылық квантын шығарып оң энергияға ийе ҳалдан терис энергияға ийе ҳалға өте алады. Ал терис энергияға ийе ҳал төменге шекке ийе болмағанлықтан, кем-кемнен оннан да "төменге" түседи. Нәтийжеде барлық электронлардың тез арада шексиз терис энергияға ийе ҳалға қулап түсиўи керек. Ал бизлер бундай "қулап түсиўдиң" болмағанлығын билемиз. Электронларға салыстырғанда теорияның өзи ушын көбирек қәўиптен қутылыў ушын Дирак фундаменталлық болжаўды усынды. Ол терис энергияға ийе болған барлық ҳаллар электронлар менен ийеленген деген идеяны қабыл етти. Ҳақыйқатында жүзеге келетуғын барлық қубылыслар ийеленген ҳаллардың "фонында" жүзеге келеди. Бундай жағдайда, егер электронлар Паули принципине бағынатуғын болса, онда ҳеш бир электрон оң энергияға ийе ҳалдан терис энергияға ийе ҳалға өте алмайды. Шын мәнисинде бул жағдайды Паули принципиниң электронлар ушын зәрүрли екенлигин тийкарлаў деп қараўға болады.

Дәслеп Дирак тәрепинен жағдайдан шығыў мақсетинде усынылған идеяның тек сөз жүзиндеги идеядай болып көринеди. Терис энергияға ийе ҳаллардың электронлар менен толған екенлигин қалайынша тексерип көриўге болады?

Оның ушын бир электронды терис энергияға ийе ҳалдан бос орынлар жүдә көп болған оң энергияға ийе ҳалға өткериў жеткиликли. Оң энергияға ийе ҳалға квантты жутыў жолы менен өтиўге болады. Бундай жағдайда барлық ийеленген ҳаллардың арасында бир ийеленбеген қәдди ямаса тесик қалады. Базы бир ярым өткизгишлердиң өткизгишлигин қарағанымызда биз тесиктиң қәсийетин қарап өттик. Рәсинда да, тарийхый жақтан тесиклик өткизгишлик ҳаққындағы көз-қараслар Дирак тесиклери тийкарында қәлиплести. Еки жағдайда да ийеленбеген электронлық қәдди басқа ийеленген қәддилердиң арасында оң зарядқа ийе электрон сыпатында хызмет етиўи керек.

Басқа тәреплери бойынша ол әдеттеги электрондай қәсийетке ийе болады. Бирақ тесик электрон менен тосыннан ушырасқанда жаңа қубылыс бақланады. Бундай жағдайда ушырасқан электрон оң электронға сәйкес келетуғын ийеленбеген қәддиге өтеди, ал артық энергиясын электромагнит майданына береди. Өзиниң теориясының тийкарында Дирак теориялық жақтан туўры ҳәм кери процесслердиң (яғный оң зарядқа ийе электронның туўылыўының ҳәм оның өз-ара жоғалыўын ямаса терис электрон менен "аннигиляциясының") итималлығын есаплады. Бирақ сол ўақытлары (1930-жылы) оң электронлар еле белгили емес еди. Себеби оларды арнаўлы түрде ҳеш ким излемеди. Сонлықтан, егер жумсақ тил менен айтқанда, теоретиклердиң көпшилиги Дирак теориясына исеним менен қарамады. Аўҳал 1933-жылы түпкиликли өзгерди. Усы жылы Андерсон космослық нурлардың қурамында оң электронды ямаса позитронды ашты. Көп узамай позитрон жасалма түрде алынған радиоактив затлардың бета-ыдыраўында да табылды. Ҳәзирги ўақытлары позитрон физикадағы ҳәм ҳәтте базы бир химиялық лабораториялардағы әдеттеги бөлекше болып есапланады.

Дирак жаңа бөлекшениң бар екенлигин тек болжап ғана қоймай, оның қәсийетлерин де есаплады. Бундай жағдай физиканың тарийхында болып көрген емес. Ол илимге пүткиллей жаңа түсиник болған антибөлекшелер түсинигин киргизди. Электрон ушын позитрон антибөлекше болып табылады. Олардың аннигиляциясында масса толығы менен жоғалады. Пуқталық пенен айтқанда, олардың толық энергиясы, соның ишинде тынышлықтағы энергиясы менен бирге электромагнит майданының энергиясына айланады. Қысқаша айтқанда, олардың массасы электромагнит майданның энергиясына айланады ҳәм бундай жағдайда ҳеш қандай қәтелик жүзеге келмейди.

Кейинирек антибөлекше түсиниги дәслеп Дирак болжаған түсиниктен әдеўир кең болып шықты. Мысалы, Паули менен Вайскопфлар Паули принципине бағынбайтуғын зарядланған бөлекшениң де антибөлекшеге ийе болатуғынлығын көрсетти. Ҳәзирги ўақытлары усындай бөлекше-антибөлекше жубы жақсы белгили: бул оң ҳәм терис пи-мезонлар болып табылады. Бундай жағдайда олардың қайсысын бөлекше, ал қайсысын антибөлекше деп қараўдың әҳмийети жоқ. Бундай мәнисте теория пүткиллей симметриялы. Дирактың позитронлар теориясы да усы еки түсиникке қарата симметриялы болып шықты. Биз дәслеп терис энергияға ийе болған терис электронлардың толтырылғын қәддилери ҳаққында гәп еткен едик ҳәм бундай жағдайда позитрон тесикке сәйкес келген еди. Бирақ, егер биз электронларды позитронлардың терис энергияларына ийе болған толтырылған қәддилердеги тесиклер деп қарағанда да ҳеш нәрсе өзгермеген болар еди. Биз жасап атырған дүньяда электронлардың санының сийрек келетуғын қонақлар болған позитронлардың санынан жүдә үлкен екенлиги Дирак теориясында өзиниң сәўлесин таба алмайды. Бул тутас дүнья ҳаққындағы илимниң шешиўи керек болған машқалалардың бири болып табылады.

Нейтраль болған пи-ноль мезон менен жақтылық квантын есапқа алмағанда барлық бөлекшелер өзлериниң антибөлекшелерине ийе. Ҳәзирги ўақытлары олардың барлығы экспериментлерде ашылды. Ал биринши еки бөлекшеге келсек, онда олардың антибөлекшелери принципиаллық жақтан жоқ - олардың ҳәр қайсысы өзиниң антибөлекшесине сәйкес келеди. Ойымыздағы ямаса ҳақыйқый бар болған антидүньяда квантлар менен пи-ноль мезонлар өзине өтеди. Антидүнья менен электромагнит толқынлары арқалы байланыс дүзиў пүткиллей қәўипсиз, бирақ олар менен тиккелей тийисиў дерлик бир заматта мезонлардың бултына айланыў дегенди аңғартады. Буннан секундтың бир неше миллионннан бир үлесиндей ўақыттан кейин мезонлар электронларға, позитронларға ҳәм нейтриноға ыдырайды. Бул бөлекшелердиң аннигиляцияға ушырап үлгеретеғынлығы ямаса үлгермейтуғынлығы бизиң ушын әҳмийетке ийе болмайды. Ситуация фантаст жазыўшының дыққатын қараўға жарайды, бирақ физикалық сәйкесликлерге ийе емес.

Өзиниң антибөлекшелери менен сәйкес келетуғын бөлекшелерди ҳәзирги ўақытлары ҳақыйқый нейтраль бөлекшелер деп атайды. Бул анықлама электрлик нейтраллықты улыўмаластырады. Мысалы, электр зарядына ийе болмаған нейтрон усындай жағдайға қарамастан тезлеткишлерде жасалма жоллар менен алынатуғын антибөлекшесине ийе. Бул теминология бойынша нейтрон ҳақыйқый нейтраль бөлекше емес.

Антибөлекшелердиң бар екенлигинде релятивистлик квантлық теорияның тийкарғы қәсийети кескин түрде көринеди. Бул теорияда бөлекшелердиң саны қозғалыс интегралы болып табылмайды. Дирак теңлемесин айырып алынған электронға қолланған жағдайда теорияның белгили болған жақынласаўы орын алады. Бул жақынласыў гейпара жағдайларда ҳақыйқатта бақланатуғын қубылысларды түсиндире алмайды. Берилген электрон менен бир қатарда, егер оның (усы электронның) энергиясы жеткиликли болса, онда ол пайда ететуғын барлық электрон-позитрон жупларын ҳәм ол шығаратуғын ямаса жутатуғын барлық квантларды қараў керек. Биз пайдаланған "егер" сөзи қәлеген энергияны нәзерде тутады. Демек, бул жағдай дүньядағы барлық электронлар менен позитронларды ҳәм болыўы мүмкин болған барлық электромагнит майданын қараўды аңғартады.

Объектлердиң усындай оғада үлкен жыйнағын қараў шешимлейтуғын мәселедей болып көриниўи мүмкин. Ҳақыйқатында, жағдай оншама қорқынышлы емес. Электрон жупты тиккелей туўдырмайды, ал алдын ала электромагнит майданының квантын қоздырады. Бирақ электрон менен квант өз-ара жүдә күшли тәсир етиспейди. Олардың бир бири менен байланысыўының өлшеми бизге белгили ҳәм 1 ден әдеўир киши болған $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ турақлы шамасы болып табылады. Бул электронның тек бир квант пенен тәсирлесетуғынлығын аңғартады, ал еки квант пенен тәсирлесиў тек киши дүзетиўлерге ғана алып келеди. Ҳәзирги ўақытлары бундай дүзетиўлерди есаплаў усылы жақсы ислеп шығылған. Ядролық өз-ара тәсирлесиўлерде киши параметр жоқ. Усыған байланыслы сораў пайда болады: жоқарыда тәрийипленген барлық жағдайларды есапқа алатуғын мәселени толығы менен шешиўге тырысыў керек пе? Ең ақыр-аяғында қандай да бир ақылға муўапық шешим алына ма? Бул сораўларға Л. Д. Ландау, И. Я. Померанчук ҳәм басқалар алынбайды деп жуўап берди: егер ақылға муўапық келетуғын барлық өз-ара тәсирлесиўлерди есапқа алатуғын болсақ, онда ҳеш қандай өз-ара тәсирлесиў қалмайды екен! Формаллық жақтан бул былайынша алынады: егер дәслеп шексиз геометриялық прогрессияны суммаласақ, ал буннан кейин оның бөлимин шексизликке умтылдырсақ, онда сумма нолге айланады.

Бул таң қаларлық нәтийже көп теоретиклерди өз-ара тәсир етиўдиң ески идеясынан пүткиллей бас тартыўға мәжбүрледи: олар тек еркин бөлекшелер кириўи тийис болған теорияны қурады; бирақ бундай теорияның ақырына жетиў ушын еле узақ.

Электронлар ушын ҳәзирше усындай радикаллық реформа талап етилмейди. Бул жағдайда электромагнит майданы менен өз-ара тәсирлесиўлерди есапқа алыў, жоқарыда айтып өтилгениндей, киши дүзетиўлерге алып келеди. Бирақ бул киши дүзетиўлер гейпара жағдайларда үлкен теориялық қызығыўларды пайда етеди. Олардың бирин қарап өтемиз.

6-бапта водород атомындағы электронның энергиясы тек бас квант саны n нен ғәрезли екенлиги көрсетилди. Бул Шердингердиң релятивистлик емес теңлемесинен келип шығады. Дирактың релятивистлик теңлемеси басқа нәтийжеге алып келеди: электронның энергиясының қәдди жуқа структураға ийе ҳәм тек бас квант саны n нен емес, ал электронның толық моменти j дан да, яғный электронның орбиталық ҳәм спинлик моментлериниң қосындысынан да ғәрезли. $j = l \pm 1/2$ теңлиги орынлы болғанлықтан, керисинше $l = j \pm 1/2$ теңлиги де орынлы. Енди $2s$- ҳәм $2p$-қәддилерин аламыз. Олардың бириншиси $l = 0$ ге ийе, сонлықтан оның толық моменти берилген жағдайда ½ те тең. Термди белгилегенде j шамасын төменги индекс түринде қояды[7]. Демек, $2s$-ҳалында тек $2s_{1/2}$ қәддиниң болыўы мүмкин. p-ҳалында $j = 3/2$ ҳәм $j = 1/2$ лердиң болыўы мүмкин. Олардан $2p_{1/2}$ қәдди сол 2 квант санына ҳәм сол $j = 1/2$ ге ийе (яғный $2s$-ҳалындай). Демек, Дирак теориясы бойынша олардың бирдей энергияға ийе болыўы керек. Бирақ бул айырым электронға ҳәм ядроның ол қозғалатуғын кулонлық майданына тийисли.

Спектроскопистлер водород атомындағы $2s_{1/2}$ ҳәм $2p_{1/2}$ ҳаллардың энергиясы бойынша бир бирине сәйкес келмейтуғынлығын әлле қашан болжады. Бирақ, сол ўақытлары өлшеўдиң жетилискен усыллары жоқ еди. Радиоспектроскопия дөретилгеннен кейин $2s_{1/2}$ қәддиниң $2p_{1/2}$ қәддиден $4 \cdot 10^{-6}$ эВ шамасына айрылатуғынлығын көрсетти.

Егер дәл дәлилленген болса, онда тәжирийбе менен қәлеген сәйкес келмеўшиликтиң түсиндирилиўи керек. Бул жағдайда сәйкес келмеўшилик санлық түрде түсиндириледи. Ең дәслеп, электрон тек ядроның кулонлық майданында тур деп тастыйықлаўға болмайды. Биз электромагнит майданның бир биринен ғәрезсиз болған тербелислерге алып келинетуғынлығын көрдик (қараңыз: 8-бап). ν жийилигиндеги тербелистиң энергиясы $h\nu(n + 1/2)$ ге тең. n санындағы ҳәр бирлик бир квантқа жуўап береди. Бирақ, ½ неге жуўап береди? Бул квантлар болмайтуғын ноллик ҳалдың кванты. 3-бапта биз тербелислер ҳаққындағы квантлық мәселени таллағанда тийкарғы ҳалдың ең киши энергиясында да тербелистиң тоқтамайтуғынлығын, тынышлықтың басланбайтуғынлығын көрдик. Бул анықсызлық принципиниң туўрыдан-туўры нәтийжеси болып табылады. Квантлар болмаған жағдайда да электромагнит майданы нолге тең емес. Майдан өзиниң ноллик тербелислерин сақлай береди. Қатаң теорияда майдан нолге тең деп тастыйықлаўға болмайды, майдан барлық ўақытта да бар ҳәм қәлеген электронға тәсир етеди. Бирақ, Дирак теңлемеси бойынша водород атомының энергиясының меншикли мәнислерин есаплағанда майданның бар екенлиги есапқа алынбады.

Ҳақыйқатында да, оны есапқа алыўдың мүмкиншилиги жоқ. Бирақ, 1/137 санының киши екенлигин есапқа алған ҳалда жуўық формуланы табыў мүмкин. Бул формуланы келтирип шығарыў мынадай қыйыншылықларды пайда етеди: Ҳәр

---

[7] "Терм" сөзи ҳал сөзиниң орнына пайдаланылған.

қыйлы ноллик тербелислердиң саны шексиз үлкен ҳәм олардың ҳәр қайсысы өзиниң үлесин береди. Сонлықтан күтилген эффект жуўап беретуғын 1/137 санының мәнисине шексиз үлкен коэффициент сәйкес келеди. Бете усындай қыйыншылықтан қалай шығыў жолын биринши болып көрсетти. Егер ядроның майданында турмаған еркин электронның энергиясына дүзетиўди қарайтуғын болсақ, онда электромагнит майданының ноллик тербелислериниң себебинен 1/137 ниң керек болған дәрежесиндеги коэффициент те шексиз үлкен болып шығады. Сонлықтан ядроның майданындағы электронның энергиясына қосылатуғын ҳақыйқый дүзетиўдиң шамасы бир шексизликтен екинши шексизликти алып таслағанда алынады. Улыўма айтқанда, бир шексизликтен екинши шексизликти алып таслаў бир мәнисли операция болып табылмайды. Егер салыстырмалық теориясының көрсетпелерин қатаң түрде сақлайтуғын болсақ, онда бул жағдайда толық бир мәнисли айырманы алыўға, ҳәм ең баслысы, ең ақырғы нәтийжени алыўға болады. Ол экспериментте бақланған эффекттиң тийкарғы бөлимин жабады.

Шама менен 3 процентлик үлкен болмаған қалдық берилген электронды қоршап турған терис энергияға ийе электронлардың "фоны" менен байланыслы. Ядроның майданында бул фон бираз деформацияланады, яғный поляризацияланғандай болады ҳәм ядроның майданында қозғалатуғын электронға қатаң болмаған кулонлық күш тәсир етеди. Солай етип, фон тек электрон-позитрон жубы пайда болғанда ғана емес, ал басқа жағдайларда да өзин көрсетеди екен. Фонның электронлары ядродан сыртқы қарай жылысады, себеби олардың массасы терис! "Фонның поляризациясына" қосылатуғын дүзетиў қалдықтың 3 процентин қаплайды. Тәжирийбе фонның ҳақыйқатында да бар екенлигин тастыйықлайды.

Тап усындай жоллар менен электронның магнитлик-механикалық қатнасына қосылатуғын дүзетиўди де есаплаў, усының менен бирге ақылға муўапық келетуғын дүзетиўлердиң барлығын классификациялаў мүмкин. Солай етип, ҳәзирги ўақытлары квантлық электродинамика тамамланған физикалық теорияның белгилерине ийе.

Альберт Мессиа. Квантовая механика. Том 2. Москва. "Наука". 1979.

РЕЛЯТИВИСТЛИК КВАНТЛЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ ЭЛЕМЕНТЛЕРИ

XX БАП. ДИРАК ТЕҢЛЕМЕСИ

I бөлим. Улыўмалық кирисиў

§ 1. Релятивистлик квантлық механика

Буннан алдыңғы бапларда квантлық теориядағы барлық есаплаўлардың тийкарында Шредингер теңлемеси жатты. Релятивистлик емес классикалық механиканың Гамильтон формализминен сәйкес принципи бойынша алынған бул теңлеме Гамильтон функциясының барлық инвариантлық қәсийетлерине ийе. Мысалы, изоляцияланған система ушын теңлеме кеңисликтеги айландырыўларға ҳәм трансляцияларға қарата инвариант. Оның Галилей түрлердириўлерине қарата инвариант екенлигин көрсетиўге болады (XV.7 мәселеге қараңыз). Демек, Шредингер теориясы болжайтуғын физикалық қәсийетлер координаталардың Галилей системасының түрлендириўлерине қарата инвариант, бирақ салыстырмалық теориясы талап ететуғын Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант емес. Галилей түрлендириўлери Лоренц түрлендириўлеринен жақтылықтың тезлигине салыстырғанда киши тезликлерде алынатуғын болғанлықтан, жоқарыда еслетип өтилген теорияның қубылысларды тек жақтылықтың тезлигинен киши болған $b \ll c$ тезликлерде ғана дурыс тәрийиплейди деп күтиў тәбийий (бул экспериментлерде тастыйықланады). Мысалы, өзиниң ишине жақтылық пенен затлардың өз-ара тәсирлесиўин алатуғын фотонлардың нурланыўы, жутылыўы ямаса шашыраўы сыяқлы барлық қубылыслар релятивистлик емес квантлық механиканың шеклеринен тыста жатады.

Релятивистлик квантлық механиканы дөретиўдеги тийкарғы қыйыншылықлардың бири бөлекшелердиң санының сақланыў нызамының бузылыўы менен байланыслы. Салыстырмалық принципиниң ең әҳмийетли нәтийжелериниң бири болған энергия менен массаның эквивалентлигиниң орын алыўына байланыслы тәсирлесиўдиң барысында усы бөлекшелердиң тынышлықтағы энергиясына тең ямаса оннан үлкен болған энергия алып берилетуғын ҳәр бир жағдайда бөлекшениң туўылыўы менен жутылыўының орын алыўы мүмкин. Демек, толық релятивистлик квантлық теория бирден бир схемада тек квантлық ҳаллары бойынша ғана емес, усы ҳалларға сәйкес келетуғын элементар бөлекшелердиң түри ҳәм саны бойынша айрылатуғын динамикалық ҳалларға да ийе болыўы керек. Оның ушын квантланған майдан концепциясын пайдаланыўға туўры келеди. Сонлықтан релятивистлик квантлық теорияны квантланған майданлар теориясы ямаса майданның квантланған теориясы деп те атайды. Ҳәзирги ўақытлардағы ҳалында бул теория қыйыншылықлардан да, ҳәтте қарама-қарсылықлардан да азат емес, бирақ ол көп санлы эксперименталлық фактларды түсиндире алады.

Бул китаптың ақырғы бесинши бөлими квантланған майданлар теориясына кирисиў болып табылады ҳәм есаплаўлардың электронның динамикасы менен электромагнит майданның зарядланған бөлекшелер менен тәсирлесиўине тийисли болған элементар усылларды береди.

Бул бөлим еки баптан турады.

Бул бапта релятивистлик квантлық механиканың ең әпиўайы болған мәселеси қаралады: берилген сыртқы майдандағы спини ½ ге тең бөлекше. Бундай ситуацияға ең әпиўайы мысал сыпатында электромагнит майдандағы электронды көрсетиўге болады. Майдан квантланбайды ҳәм системаның эволюциясы салыстырмалық принципинен келип шығатуғын инвариантлық қәсийетине ийе болған толқын теңлемесиниң жәрдеминде тәрийиплениўи керек. Теңлемениң сәйкеслик принципин де қанаатландырыўы ҳәр релятивистлик емес жақынласыўда Паули теориясын бериўи керек. Бундай теңлеме бар ҳәм оны Дирак теңлемеси деп атайды. Лоренц группасына ҳәм релятивистлик классикалық динамикаға (I бөлим) қысқаша шолыў өткерилгеннен кейин биз Дирак теңлемесин келтирип шығарамыз (II бөлим) ҳәм оның инвариантлық қәсийетин толық изертлеймиз (III бөлим). Бул баптың қалған бөлиминде теорияның физикалық мазмунын таллаймыз ҳәм Дирак теңлемесиниң тийкарғы таманларын қарап, оның классикалық динамика (IV бөлим), релятивистлик емес квантлық механика (V бөлим) ҳәм майданның квантлық теориясы (VI бөлим) менен байланысын изертлеймиз.

Екинши бап квантланған майдан концепцияларына, электромагнит нурланыўының элементар квантлық теориясына ҳәм оның атомлық және ядролық системалар менен өз ара тәсирлесиўине бағышланған.

§ 2. Белгилеўлер ҳәм ҳәр қыйлы анықламалар

Бирликлер. Жүдә сийрек жағдайлардың барлығында да

$$\hbar = c = 1$$

теңлиги орынланатуғын бирликлер системасынан пайдаланамыз. Усыған сәйкес ўақыт узынлықтың бирлигине, энергия, импульс ҳәм масса кери узынлықтың бирлигине ийе, ал электр заряды болса өлшем бирлигине ийе болмайды ($e^2 = e^2/\hbar c = 1/137$. Улыўмалық аңлатпаларды бир теклилик көз-қарасы бойынша аңсат қайта тиклеўге болады.

Координаталар. Ўақыт моменти t менен әдеттеги кеңисликтиң ноқаты $r \equiv (x, y, z)$ ди бериў кеңислик-ўақыттың ноқатын береди. Бул ноқаттың координаталарын x^0, x^1, x^2, x^3 арқалы белгилеймиз. $x^0 = ct$ - ўақыт, ал x^1, x^2, x^3 шамалары үш кеңисликлик координаталар болып табылады: $x^1 \equiv x, x^2 \equiv y, x^3 \equiv z$. Бизлер 0, 1, 2, 3 индекслерин төрт өлшемли векторлар менен тензорлардың сәйкес 0, 1, 2, 3 көшерлери бойынша қураўшыларын белгилеў ушын қолланамыз[8]. 4-векторлар ямаса тензорлардың кеңисликлик-ўақытлық қураўшыларын грек ҳәриплериниң жәрдеминде белгилеймиз. Бул индекслер төрт 0, 1, 2, 3 мәнислерин қабыл етеди. Латын ҳәриплерин әдеттеги кеңисликтеги қураўшыларды белгилеў ушын пайдаланамыз, олар 1, 2, 3 мәнислерине ийе бола алады. Солай етип,

$$x^\mu \equiv (x^0, x^k) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3),$$
$$(\mu = 0, 1, 2, 3)\ (k = 1, 2, 3).$$

Метрлик тензор, ковариант ҳәм контрвариант индекслер. Кеңислик-ўақыт псевдоевклидлик метрикаға ийе ҳәм ол

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ямаса

$$g_{\mu\nu} = 1, g_{kk} = -1, \text{егер } \mu \neq \nu \text{ теңсизлиги орынлы болса } g_{\mu\nu} = 0 \qquad (1)$$

түринде жазылады.

Ковариант векторлар (олар $\partial/\partial x^\mu$ түринде түрленеди) менен ковариант векторларды (олар ∂x^μ түринде түрленеди) ҳәм тензорлардың ковариант ҳәм контрвариант қураўшыларын айырыў керек болады. Бәрше тәрепинен қабыл етилген келисимге муўапық ковариант индекслерди төменде, ал контрвариант индекслерди жоқарыға жазады. Мысалы, a^μ контрвариант векторды аңғартады. Сәйкес ковариант вектор метрлик тензорды пайдаланыў жолы менен алынады:

$$a_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu.$$

Бул теңлик мынаны береди:

$$a_0 = a^0, \qquad a_k = -a^k.$$

Бизлер қайталаныўшы индекслер бойынша суммалаў қағыйдасын пайдаланамыз. Бундай жағдайда $\sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu$ түриндеги аңлатпа компактлы түрдеги

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu$$

аңлатпаға ийе боламыз.

Индекслерди көтериў операциясы $g^{\mu\nu}$ тензорын пайдаланыў менен әмелге асырылады.

$$a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu.$$

Бул жағдайда биз мынаған ийе боламыз:

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}.$$

Усының менен бирге

$$g_\mu^\nu = g_{\mu\rho} g^{\rho\nu} = g_\nu^\mu = \delta_\mu^\nu.$$

Бул аңлатпада δ_μ^ν - Кронекер символы:

$$\delta_\mu^\nu = \begin{cases} 1, \text{егер } \mu = \nu \text{ теңлиги орынлы болса,} \\ 0, \text{егер } \mu \neq \nu \text{ теңсизлиги орынлы болса.} \end{cases}$$

---

[8] Қысқа түрде жазыў мақсетинде 4-вектор, 4-тензор жазыўларын пайдаланамыз.

Үш өлшемли векторлар, төрт өлшемли векторлар, скаляр көбейме. Биз әдеттеги кеңисликтиң векторлары ямаса 3-векторлар ушын қолланылған бурынғы белгилеўлерди пайдаланамыз: векторды жуўан шрифттың ҳәриби менен, ал оның узынлығын әдеттеги шрифттың ҳәриби менен белгилеймиз.

a^μ векторының үш кеңисликлик қураўшысы 3-векторды пайда етеди. Қабыл етилген белгилеўлерди пайдаланып, мынаған ийе боламыз:

$$a^\mu \equiv (a^0, a^1, a^2, a^3) \equiv (a^0, \boldsymbol{a}), \qquad \boldsymbol{a} \equiv \left(a_x, a_y, a_z\right),$$

$$a^1 = a_x, a^2 = a_y, a^3 = a_z, a \equiv (\boldsymbol{aa})^{\frac{1}{2}} \equiv \left[a_x^2 + a_y^2 + a_z^2\right]^{\frac{1}{2}}.$$

$\boldsymbol{a}$ арқалы белгиленген 3-векторының узынлығы менен шатасықты пайда етпейтуғын гейпара жағдайларда биз 4-вектор болған a^μ векторын тек a арқалы да белгилеймиз.

Еки 4-вектор болған a^μ менен a^ν векторларының скаляр көбеймеси биреўиниң контрвариантлық қураўшысын екиншисиниң ковариантлық қураўшысы менен сверткасында алынады, яғный $a_\mu b^\mu$ ямаса $a^\mu b_\mu$:

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \boldsymbol{ab}. \tag{2}$$

a^μ векторының нормасы $a_\mu a^\mu = (a^0)^2 - \boldsymbol{a}^2$.

4-векторлардың классификациясы. Нормасының белгисине байланыслы төрт өлшемли векторларды үш классқа бөлиўге болады:

$$a_\mu a^\mu < 0, a^\mu - \text{кеңисликке мегзес вектор},$$

$$a_\mu a^\mu < 0, a^\mu - \text{ноль вектор},$$

$$a_\mu a^\mu > 0, a^\mu - \text{ўақытқа мегзес вектор}.$$

Бул классификация $x_\mu x^\mu$ жақтылық конусына салыстырғандағы вектордың ийелеген орнына сәйкес келеди. Соңғы еки жағдайды ўақытлық қураўшының белгисине ғәрезлиги бойынша классификациялаўға болады:

$$a^0 > 0 - \text{болажаққа қарай бағытланған},$$

$$a^0 < 0 - \text{өтмишке қарай бағытланған}$$

Градиент. Дифференциаллық операторлар. Биз $\boldsymbol{\nabla} \equiv (\partial/\partial x,\ \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ ҳәм $\Delta \equiv \boldsymbol{\nabla\nabla}$ белгилеўлерин пайдаланыўды даўам етемиз.

$\partial/\partial x^\mu$ дара туўындысының төрт операторы ковариант векторды пайда етеди, оны биз ∂_μ арқалы белгилеймиз:

$$\partial_\mu \equiv \partial/\partial x^\mu = (\partial/\partial x^0,\ \partial/\partial x^1, \partial/\partial x^2, \partial/\partial x^3) \equiv (\partial/\partial ct, \boldsymbol{\Delta}). \tag{3}$$

Бул градиент операторы болып табылады.

Биз "контрвариантлық градиентти" де пайдаланамыз:

$$\partial^\mu \equiv g^{\mu\nu}\partial_\nu \equiv (\partial/\partial ct, \boldsymbol{\Delta}). \tag{4}$$

Даламбер операторын анықлаймыз (§ 11.12 менен салыстырыңыз):

$$\Box \equiv \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \equiv \partial_\mu \partial^\mu. \tag{5}$$

$\varepsilon^{\lambda\mu\nu\rho}$ тензоры. $\varepsilon^{\lambda\mu\nu\rho}$ тензоры қураўшылары егер еки индекси бир бирине тең болған жағдайда 0 ге тең, егер λμνρ индекслери индекслердиң жуп орын алмастырыўларын (0, 1, 2, 3) пайда етсе +1 ге, ал егер λμνρ индекслери индекслердиң тақ орын алмастырыўларын пайда етсе -1 ге тең болған тензор.

Электромагнит майданы. Электромагнит потенциал векторлық $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ ҳәм скаляр $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ потенциаллардан турады. Олар төрт өлшемли A^μ векторды пайда етеди

$$A^{\mu} \equiv (\varphi, \boldsymbol{A}). \qquad (6)$$

Электр $\mathscr{E}$ ҳәм магнит $\mathscr{H}$ майданлары мынадай формулалардың жәрдеминде анықланады:

$$\mathcal{E} = -\boldsymbol{\nabla}\varphi - \partial A/\partial x^{0}, \mathcal{H} = rot\ A. \qquad (7)$$

$\mathcal{E}$ ҳәм $\mathcal{H}$ векторларының қураўшылары кеңислик-ўақытта

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_{\nu}}{\partial x^{\mu}} - \frac{\partial A_{\mu}}{\partial x^{\nu}} \qquad (8)$$

анықламасының тийкарында антисимметриялы $F_{\mu\nu}$ тензорын пайда етеди. Бул өз гезегинде мынаны береди:

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{E}_x & \mathcal{E}_y & \mathcal{E}_z \\ -\mathcal{E}_x & 0 & -\mathcal{H}_z & \mathcal{H}_y \\ -\mathcal{E}_y & \mathcal{H}_z & 1 & -\mathcal{H}_x \\ -\mathcal{E}_z & -\mathcal{H}_y & \mathcal{H}_x & 0 \end{pmatrix}. \qquad (9)$$

Биз

$$D_{\mu} \equiv \partial_{\mu} + ieA_{\mu} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x^{0}} + ie\varphi, \nabla - ieA\right) \qquad (10)$$

түринде жазылатуғын векторлық операторды да пайдаланамыз.

§ 3. Лоренц группасы

Координата системасын Лоренц түрлендириўи деп кеңисликлик-ўақытлық интервалдың нормасын сақлайтуғын координаталарды *затлық, сызықлы* түрлендириўине айтады. Кеңислик-ўақыттағы ноқаттың x'^{μ} ески x^{μ} координаталардан

$$x'^{\mu} = \Omega^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + a^{\mu} \qquad (11)$$

формуласының жәрдеминде алынады.

Затлық a^{μ} векторы кеңислик-ўақытлық көшерлердиң трансляциясын анықлайды. Буннан былай трансляция түрлендириўлерин биз өз алдына қараймыз, ал Лоренц түрлендириўлери деп мынадай бир текли түрлендириўлерге айтамыз ($a^{\mu} = 0$)[9]:

$$x'^{\mu} = \Omega^{\mu}_{\nu} x^{\nu}.$$

Ω^{μ}_{ν} матрицасының индекслерин көтерип ямаса түсирип $\Omega^{\nu}_{\mu}, \Omega^{\mu\nu}, \Omega_{\mu\nu}$ матрицаларын алыўға болады (мысалы, $\Omega^{\mu\nu} = g^{\nu\rho}\Omega^{\mu}_{\rho}$). Бул матрицалардың биреўин бериў Лоренц түрлендириўлерин анықлайды. Норманың затлық ҳәм инвариантлық шәрти мынадай түрге ийе болады:

$$\Omega^{*}_{\mu\nu} = \Omega_{\mu\nu}, \qquad (12)$$

$$\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} = \Omega_{\nu\mu}\Omega^{\lambda u} = \delta^{\lambda}_{\nu}. \qquad (13)$$

Демек,

$$\det\left|\Omega^{\mu}_{\nu}\right| = \pm 1. \qquad (14)$$

Бундай жағдайда кери түрлендириўди былайынша жазыўға болады:

$$x^{\mu} = x'^{\nu}\Omega^{\mu}_{\nu}. \qquad (15)$$

---

[9] Лоренц түрлендириўлеринен ҳәм трансляциялардан пайда болған группаларды әдетте Лоренцтиң бир текли емес группалары ямаса Пуанкаре группалары деп атайды.

Бундай түрлендириўлер *Лоренцтиң толық группасын* - төрт өлшемли векторлардың скаляр көбеймесин сақлайтуғын затлық сызықлы түрлендириўлердиң группасын пайда етеди.

Егер $\Omega^{00} > 0$ болса, онда түрлендириў ўақытқа мегзес болған қураўшылардың белгисин сақлайды. Бундай түрлендириўлерди *ортохронлық* деп атайды ҳәм олар *Лоренцтиң ортохронлық группасын* пайда етеди[10].

Егер оған *қосымша* $\det\left|\Omega_\nu^\mu\right| = 1$ теңлиги орынлы болса, онда түрлендириў әдеттеги кеңисликтеги координата көшерлериниң ориентациясын да (оң ҳәм терис) сақлайды. Усындай түрлендириўлердиң көплиги *Лоренцтиң меншикли группасын* пайда етеди, оны биз $\mathcal{L}_0$ арқалы белгилеймиз.

Лоренцтиң меншикли группасын түрлендириўди шексиз киши түрлендириўлердиң избе-излиги деп қараўға болады. *Шексиз киши түрлендириўдиң матрицасы $\Omega_{\mu\nu}$* мынадай түрге ийе:

$$g_{\mu\nu} + \omega_{\mu\nu}.$$

Бул аңатпада $\omega_{\mu\nu}$ шамалары шексиз киши шамалар болып табылады. (12)- ҳәм (13)-шәртлер мынаны береди:

$$\omega_{\mu\nu} = \omega_{\mu\nu}^*,\ \omega_{\mu\nu} + \omega_{\nu\mu} = 0. \qquad (16)$$

Демек, $\omega_{\mu\nu}$ затлық ҳәм антисимметриялы тензор болып табылады.

Енди

$$Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)} = -Z_{\mu\nu}^{(\beta\alpha)} = g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta} - g_{\mu\beta}g_{\nu\alpha} \qquad (17)$$

теңлиги орынлы деп есаплаймыз. $Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)}$ тензоры антисимметриялы ҳәм нолге тең болмаған еки қураўшыға ийе: $\mu = \alpha, \nu = \beta$ ҳәм $\mu = \beta, \nu = \alpha$. Олардың бири +1 ге, ал екиншиси -1 ге тең. Мейли ε шексиз киши шама болсын, бундай жағдайда

$$g_{\mu\alpha} - \varepsilon Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)}$$

шамасы $x^\alpha x^\beta$ тегислигиндеги ε мүйешине "бурыўға" жуўап беретуғын Лоренцтиң шексиз киши түрлендириўиниң матрицасы болып табылады.

Усындай түрдеги шексиз киши түрлендириўлердиң алты түри бар. x^1x^2, x^2x^3, x^3x^1 тегисликлериндеги "айланыўлар" Лоренцтиң арнаўлы түрлендириўлери

---

[10] Ортохронлы түрлендириўлер арнаўлы салыстырмалық теориясындағы ўақыттың бағытын өзгертпейтуғын Лоренц түрлендириўлериниң типи болып табылады. Басқа сөз бенен айтқанда, ўақыттың бағытын мынадай мәнисте сақлайды: егер A ҳәм B ўақыялары бир бири менен себеп пенен байланысқан болса (яғный A ўақыясы B ўақыясына тәсир ете алады ямаса B ўақыясы A ўақыясына тәсир ете алады), онда ортохронлы түрлендириўлерде ўақыялардың жүзеге келиў тәртиби сақланады.

Математикалық көз-қарастан ортохронлы түрлендириў детерминанты +1 ге тең болған Лоренц түрлендириўи болып табылады. Детерминанттың +1 те тең болыўы кеңислик-ўақыттың бағытының сақланатуғынлығын аңғартады. Ортохронлы түрлендириўлер өзиниң ишине инерциаллық есаплаў системаларындағы салыстырмалы қозғалысқа сәйкес келетуғын тезлениўлерди ҳәм бурыўларды (айланыўларды) алады. Бундай түрлендириўлер группаны пайда етеди ҳәм бур группа ири болған Лоренц түрлендириўлериниң группасына киреди (Аўдарыўшы).

болып табылады (сәйкес Ox, Oy, Oz бағытларында ε тезлиги менен қозғалатуғын координаталар системасына өтиў)[11].

Шексиз киши түрлендириўлерден басқа ҳәр қыйлы шағылысыўлар түрлендириўлерин анықлаў керек болады: кеңисликтеги шағылысыў s ($x^0 = x^0$, $x^k = -x^k$) ҳәм ўақыт t ның шағылысыўы ($x^0 = -x^0, x^k = x^k$). Ортохронлық группа $\mathcal{L}_0$ группасынан, s шағылысыўлар ҳәм $s\mathcal{L}_0$ көбеймесинен туратуғын түрлендириўлерден турады. Толық группа $\mathcal{L}_0$, $s\mathcal{L}_0$, $t\mathcal{L}_0$ ҳәм $st\mathcal{L}_0$ түрлендириўлеринен пайда етиледи. Толық группаның бул төрт көплигиниң қәсийетлери I кестеде келтирилген.

I кесте

	$\det\lvert\Omega^{\mu}_{\nu}\rvert$	Ω^{00}	Группаның белгилениўи
$\mathcal{L}_0$	+1	>0	меншикли
$s\mathcal{L}_0$	-1	>0	ортохронлы
$t\mathcal{L}_0$	-1	<0	толық
$st\mathcal{L}_0$	+1	<0	

§ 4. Классикалық релятивистлик динамика

Тынышлықтағы массасы m ге, заряды e ге тең болған классикалық бөлекшениң динамикалық қәсийетиниң $(\varphi, \boldsymbol{A})$ электромагнит майдандағы қәсийетин еске саламыз.

Бөлекшениң тезлигин v арқалы белгилеймиз:

$$\boldsymbol{v} \equiv \frac{d\boldsymbol{r}}{dt}. \tag{18}$$

Релятивистлик масса M менен механикалық импульс $\boldsymbol{\pi}$ ди былайынша анықлаймыз[12]:

$$M \equiv \frac{m}{\sqrt{1-v^2}}, \qquad \boldsymbol{\pi} \equiv M\boldsymbol{v}. \tag{19}$$

$(M, \boldsymbol{\pi})$ шамаларының жыйнағын 4-вектор болып табылады, оның нормасы

$$M^2 - \boldsymbol{\pi}^2 = m^2 \tag{20}$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады ҳәм ол болажаққа қарай бағытланған ($M > 0$).

---

[11] Егер жаңа координаталар ески координаталардан Oz көшериниң дөгерегинде шекли ф мүйешине бурыўдың салдарынан алынатуғын болса, онда мынаған ийе боламыз:

$$x'^1 = x^1\cos\varphi + x^2\sin\varphi, x'^2 = x^2\cos\varphi + x^1\sin\varphi,\ x'^3 = x^3, x'^0 = x^0.$$

Егер олар Ox көшериниң бағытындағы $v = tg\,\varphi$ тезлигине ийе Лоренцтиң арнаўлы түрлендириўлеринде алынған болса, онда мынаған ийе боламыз:

$$x'^1 = x^1 ch\,\varphi - x^0 sh\,\varphi, x'^0 = x^1 ch\,\varphi - x^1\ sh\,\varphi, x'^2 = x^2, x'^3 = x^3.$$

Жоқарыда қарап өтилген түрлендириўлер $\varphi = \varepsilon$ шамалары шексиз киши шамалар болған жағдайға жуўап береди.

[12] Бул китапта координатаға каноникалық түйинлес болған өзгериўши түринде анықланатуғын импульс пенен шатастырмаў керек (1-томның 62-бетиндеги ескертиўге қараңыз).

Егер сыртқы майдан болмаса, онда бөлекше тең өлшеўли ҳәм туўры сызықлы қозғалады: $\boldsymbol{v}$ шамасы турақлы.

Сыртқы электромагнит майданында бөлекшениң траекториясы

$$\frac{d\boldsymbol{\pi}}{dt} = e[\mathcal{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}] \equiv \boldsymbol{F}. \tag{21}$$

Бул материаллық ноқаттың релятивистлик динамикасының тийкарғы теңлемеси болып табылады. $\boldsymbol{F}$ векторы Лоренц күши деп аталады.

(21)-теңлемеден мынадай теңлемелер келип шығады:

$$\frac{dM}{dt} = (\boldsymbol{vF}) = e(\boldsymbol{v\mathcal{E}}), \tag{21'}$$

$$\frac{d}{dt}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\pi}) = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F}. \tag{22}$$

Бул теңлемелер масса менен қозғалыс муғдарының моментиниң ўақыттан ғәрезлигин анықлайды.

Егер бөлекшениң меншикли ўақыты τ ды

$$d\tau = \left(dx^{\mu}dx_{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{1 - v^2}dt$$

формуласының жәрдеминде анықлайтуғын болсақ, онда жоқарыда келтирилген қатнасларды ковариант формада жазыўға болады. 4-тезликти анықлаймыз:

$$u^{\mu} \equiv \frac{dx^{\mu}}{d\tau} \equiv \left(\frac{dt}{d\tau}, \frac{vdt}{d\tau}\right), \left(u^{\mu}u_{\mu} = 1\right).$$

Бул шаманы m ге көбейтип механикалық 4-импульсти анықлаймыз

$$\pi^{\mu} \equiv mu^{\mu} \equiv (M, \boldsymbol{\pi}).$$

(21)- ҳәм (21')-теңлемелер формаллық жақтан ковариант

$$\frac{d\pi^{\mu}}{d\tau} = eF^{\mu\nu}u_{\nu} \tag{23}$$

ямаса

$$\frac{du^{\mu}}{d\tau} = \frac{e}{m}\, F^{\mu\nu}u_{\nu}$$

теңлемелерине эквивалент. Бул теңлемелерде $F^{\mu\nu}$ арқалы электромагнит майданы тензоры белгиленген [(8)- ҳәм (9)-теңлемелер].

Жоқарыда келтирилген қозғалыс теңлемелерин Лагранж ямаса Гамильтон формализми тийкарында да келтирип шығарыўға болады (1.5-мәселеге қараңыз). $\boldsymbol{p}$ импульс пенен E энергия p^{μ} арқалы белгиленетуғын 4-векторды пайда етеди. Ол π^{μ} менен

$$p^{\mu} = \pi^{\mu} + eA^{\mu}, \tag{24}$$

яғный

$$E = M + e\varphi, \qquad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{\pi} + e\boldsymbol{A}$$

аңлатпаларының жәрдеминде байланысқан.

Гамильтон функциясы былайынша жазылады:

$$H \equiv e\varphi + \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2}. \tag{25}$$

Бул формула (24)- ҳәм (20)-қатнасларға сәйкес келеди. Бул теңликти пайдаланып гамильтонлық каноникалық теңлемени аламыз:

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \frac{\pi}{M}, \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -e\; grad\; (\varphi - e\boldsymbol{A}).$$

Биринши теңлеме тезликтиң анықламасы болып табылады, ал екинши теңлеме (21)-теңлемеге эквивалент. Усы эквивалентликтиң бар екенлигин $\mathcal{E}$ менен $\mathcal{H}$ тың анықламаларын ҳәм

$$\frac{d\boldsymbol{A}}{dx} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + v\, grad\right) A$$

теңлик арқалы табыўға болады.

II бөлим. Клейн-Гордон ҳәм Дирак теңлемелери

§ 5. Клейн-Гордон теңлемеси

Спинниң бар болыўына байланыслы электрон ушын релятивистлик толқын теңлемесин дүзиў қурамалы мәселе болып табылады. Дәслеп спини 0 ге тең болған бөлекше, мысалы π-мезон ушын релятивистлик толқын теңлемесин табамыз. Бундай бөлекше ишки еркинлик дәрежеге ийе емес ҳәм оның толқын функциясы Ψ тек r менен ўақыт t ның функциясы болып табылады. Бөлекшениң массасын m, ал зарядын e арқалы белгилеймиз, бул бөлекше сыртқы $A^{\mu} \equiv (\varphi, \boldsymbol{A})$ электромагнит майданында жайласқан деп болжаймыз.

Толқын теңлемесин келтирип шығарғанда сәйкеслик принципин басшылыққа алған ҳалда эмпирикалық ҳәрекет етемиз. Бул квазиклассикалық жуўықлаў дурыс болатуғын жағдайларда классикалық қозғалыс теңлемесин алыўға мүмкиншилик береди.

Шредингердиң сәйкеслик қағыйдасын еске саламыз:

$$E \to i\frac{d}{dt}, \boldsymbol{p} \to -i\boldsymbol{\nabla}. \qquad (26)$$

$p^{\mu} \equiv (E, p)$ теңлигин киргизиў жолы менен мынаған ийе боламыз:

$$p^{\mu} \to i\partial^{\mu}. \qquad (26')$$

Гамильтониан ушын жазылған (25)-аңлатпадан мынаған ийе боламыз:

$$E = e\varphi + \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2}. \qquad (27)$$

(26)-аңлатпаны пайдаланып, буннан мынадай толқын теңлемеси келип шығады

$$\left(i\frac{d}{dt} - e\varphi\right)\Psi = \left[\left(\frac{1}{i}\boldsymbol{\nabla} - e\boldsymbol{A}\right)^2 + m^2\right]^{\frac{1}{2}}\Psi$$

теңлемеси келип шығады.

Бул теңлемениң дыққат аўдарылыўы керек болған еки кемшилиги бар. Бириншиден, кеңисликлик ҳәм ўақытлық координаталардың асимметриясы анық релятивистлик инвариантлықты көриўге мүмкиншилик бермейди. Екиншиден, оң бөлиминде квадрат түбир турыпты, $\boldsymbol{A} = 0$ болған жағдайлардың барлығында оған оператор мәнисин бериўге болмайды.

Егер басланғыш ноқат сыпатында

$$(E - e\varphi)^2 - (\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 = m^2 \qquad (28)$$

теңлигин беретуғын (20)-қатнасты сайлап алсақ, онда кемшиликлердиң екеўи де жоғалады. Бул қатнас (27)-қатнасқа салыстырғанда улыўмарақ болған

$$E = e\varphi \pm \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 - m^2} \qquad (29)$$

қатнасына эквивалент.

Классикалық шешимлерге "+" белгиси сәйкес келеди; "-" белгиси физикалық мәниске ийе болмаған *терис массаға ийе шешимди* береди. Солай етип, ең басланғыш қатнас сыпатында (28)-қатнасты қабыл етсек, онда *терис массаға ийе болған артықмаш шешимди* киргиземиз.

(28)-қатнасқа сәйкеслик қағыйдасын пайдаланыў *Клейн-Гордон теңлемесин* береди:

$$\left[\left(i\frac{\partial}{\partial t}-e\varphi\right)^2-\left(\frac{1}{i}\boldsymbol{\nabla}-e\boldsymbol{A}\right)^2\right]\Psi=m^2\Psi. \tag{30}$$

Бул теңлемени анық түрдеги релятивистлик инвариант түрде жазыўға болады:

$$\left(D_\mu D^\mu+m^2\right)\Psi\equiv\left[\left(\partial_\mu+ieA_\mu\right)\left(\partial^\mu+ieA^\mu\right)+m^2\right]\Psi=0. \tag{30'}$$

Бул теңлемениң интерпретациясын қысқаша караймыз[13]. Әпиўайылық ушын сыртқы майдан нолге тең болған жағдайды қараў менен шекленемиз. Бундай жағдайда теңлеме әпиўайы түрге енеди (§ II.12 ге қараңыз):

$$(\Box+m^2)\Psi=0. \tag{31}$$

Бул ўақыт бойынша екинши тәртипли болған дифференциаллық теңлеме болып табылады. Бул теңлеме бойынша барлық ўақыттағы Ψ ди табыў ушын басланғыш моменттеги Ψ функциясын да, $\partial\Psi/\partial t$ туўындысының мәнисин де билиў керек. Егер берилген моменттеги системаның динамикалық ҳалын тек ғана Ψ функциясының жәрдеминде емес, ал Ψ менен $\partial\Psi/\partial t$ ниң ямаса олардың

$$\Phi=\Psi+\frac{i}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial t},\chi=\Psi-\frac{i}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

түринде жазылатуғын сызықлы комбинацияларының жәрдеминде анықланады деп постулатланса, онда пайда болған қыйыншылықты аңсат айланып өтиўге болады. Басқа сөзлер менен айтқанда, системаның халы еки Φ ҳәм χ қураўшыларына ийе толқын функциясының жәрдеминде анықланады екен. Бундай толқын функциясы ўақыт бойынша биринши тәртипли туўындыға ийе теңлемени қанаатландырады. Бундай теңлемени Клейн-Гордон теңлемесинен аңсат алыўға болады. Релятивистлик емес шекте бөлекшениң энергиясы шама менен оның тынышлықтағы массасы m ге тең, усыған сәйкес

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t}\approx m\Psi$$

теңлемеси ҳәм $\chi\ll\Phi$ теңсизлиги орынлы болады. Қураўшыларының бири екиншисине салыстырғанда есапқа алмастай дәрежеде киши болады ҳәм усының салдарынан бир Шредингердиң релятивистлик емес теңлемесине ийе боламыз. Бундай теңлемеде спини 0 ге тең болған бөлекшениң динамикалық ҳалы бир қураўшыға ийе болған толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленеди.

Толқын функциясын интерпретациялаў ушын бөлекшениң орнының итималлығының тығызлығы P ны, ҳәм итималлық ағысының тығызлығы $\boldsymbol{j}$ ды анықлаў зәрүрли. Олар үзликсизлик теңлемесин қанаатландырады (§ IV.4 ке қараңыз)

$$\frac{\partial P}{\partial t}+\nabla\boldsymbol{j}=0. \tag{32}$$

---

[13] Толығырақ баянлаўды мына мақалада табыўға болады: *H. Feshbach, F. Villars.* Rev. Mod. Phys. 30, 24 (1958).

Егер $j^{\mu} \equiv (P, \boldsymbol{j})$ белгилеўин киргизсек, онда

$$\partial_{\mu} j^{\mu} = 0 \tag{33}$$

түриндеги теңлемеге ийе боламыз.

Ψ ҳәм Ψ^* функциялары (31)-теңлемени қанаатландырады ҳәм, соған сәйкес

$$\Psi^*(\square\, \Psi) - (\square\, \Psi^*)\Psi = 0$$

теңлемеси орынлы ҳәм Даламбер операторының анықламасын пайдалансақ

$$\partial_{\mu}[\Psi^*(\partial^{\mu}\Psi) - (\partial^{\mu}\Psi^*)\Psi] = 0$$

теңлемеси келип шығады.

Егер квадрат қаўсырманың ишиндеги аңлатпаға пропорционал болған j^{μ} ды сайлап алсақ үзликсизлик теңлемеси орынланады. Пропорционаллық коэффициенти релятивистлик шекте әдеттеги анықлама болған

$$j^{\mu} = \frac{i}{2m}[\Psi^*(\partial^{\mu}\Psi) - (\partial^{\mu}\Psi^*)\Psi],$$

яғный

$$P(\boldsymbol{r}, t) = \frac{i}{2m}\left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi\right], \qquad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = \frac{i}{2m}[\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi] \tag{34}$$

алынатуғындай етип сайлап алынады.

(34)-аңлатпаны изертлеп, $P(\boldsymbol{r}, t)$ *тығызлығының оң мәниске ийе болатуғынлығын* көремиз. Клейн-Гордон теңлемеси менен байланыслы болған тийкарғы қыйыншылық усы жағдай менен байланыслы.

Буннан бурынғы қыйыншылық пенен байланыслы болған басқа қыйыншылық "терис энергияға ийе шешимлерден" келип шығады. Мысалы, егер сыртқы майдан болмаған жағдайдағы теңлемениң тегис толқынлық шешими болған

$$\Psi = \exp\left[-i(Et - pr)\right)$$

шешимди қарасақ, онда бул аңлатпаны (31)-аңлатпаға қойсақ

$$E = \pm\sqrt{p^2 + m^2}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Демек, $-\sqrt{p^2 + m^2}$ терис энергиялы шешимлер де болады екен. Көринип турғанындай, бундай шешимлердиң пайда болыўы жоқарыда еслетип өтилген терис массалардың болыўы менен байланыслы (терис массаларға сәйкес келетуғын шешимлер деп атаған дурысырақ болған болар еди, бирақ ноллик сыртқы майданда масса менен энергия арасындағы айырма иллюзиялық болып табылады). Бул қыйыншылықлардан қутылыў ушын биз Паули менен Вайскопфлардың[14] изинен жүрип 4-вектор болған j^{μ} менен орташа мәнислерди анықлаўдың интерпретациясын өзгертемиз. Жаңа интерпретацияда ej^{μ} шамасы тоқтың тығызлығының 4-векторына, мысалы, $eP(\boldsymbol{r}, t)$ электр зарядының тығызлығы болып табылады. Демек, (33)-теңлеме зарядтың сақланыў нызамын аңғартады. Екинши тәрептен, бөлекшелердиң саны сақланбайды. Бул белгилери қарама-қарсы болған бөлекшелер жубының аннигиляциясы ҳәм туўылыўы менен байланыслы. Тек майданлар теориясында ғана бундай

---

[14] W. Pauli, V. Weisskopf. Helv. Phys. Acta 7, 709 (1934); усының менен бирге буннан бурынғы сноскадағы цитата келтирилген H. Feshbach пенен F. Villars лардың мақаласын қараңыз.

қубылысларды избе-из қарайды. Сайлап алынған интерпретацияда тек бир зарядтың (бир бөлекшениң емес) теориясына ийе боламыз. Дирак теориясында бизге оң мәниске ийе болған тығызлық P ны алыў мүмкиншилигине ийе боламыз. Бирақ, терис энергиялар менен байланыслы болған қыйыншылық сақланады ҳәм Дирак теориясын да қанаатландырарлықтай бир бөлекшели терия деп есаплаўға болмайды (VI бөлим).

§ 6. Дирак теңлемеси

Электронлар ушын релятивистлик толқын теңлемесин дүзиўге өтемиз. Дирактың изи менен релятивистлик емес квантлық механиканы дүзгендегидей ҳәрекет етемиз.

Релятивистлик емес теорияда электрон еки қураўшыға ийе спинордың жәрдеминде тәрийипленеди. Бул спинор айланыўларда ½ ге тең импульс моменти сыяқлы түрленеди. Сонлықтан, релятивистлик теорияда электронның бир неше қураўшыдан туратуғын ҳәм Лоренц түрлендириўлеринде белгили түрде өзгеретуғын толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленииўи керек. Ψ толқын функциясының номери s болған қураўшысын $\psi_s(\boldsymbol{r},t)$ арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда Ψ ди бир бағанадан туратуғын матрица түринде жазыўға болады:

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_N \end{vmatrix}.$$

Релятивистлик емес теориядағыдай, берилген моменттеги толқын функциясын кеңисликлик координаталар $\boldsymbol{r}$ менен ишки ямаса спинлик өзгериўшилер болған s $(s = 1, 2, \dots N)$ тиң функциясы деп қараўға болады. Бундай толқын функциясы базы бир $\langle\psi(t)|$ ҳал векторын береди, ал бундай ҳаллардың кеңислиги орбиталық өзгериўшилер кеңислиги $\mathcal{E}^0$ менен спинлик өзгериўшилер кеңислиги $\mathcal{E}^s$ ниң көбеймесинен турады:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}^0 \otimes \mathcal{E}^s.$$

Ψ толқын функциясы болса сәйкес

$$\Psi(\boldsymbol{r}, s;\ t) \equiv \psi_s(\boldsymbol{r},t) \equiv \langle \boldsymbol{r}\ \boldsymbol{s}|\Psi(t)\rangle$$

көринисиндеги усы векторға жуўап береди. Аналогияны даўам етип, биз бөлекшениң орнының итималлығының тығызлығын

$$P(\boldsymbol{r},t) = \sum_{s=1}^{N} |\psi_s|^2 \qquad (35)$$

формуласының жәрдеминде анықлаймыз.

Усындай гипотезаларға сәйкес, толқын теңлемеси мынадай түрге ийе болады:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H_D\Psi. \qquad (36)$$

Бул теңлемеде H_D арқалы ҳал векторлары кеңислигиндеги Эрмит операторы. Ψ толқын функциясы берилген ўақыт моментиндеги электронның динамикалық ҳалын анықлайтуғын болғанлықтан толқын теңлемесиниң ўақыт бойынша биринши тәртипли болыўы, ал бизиң $P(\boldsymbol{r},t)$ шамасына берген анықламамыздың өз-ара сәйкес келиўи ушын H_D операторының эрмитлик болыўы керек (қараңыз: § IV.3).

Биз релятивистлик толқын теңлемесин излеп атырмыз. Сонлықтан бундай теңлемениң кеңисликлик координаталар менен ўақыт арасындағы симметрияға ийе болыўын, ҳәм кеңисликлик координаналарға қатнасы бойынша да биринши тәртипли теңлеме болыўы керек.

Дәслеп сыртқы майдан нолге тең болған жағдай ушын электронды қараймыз. Гамильтониан трансляцияларға қатнасы бойынша инвариант ҳәм соған сәйкес $\boldsymbol{r}$ ден ғәрезсиз болыўы керек. Жоқарыда айтылғанлардың барлығын есапқа алып, оны былайынша жазыўға болады:

$$H_D = \boldsymbol{\alpha p} + \beta m. \tag{37}$$

Бул аңлатпадағы $\boldsymbol{p}$ операторы (26)-сәйкес келиў қағыйдасы бойынша алынады (яғный $\boldsymbol{p} = -i\boldsymbol{\nabla}$, ал $\alpha \equiv (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ ҳәм β шамасы тек спинлик өзгериўшилерге тәсир ететуғын 4 эрмит операторын аңғартады). Егер $E \equiv i\,\partial/\partial t$ белгилеўин пайдалансақ, толқын теңлемесин былайынша жазыўға болады:

$$[E - \boldsymbol{\alpha p} - \beta m]\Psi = 0. \tag{38}$$

$\boldsymbol{\alpha}$ менен $\boldsymbol{p}$ ларды анықлаў ушын бир сәйкес келиўшилик принципинен пайдаланамыз ҳәм бул теңлемениң шешиминиң Клейн-Гордон теңлемесин қанаатландырыўын талап етемиз:

$$[E^2 - \boldsymbol{p}^2 - m^2] = 0. \tag{39}$$

(38)-теңлемени шеп тәрептен $[E + \boldsymbol{\alpha p} + \beta m]$ операторына көбейтип, екинши тәртипли теңлеме аламыз:

$$[E^2 - \sum_k (\alpha^k)^2 (p^k)^2 - \beta^2 m^2 - \sum_{k<l} (\,\alpha^k\alpha^l + \alpha^l\alpha^k) p^k p^l -$$
$$- \sum_k (\alpha^k\beta + \beta\alpha^k) m p^k]\Psi = 0.$$

Егер α ҳәм β арқалы аңлатылған 4 оператор антикоммутацияланатуғын ҳәм олардың квадраты 1 ге тең болатуғын болса, онда алынған теңлеме менен (39)-теңлеме бир бирине теппе-тең:

$$(\alpha^k)^2 = 1, \alpha^k\alpha^l + \alpha^l\alpha^k = 0\ (k \neq l), \tag{40}$$
$$\beta^2 = 1, \alpha^k\beta + \beta\alpha^k = 0.$$

(40)-қатнасты қанаатландыратуғын ҳәм эрмитлик болған α ҳәм β матрицаларына ийе (38)-теңлеме Дирак теңлемеси деп аталады.

Сыртқы $(\varphi, \boldsymbol{A})$ электромагнит майдандағы электронды тәрийиплейтуғын Дирак теңлемесин алыў ушын мынадай алмастырыўларды ислеў керек болады:

$$E \to E - e\varphi, \boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}. \tag{41}$$

Бул теңлемеде e $(e < 0)$ электронның заряды. Бундай жағдайда мынаған ийе боламыз:

$$[(E - e\varphi) - \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}) - \beta m] = 0. \tag{42}$$

Демек мынадай теңлемени алады екенбиз:

$$\left[\left(i\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right) - \boldsymbol{\alpha}(-i\boldsymbol{\nabla} - e\boldsymbol{A}) - \beta m\right]\Psi = 0. \tag{43}$$

Алынған теңлемени (36)-теңлеме менен салыстырып, сыртқы майдан бар болған жағдайдағы Дирак гамильтонианы ушын аңлатпаны табамыз:

$$H_D = e\varphi + \boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}) + \beta m. \tag{44}$$

§ 7. $\mathcal{E}^{(s)}$ кеңислигин қурыў. Дирак көриниси

Бизге $\mathcal{E}^{(s)}$ кеңислигин қурыў қалды. Бул кеңисликтеги операторлар тийкарғы төрт оператор болып табылады: $\beta, \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ ҳәм бул операторлардың ҳәр қыйлы формалары. Операторлардың бул жыйнағына қатнасы бойынша $\mathcal{E}^{(s)}$ кеңислиги төменлетилмейтуғын болып табылады.

$\mathcal{E}^{(s)}$ ти қурыў ушын биз төрт тийкарғы оператордың эрмитлик шәртин ҳәм олардың алгебралық қәсийетлерин анықлайтуғын (40)-қатнастан пайдаланамыз.

Бул қәсийетлери ½ спин теориясының релятивистлик емес теориясындағы үш σ_1, σ_2 ҳәм σ_3 операторларының қәсийетлерине уқсас. Бул жағдайда спинлик өзгериўшилер кеңислигиниң өлшеми екиге тең. Кеңислик былайынша қурылды. σ_3 эрмитлик оператор ҳәм $\sigma_3^2 = 1$ теңлиги орынлы болғанлықтан оның меншикли мәнислериниң тек ± 1 болыўы мүмкин. Оның үстине ҳәр бир меншикли σ_3 векторы менен қарама-қарсы белгиге ийе болған меншикли мәниске жуўап беретуғын басқа меншикли векторды байланыстырыўға болады. Мысалы, $\sigma_3|+\rangle = |+\rangle$ теңлиги орынланатуғын $|+\rangle$ вектор. Бундай жағдайда σ_3 пенен σ_1 диң антикоммутативлигине байланыслы $|-\rangle \equiv \sigma_1|+\rangle$ векторы ушын $\sigma_3|-\rangle = (-1)|-\rangle$ теңлигин аламыз. Нәтийжеде мынаған ийе боламыз: $\sigma_1|\pm\rangle = |\mp\rangle$ ҳәм $\sigma_3|\pm\rangle = (\pm 1)|\pm\rangle$. Демек, $|+\rangle$ ҳәм $|-\rangle$ векторларына керилген кеңислик σ_3 пенен σ_1 операторларының ҳәм бул операторлардың функцияларына тәсирине қатнасы бойынша инвариант (атап айтқанда $\sigma_2 \equiv i\sigma_1\sigma_3$). Кеңисликти дүзиўдиң усылынан оның төменлетиўге болмайтуғынлығы келип шығады, демек, биз излеп атырған $\mathcal{E}^{(s)}$ кеңислиги қурылды деген сөз. $|+\rangle$ ҳәм $|-\rangle$ базислик векторлар болып табылатуғын көринисте σ_1, σ_2 ҳәм σ_3 операторлары Паули матрицалары менен бериледи (қараңыз § XIII.19 ды ямаса (VII. 65)-формуланы).

$\mathcal{E}^{(s)}$ кеңислигин қурыў мәселесин өткен мәселеге алып келемиз.

$$\sigma_z = -i\alpha_x\alpha_y, \sigma_x = -i\alpha_y\alpha_z, \sigma_y = -i\alpha_z\alpha_x, \tag{45}$$

$$\rho_3 = \beta, \rho_1 = \sigma_z\alpha_z = -i\alpha_x\alpha_y\alpha_z, \rho_2 = i\rho_1\rho_3 = -\beta\alpha_x\alpha_y\alpha_z. \tag{46}$$

Төрт тийкарғы оператор ρ ҳәм σ арқалы былайынша аңлатылады:

$$\beta = \rho_3, \alpha^k = \rho_1\sigma^k. \tag{47}$$

Солай етип, $\mathcal{E}^{(s)}$ ти қурыў ρ менен α операторларына қатнасы бойынша төменлетилмейтуғын кеңисликти қурыўға алып келинди. Төмендегидей жағдайлардың орынлы екенлигин аңсат көрсетиўге болады:

(i) ҳәр бир ρ операторы ҳәр бир σ менен коммутацияланады;

(ii) σ — квадратлары 1 ге тең үш антикоммутацияланатуғын эрмитлик оператор;

(iii) ρ — квадратлары 1 ге тең үш антикоммутацияланатуғын эрмитлик оператор.

Демек (қараңыз § VIII. 7):

(i) $\mathcal{E}^{(s)}$ кеңислиги ρ ға қатнасы бойынша төменлетилмейтуғын $\mathcal{E}^{(p)}$ кеңлислиги менен σ ға қатнасы бойынша төменлетилмейтуғын $\mathcal{E}^{(\sigma)}$ кеңислигиниң тензорлық көбеймеси болып табылады:

$$\mathcal{E}^{(s)} = \mathcal{E}^{(p)} \otimes \mathcal{E}^{(\sigma)}.$$

(ii) $\mathcal{E}^{(\sigma)}$ ның өлшеми екиге тең ҳәм оны жоқарыда келтирилген усыл менен қурыўға болады;

(iii) $\mathcal{E}^{(p)}$ ның да өлшеми екиге тең оны жоқарыда келтирилген усыл менен қурыўға болады.

Солай етип, $\mathcal{E}^{(s)}$ *кеңислигиниң өлшеми төртке тең*.

Келеси бөлимлерде Дирак теңлемесиниң де, Клейн-Гордон теңлемеси сыяқлы терис энергиялы шешимлерге ийе болғанлықтан биз σ операторларының спин менен, ал ρ ның энергияның белгиси менен байланыслы екенлигин көрсетемиз. Мысалы, биз α ның поляр векторлық оператор екенлигин, ал $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ шамасының аксиаллық векторлық оператор екенлигин көремиз. Усының менен бир қатарда формаллық түрде мынаған ийе боламыз:

$$\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha} = 2i\sigma. \tag{48}$$

Электронның спини операторы ½ $\boldsymbol{\sigma}$ болып табылады, ал энергияның белгиси $\beta \equiv \rho_3$ операторының меншикли мәниси бойынша анықланады.

Электронның динамикалық ҳалы 4 қураўшыға ийе болған Ψ функциясының жәрдеминде анықланады. Бул спини ½ ге тең болған бөлекшениң релятивистлик емес теориясындағыдан 2 есе үлкен. ρ менен σ шамалары Паули матрицалары тәрепинен берилетуғын көринис (қараңыз: (VII.65) — (VII.66) теңлемелер) *Дирак көриниси* деп аталады. Бул көринисте ҳәр бир қураўшы спинниң Oz көшерине салыстырғандағы белгили бир бағытына ҳәм энергияның белгили болған белгисине жуўап береди.

§ 8. Дирак теңлемесиниң ковариантлық формасы

Дирак дәслеп өзиниң теңлемесин (43)-формада алды. Теңлемени усындай етип жазыў физикалық интерпретация ҳәм релятивистлик емес шекке өтиў ушын қолайлы. Енди Дирак теңлемесиниң релятивистлик ковариантлық мәселелери тийкарғы орынды ийелейтуғын жағдайда артықмашлыққа ийе болған ўақытлық ҳәм кеңисликлик координаталарға қарата симметриялы формасын аламыз.

(43)-теңлемени шеп тәрептен β ға көбейтемиз. Буннан кейин

$$\gamma^\mu \equiv (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) \equiv (\gamma^0, \gamma), \tag{49}$$
$$\gamma^0 \equiv \beta, \gamma \equiv \beta\boldsymbol{\alpha}$$

белгилеўлерин киргизип, мынаны аламыз

$$\left[i\gamma^\mu D_\mu - m\right]\Psi \equiv \left[\gamma^\mu\left(i\partial_\mu - eA_\mu\right) - m\right] = 0. \tag{50}$$

γ^μ диң қәсийетин (49)-анықлама менен α ҳәм β лардың қәсийетлерин пайдаланып аңсат алыўға болады. (40)- он қатнас мынадай он қатнасқа өтеди:

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}. \tag{51}$$

α ҳәм β лардың эрмитлиги

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0, \gamma^{k\dagger} = -\gamma^k \tag{52}$$

шәртине эквивалент ҳәм бул шәртти ықшымлы формада жазыўға болады:

$$\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0. \tag{53}$$

γ операторлары ушын индекслерди көтериў ҳәм түсириў қағыйдасын тарқатыў қолайлы:

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu. \tag{54}$$

Төмендегидей теңликлердиң орын алатуғынлығын атап өтемиз:

$$\gamma_0 = \gamma^0, \gamma_k = -\gamma^k, \tag{55}$$

$$\gamma^\mu = \gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu^{-1}. \tag{56}$$

§ 9. Түйинлес теңлеме. Тоқты анықлаў

Жоқарыда биз оң мәниске ийе болған итималлық тығызлығын қурдық [(35)-теңлеме)]. Жоқарыда айтылып өтилгениндей, Дирак гамильтонианының эрмитлиги бул анықламаның өзи өзине үйлесиўине алып келеди. Тоқтың тығызлығын анықлаймыз ҳәм Дирак теңлемесиниң шешимлери ушын тоқтың тығызлығының үзликсизлик теңлемесин қанаатландыратуғынын көрсетемиз. Дәслеп Дирак теңлемесин пайдаланып усы мәселени қараймыз, ал оннан кейин ковариантлық форма менен өткерилген таллаўларды қайталаймыз.

β ҳәм α ушын базы бир көринис сайлап алынған деп есаплаймыз. Бундай жағдайда Ψ толқын функциясы мынадай бағана болып табылады:

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Оған эрмитлик түйинлес болған толқын функциясын былайынша белгилеймиз:

$$\Psi^\dagger \equiv (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*).$$

Спинлик кеңисликтеги операторлар 4х4 матрицалар болып табылады. Суммалаў тек спинлик өзгериўшилер менен жүргизилетуғын скаляр көбеймени анықлаўға болады. Бундай скаляр көбеймени әпиўайы қаўсырмалар менен белгилеймиз. Бундай жағдайда P тығызлығын мынадай түрде жазыўға болады:

$$P(r,t) \equiv (\Psi^\dagger \Psi). \tag{57}$$

Басқа мысал сыпатында s қатарында ҳәм t бағанасында турған β мартицасының матрицалық элементи β_{st} ны қараймыз ($s, t = 1, 2, 3, 4$). Бундай жағдайда мынаған ийе боламыз:

$$(\Psi^\dagger \beta \Psi) \equiv \sum_s \sum_t \psi_s^* \beta_{st} \psi_t \,.$$

Мейли, Ψ функциясы Дирак теңлемеси болған

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H_D \Psi = \left[e\varphi + \sum_k \alpha^k \left(-i\frac{\partial}{\partial x^k} - eA^k \right) + \beta m \right] \Psi. \tag{58}$$

теңлемениң шешими болсын. Бундай жағдайда $\Psi^\dagger$ функциясы эрмитлик-түйинлес теңлемениң шешими болып табылады. Бундай теңлеме (58)-теңлемениң комплексли түйинлеси ҳәм ондағы ҳәр бир матрицаны транспонирленген матрица менен алмастырыў арқалы алынады:

$$i\frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t} = -\Psi^\dagger H_D = -e\varphi \Psi^\dagger + \sum_k \left(-i\frac{\partial}{\partial x^k} - eA^k \right) \Psi^\dagger \alpha^k - m\Psi^\dagger \beta. \tag{59}$$

(58)-теңлемени шеп тәрептен $\Psi^\dagger$ ға, ал (59)-теңлемени оң тәрептен Ψ ға көбейтип ҳәм оларды бир бирине қосып, мынаны аламыз:

$$i\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^{\dagger}\Psi) = -i\sum_{k}\frac{\partial}{\partial x^{k}}(\Psi^{\dagger}\alpha^{k}\Psi). \qquad (60)$$

Шеп тәрепте итималлықтың тығызлығы P дан ўақыт бойынша алынған туўынды, ал оң тәрепте базы бир $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ векторының дивергенциясы тур:

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = (\Psi^{\dagger}\alpha^{k}\Psi). \qquad (61)$$

Алынған $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ шамасы биз излеп атырған тоқтың тығызлығы, ал (60)-теңлеме үзликсизлик теңлемеси болып табылады:

$$\frac{\partial}{\partial t}P + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{j} = 0.$$

Дирак теңлемесиниң ковариант формасын пайдаланып жоқарыда өткерилген таллаўларды қайталаўға болады [(50)-теңлеме]. (50)-теңлемеге эрмитлик-түйинлес теңлеме

$$\left(i\partial_{\mu} - eA_{\mu}\right)\Psi^{\dagger}\gamma^{\mu\dagger} - m\Psi^{\dagger} = 0 \qquad (62)$$

түринде жазылады (бул теңлемеде $\partial_{\mu}\Psi^{\dagger}\gamma^{\mu\dagger}$ ағзасы төрт $(\partial\Psi^{\dagger}/\partial x^{\mu})\,\gamma^{\mu\dagger}$ элементтен туратуғын матрица-қатарды аңғартады). Төмендегидей белгилеўди киргизген қолайлы:

$$\bar{\Psi} = \Psi^{\dagger}\gamma^{0}, \qquad \Psi^{\dagger} = \bar{\Psi}\gamma^{0}. \qquad (63)$$

(62)-теңлемени оң тәрептен γ^{0} ге көбейтип ҳәм (53)-қатнасты есапқа алып, мынадай теңлемени аламыз:

$$\left(-i\partial_{\mu} - eA_{\mu}\right)\bar{\Psi}\gamma^{\mu\dagger} - m\bar{\Psi} = 0. \qquad (64)$$

Бул теңлеме (59)-теңлемеге эквивалент. $\bar{\Psi}$ шамасы Ψ ге түйинлес, ал (64)-теңлемени *түйинлес теңлеме* деп атайды.

(50)-теңлемени шеп тәрептен скаляр түрде $\bar{\Psi}$ ге, ал (64)-теңлемени оң тәрептен Ψ ге көбейтип ҳәм оннан кейин оларды бир биринен алып, мынаған ийе боламыз:

$$i\partial_{\mu}(\bar{\Psi}\gamma^{\mu}\Psi) = 0.$$

Тоқтың тығызлығының төрт өлшемли векторын былайынша анықлаймыз:

$$j^{\mu} \equiv (\bar{\Psi}\gamma^{\mu}\Psi). \qquad (65)$$

Бундай жағдайда буннан алдыңғы теңлеме үзликсизлик теңлемесине эквивалент:

$$\partial_{\mu}j^{\mu} = 0.$$

$j^{\mu} \equiv (P,\boldsymbol{j})$ теңлигиниң орынлы екенлигин аңсат көрсетиўге болады. Солай етип, биз үзликсизлик теңлемесин ковариант формада жаздық. Келеси бөлимде биз j^{μ} ның төрт қураўшысының ҳақыйқатында да 4-векторды пайда ететуғынлығын көрсетемиз.

III бөлим. ДИРАК ТЕҢЛЕМЕСИНИҢ ИНВАРИАНТЛЫҚ ҚӘСИЙЕТЛЕРИ

§ 10. Дирак матрицаларының қәсийетлери

Дирак теңлемесиниң инвариантлық қәсийетин қарамастан бурын $\gamma^{\mu} \equiv (\gamma^{0},\gamma^{1},\gamma^{2},\gamma^{3})$ түринде жазылған 4х4 матрицаларының қәсийетлерин үйренемиз. Олар мынадай қатнасларды қанаатландырады:

$$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu} = 2g^{\mu\nu}I. \qquad (66)$$

Бул аңлатпада I арқалы бирлик матрица белгиленген. (66)-матрицалық қатнас операторлар арасындағы (66)-қатнастың аналогы болып табылады, бирақ ҳәзир қарап атырған матрицалардың (53)-унитарлық шәртлерин қанаатландырыўының кереги жоқ. Бизлер алатуғын барлық қәсийетлер тек (66)-қатнастан келип шығады.

γ^A матрицалары. γ^μ матрицалары антикоммутацияланатуғын, ал олардың қәлегениниң квадраты $+I$ ямаса $-I$ ге тең болғанлықтан, бир неше γ^μ матрицаларының қәлеген көбеймеси белгиге шекемги дәлликте II кестеде келтирилген 16 матрицаның бирине тең болады. γ^A матрицалары бес (S), (V), (T), (A) ҳәм (P) классқа топланған (группаласқан), олардың ҳәр қайсысы сайкес 1, 4, 6, 4 ҳәм 1 элементке ийе (бундай классификацияның себеплери усы бөлимниң ақырында түсиникли болады, § 14 ке қараңыз).

II кесте.

γ^A матрицалары

Белгилениўи		Анық түри			
		$(\,_{\gamma}A)^2 = I$	$(\,_{\gamma}A)^2 = -I$		
(S)	$1 \equiv$	I			
(V)	$\gamma^m \equiv \{\gamma^0, \gamma^k\} \equiv$	γ^0	γ^1	γ^2	γ^3
(T)	$\gamma^{[\lambda m]} \equiv \{\gamma^k\gamma^0, \gamma^5\gamma^0\gamma^k\} \equiv$	$\gamma^1\gamma^0 \quad \gamma^2\gamma^0 \quad \gamma^3\gamma^0$	$\gamma^2\gamma^3$	$\gamma^3\gamma^1$	$\gamma^1\gamma^2$
(A)	$\gamma^{[\lambda m \nu]} \equiv \{\gamma^0\gamma^5, \gamma^k\gamma^5\} \equiv$	$\gamma^1\gamma^2\gamma^3$	$\gamma^0\gamma^2\gamma^3$	$\gamma^0\gamma^3\gamma^1$	$\gamma^0\gamma^1\gamma^2$
(P)	$\gamma^{[\lambda m \nu c]} \equiv \gamma^5 \equiv$		$\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$		

Бул матрицалардың квадратлары $(\gamma^A)^2$ ның $+I$ ге ямаса $-I$ ге тең екенлиги түсиникли. Квадратлары $+I$ ге тең болған алты матрица шеп тәрептеги бағанада, квадратлары $-I$ ге тең он матрица оң бағанада жайласқан.

Бул матрицалардың барлығының ишинен тек бирлик I матрица басқа барлық матрицалар менен коммутацияланады. Егер $\gamma^A \neq I$ теңсизлиги орынлы болса, ол 16 матрицаның сегизи менен антикоммутацияланады ҳәм қалған сегизи менен коммутацияланады.

Мысалы[15],

$$\gamma^5 \equiv \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \tag{67}$$

түринде анықланатуғын γ^5 матрица γ^μ менен антикоммутацияланады:

$$\gamma^5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^5 = 0. \tag{68}$$

Оның квадраты

$$(\gamma^5)^2 = -I. \tag{69}$$

Кери матрицалар (γ_μ). γ_μ матрицаларын

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu \tag{70}$$

қатнасының жәрдеминде анықлаймыз.

$$\gamma^\mu = [\gamma_\mu]^{-1}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығы өз-өзинен түсиникли.

---

[15] 4 индекси әдетте $x^4 = ix^0 = ict$ арқалы белгиленетуғын ўақытлық қураўшыны белгилеў ушын қолланылады.

Нәтийже сыпатында егер оның аңлатпасында γ^{μ} матрицалары арқалы олардың нәтийжелерин керисине өзгертсек биз γ^{μ} матрицасына кери матрицаны аламыз ҳәм ҳәр бир γ^{μ} матрицаны γ_{μ} матрицасына өзгертемиз. Алынатуғын аңлатпаны γ_A арқалы белгилеймиз:

$$\gamma_A\gamma^A = \gamma^A\gamma_A = I. \tag{71}$$

Усындай етип ҳәрекет етиўдиң нәтийжесинде γ^5 матрицасына кери матрицаны табамыз:

$$\gamma_5 = \gamma_3\gamma_2\gamma_1\gamma_0.$$

Из ҳәм анықлаўшы. Мынадай теңлик орынлы:

$$Tr\,\gamma^A = \begin{cases} 4, & \text{егер } \gamma^A = I \text{ болса,} \\ 0, & \text{егер } \gamma^A \neq I \text{ болса.} \end{cases} \tag{72}$$

Дәлиллеў ушын $\gamma^A \neq I$ деп болжаймыз ҳәм, мейли, γ^B матрицасы γ^A менен антикоммутацияланатуғын 8 матрицаның бири болсын:

$$\gamma^A = -\gamma^B\gamma^A\gamma_B.$$

Бундай жағдайда мынаған ийе боламыз:

$$Tr\,\gamma^A = -Tr\,\gamma^B\gamma^A\gamma_B = Tr\,\gamma_B\gamma^B\gamma^A = -Tr\,\gamma^A = 0.$$

Усының менен бирге

$$\det\gamma^A = 1$$

теңлигиниң орынлы екенлигин атап өтемиз (3-мәселе).

Қайтадан қурыў ҳаққындағы лемма. Келеси қәсийетти әпиўайы тексериў жолы менен анықланады. Егер 16 матрицаның ҳәр бирин оң тәрептен (ямаса шеп тәрептен) олардың бирине көбейтсек, онда белги дәллигине шекемги дәлликте сол 16 матрицаны аламыз.

Сызықлы ғәрезсизлик ҳәм төменлетпеўшилик. Қайта қурыў ҳаққындағы лемма менен издиң қәсийетин пайдаланып, мынадай жағдайларды аңсат көрсетиўге болады:

1°. γ^A матрицалары сызықлы ғәрезсиз.

2°. Қәлеген 4х4 өлшемге ийе болған M матрица γ^A матрицаларының сызықлы комбинациясы түринде көрсетиледи:

$$M = \sum_A m_A\gamma^A, m_A = \frac{1}{4}Tr\,\gamma_A M.$$

3°. γ^{μ} матрицаларының ҳәр бири менен, усыған сәйкес γ^A матрицасы менен коммутацияланатуғын қәлеген матрица бирлик матрицаға пропорционал.

Қәлеген μ ушын $[M,\gamma^{\mu}] = 0$ теңлиги орынлы болса, онда $M = const\ \times I$.

Фундаменталлық теорема. *Мейли* γ^{μ} *менен* γ'^{μ} *(66)-қатнасты қанаатландыратуғын 4х4 матрицаларының еки жыйнағы болсын. Бундай жағдайда көбейтиўшиге шекемги дәлликте анықланған ҳәм*

$$\gamma^{\mu} = S\gamma'^{\mu}S^{-1}\ (\mu = 0, 1, 2, 3) \tag{73}$$

түриндеги сингулярлық емес ($\det S \neq 0$) S *матрицасы бар болады.*

Теореманың дәлиллениўин былайынша өткеремиз.

γ^{μ} менен γ'^{μ} шамаларының ҳәр бир жыйнағы менен 16 дана γ^A ҳәм γ'^A матрицалары байланысқан. Олардың анықламасы менен қәсийетлери жоқарыда келтирилди. Сонлықтан ҳәр бир γ^A матрицаға базы бир γ'^A матрица сәйкес келеди,

A индекси 16 дана ҳәр қыйлы мәнислерди қабыл етеди. Базы бир F матрицасын аламыз ҳәм S арқалы келеси матрицаны белгилеймиз:

$$S \equiv \sum_A \gamma'^A F \gamma_A.$$

Бул аңлатпада суммалаў A индексиниң барлық мүмкин болған мәнислери бойынша жүргизиледи.

Айқын түрдеги γ^B матрицасын сайлап аламыз, оған кери болған матрица γ_B болып табылады, ал басқа жыйнақтағы оған сәйкес келетуғын матрица γ'^B. Қайта қурыў ҳаққындағы леммаға сәйкес, мынаған ийе боламыз:

$$\gamma'^B S \gamma_B \equiv \sum_A \gamma'^B \gamma'^A F \gamma_A \gamma_B = \sum_A \gamma^A F \gamma_A \equiv S.$$

Демек,

$$\gamma'^B S = S \gamma^B. \tag{74}$$

(73)-қатнасларды дәлиллеў ушын S матрицасының кери матрицаға ийе екенлигин көрсетиў керек болады. T матрицасын қурамыз:

$$T \equiv \sum_A \gamma^A G \gamma'_A.$$

Бул аңлатпада G - ықтыярлы матрица. Тап бурынғыдай таллаў арқалы, мынаны аламыз:

$$\gamma^B T = T \gamma'^B.$$

Демек, қәлеген γ^B матрицасы ушын

$$\gamma^B T S = T \gamma'^B S = T S \gamma'^B$$

теңлиги орынлы болады. TS матрицасы барлық γ^B лар менен коммутацияланатуғын болғанлықтан, ол бирлик матрицаға пропорционал: $TS = c \times I$. c турақлысы

$$c = \frac{1}{4} Tr\, TS = \frac{1}{4} \sum_A \sum_B Tr\, \gamma^A G \gamma'_A \gamma' F \gamma_B =$$

$$= \frac{1}{4} Tr\, G \left(\sum_A \sum_B Tr\, \gamma'_A \gamma'^B F \gamma_B \gamma^A \right) = 4\, Tr\, GS.$$

F матрицасын S матрицалық элементлериниң барлық ўақытта ең кеминде бири нолге тең болмайтуғындай етип сайлап алыўға болады. Егер ондай болмағанда γ^A матрицалары сызықлы ғәрезсиз болмаған болар еди. Буннан кейин G ны

$$Tr\, GS \equiv \sum_s \sum_t G_{st} S_{ts} = \frac{1}{4}$$

теңлиги орынланатуғындай етип сайлап алыўға болады. Демек $c = 1$ ҳәм $TS = I$. Солай етип, S матрицасы кери матрицаға ийе ҳәм (74)-теңликти оң тәрептен S^{-1} ге көбейтип (73)-қатнасты аламыз.

Егер тап сондай қатнаслар орынланатуғын басқа S' матрица бар болатуғын болса, онда $S^{-1}S'$ барлық γ^m матрицалар менен коммутацияланады ҳәм, демек, $S^{-1}S' = c \times I$. Кери тастыйықлаў да дурыс: Егер S ушын (73)-қатнас орынланатуғын болса, онда олар S ке пропорционал болған қәлеген матрица ушын да орынланады. Усының менен биз сингуляр болмаған S матрицасының болатуғынлығын ҳәм көбейтиўди дәллигине шекем анықланғанлығын дәлилледик.

Егер (66)-қатнасларды қанаатландыратуғын γ^{μ} матрицалары унитарлық болатуғын болса

$$\gamma_{\mu} \equiv \gamma^{0}\gamma^{\mu}\gamma^{0} = \gamma^{\mu\dagger}, \tag{75}$$

онда барлық γ^{A} матрицалары да унитарлық, демек, олар $(\gamma^{A})^{2}$ шамасының бирлик матрица $+I$ ге ямаса $-I$ ге тең болыўына байланыслы эрмитлик ямаса антиэрмитлик болады.

384 Дәллиллениўи оқыўшыға усынылатуғын келеси тастыйықлаў фундаменталлық теореманы толықтырады: *Егер* γ^{μ} *менен* γ'^{μ} *арқалы* (66)-*қатнасларды қанаатландыратуғын өлшеми* 4x4 *болған еки унитарлық матрица белгиленген болса, онда фазалық көбейтиўшиге шекемги дәлликте анықланған унитарлық* $\gamma'^{\mu} = U\gamma^{\mu}U^{\dagger}$ *матрица бар болады* (μ = 0, 1, 2, 3).

***B* комплексли түйинлес матрица**. Егер дара жағдайда γ^{μ} матрицалары (66)-қатнасты қанаатландыратуғын ҳәм унитарлық болса, онда 4 дана комплексли $\gamma^{\mu*}$ матрицалары да тап сол қатнасларды қанаатландырады. Буннан алдыңғы тастыйықлаў бойынша γ^{μ} ҳәм $\gamma^{\mu*}$ матрицалары унитарлық түрлендириў арқалы байланысқан. Бул түрлендириўдиң матрицасын B арқалы белгилеймиз (B матрицасы фазалық көбейтиўши дәллигинде анықланған):

$$\gamma^{\mu} = B\gamma^{\mu*}B^{\dagger}, \qquad \gamma^{\mu*} = B^{*}\gamma^{\mu}\tilde{B}. \tag{76}$$

B матрицасының антисимметриялы екенлигин көрсетиўге болады, яғный

$$B = -\tilde{B}.$$

Усы теңликке

$$BB^{*} = B^{*}B = I \tag{77}$$

теңлиги сәйкес келеди.

Егер γ матрицалары ушын Дирак көриниси сайлап алынған болса, онда

$$B \equiv B_{D} = \gamma^{2}\gamma^{5} = -i\rho_{3}\sigma_{y}.$$

Бундай жағдайда (77)-теңликлердиң дурыс екенлигин аңсат тексерип көриўге болады.

§11. Координаталар системасын ортохронлық түрлендириўлердеги Дирак теңлемесиниң инвариантлығы

Салыстырмалық принципи Дирак теңлемесиниң ҳәм үзликсизлик теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлери менен байланыслы болған ҳәр қыйлы координаталар системаларындағы бирдей формаға ийе болыўын талап етеди. Ҳақыйқатында, қатаң түрде айтқанда Лонец түрлендириўлериниң өзине қатнасы бойынша инвариантлық талап етиледи. Бирақ, теория толық группаға қатнасы бойынша да инвариант[16]. Дәслеп ортохронлық группаға қатнасы бойынша инвариантлық

---

[16] Соның менен бирге кеңисликлик ҳәм ўақытлық трансляцияларға қатнасы бойынша да. Төменде өткерилетуғын таллаўларды пайдаланып та бул инвариантлықтың орын алатуғынлығына көз жеткериўге болады. Егер координаталардың басын a^{μ} арқалы белгиленген 4 векторға жылыстыратуғын болсақ, яғный $x'^{\mu}x = x^{\mu}a^{\mu}$ теңлиги орынланатуғын болса, онда $A'_{\mu}(x') = A_{\mu}(x)$ теңлиги орынлы болады ҳәм функцияларды түрлендириў нызамы [(85)-нызамның аналогы] әпиўайы болған

$$\Psi'(x') = \Psi(x)$$

қәсийетин қараймыз. Ўақыттың өзгериўи менен Лоренц түрлендириўлери менен байланыслы болған Дирак теңлемесиниң баска қәсийетлери усы бөлимниң ақырында қаралады.

Электронның динамикалық ҳалы координаталар системасында (R) Дирак теңлемесин қанаатландыратуғын төрт қураўшыға ийе толқын функциясының жәрдеминде бериледи деп есаплаймыз:

$$\left[\gamma^\mu\left(i\partial_\mu - eA_\mu(x)\right) - m\right]\Psi(x) = 0. \tag{78}$$

$\mathcal{E}^{(s)}$ кеңислигиндеги операторлар ушын базы бир көринисти белгилеп аламыз; бундай жағдайда γ^μ символлары белгили болған матрицаларды аңғартады ҳәм (78)-қатнас $\psi_s(x)$ толқын функциясының төрт қураўшысы ушын төрт теңлемеден туратуғын системаға алып келинеди $(s = 1, 2, 3, 4)$

$$\sum_{t=1,2,3,4}\sum_{\mu}(\gamma^\mu)_{st}\left(i\frac{\partial}{\partial x^\mu} - eA_\mu(x^0x^1x^2x^3)\right)\psi_t(x^0x^1x^2x^3) -$$
$$-m\psi_s(x^0x^1x^2x^3) = 0.$$

Тап сол физикалық системаны Лоренцтиң басланғыш ортохронлық $\mathcal{L}$ түрлендириўлери менен байланыслы болған координаталар системасында қараймыз:

$$(R') = \mathcal{L}(R).$$

$\mathcal{L}$ түрлендирилиўи (12) менен (13) ти қанаатландыратуғын ҳәм (R) системасындағы берилген ноқаттың координаталары x^μ менен тап сол ноқаттың (R') системасындағы координаталары x'^μ менен байланыстыратуғын базы бир матрица менен тәрийипленеди (яғный, контрвариантлық векторлардың түрлениў нызамы, (11)- ҳәм (15)-теңлемелер). Символлық түрде мыналарды жазыўға болады:

$$x' = \mathcal{L}x, \qquad x = \mathcal{L}^{-1}x'. \tag{79}$$

Дара туўындылар операторлары ковариант векторлардай болып түрленеди:

$$\partial_\mu = \partial'_\mu\Omega^\nu_\mu. \tag{80}$$

Егер жаңа координаталар системасындағы электромагнит потенциалдың ковариант қураўшыларын $A'_\mu(x')$ арқалы белгилесек, онда олар $A_\mu(x)$ пенен ковариант векторлардың түрлениў нызамы бойынша байланысқан:

$$A_\mu(x) \equiv A_\mu(\mathcal{L}^{-1}x') = A'_\nu(x')\Omega^\nu_\mu. \tag{81}$$

Жаңа координаталардың функциясы сыпатында $\Psi(x)$ функциясы (78) ден (80) менен (81) ди қойғаннан кейин алынады:

$$\left[\hat{\gamma}^\mu\left(i\partial'_\mu - eA'_\mu(x')\right) - m\right]\Psi(\mathcal{L}^{-1}x') = 0. \tag{82}$$

Бул теңлемеде

$$\hat{\gamma}^\mu \equiv \Omega^\mu_\rho\gamma^\rho. \tag{83}$$

γ^μ матрицалары унитарлық ҳәм (66)-қатнасларды қанаатландырады. Төрт $\hat{\gamma}^\mu$ матрицасының унитарлық болыўы шәрт емес, бирақ Ω^μ_ν дың ортогоналлығына байланыслы [(13-қатнаслар], олар (66)-қатнасларды да қанаатландырады, яғный

$$\hat{\gamma}^\mu\hat{\gamma}^\nu + \hat{\gamma}^\nu\hat{\gamma}^\mu = \Omega^\mu_\rho\Omega^\mu_\sigma(\gamma^\rho\gamma^\sigma + \gamma^\sigma\gamma^\rho) = 2\Omega^\mu_\rho g^{\rho\sigma}\Omega^\nu_\sigma = 2g^{\mu\nu}.$$

§ 10 дағы фундаменталлық теореманың бар болыўына байланыслы $\hat{\gamma}$ матрицасын γ матрицасына түрлендиретуғын Λ матрицасы бар болады:

түрине ийе болады.

$$\hat{\gamma}^{\mu} \equiv \Omega^{\mu}_{\rho}\gamma^{\rho} = \Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\,\Lambda \ \ (\mu = 0, 1, 2, 3). \tag{84}$$

Бул қатнасты (82)-теңлемеге қойып ҳәм

$$\Psi'(x') = \Lambda\Psi(x) \equiv \Lambda\,\Psi(\mathcal{L}^{-1}x') \tag{85}$$

белгилеўин қолланып, буннан кейин шеп тәрептен Λ ге көбейтип, мынаны аламыз

$$\left[\gamma^{\mu}\left(i\partial'_{\mu} - eA'_{\mu}(x')\right) - m\right]\Psi'(x') = 0.$$

Бул толқын теңлемеси жаңа координаталар системасындағы системаның эволюциясын тәрийиплейди. Бул теңлеме формаллық жақтан (78)-теңлеме менен теппе-тең. Солай етип, Дирак теңлемеси координаталар системасын ортохронлық түрлендириўлерге қарата формаллық жақтан инвариант ҳәм толқын функциясы түрлендириў нызамы (85)-теңлемениң жәрдеминде анықланады.

Улыўма жағдайда турақлы көбейтиўши дәллигинде анықланатуғын Λ матрицасын унитарлық етип сайлап алыўға болмайды. Бирақ, биз барлық ўақытта көбейтиўшини

$$\Lambda^{\dagger} = \gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0} \tag{86}$$

теңлиги орынланатуғындай етип сайлап аламыз ҳәм ықтыярлы түрде сайлап алыў тек фазада қалады.

Ω^{ν}_{σ} затлық, ал γ^{μ} унитарлық ҳәм (75)-қатнасларды қанаатландыратуғын болғанлықтан, (83) пенен эрмитлик-түйинлес қатнасты салыстырып, мынаны табамыз:

$$\hat{\gamma}^{\mu\dagger} = \gamma^{0}\hat{\gamma}^{\mu}\gamma^{0}.$$

(84)-қатнастан эрмитлик-түйинлес қатнасқа өтип ҳәм буннан бурынғы формулаға қойып, мынаны аламыз

$$\hat{\gamma}^{\mu} = (\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0})\gamma^{\mu}(\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0})^{-1}.$$

Бул формуланы (84) пенен салыстырып, биз $\Lambda\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0}$ матрицасының төрт γ^{μ} матрицасы менен коммутацияланатуғынлығын ҳәм, усыған сәйкес) бирлик

$$\Lambda^{\dagger} = c\gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0} \tag{87}$$

матрицасына пропорционал екенлигин көремиз.

c турақлысының сөзсиз затлық ҳәм оң мәниске ийе болатуғынлығын көрсетемиз. (87)- ҳәм (84)-формулаларды пайдаланып, мынаған ийе боламыз:

$$\Lambda^{\dagger}\Lambda = c\gamma^{0}(\Lambda^{-1}\gamma^{0}\Lambda) = c\left(\Omega^{0}_{0} + \sum_{k}\Omega^{0}_{k}\gamma^{0}\gamma^{k}\right).$$

Буннан (72) ни дыққатқа алып, $Tr\ \Lambda^{\dagger}\Lambda = 4c\Omega^{0}_{0}$ теңлигиниң орынлы екенлигин көремиз. Эрмитлик $\Lambda^{\dagger}\Lambda$ матрицасының изи затлық ҳәм оң болғанлықтан, Ω^{0}_{0} саны да оң ҳәм затлық болып табылады. Буннан c турақлысы ҳаққындағы ең дәслепки тастыйықлаўға келемиз. Егер Λ матрицасын $\sqrt{c}$ Га бөлсек, онда жаңа матрица Λ-матрица болып табылады ҳәм (86)-теңлемени қанаатландырады.

(85)-толқын функцияларын түрлендириў нызамы түйинлес функциялардың түрлениў нызамын анықлайды:

$$\bar{\Psi}' \equiv \Psi'^{\dagger}\gamma^{0} = \Psi^{\dagger}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0} = \bar{\Psi}\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0}.$$

Буннан, (86) ны есапқа алған ҳалда мынаған ийе боламыз:

$$\bar{\Psi}'(x') = \bar{\Psi}(x)\Lambda^{-1}. \tag{88}$$

Бул түрлендириў нызамын пайдаланып, оқыўшы қыйыншылықсыз (64)-түйинлес теңлемениң координаталар системасының ортохронлық түрлендириўлерине қарата формаллық инвариант екенлигин тексерип көре алады.

Енди үзликсизлик теңлемесиниң инваринатлығын ямаса γ^{μ} тоғының [(65)-анықлама] контрвариантлық 4-вектор сыпатында түрленетуғынлығын көрсетиў қалды[17].

Оны (85), (88) ҳәм (84) аңлатпаларды пайдаланыў жолы менен табыўға болады.

$$\gamma'^{\mu}(x') \equiv (\bar{\Psi}'\gamma^{\mu}\Psi') = (\bar{\Psi}\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda\Psi) = \Omega^{\mu}_{0}(\bar{\Psi}\gamma^{\rho}\Psi) = \Omega^{\mu}_{0}j^{\rho}(x).$$

Ҳәр бир Лоренц түрлендириўи ушын (84)- ҳәм (86)-шәртлер Λ ны фазалық көбейме дәллигинде анықлайды. *Бул жағдайда бул фаза физикалық мәниске ийе болмайды*.

Λ Лоренц группасына ортрохронлық болған гомоморфлық группаны пайда етиўи ушын фазадағы ықтыярлықты мүмкин болғанынша сапластырыў қолайлы (қараңыз: § XV. 8 деги таллаўды).

Ω^{μ}_{ν} шамасының затлығын есапқа алғанда (84)-шәрт мынаны береди:

$$\Omega^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu^*} = (\Lambda^*)^{-1}\gamma^{\mu^*}\Lambda^*.$$

Буннан унитарлық B матрицасын киргизип [(76)-анықлама] мынаны аламыз:

$$\Omega^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu} = (B\Lambda^*B^{\dagger})^{-1}\gamma^{\mu}(B\Lambda^*B^{\dagger}).$$

Бул теңлемени ҳәм (84)-теңлемени салыстырып $B\Lambda^*B^{\dagger}\Lambda^{-1}$ диң төрт γ^{μ} матрицасы менен коммутацияланатуғынлығын ҳәм, усыған сәйкес, бирлик матрицаға пропорционал екенлигин көрсетемиз. Мысалы, $\det B\Lambda^*B^{\dagger}\Lambda^{-1}$ шамасын есаплап, пропорционаллық коэффициентиниң модулиниң 1 ге пропорционал екенлигин аңсат көрсетиўге болады. Басқа сөз бенен айтқанда

$$\Lambda^* = e^{i\lambda}B^{\dagger}\Lambda B.$$

Λ фазалық көбейтиўши дәллигинде анықланған болғанлықтан оны алынған формулада $e^{i\lambda} = 1$ теңлиги орынланатуғындай етип сайлап алыўға болады. Буннан былай Λ белги дәллигинде анықланған жағдайда усындай сайлап алыў қабыл етилген деп есаплаймыз.

Солай етип, Лоренцтиң ҳәр бир ортохронлық түрлендириўине белгиси менен айрылатуғын еки Λ мартицаның жуўап береди екен. Олар төмендегидей үш шәрт бойынша анықланады:

$$\Omega^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu} = \Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda, \tag{89a}$$

$$\Lambda^{\dagger} = \gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0}, \tag{89b}$$

$$\Lambda^* = B^{\dagger}\Lambda B. \tag{89c}$$

Бул шәртлерди қанаатландыратуғын Λ матрицаларының жыйнағы группаны пайда етеди. Бул группа Лоренцтиң ортохронлық группасына гомоморфлы. Келеси параграфта Λ ның белгисин сайлап алыўдағы ықтыярлықты группалық структураны бузбай сапластырыўға болмайтуғынлығын көремиз[18].

---

[17] Бундай болмағанда (яғный қарама-қарсы жағдайда) толқын функциясының нормировкасы координата системасының нормировкасынан ғәрезли болған, сонлықтан j^0 ди орынның итималлығы сыпатында интерпретациялаўға мүмкин болмаған болар еди.

[18] (89c) ның орнына улыўмарақ болған шәртти пайдаланыўға болады: $\Lambda^* = \eta B^{\dagger}\Lambda B$. Бул теңликтеги турақлы шама η бир қарап атырған Лоренц түрлендириўинен ғәрезли. Егер η шамалары Лоренц группасының абеллик көринисин пайда ететуғын болса,

§ 12. Меншикли группаның түрлендириўлери

Λ матрицалары ушын (89)-шәртлерди қанаатландыратуғын матрицалардың анық түрин табамыз. Бул параграфта биз тек меншикли группалардың түрлендириўлерин қараймыз.

Дәслеп инфинитезималлық түрлендириўдлерди қараймыз[19]. Алты инфинитезимал "айланыўлар" $g_{\mu\nu} - \varepsilon Z_{\mu\nu}^{(\alpha\beta)}$ дың ҳәр қайсысына бирлик матрицадан шексиз киши шамаға айрылатуғын ҳәм

$$\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon) \approx I + i\varepsilon S_{\alpha\beta} \tag{90}$$

түринде жазылатуғын $\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)$ матрицасы сәйкес келеди. Бул теңликте $S_{\alpha\beta}$ арқалы анықланыўы керек болған шекли матрица белгиленген. Мынаған ийе боламыз:

Λ матрицаларының көплиги группаның структурасына ийе болады. Демек, Лоренцтиң меншикли группасы $\mathcal{L}_0$ диң түрлендириўлери ушын шәртли түрде $\eta = 1$ теңлигине ийе боламыз. Бул жағдай қайтадан (89c) шәртин береди. Шағылыстырыўды өзиниң ишине алатуғын түрлендириўлер ушын (яғный $s\mathcal{L}_0$ ге киретуғын) η ны сайлап алыўдың еки мүмкиншилиги бар:

(a) қәлеген $s\mathcal{L}_0$ ушын $\eta = 1$, бул (89c) ны береди;

(b) қәлеген $s\mathcal{L}_0$ ушын $\eta = -1$, яғный $\Lambda^* = -B^\dagger \Lambda B$.

Көринип турғанындай, теорияның физикалық мазмуны бундай сайлап алыўдан ғәрезли емес. (a) ҳәм (b) ларға сәйкес келетуғын $G^{(a)}$ ҳәм $G^{(b)}$ группаларының екеўи де Лоренцтиң ортохронлы группасына қарата гомоморфлы, бирақ бир бирине изоморфлы емес. Мысалы, s шағылысыўға сәйкес келетуғын матрицалардың квадраты $G^{(a)}$ да $+I$ ге, ал $G^{(b)}$ да $-I$ ге тең (келеси сноскаға қараңыз).

[19] Инфинитезималлық түрлендириўлер, яғный шексиз киши түрлендириўлер - физикалық системаны тәрийиплейтуғын өзгериўшилердиң шамалардың үлкен болмаған үзликсиз өзгерислери болып табылады. Бул түрлендириўлер әдетте математикалық теңлемелердиң жәрдеминде тәрийипленеди ҳәм олар үлкен болмаған өзгерислериндеги системалардың қәсийетлериниң өзгериси ушын пайдаланылады.

Физикада шексиз киши болған түрлендириўлер физикалық системаның симметриясын үйрениў ушын жийи қолланылады. Симметрия - системаның белгили болған түрлендириўлерде өзгериссиз қалатуғын қәсийети болып табылады. Мысалы, егер система кеңисликтеги түрлендириўлерге қарата симметриялы болса, онда оның қәсийетлери оны қәлеген бағытта жылыстырғанда өзгериссиз қалады.

Шексиз киши түрлендириўлер деп аталыўды себеби бундай түрлендириўлерде системаны тәрийиплейтуғын өзгериўшилердиң мәнислериниң әсте-ақырынлық пенен өзгериўи менен байланыслы. Есаплаўлар жолы менен аппроксимациялаў ушын бундай өзгерислердиң жеткиликли дәрежеде киши болыўы керек. Бул жағдай әмелде мынаны аңғартады: шексиз киши түрлендириўлер әдетте Тейлор қатарына жайыў жолы менен көрсетиледи, бул оларды жоқарырақ тәртипли өзгериўшилердиң туўындылары менен аппроксимациялаўға мүмкиншилик береди.

Шексиз киши түрлендириўлер физиканың көплеген областларындағы әҳмийетли түсиниклердиң қатарына киреди. Оларды киши уйытқыўлардағы физикалық системалардың қәсийетелерин үйрениў ушын қолланады ҳәм тәбияттың нызамларының тийкарында жатқан симметрияларды түсиниўде шешиўши орынды ийелейди (Аўдарыўшы).

$$[\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)]^{-1} \approx \Lambda^{(\alpha\beta)}(-\varepsilon) \approx I - i\varepsilon S_{\alpha\beta}.$$

(89a) шәртинен мынаған ийе боламыз:

$$-\varepsilon g^{\mu\nu} Z_{\nu\rho}^{(\alpha\beta)} \gamma^{\rho} = -i\varepsilon\left[S_{\alpha\beta}, \gamma^{\mu}\right]$$

ямаса (17) ни пайдаланып

$$\left[S_{\alpha\beta}, \gamma^{\mu}\right] = i\left(\delta_{\beta}^{\mu}\gamma_{\alpha} - \delta_{\alpha}^{\mu}\gamma_{\beta}\right).$$

$S_{\alpha\beta}$ матрицасы $\frac{1}{2} i\gamma_{\alpha}\gamma_{\beta}$ матрицасы менен қанаатландыратуғын коммутациялық қатнасларды γ^{μ} матрицасы менен де қанаатландырады. Олардың айырмасы γ^{μ} матрицалары менен коммутацияланады ҳәм, сонлықтан, бирлик матрицаға пропорционал. (89b) менен (89c) шәртлериниң пропорционаллық коэффициенти нолге тең болған жағдайда ғана орынланатуғынлығын аңсат дәлиллеўге болады. Мынадай белгилеўлерди киргизген қолайлы

$$\sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{1}{2} i\left[\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}\right] \equiv i\gamma_{\mu}\gamma_{\nu}. \qquad (91)$$

Ең ақырында мынаған ийе боламыз:

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}. \qquad (92)$$

Водород атомы: ҳәзирги заман квантлық механиканың туўылыўы

Лука Нанни

2015-жыл январь

Аннотация

Бул жумыстың мақсети XX әсирдиң алымлары Бор, Шредингер, Гейзенберг, Паули, Дираклардың ҳәзирги ўақытлардағы квантлық механиканың пайда болыўы ушын қойған қәдемлерин таллаў менен бирге еки он жыллықтың ишинде классикалық физиканның дурыс екенлигине гүман пайда еткенлигин баянлаў болып табылады. Бундай контекстте водород атомының электронлық структурасын үйрениў теорияны қәлиплестириў ушын болған тийкарғы ноқат болып табылады ҳәм усы ўақытларға шекем ол квантлық қозғалыс теңлемесиниң дәл шешилиўи мүмкин болған бирден бир ҳақыйқый жағдай болып табылады. Ҳәр бир теория тәрепинен алынған нәтийжелер сын көз-қарастан талланады ҳәм усының менен бирге квантлық теорияның раўажланыўының даўам етиўи ушын қойылатуғын шеклер ажыратып көрсетиледи.

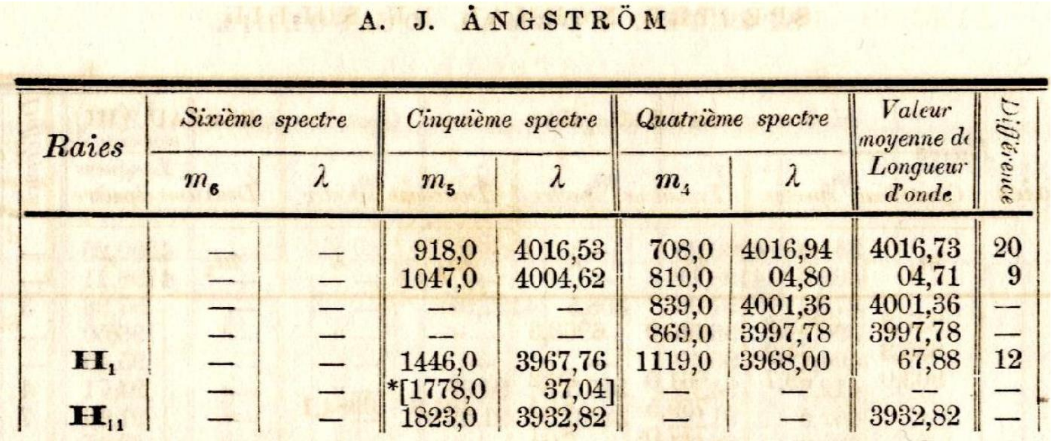
Мазмуны

1. Кирисиў

Илимий әдебиятта водородтың ашылыўын Г.Кавендиштиң аты менен байланыслы деп есаплайды ҳәм оны 1766-жылы ашылды деп есаплайды [1]. Сол ўақыттан баслап жаныў реакцияларындағы қәсийетлерин майда-шүйдесине шекем қалдырмай үйрениў ушын оны физикалық-химиялық қәсийетлери бойынша тәрийипледи. Тек 1855-жылы Андерс Ангстрем водородтың сызықлы спектрин изертлеў бойынша 1952-жылы өткерген өзиниң спектроскопиялық изертлеўлерин баспасөзде жәриялағаннан кейин водород атомы сол дәўирдеги физиклер ушын ең әҳмийетли болған изертлеў объектине айланды [2]. XX әсирдиң физикасы оның спектриниң сызықлы структурасын түсиндире алмады. Екинши тәрептен, сол ўақытлардағы физиклерди сызықлы спектрдиң пайда болыўын түсиндириў мүмкиншилигине ийе болған атомлық теорияны дөретиўге мүмкиншилик беретуғын электронның Томсон тәрепинен тек 1897-жылы ашылғанын еске түсириў жеткиликли [3]. Бирақ билимниң бул кемислиги физиклерди теория бермеген информацияларды алыў ушын қосымша спектроскопиялық өлшеўлерди жүргизиўге және өлшеў аппаратурасын жетилистириўге мәжбүрледи. Тап усындай жағдайдың орын алыўының салдарынан сыртқы магнит майданы бар болғанда спектраллық сызықлардың бир неше сызықларға ажыралыўы менен көринетуғын водород спектриниң жуқа спектри ашылды (Зееман эффекти, 1896-жыл).

Ангстрем тәрепинен өткерилген биринши өлшеўлер көзге көринетуғын диапазондағы узынлығы 6562,852 Å ге тең болған қызыл сызықтағы, 4861,33 Å узынлықтағы көк-жасыл сызықтағы және 4340,47 Å узынлықтағы спектраллық сызықлардың үш сызықтан туратуғынлығын көрсетти.

Кейинирек Ангстрем өзиниң асбабының спектраллық ажырата алыў қәбилетлигин жетилистирди ҳәм фиолет сызықтың бир бирине жүдә жақын жайласқан еки сызықтан туратуғынлығын тапты. 1-сүўретте Ангстрем тәрепинен Қуяш жақтылығының спектрин үйрениў бойынша баспадан шығарылған оригиналлық кесте берилген.



A. J. ÅNGSTRÖM

Raies	*Sixième spectre*		*Cinquième spectre*		*Quatrième spectre*		*Valeur moyenne d Longueur d'onde*	*Différence*
	m_6	λ	m_5	λ	m_4	λ		
	—	—	918,0	4016,53	708,0	4016,94	4016,73	20
	—	—	1047,0	4004,62	810,0	04,80	04,71	9
	—	—	—	—	839,0	4001,36	4001,36	—
	—	—	—	—	869,0	3997,78	3997,78	—
$\mathbf{H}_1$	—	—	1446,0	3967,76	1119,0	3968,00	67,88	12
	—	—	*[1778,0	37,04]	—	—	—	—
$\mathbf{H}_{11}$	—	—	1823,0	3932,82	—	—	3932,82	—

1-сүўрет.

Буннан кейинги жыллары спектрдиң базы бир нызамлықларының бар екенлигин ҳәм бир сызықлардың екиншилери менен эмперикалық теңлеме менен байланысқанлығы анықланды. Усындай изертлеў менен биринши рет Бальмер шуғылланды ҳәм ол 1885-жылы өзиниң эмпирикалық формуласын усынды:

$$\lambda = B\left(\frac{m^2}{m^2 - 2^2}\right). \qquad (1.a)$$

Бул формулада λ - спектраллық сызықтың узынлығы, B арқалы 3645,6 Å шамасына тең константа (бул шама спектрдиң ультрафиолет областында жататуғын сызықлардың бириниң узынлығына тең), ал m арқалы 2 ден үлкен болған пүтин сан белгиленген [4]. 1888-жылы физик Дж.Ридберг Бальмердиң формуласын улыўмаластырды ҳәм

$$\frac{\lambda}{2} = \frac{4}{B}\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right), n' = 1, 2, 3, \dots, n = 2, 3, 4, \dots \qquad (1.b$$

формуласын алды. Бальмер көзге көринетуғын спектраллық сызықлардың жолағын изертледи. Олардың жайласыўы 1-кестеде келтирилген:

1-кесте.

Бальмер сериясы ($n' = 2$)	
n	λ (nm)
3	656,3
4	486,1
5	434,0
6	410,2
7	397,0

Физик Лайман 1906-1914 жыллары ашылған ультрафиолет диапазондағы спектраллық сызықларды изертледи:

2-кесте.

Лайман сериясы ($n' = 1$)	
n	λ (nm)
2	122
3	103
4	97,3
5	95,0
6	93,8

Инфрақызыл диапазондағы сызықлар немис физиги Ф.Пашен тәрепинен 1908-жылы ашылды ҳәм изертленди; олар 1924-жылы Брэкетт ($n' = 4$) ҳәм Пфунд ($n' = 5$) ашылған сериялардың сызықлары менен азмаз бетлеседи [5-7]. Бул атап өтилген үш серияның спектраллық сызықларының орынлары 3-кестеде келтирилген:

3-кесте

Пашен сериясы ($n' = 3$)		Брэккет сериясы ($n' = 4$)		Пфунд сериясы ($n' = 5$)	
n	λ (nm)	n	λ (nm)	n	λ (nm)
4	1875	-	-	-	-

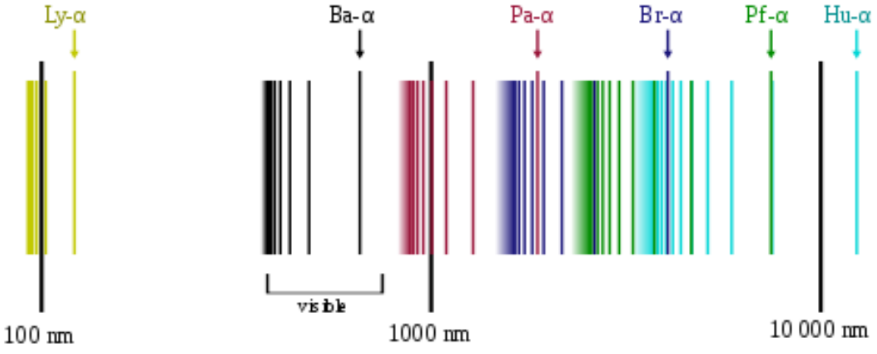
5	1282	5	4050	-	-
6	1094	6	2624	6	7460
7	1005	7	2165	7	4650
8	955	8	1944	8	3740
9	923	9	1817	9	3300
10	902	-	-	10	3040
11	887	-	-	-	-

Водородтың спектри К.Дж.Хамфрис тәрепинен 1953-жылы микротолқынлық диапазондағы серия менен жуўмақланады [8]. Олардың спектрдеги орынлары 4-кестеде келтирилген:

4-кесте.

Хамфрис сериясы ($n' = 6$)	
n	λ (nm)
7	12400
8	7500
9	5910
10	5130
11	4670

Ашылғаннан кейин дерлик 60 жылдан кейин водородтың спектри 1913-жылы Н.Бор тәрепинен биринши рет түсиндирилди. Ол квантлардың Планклық концепциясын пайдаланып ортодоксаллық классикалық физика ҳәм оның траектория концепциясы менен байланысқан болса да, тарийхтағы биринши квантлық моделди усынды [9]. Баянлаўдың толық болыўы мақсетинде 2-сүўретте водородтың спектриниң структурасы сызықлы қатарларға жайластырыў жолы менен көрсетилген.



2-сүўрет.

2. Бор модели

1900-жыллардың басында физиклер тәрепинен усынылған модель планетарлық болып табылады. Бул моделде массасы m_e ҳәм заряды q_e болған электрон массасы m_N ҳәм заряды q_N болған ядроның дөгерегинде шеңбер тәризли орбита бойынша қозғалады. Бул еки бөлекше электрлик тәбиятқа ийе болған орайлық майдан арқалы өз-ара тәсирлеседи. Улыўма айтқанда биз бөлекшениң консервативлик орайлық майдандағы қозғалысын үйрениўимиз керек. Классикалық физикаға сәйкес (электромагнетизм) электронның зарядланған ядроның дөгерегиндеги қозғалысы атомлық системаның жоқ болыўына шекем энергияның нурланыў түринде энергияның жоғалыўына алып келеди. Бирақ, тәжирийбе водород атомының стабилли екенлигин ҳәм электронның ҳеш қашан ядроға қулап түспейтуғынлығын көрсетеди.

Нильс Бор

Лагранж формализмине сәйкес водород атомының планетарлық модели алты еркинлик дәрежеси менен тәрийиплениўи керек. Бирақ координаталар көшерин массалардың атомлық орайына сәйкес етип сайлап алған жағдайда еркинлик дәрежелериниң саны үшке шекем кемейеди. Электрон менен ядроның массалар орайына салыстырғандағы орынлары мынадай векторлардың жәрдеминде бериледи:

$$\boldsymbol{r}_e = \frac{m_e}{m_e + m_N}\boldsymbol{r},$$
$$\boldsymbol{r}_N = \frac{m_N}{m_e + m_N}\boldsymbol{r}.$$

Бул аңлатпаларда $\boldsymbol{r}$ шамасы шеңбер тәризли орбитаның радиусын беретуғын вектор ($\boldsymbol{r}_e - \boldsymbol{r}_N$). Бундай система ушын кинетикалық энергия

$$T = \frac{1}{2}m_e\dot{\boldsymbol{r}}_e^2 + \frac{1}{2}m_e\dot{\boldsymbol{r}}_N^2 = \frac{1}{2}\frac{m_e m_N}{m_e + m_N}\dot{\boldsymbol{r}}^2$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпада $\frac{m_e m_N}{m_e + m_N}$ арқалы атомның келтирилген массасы белгиленген. Усының салдарынан кинетикалық энергияны былайынша қайтадан жазыўға болады:

$$T = \frac{1}{2}\mu\dot{\boldsymbol{r}}^2.$$

Сонлықтан, атомның гамильтонианы мынадай түрге ийе болады:

$$H = T + V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\mu\dot{\boldsymbol{r}}^2 + V(\boldsymbol{r}).$$

H биз изертлеп атырған системаның толық энергиясы болып табылады. Бул моделдеги Кулон майданы консервативлик болғанлықтан толық энергия қозғалыс константасы (қозғалыс интегралы) болып табылады. Ядро менен электрон арасындағы кулонлық күш

$$F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} q_e q_N \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_e^2}{r^2}\frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|}$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Система стабилли болғанлықтан, электрон менен ядроның арасындағы өз-ара тәсирлесиў күши шеңбер тәризли қозғалыста пайда болған орайдан қашыўшы күшке тең болады:

$$\boldsymbol{F}_c = -m_e\omega^2 r\frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|}.$$

Бул еки күшти бир бирине теңеп, мынаны аламыз:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_e^2}{r^2} = m_e\omega^2 r. \tag{2a}$$

Планетарлық модель ушын мүйешлик момент сақланады:

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} = m_e v\times\boldsymbol{r} = m_e\omega r^2\boldsymbol{n}. \tag{2b}$$

Бул аңлатпада $\boldsymbol{n}$ - мүйешлик моменттиң коэффициенти (оң қол қағыйдасы бойынша есапланады). Пүткиллей ықтыярлы болса да Бордың данышпанлық интуициясы мүйешлик моменттиң модулин

$$l = m_e vr = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar, \qquad n\in N \tag{2c}$$

қағыйдасы бойынша квантлаўдан ибарат. Усының салдарынан

$$2\pi r = \frac{nh}{m_e v} = \frac{nh}{p} \tag{2d}$$

формуласы алынды. Егер орбитаның узынлығы болған $2\pi r$ шамасын пүтин сан болған n ге бөлсек, онда бирлиги узынлықтың бирлигиндей болған h/p шамасы алынады. Бул Борда электронның орбитасы менен толқын узынлығы h/p ға тең болған турғын толқынды байланыстырыў ойының пайда болыўына алып келди. Бор саналы түрде болмаса да электронды материаллық толқын түринде қараў ҳаққындағы революциялық идеяға келип жетти. Бул мәселе бойынша ол де Бройль гипотезасынан он жылға алға кетти [9-10]. Бордың квантланыў қағыйдасын пайдаланып, биз водородтағы электронның энергиясын былайынша есаплай аламыз.

Атомның планетарлық моделиниң толық энергиясы мынаған тең:

$$E = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_e^2}{r}.$$

(2.b) аңлатпа бойынша мүйешлик тезлик есапланады:

$$\omega = \frac{l}{m_e r^2}.$$

Оны толық энергияның теңлемесине қойыў мынаны береди:

$$E = \frac{1}{2}\mu\frac{l^2}{m_e^2 r^2} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_e^2}{r}. \tag{2.e}$$

Орынды анықлаў ушын (2.a) ны пайдаланамыз:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_e^2}{r^2} = m_e\omega^2 r \Rightarrow \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_e^2}{r^2} = m_e\omega^2 r = m_e\frac{l^2}{m_e^2 r^4}r.$$

Бул теңликтен

$$r = \frac{4\pi\varepsilon_0 l^2}{m_e q_e^2}$$

формуласын аламыз ҳәм оны (2.e) ге қойсақ,

$$E=\frac{1}{2}\mu\frac{l^2}{m_e^2}\frac{m_e^2q_e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2l^4}-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_e^2m_eq_e^2}{4\pi\varepsilon_0l^2}=$$
$$=\frac{1}{2}\mu\frac{q_e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2l^2}-\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_eq_e^4}{l^2}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Егер биз системаның массалар орайының атом ядросына сәйкес келиўин талап етсек, онда $m_e \ll m_N$ жуўықлаўын пайдаланып,

$$\mu=\frac{m_em_N}{m_e+m_N}\cong\frac{m_em_N}{m_N}=m_e$$

шамасына ийе боламыз. Бул нәтийже бойынша жоқарыда жазылған энергия мынадай энергияға айланады:

$$E=\frac{1}{2}m_e\frac{q_e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2l^2}-\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_eq_e^4}{l^2}=-\frac{1}{2(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_eq_e^4}{l^2}.$$

Ақырында, алынған аңлатпаны (2.c) ға қойсақ, биз төмендегидей аңлатпаға ийе боламыз:

$$E_n=-\frac{1}{2(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_eq_e^4}{n^2\hbar^2}. \qquad (2.f)$$

(2.f) аңлатпадан электронның пүтин n санынан ғәрезли болған энергияның тек квантланған мәнисине ийе болатуғынлығы келип шығады. Бул бас квант саны болған n ниң мәнисиниң үлкейиўи менен энергия қәддилериниң арасындағы қашықлық кем-кемнен киширейеди. Егер мүйешлик моменттиң квантланған мәнисин жоқарыда r ушын алынған аңлатпаға қойсақ, онда орбитаның радиусын есаплаўға болады:

$$r_n=\frac{4\pi\varepsilon_0}{m_eq_e^2}n^2\hbar^2. \qquad (2.g)$$

Турғын толқын сыяқлы электрон тек квантланған радиусқа ийе болған шеңбер тәризли орбиталар бойынша қозғалады. Қашықлықтың үлкейиўи менен орбита үлкейеди. Бор тәрепинен алынған теңлемелер водородтың спектрин үлкен дәлликте анықлаўға мүмкиншилик берди: ҳәр бир спектраллық сызық электронның берилген орбитадан басқа орбитаға өтиўи менен байланыслы. Планктың $E=h\nu$ формуласына сәйкес (2.f) ти пайдаланып биз Ридбергтиң (1.b) аңлатпасын аламыз:

$$\Delta E=E_{n\prime}-E_n=h\frac{c}{\lambda}\ \Rightarrow\frac{1}{\lambda}=\frac{4}{B}\left(\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right).$$

Бул нәтийжелер квантлық механикаға жолдың ашылғанлығын билдиреди. Толқын узынлықларының есапланған мәнислери менен экспериментлерде алынған мәнислери 5-кестеде берилген:

5-кесте.

Спектраллық сызық	Эксперименталлық мәнис	Теориялық мәнис
-	(нм)	(нм)
$\lambda(n'=2,n=1)$	121.5	122.0
$\lambda(n'=3,n=1)$	102.5	103.0
$\lambda(n'=4,n=1)$	97.2	97.3
$\lambda(n'=2,n=3)$	656.1	656.3

$\lambda(n' = 2, n = 4)$	486.0	486.1
$\lambda(n' = 3, n = 4)$	1874.6	1875.0

(2.b) ҳәм (2.g) аңлатпаларынан келип шыққан ҳалда электронның тезлигиниң модулин де алыўға болады:

$$v = \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}.$$

Бул аңлатпа бас квант саны болған n санының өсиўи менен электронның тезлигиниң кемейетуғынлығын көрсетеди. Егер электронның тезлиги релятивистлик болатуғын болса, онда n санының өсиўи менен массаның шамасы тынышлықтағы массаның шамасына умтылады.

Бирақ, Бор модели водород атомының спектриниң жуқа структурасын ҳәм Зееман эффектин түсиндире алмайды. Усының менен бирге бул модель еки ямаса оннан да көп санлы электронларға ийе болған атомлардың спектрин түсиндириўге жарамайды. Теориялық модель болып табылатуғын бул моделдиң пайдаланылыў областы дым киши; бирақ оның әҳмийети мынадан ибарат екенлигин умытпаў керек: модель классикалық қозғалыс теориясы менен күшли контрастқа ийе болған жаңа физикалық концепцияларды берди!

3. Зоммерфельд шәртлери ҳәм эллипс тәризли орбиталар

Бор тәрепинен усынылған мүйешлик моменттиң квантланыўы Зоммерфельд ҳәм Вильсон тәрепинен оны водородқа салыстырғанда қурамалы болған атомларға қолланыў мақсетинде улыўмаластырылды [12].

Арнольд Зоммерфельд

g еркинлик дәрежесине ийе болған атомлық системаны ўақыттан ҳәм түйинлес моментлерден ғәрезли болған $x_1, x_2, \dots x_q$ улыўмаластырылған координаталар менен тәрийипленеди деп болжап, олар квантланыўдың төмендегидей қағыйдасын усынды:

$$\int p_1 dx_1 = l_1 h, \dots \dots \dots, \int p_g dx_g = l_g h. \tag{3.a}$$

Бул аңлатпадағы интеграллар сәйкес өзгериўшиниң дәўириниң диапазоны бойынша есапланады. (3.a) интеграллары электронның механикалық ҳәрекети болып табылады. Зоммерфельд пенен Вильсон энергияның бир мәниси сәйкес келетуғын бас квант санының берилген мәнисине жаңа квант санлары менен тәрийипленетуғын мүмкин болған орбиталық жоллар сәйкес келеди деп болжады. Бул жаңа квант санларын екинши ямаса азимуталлық квант санлары деп атайды.

Жаңа орбиталар болса ҳәр қыйлы эксцентриситетлерге ийе болған эллипслер болып табылады.

Бир бас квант саны менен ҳәр қыйлы азимуталлық квант санларына ийе болған орбиталардың бирдей энергияға ийе болатуғынлығын ҳәм бир биринен тек геометриялық ориентациясы бойынша ажыралатуғынлығын атап өтиў әҳмийетли! Шеңбер тәризли орбитада электрон ядродан барлық ўақытта ядродан бирдей қашықлықта жайласады, ал эллипс тәризли орбиталарда болса бул қашықлық эксцентриситеттиң шамасына байланыслы дәўирли түрде өзгереди. Бундай өзгерис электронның тезлигиниң үзликсиз өзгериўине алып келеди ҳәм тезликтиң шамасы электронның ядроға жақынласыўының барысында үлкейеди. Егер электронның релятивистлик қәсийети есапқа алынатуғын болса, онда масса $m = m_0\gamma$ эллипс тәризли орбитаның эксцентриситетинен ғәрезли болады. Энергия квантланған ҳәм m_e массадан ғәрезли болғанлықтан энергияның шамасы да эксцентриситетке байланыслы өзгеретуғынлығы келип шығады! Усы жағдайға байланыслы төмендегидей түсиникти математикалық формализм бойынша жазамыз. Бундай жағдайда атомның толық энергиясының релятивистлик формасы кинетикалық энергияның (2.c) релятивистлик версиясы менен кулонлық потенциаллық энергияның қосындысынан турады:

$$E = \gamma m_0 c^2 - m_0 c^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} Z q_e^2 = m_0 c^2(\gamma - 1) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} Z q_e^2.$$

Бул аңлатпада Z - атомлық номер (ядроның заряды) ҳәм m_0 - электронның тынышлықтағы массасы. $u = 1/r$ жаңа өзгериўшисин киргизип, биз мынаны аламыз:

$$\gamma = 1 + \frac{E}{m_0 c^2} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{u Z q_e^2}{m_0 c^2}. \qquad (3.b)$$

Бөлекшениң орайлық майдандағы қозғалыс теориясын еске түсирип, биз өзгериўшилерди алмастырамыз. Мүйешлик моменттиң қураўшыларын поляр координаталар терминлеринде жазамыз (орайлық қозғалыс тегис қозғалыс болып табылады:

$$r = (x, y) = (\rho\cos\theta, \rho\sin\theta) \rightarrow p_\rho = m\dot{\rho}, \qquad p_\theta = m\rho^2\,\dot{\theta}.$$

Зоммерфельд мүйешлик моментлер де, E энергия да сақланады деп болжады. Бул p_ρ, p_θ ҳәм E шамаларының қозғалыс константалары болып табылатуғынлығын аңғартады. Енди мүйешлик моменттиң еки қураўшыларының арасындағы қатнасты есаплаймыз:

$$\frac{p_\rho}{p_\theta} = \frac{m\dot{\rho}}{m\rho^2\dot{\theta}} = \frac{\dot{\rho}}{\rho^2\dot{\theta}} = \frac{1}{\rho^2}\frac{d\rho}{d\theta} = -\frac{d(1/\rho)}{d\theta} \Rightarrow p_\rho = p_\theta\frac{1}{\rho^2}\frac{d\rho}{d\theta}.$$

Зоммерфельд пенен Вильсонның квантланыў қағыйдасын еске түсиремиз:

$$\oint p_\rho d\rho = n_\rho h, \qquad \oint p_\theta d\theta = n_\theta h.$$

Буннан кейин Бире формуласын пайдаланып, биз релятивистлик электронның қозғалыс теңлемесин жаза аламыз:

$$\frac{d^2(1/\rho)}{d\theta^2} + \gamma^2 \left[\frac{1}{\rho}\frac{m_0 Z q_e^2}{p_\theta^2 \gamma^2}\left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)\right] = 0. \tag{3.c}$$

Бул аңлатпада γ коэффициенти $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ формуласының жәрдеминде анықланады. Екинши тәртипли дифференциаллық теңлемени шешип, қозғалыс нызамын аламыз:

$$\rho(\theta) = \frac{p_\theta^2 \gamma^2}{m_0 Z q_e^2}\left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)^{-1} \frac{1}{1 + A\cos\gamma\theta}.$$

Бул аңлатпада A арқалы шегаралық шәртти бериў жолы менен анықланатуғын интеграллаў турақлысы белгиленген. Енди бизде төмендегидей релятивистлик теңлеме менен берилетуғын ең соңғы нәтийжеге алып келетуғын барлық элементлер бар (математикалық есаплаўлардың барлық деталлары [12]-оригиналлық мақалада берилген):

$$\frac{E}{m_0 c^2} = \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left(n_\rho + \sqrt{n_\theta^2 - \alpha^2 Z^2}\right)^2}\right)^{-1/2} = 1. \tag{3.d}$$

Бул аңлатпада

$$\alpha = \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0 c\hbar}$$

формуласының жәрдеминде анықланатуғын жуқа структураның турақлысы белгиленген. Оның мәниси квантлық механикада әҳмийетли орынды ийелейди ҳәм төменде талланады.

(3.d) аңлатпадағы n_ρ ағзасы бас квант саны, ал n_θ болса екинши дәрежели ямаса мүйешлик (азимуталлық) квант саны болып табылады. Квадрат түбирдиң астындағы ағза релятивистлик коэффициент болып табылады. Жоқарыдағы таллаўлардан оның шамасының орбитаның эксцентриситетинен ғәрезли ҳәм азимуталлық квант саны менен байланыслы екенлиги келип шығады. n_ρ ҳәм n_θ квант санларының өсиўи менен электрон релятивистлик емес қәсийетлерге ийе бола баслайды. Соның менен бирге (3.d)-аңлатпа мүйешлик моментлердиң $n_\theta^2 - \alpha^2 Z^2 \gg 0$ теңсизлиги орынланған жағдайда ғана физикалық мәнислерге ийе болатуғынлығын көрсетеди. Берилген n_ρ квант саны менен n_θ ның мәнислери $n_\theta = n_\rho - 1, n_\rho - 2, n_\rho - 2, \dots, 0$ қатнаслары арқалы байланысқан. Солай етип, Зоммерфельдтиң релятивистлик теориясы атомлық спектрдиң жуқа структурасының бар екенлигин ҳәм оның ушын

$$E(n, l) - E(n', l') = h\nu$$

аңлатпасының орынлы екенлигин болжайды.

Зоммерфельд пенен Вильсон өзиниң жумысын баспасөзде жәриялағанда сол ўақыттағы физиклер жүдә ҳайран болды ҳәм олардың теориясының эффективлигин көрип қуўанды. Себеби теорияның дурыс екенлиги арнаўлы салыстырмалық теориясының дурыс екенлигин дәлиллеўге жәрдем берди. Бирақ, водородтың спектрлериниң жуқа структурасы спектраллық сызықлардың ҳәр қыйлы екенлигин, ал сол интенсивликлердиң шамаларының Зоммерфельд теориясының жәрдеминде анықланбайтуғынлығын көрсетти. Зоммерфельдтиң жумысы (1916-жылы) жәрияланғаннан кейин өткерилген экспериментлер жуқа структураның спин-орбиталық байланыстың бар болыўының салдарынан жүзеге келетуғынлығын көрсетти (Бор-Зоммерфельд теориясы тәрепинен түсиндирилмейтуғын қубылыс). Оның үстине, айырым сызықлардың арасындағы қашықлық теориялық нәтийжелерге пүткиллей сәйкес келмейтуғын болып шықты. Эксперименталлық техниканың жетилисиўи ҳәм дәллиги жоқары болған әсбаплардың дөретилиўи Зоммерфельд теориясын Гейзенберг, Шредингер, Дирак ҳәм басқалар тәрепинен ҳәзирги заман квантлық механикасының дөретилиўине шекем нәзик болып қалыўын тәмийинледи. Әдебиятта Бор менен Зоммерфельдтиң теорияларын жийи түрде ески квантлық механика деп атайды. Бирақ, олардың Шредингердиң ҳәм оның кәсиплеслериниң орынлаған жумысларын жеңиллестирген ҳәм квантлық механиканың дөретилиўине жол ашқан толық жаңа ҳәм революциялық идеялар екенлигине гүман жоқ.

4. Материяның толқынлық қәсийети

XX әсирдиң басында физиклер өткерилип атырған эксперименттиң характерине байланыслы материяның толқын ямаса бөлекше түриндеги қәсийетлерге ийе болатуғынлығын көрсетти (фотоэлектрлик эффект, қос саңлақ пенен өткерилген экспериментлер, Комптон эффекти ҳ.т.б.). Көп узамай физик-теоретиклер бул жаңа ҳәм күтилмеген қубылысларды түсиндириўге жарамлы болған теорияны ислеп шыға баслады. Луи де Бройль өзиниң бакалаврлық жумысында электромагнит толкынлардың теңлемелери менен материаллық бөлекшелердиң қозғалыс теңлемелеринде параллелизмниң бар екенлигин интуициялық түрде аңғарды [9,13-14]. Ол материяны толқын теңлемелериниң жәрдеминде үйренетуғын математикалық формализмди келтирип шығара алды!

Луи де Бройль

Вакуумда берилген толқын векторы $\boldsymbol{k}$ ның бағытында тарқалатуғын монохромат электромагнит толқынды қараймыз. Толқын фронты тегис ҳәм толқын векторына перпендикуляр; оның теңлемеси мынадай түрге ийе:

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} = const. \qquad (4.a)$$

Басқа сөзлер менен айтқанда, толқын фронты бирдей фазаға ийе ноқатлардың жыйнағы болып табылады. Электромагнетизмнен бундай толқынның төмендегидей функцияның жәрдеминде тәрийипленетуғынлығы келип шығады:

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = A_0 e^{\{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)\}}. \qquad (4.b)$$

Бул аңлатпада $\omega = 2\pi\nu$ - мүйешлик жийилик, A_0 - толқынның максималлық амплитудасы, ал оның модулиниң квадраты $|A_0|^2$ толқынның интенсивлиги болып табылады. Ўақыттың өтиўи менен толқын фронты $\boldsymbol{r}$ векторының бағытында фазасы турақлы шамаға тең ҳалда

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t=const \tag{4.c}$$

теңлемесине сәйкес жылысады. Барлық избе-из толқын фронтлары бир биринен теңдей $\lambda=2\pi/k$ қашықлықта жайласады ҳәм

$$v_f=\lambda\nu=\frac{\omega}{k} \tag{4.d}$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланатуғын фазалық тезлик пенен қозғалады. Егер толқын вакуумда тарқалатуғын болса, онда v_f ниң мәниси жақтылықтың тезлигине тең.

Егер толқын изотроп материаллық орталықта тарқалатуғын болса, онда группалық тезлик $v_g=c/n$ шамасына тең болады (n арқалы сындырыў көрсеткиши белгиленген). Егер материал анизотроп болса, онда сындырыў көрсеткиши ноқаттан ноқатқа өткенде өзгереди ҳәм бул жағдай фазалық тезликтиң турақлы болып қалмайтуғынлығын ҳәм толқын фронтының геометриясының тегис болмай қалатуғынлығын аңғартады. Бундай жағдайда толқын фронтының теңлемеси

$$\psi_0(\boldsymbol{r})-\omega t=const \tag{4.e}$$

ҳәм толқын функциясы

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=A_0e^{\{i(\psi_0(\boldsymbol{r})-\omega t)\}}$$

түрине ийе болады. Соңғы теңлемени Даламбер теңлемеси болған

$$\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)-\frac{1}{v_f^2}\frac{\partial^2\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t^2}=0$$

теңлемесине қоямыз ҳәм төмендеги аңлатпаны аламыз:

$$-A_0\big(\nabla\psi_0(\boldsymbol{r})\big)^2e^{\{i(\psi_0(\boldsymbol{r})-\omega t)\}}+\frac{\omega^2}{v_f^2}A_0e^{\{i(\psi_0(\boldsymbol{r})-\omega t)\}}=0.$$

Гейпара жағдайларда жоғалмайтуғын комплексли экспоненциаллық ағзаны жоғалтып, биз мынадай теңлемеге ийе боламыз:

$$\big(\nabla\psi_0(\boldsymbol{r})\big)^2+\frac{\omega^2}{v_f^2}=0. \tag{4.f}$$

Қәлеген ноқаттағы фазалық тезлик мынадай аңлатпаның жәрдеминде анықланады:

$$v_f(\boldsymbol{r})=\frac{c}{n(\boldsymbol{r})}=\frac{\lambda_0\nu}{n(\boldsymbol{r})}=\frac{2\pi\nu}{n(\boldsymbol{r})\frac{2\pi}{\lambda_0}}=\frac{\omega}{n(\boldsymbol{r})k_0}.$$

Бул аңлатпаны (4.f) ке қойсақ

$$-\big(\nabla\psi_0(\boldsymbol{r})\big)^2+\omega^2\frac{n^2k_0^2}{\omega^2}=0\ \rightarrow\frac{1}{k_0^2}\big(\nabla\psi_0(\boldsymbol{r})\big)^2=n(\boldsymbol{r})^2 \tag{4.g}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада k_0 - вакуумдеги толқын векторының модули. Егер толқын полихромат болса, онда ҳәр бир қураўшы орталықта өзиниң фазалық тезлиги менен қозғалып, өзиниң меншикли Даламбер теңлемесине ийе болады. Бул жағдайда биз группалық тезликти

$$v_g=\frac{d\omega}{dk}. \tag{4.h}$$

аңлатпасының жәрдеминде анықлаймыз.

Енди массасы m_0 болған $V(\boldsymbol{r})$ потенциалы менен тәрийипленетуғын консервативлик майданда $\boldsymbol{v}$ тезлиги менен қозғалатуғын материаллық бөлекшени қараймыз. Гамильтон механикасына сәйкес, бөлекшениң толық энергиясы E

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + V(\boldsymbol{r})$$

формуласының жәрдеминде бериледи. Бөлекше ушын жазылған ҳәрекет Лагранж интегралы сыяқлы мынадай түрге ийе болады:

$$S(\boldsymbol{r}, t) = \int L(q_1, q_2, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n,\ t)dt.$$

Лагранж функциясы кинетикалық T ҳәм потенциаллық V энергиялардың айырмасы бойынша анықланатуғын болғанлықтан, ҳәрекет төмендегидей түрге ийе болады:

$$S(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r} - Et. \qquad \text{(4.i)}$$

Егер $p \equiv k$ ҳәм $E \equiv \omega$ теңликлери орынлы деп есаплайтуғын болсақ, онда бул $\equiv$ белгиси p менен k ның ҳәм E менен ω шамаларының математикалық симметриясы бойынша бирдей екенлигин аңғартады. Функцияға ∇ дифференциаллық оператор менен тәсир етип ҳәм оның квадратын есаплап, биз мынаны аламыз:

$$[\nabla S(\boldsymbol{r}, t)]^2 = p^2 = 2m_0[E - V(\boldsymbol{r})]. \qquad \text{(4.l)}$$

$p^2 \equiv n^2$ теңлиги орын алатуғын жағдайда (4.l) теңлиги (4.g) теңлигине сәйкес келеди. Бул жағдай сызықлы испульстиң квадратының математикалық симметриясы бойынша сындырыў көрсеткишиниң квадратына уқсас екенлигин көрсетеди. Бул параллелизмнен биз мынадай қатнасты жаза аламыз:

$$[\nabla S(\boldsymbol{r}, t)]^2 = p^2 \equiv n^2 = \frac{1}{k_0^2}\left(\nabla\psi_0(\boldsymbol{r})\right)^2 \ \rightarrow p \equiv \frac{1}{k_0}\nabla\psi_0(\boldsymbol{r}).$$

Бул аңлатпалардың мәниси төменде түсиндириледи. Егер ҳәрекет турақлы болса, онда

$$S(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r} - Et = const$$

теңлигине ийе боламыз, ол (4.c) ға уқсас тегисликтиң теңлемеси болып табылады. Материаллық бөлекшениң тезлиги

$$v_f = \frac{\omega}{k} \equiv \frac{E}{p} \qquad \text{(4.m)}$$

теңлигине сәйкес электромагнит толқынның тезлигине усатылыўы мүмкин.

(4.m) аңлатпада толқынлардың геометриялық оптикасы менен материаллық бөлекшелердиң динамикасының арасындағы барлық параллелизм көринип тур. Бул теңликтиң тийкарында Де Бройль мынадай болжаўды усынды: бөлекшени энергиясы $E = h\nu$ шамасына тең ҳәм $v_f = \lambda\nu$ фазалық тезлиги менен тарқалатуғын материаллық толқын деп қараўға болады. (4.m) теңликти қараймыз:

$$v_f = \frac{E}{p} = \frac{h\nu}{p} \Rightarrow\ \lambda = \frac{h}{p}. \qquad \text{(4.n)}$$

Де Бройлдың гипотезасы бойынша қәлеген бөлекше менен толқын узынлығы (4.n) аңлатпасы менен байланысқан толқынды байланыстырыўға болады. Гамильтон функциясынан сызықлы импульс келип шығады:

$$p = \sqrt{2m_0(E - V)}.$$

Сонлықтан материаллық толқынның толқын узынлығы

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0(E - V)}} \tag{4.o}$$

шамасына тең болады. Геометриялық оптика менен бөлекшелер динамикасының арасындағы параллелизмди бәрҳама есте сақлап, (4.b) ға сәйкес материаллық толқынның функциясын былайынша жазыўға болады:

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = A_0 e^{\{i(\psi_0(\boldsymbol{r}) - \omega t)\}}. \tag{4.p}$$

Бөлекшени релятивистлик тезлик пенен қозғалады деп болжайық; Эйнштейнниң теориясына сәйкес оның энергиясы

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$$

шамасына тең болады. Бул аңлатпаны (4.m) менен теңлестирип, мынадай аңлатпаны аламыз:

$$v_f = \frac{E}{p} = c\sqrt{1 + \frac{m_0^2 c^2}{p^2}} = c\sqrt{1 + \frac{m_0^2 c^2}{m_0^2 v^2}} = c\sqrt{1 + \frac{c^2}{v^2}}.$$

Квадрат түбирдиң астындағы ағза 1 ден үлкен. Бул материаллық толқынның фазалық тезлигиниң жақтылықтың тезлигинен үлкен екенлигин аңғартады. Бундай нәтийже мәниске ийе емес ҳәм сонлықтан де Бройль бөлекшениң тезлиги жуўырыўшы толқынның тезлиги арасында корреляция жоқ деп болжап мәселени шеше алды. Қозғалыс релятивистлик болған жағдайда бөлекшени әдетте толқын пакети деп аталатуғын толқынлардың топары деп қараў керек. (4.h) аңлатпаға сәйкес группалық тезлик мынаған тең болады

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{c}{\sqrt{1 + \frac{c^2}{v^2}}}.$$

Бул аңлатпа бойынша группалық тезлик барлық ўақытта жақтылықтың тезлигинен киши. Релятивистлик бөлекшениң толқын узынлығы мынаған тең:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}. \tag{4.q}$$

(4.n) де Бройль толқын узынлығының мүйешлик моменттиң квантланатуғынлығын болжаған Бордың (2.d) толқын узынлығына тең екенлигин атап өтемиз. Де Бройлдың хызмети Бор тәрепинен алынған мәселени физикалық көз-қарастан рационалластырды.

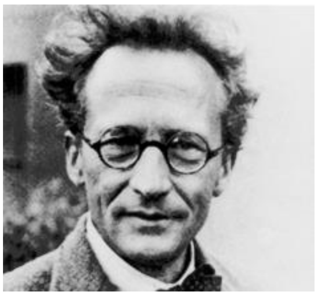
(2.b) аңлатпадан баслап (2.g) ға шекем өтип водород атомындағы электронның тезлигин аламыз:

$$v = \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar} = \frac{2188}{n}\ Km/s.$$

Демек, водород атомындағы электронның тезлиги барлық ўақытта жақтылықтың тезлигиниң 1 процентинен де киши екен; сонлықтан биз водородтағы электронды релятивистлик емес бөлекше деп қарай аламыз. Бирақ, кейинирек биз мынадай жағдайды көремиз: релятивистлик теңлемени келтирип шығарыў қандай да бир қосымша постулатларды пайдаланыўдың пайдаланбай-ақ электронның физикалық реаллығын түсиндириў ушын нәтийжелерге алып келеди ҳәм Шредингердиң квантлық теориясын исенимли ҳәм толық етеди.

5. Шредингер теңлемеси

1926-жылы де Бройлдың гипотезасын пайдаланып Эрвин Шредингер бир неше ай даўамында ислеген терең мийнетиниң нәтийжесинде усы ўақытларға шекем барлық релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарғы қуралы болған өзиниң аты менен аталатуғын теңлемени келтирип шығарды [15-18].



Эрвин Шрёдингер

Шредингер электронды турғын толқын түринде қарады, бундай толқында кеңисликлик ҳәм ўақытлық бөлимлер бир биринен ғәрезсиз ҳәм бөлинеди:

$$\varphi(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r})\cos\omega t. \qquad (5.a)$$

Бул аңлатпада ω - мүйешлик тезлик ҳәм оның мәниси $2\pi\nu$ көбеймесине тең. Де Бройль гипотезасы бойынша оның шамасы $\nu=v/\lambda=vh/p$ формуласы бойынша анықланады. Турғын толқын түриндеги атомлық электрон ҳаққындағы гипотеза орнықлы болып табылады. Себеби экспериментлердиң нәтийжелери оның энергиясының сақланатуғынлығын көрсетеди. (5.a) ны Даламбер теңлемесине қойып, мынаны аламыз:

$$\nabla^2\varphi(\boldsymbol{r},t)=\nabla^2\,\psi(\boldsymbol{r})\cos\omega t,$$
$$\frac{\partial^2\varphi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t^2}=-\psi(\boldsymbol{r})\omega^2\cos\omega t.$$

Нәтийжеде, теңлеме мынадай түрге енеди:

$$\nabla^2\,\psi(\boldsymbol{r})\cos\omega t=-\frac{\omega^2}{v^2}\,\psi(\boldsymbol{r})\cos\omega t,$$
$$\nabla^2\,\psi(\boldsymbol{r})=-\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\,\psi(\boldsymbol{r}). \qquad (5.b)$$

(5.b) екинши тәртипли дифференциаллық теңлеме болып табылады, бул теңлемеде $\psi(\boldsymbol{r})$ функциясы меншикли мәниси $-\frac{4\pi^2}{\lambda^2}$ шамасына тең болған Лаплас операторының меншикли функциясы болып табылады. Бул соңғы аңлатпа толқын векторының модулиниң квадраты болып табылады:

$$\frac{4\pi^2}{\lambda^2}=k^2.$$

Бөлекше релятивистлик емес тезлик пенен потенциаллық энергиясы V болған майданда қозғалады деп болжайық. Бундай жағдайда де Бройль теориясына сәйкес оның толқын узынлығы

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2m_0(E-V)}}$$

аңлатпасы бойынша есапланады. Оны (5.b) теңликке қойыў мынаны береди:

$$\nabla^2\,\psi(\boldsymbol{r}) = -\frac{4\pi^2 2m_0(E-V)}{h^2}\psi(\boldsymbol{r}) = -\frac{8\pi^2 m_0 E}{h^2}\psi(\boldsymbol{r}) + \frac{8\pi^2 m_0 V}{h^2}\psi(\boldsymbol{r}).$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\nabla^2\,\psi(\boldsymbol{r}) + V\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \qquad (5.c)$$

(5.c) теңлеме релятивистлик емес бөлекше ушын Шредингер теңлемеси болып табылады. Бул бөлекшениң қәсийети турғын материаллық толқынның қәсийетиндей. Классикалық механикадағы Гамильтон функциясы $E = T + V$ ны Шредингер теңлемеси менен салыстырып, биз мынадай математикалық эквивалентликлердиң бар екенлигин аңғарамыз:

$$T_H \equiv \left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\nabla^2\right)_S,$$

$$V_H \equiv V_S$$

Бул аңлатпаларда H ҳәм S белгилери Гамильтон менен Шредингерди аңғартады. Демек, классикалық кинетикалық энергия квантлық дифференциаллық оператор менен байланысқан, ал потенциал болса оның классикалық функциясына сәйкес келетуғын операторға сәйкес келеди. Бул эквивалентликлердиң биришсисин пайдаланып классикалық импульс пенен квантлық дифференциаллық оператор арасындағы әҳмийетли байланысты табыўға болады:

$$T = \frac{p^2}{2m_0} \equiv - - \frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\nabla^2 \Rightarrow p \equiv i\hbar\nabla = -\frac{\hbar}{i}\nabla. \qquad (5.d)$$

Квантлық импульстиң белгисиниң оң ямаса терис болыўының парқы жоқ [көп санлы әдебиятлардағы сыяқлы биз (5.d) аңлатпада оң белги қойдық]. Бул белги классикалық $\boldsymbol{p}$ векторының мүмкин болған ориентациясынан пайда болатуғын операторлық есте сақлаў болып табылады. Гүман пайда етпеў ушын биз операторларды белгилеў ушын тильдасы бар (мысалы, $\hat{E}$) ҳәрипти, ал сәйкес классикалық шаманы белгилеў ушын белгиси жоқ ҳәрипти пайдаланамыз. Усындай жағдайлардан келип шыққан ҳалда тийкарғы физикалық шамалар $\boldsymbol{p}$ импульстиң, $\boldsymbol{r}$ орынның, m массаның ҳәм t ўақыттың тийкарында келтирилип шығарылатуғын Гамильтонлық картинадағыдай сыяқлы квантлық механиканың сәйкес картинасы келтирип шығарылады. Бундай жағдайда импульс (5.d) операторы менен алмастырылады, ал $\boldsymbol{r}$, m ҳәм t шамалары классикалық мәнислерге тең болады. (5.c) теңлемени Гамильтон функциясы менен салыстырыўдан келип шығатуғын бул жағдай барлық квантлық механиканың теориясының физика-математикалық постулатларының бири болып табылады.

Шредингер теңлемеси операторлық ағзаларда да, толқын функцияларында да материаллық турғын толқынның ўақыт бойынша эволюциясы ҳаққында ҳеш қандай информацияларға ийе емес. Усыған байланыслы (5.m) де берилген материаллық толқынның тезлигин қараймыз:

$$v_f = \frac{E}{p} \to E = pv_f.$$

Бул теңликте v_f - бөлекшениң тезлиги. Биз ҳәзирше классикалық теорияда турмыз. Квантлық механиканың формализмине өтсек, биз энергия операторын былайынша жаза аламыз:

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \qquad (5.e)$$

Солай етип, биз квантлық операторлар терминлеринде материаллық толқынның толық энергиясын жазыўдың еки усылын таптық: (5.e) аңлатпасы беретуғын ҳәм ўақытқа ийе ҳәм T_s ҳәм V_s операторларының қосындысы беретуғын:

$$\hat{E} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\nabla^2 + V. \qquad (5.e')$$

Бул теңлик тек кеңисликлик өзгериўшиге ийе. (5.e) ҳәм (5.e') теңликлериниң бирдей екенлигине байланыслы (5.c) Шредингер теңлемесин былайынша жазыўға болады:

$$\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m_0}\nabla^2 + V\right]\varphi(\boldsymbol{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\boldsymbol{r},t). \qquad (5.f)$$

Бул теңлемени ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемеси деп атайды. $\hat{E}$ операторының физикалық мәниси Гамильтонның классикалық функциясының физикалық мәнисиндей болғанлықтан (системаның толық энергиясы), биз оны үлкен H ҳәрипи менен белгилеймиз. Бул оператор затлық меншикли мәнислерге ийе сызықлы ҳәм эрмитлик дифференциаллық оператор болып табылады [21]. Барлық бақланатуғын шамалар сыяқлы энергия да ҳақыйқый сан болғанлықтан, бул жағдай (5.c) теңлемесиниң физикалық корректли (дурыс) екенлигин дәлиллейди. Импульстиң сызықлы операторының да эрмитлик екенлигин аңсат дәлиллеўге болады:

$$\hat{p} = i\hbar\frac{\partial}{\partial r} = -i\hbar\left(-\frac{\partial}{\partial r}\right) = (i\hbar)^{\dagger}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^{\dagger} = \hat{p}^{\dagger}.$$

$\hat{p}$ операторы өзине өзи түйинлес болғанлықтан эрмитлик оператор болып табылады. $\boldsymbol{r}$, m ҳәм t шамалары да затлық болғанлықтан, эрмитлик операторлардың қатарына киреди. Сонлықтан биз квантлық механикада ҳәр бир физикалық шаманың эрмитлик оператордың жәрдеминде аңлатылады деп жуўмақ шығарамыз [21].

Меншикли функция системаның ҳалын беретуғын қурамалы функция болып табылады, оның физикалық мәниси кейинирек түсиндириледи.

Шредингердиң жумысы бөлекшени Даламбер теңлемесин қанаатландыратуғын материаллық толқын түринде қараў мүмкин деген болжаўға тийкарланған. Усындай себепке байланыслы ол толқынлық механика түринде анықланады. Гейзенберг картинасы бул картинаға параллель картина болып табылады. Басқа математикалық формулировкаға тийкарланған Гейзенберг картинасы кейинирек көрсетиледи. Математикалық формализм көз-қарасы бойынша Гейзенберг картинасы сулыўырақ болса да Шредингер картинасы көбирек пайдаланылады.

Шредингер (5.c) теңлемени водород атомы ушын пайдаланды ҳәм де Бройль гипотезасынан өзгеше болған қандай да бир гипотезаны пайдаланбай-ақ эксперименталлық нәтийжелерди түсиндире алатуғын биринши квантлық теорияны дөретти.

6. Толқын механикасы картинасындағы водород атомы

Мейли, $\boldsymbol{r}_N$ менен $\boldsymbol{r}_e$ ядро менен электронның орынлары, ал m_N менен m_e лер олардың массалары болсын. Атомның каркасы массаның атомлық орайында жайласқан. Атомның келтирилген массасы $\mu = m_N m_e/(m_N + m_e)$ ге тең. Егер Гамильтон операторын

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_N}\nabla_N^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 + V(\boldsymbol{r}_e - \boldsymbol{r}_N)$$

түринде жазсақ, Шредингер теңлемесин алыўға болады [19]. Жоқарыда аңлатпадағы N ҳәм e белгилери ядро менен электронға тийисли. Массалар орайының координатасы менен келтирилген массаны пайдаланып гамильтонианды жазыў қолайлы:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2(m_N + m_e)}\nabla_{MO}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r). \tag{6.a}$$

Бул аңлатпадағы MO индекси массалар орайы дегенди билдиреди. (6.a) дағы биринши ағза массалар орайының кинетикалық энергиясы операторы, екинши ағза келтирилген массаның кинетикалық энергиясы, ал соңғы ағза болса электрон менен ядроның арасындағы электростатикалық өз-ара тәсирлесиўдиң нәтийжесинде пайда болған потенциаллық энергия болып табылады. (6.a) операторын пайдаланғанда Шредингер теңлемеси мынадай түрге енеди:

$$H\varphi(\boldsymbol{r}_{MO}, \boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r}_{MO}, \boldsymbol{r}).$$

Массалар орайының қозғалысы келтирилген массаның қозғалысынан ғәрезсиз болғанлықтан, меншикли функцияның былайынша жазылыўы мүмкин:

$$\varphi(\boldsymbol{r}_{MO}, \boldsymbol{r}) = \chi(\boldsymbol{r}_{MO})\psi(\,\boldsymbol{r}). \tag{6.b}$$

(6.a) операторын массалар орайының гамильтонианы (H тағы биринши ағза) менен келтирилген массаның гамильтонианының (H тағы екинши ҳәм үшинши ағза) суммасы түринде жазыўға болады:

$$H = H_{MO} + H_\mu.$$

(6.b) функцияны бул соңғы операторға қолланып, биз төмендегидей теңлемени аламыз:

$$\begin{aligned} H\chi(\boldsymbol{r}_{MO})\psi(\,\boldsymbol{r}) &= H_{MO}\chi(\boldsymbol{r}_{MO})\psi(\,\boldsymbol{r}) + H_\mu\chi(\boldsymbol{r}_{MO})\psi(\,\boldsymbol{r}) = \\ &= E_{MO}\chi(\boldsymbol{r}_{MO})\psi(\,\boldsymbol{r}) + E_\mu\chi(\boldsymbol{r}_{MO})\psi(\,\boldsymbol{r}) = \\ &= \left(E_{MO} + E_\mu\right)\chi(\boldsymbol{r}_{MO})\psi(\,\boldsymbol{r}). \end{aligned}$$

Водород атомы ушын жазылған Шредингер теңлемесин бир биринен ғәрезсиз болған еки теңлемеге ажыратыўға болады:

$$H_{MO}\chi(\boldsymbol{r}_{MO}) = E_{MO}\chi(\boldsymbol{r}_{MO}), \tag{6.c}$$

$$H_\mu\chi\left(\boldsymbol{r}_\mu\right) = E_\mu\chi\left(\boldsymbol{r}_\mu\right). \tag{6.d}$$

Еркин қозғалыс ушын атомның меншикли функциялар менен меншикли энергияларды алыў мақсетинде (6.c) теңлемени шешемиз. Бул теңлемени анық түрде жазыўға болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_N + m_e}\nabla_{MO}^2\chi(\boldsymbol{r}_{MO}) = E_{MO}\chi(\boldsymbol{r}_{MO}),$$

$$\nabla_{MO}^2\chi(\boldsymbol{r}_{MO}) = -\frac{2(m_N + m_e)}{\hbar^2}E_{MO}\chi(\boldsymbol{r}_{MO}).$$

Бул дифференциаллық теңлемениң шешимлери мына функциялар болады:

$$\chi(\boldsymbol{r}_{MO}) = A\exp\left\{i\sqrt{\frac{2(m_N+m_e)E_{MO}}{\hbar^2}}r\right\} + B\exp\left\{-i\sqrt{\frac{2(m_N+m_e)E_{MO}}{\hbar^2}}r\right\}.$$

Бул аңлатпадағы энергия белгисиз шама болғанлықтан, биз

$$2(m_N+m_e)E_{MO} = \frac{\hbar^2}{\lambda_{MO}^2}$$

теңлигин алыў ушын (4.o) ны пайдаланып, машқаладан шығыўға болады. Бул аңлатпада λ_{MO} - водород атомы ушын де Бройль толқын узынлығы. Бул нәтийжени соңғы аңлатпаға қойып, биз мынаны аламыз:

$$\chi(\boldsymbol{r}_{MO}) = A\exp\left\{\frac{ih}{E_{MO}h}r\right\} + B\exp\left\{-\frac{ih}{E_{MO}h}r\right\}.$$

Егер биз толқын векторының модулиниң $k = 2\pi/\lambda$ шамасына тең екенлигин еске түсирсек, онда биз ақырғы функцияға келемиз:

$$\chi(\boldsymbol{r}_{MO}) = Ae^{\boldsymbol{ik\cdot r}} + Be^{-\boldsymbol{ik\cdot r}}. \quad (6.e)$$

(6.e) биз излеп атырған шешим болып табылады ҳәм ол әдеттеги тегис толқынды береди, теңлеме (6.c) теңлемени алмастырады ҳәм массалар орайының толық энергиясын береди:

$$E_{MO} = \frac{\hbar^2k^2}{2(m_N+m_e)}.$$

(6.e) деги A ҳәм B константаларын есаплаў ушын шегаралық шәртлер керек. Олардың мәнислерин бериўге еле ертерек. Себеби биз еле меншикли функциялардың физикалық мәнисин түсиндирмедик (Борнның итималлық гипотезасы). Толқын векторының мәнисин сайлап алыў ушын ҳеш қандай шек қойылмағанлықтан энергияның мәниси квантланған емес. Бул шекленбеген кеңисликте қозғалатуғын еркин бөлекше ушын дурыс болады.

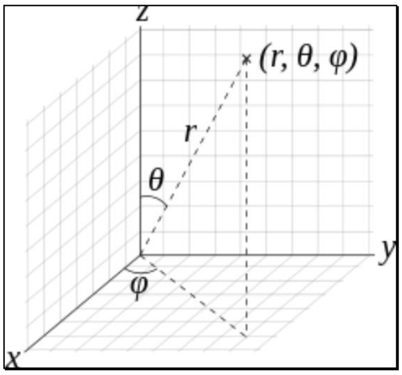
Енди келтирилген масса ушын Шредингер теңлемесин қараймыз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + V\psi(\boldsymbol{r}) = E_\mu\psi(\boldsymbol{r}).$$

Усының менен бирге водород атомының Бор модели ушын $m_N \gg m_e$ теңсизлиги орынлы деп есапланды. Бундай жағдайда келтирилген масса электронның массасына жақын. Бундай жағдайда Шредингер теңлемеси мынадай түрге ийе болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + V\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}). \quad (6.f)$$

Бул теңликте E - электронның толық энергиясы. Бул дифференциаллық теңлемени декарт координаталар системасында шешиў жеткиликли дәрежеде қурамалы ҳәм, сонлықтан, координаталарды физикалық системаның симметриясын сәўлелендиретуғындай етип сайлап алған қолайлы. Электронның ядроның дөгерегиндеги қозғалысы бөлекшениң сфералық симметрияға ийе болған орайлық майдандағы қозғалысына эквивалент. Биз излеген координаталардың жыйнағы мынадай:



$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi\,, \\ y = r\sin\theta\sin\varphi\,, \\ \quad z = r\cos\theta\,. \end{cases} \qquad (6.g)$$

(6.f) теңлемесин сфералық координаталарда жазыў ушын дәслеп ∇^2 операторындағы өзгериўшилерди алмастырыў керек:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi(r,\theta,\varphi)+ \qquad (6.h)$$
$$+V(r)\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi).$$

r,θ,φ координаталары (улаўмаласқан координаталар) бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан, $\psi(r,\theta,\varphi)$ меншикли функцияны бир өзгериўши функциялардың көбеймеси түринде көрсетиўге болады:

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi).$$

Электростатикалық энергия $V(r)$ тек улыўмаласқан координата r ден ғәрезли; буннан бурынғы бөлимде қарап өтилген квантлық механиканың қағыйдаларына сәйкес, бул шамаға сәйкес келетуғын оператор мынадай түрге ийе:

$$V(r)=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}.$$

Бул аңлатпа белгилери қарама-қарсы болған еки электр заряды тәрепинен пайда етилген орайлық симметрияға ийе майданның потенциаллық энергиясының белгили аңлатпасы болып табылады. Ажыратылған меншикли функцияны алмастырып ҳәм (6.h) аңлатпадағы электростатикалық потенциаллық энергияны айқын формаға келтирип ҳәм еки ағзаны $r^2\sin\theta/R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ аңлатпасына көбейтип, биз ажыралатуғын өзгериўшилерге ийе мынадай дифференциаллық теңлемеге ийе боламыз:

$$\frac{\sin^2\theta}{\mathrm{R(r)}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+$$
$$+\frac{2m_e}{\hbar^2}r^2\sin^2\theta\left(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}.$$

Бул теңлемедеги биринши ағза улыўмаласқан r,θ координаталарынан ғәрезли, ал екинши ағза болса φ координатасының функциясы болып табылады. Бул еки ағзаны сан мәниси бойынша бирдей болған m^2 константасына теңлестириўге болады:

$$-\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}=m^2,\qquad \frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}=-m^2\Phi(\varphi).$$

Бул меншикли мәнислер табылатуғын екинши тәртипли әпиўайы дифференциаллық теңлеме болып табылады. Оның шешимлери

$$\Phi_m(\varphi)=e^{\pm im\varphi}.$$

Бул аналитикалық функциялардың бир мәнисли болыўы керек, яғный олардың ҳәр қайсысы тек бир мәниске ийе болатуғынлығын аңғартады (бул шәрт Борн тәрепинен меншикли функцияларға берилген итималлық интерпретациясы менен байланыслы ҳәм бул интерпретация кейинирек талланады). Бул шәрт

$$\Phi_m(\varphi) = \Phi_m(\varphi + 2\pi) = e^{\pm im(\varphi+2\pi)} = e^{\pm im\varphi} + e^{\pm im2\pi}$$

теңликлериниң орынлы болатуғынлығын көрсетеди. Соңғы теңликтен m константасының мынадай шәртти қанаатландыратуғыны келип шығады:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n.$$

Енди екинши элементти m^2 константасына тең деп есаплап, биринши ағза ушын теңлемени шешейик. Бул теңлемени r ҳәм θ өзгериўшилерине байланыслы ажыратыў ушын қайтадан жазамыз:

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2m_e}{\hbar^2}r^2 =$$

$$= \frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta}.$$

Теңлемениң ҳәр бир ағзасы тек бир өзгериўшиден ғәрезли болғанлықтан, оларды бир санлы константаға теңлестириў керек. Математикалық жақтан қолайлы болыўы ушын бул константаны $l(l+1)$ арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{m^2\Theta(\theta)}{\sin^2\theta} + l(l+1) = 0$$

теңлемесине ийе боламыз. Егер l натурал сан болатуғын болса, онда алынған теңлеме Лежандр теңлемеси болып табылады. $m = 0$ теңлиги орынлы деп болжайық, бундай жағдайда

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + l(l+1) = 0$$

теңлемесине ийе боламыз. Бул теңлемениң шешими Лежандр полиномлары болып табылады:

$$\Theta_l(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!}\frac{\partial(\cos^2\theta - 1)^l}{\partial(\cos\theta)^l}.$$

Егер $m \neq 0$ теңсизлиги орынлы болса, онда шешимлер Лежандр функциялары болып табылады:

$$\Theta_l^m(\theta) = \sin^{|m|}\theta\frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}\left[\frac{1}{2^l l!}\frac{\partial(\cos^2\theta - 1)^l}{\partial(\cos\theta)^l}\right].$$

Егер константаның мәниси $l(l+1)$ ден өзгеше болатуғын болса (l - пүтин сан), онда шешим 2π шамасына тең болған дәўирге ийе болмаған болар еди.

Енди биринши ағзадан дүзилген теңлемени қараймыз ҳәм екинши ағзадан дүзилген теңлемени $l(l+1)$ константасына тең деп есаплаймыз.

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{2m_e}{\hbar^2}r^2\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0 \qquad (6.i)$$

Бул Лагеррдиң дифференциаллық теңлемеси болып табылады. Оның шешимлери былайынша жазылады:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2m_e e^2}{\hbar^2}\right)^3 \frac{(n-l+1)!}{[2n(n+1)!]^3}}\, e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+1}^{2l+1}(\rho).$$

Бул аңлатпада

$$\rho = \frac{2m_e e^2}{n\,\hbar^2 4\pi\varepsilon_0} r. \qquad (6.i')$$

$$L_{n+1}^{2l+1}(\rho) = \frac{d^{2l+1}}{d\rho^{2l+1}} L_{n+1}(\rho),$$

$$L_{n+1}(\rho) = e^{\rho}\frac{d^{n+1}}{d\rho^{n+1}}(\rho^{n+1}e^{-\rho}).$$

$R_{nl}(r)$ функциясын (6.i) Лагерр теңлемесине қойып электронның энергиясының мәнисин аламыз:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{1}{\hbar^2 n^2}. \qquad (6.l)$$

Бул нәтийже Бор тәрепинен алынған (2.f) нәтийжесине сәйкес келеди. Бул Бор тәрепинен орынланған мүйешлик моменттиң квантланыўының квантлық толқынлық механикаға сәйкес келетуғынлығын аңғартады. Усының менен бирге (6.i') функциясындағы турақлы ағза (6.g) Бор орбитасының радиусына тең:

$$a_B = \frac{\hbar^2 n^2 4\pi\varepsilon_0}{m_e e^2}.$$

Пүтин n, l ҳәм m санлары физикалық химияда фундаменталлық орынды ийелейди. Олар былайынша анықланады:

- n = бас квант саны,
- l = екинши ямаса азимуталлық ямаса орбиталық квант саны,
- m = магнит квант саны.

(6.h) та көрсетилгениндей, бириншиси n электронлық ҳалдың толық энергиясын береди (меншикли мәнисти ҳәм меншикли функцияны). n саны нолге тең емес тек оң пүтин мәниске ийе болғанлықтан водород атомының энергиясы квантланған. Екинши тәрептен орбиталық квант саны l меншикли функцияның геометриялық формасын анықлайды; оның мәниси водород атомына салыстырғанда қурамалы болған атомларға Бор моделин пайдаланыў ушын Зоммерфельд тәрепинен киргизилген квант санына сәйкес келеди. $\psi(r, \theta, \varphi)$ толқын функциясы итималлықлық интерпретациядан келип шығатуғын математикалық шәртлерди қанаатландыратуғын болғанлықтан l квант саны $l \leq n-1$ теңсизлиги тәрепинен қойылатуғын шәртти қанаатландырыўы керек. Ал магнит квант саны болса электронлардың ядроның дөгерегиндеги қозғалыўының салдарынан жүзеге келген магнит майданы пайда еткен эффектлер менен байланыслы. Бул эффектлерди сыртқы магнит майданы түскен жағдайдағы атомның спектриниң өзгериўинде көринеди. Орбиталық квант санына қойылатуғындай математикалық шәрт магнит квант саны ушын $-l \leq m \leq +l$ түринде жазылады.

Квант санларының берилген (n, l, m) триплети менен байланысқан толқын функцияларына $\psi(n, l, m)$ бир неше мысал келтиремиз:

$$\psi(1,0,0) \to \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} e^{-r/a_B},$$

$$\psi(2,0,0) \rightarrow \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_B}\right) e^{-r/2a_B},$$
$$\psi(2,1,0) \rightarrow \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_B} \cos\theta\, e^{-r/2a_B},$$
$$\psi(2,1,1) \rightarrow \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_B} \sin\theta\, e^{-r/2a_B} e^{i\varphi},$$
$$\psi(2,1,-1) \rightarrow \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_B^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_B} \sin\theta\, e^{-r/2a_B} e^{-i\varphi}.$$

$R_{n,l}(r)$ функциясы радиаллық функция деп аталады, ал $\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi)$ көбеймеси сфералық гармоника атамасына ийе ҳәм әдебиятта $Y_l^m(\theta,\varphi)$ түринде белгиленеди. Ол электронның мүйешлик моменти менен байланыслы болған оператордың меншикли функциясы ҳәм оның мәниси келеси бөлимде талланады. Меншикли функциялар Бор моделиндеги орбиталар сыяқлы орбиталлар деп аталады (орбиталлар траекториялар болып табылмайды). Бул орбиталлар ушын 6-кестеде келтирилген символлар пайдаланылады.

6-кесте.

Орбиталық квант саны	l	0	1	2	3
Магнит квант саны	m	0, ±1	0, ±1	0, ±1, ±2	0, ±1, ±2, ±3
Орбиталық символ		s	p	d	f

Орбиталық квант санының алдында бас квант санының мәниси көрсетиледи:

$n = 1 \;\; \Rightarrow \;\; 1s,$

$n = 2 \;\; \Rightarrow \;\; 2s, 2p$ (азғынған орбиталлардың саны 3),

$n = 3 \;\; \Rightarrow$

$3s, 3p$ (азғынған орбиталлардың саны 3), $3d$ (азғынған орбиталлардың саны 5),

p, d ҳәм f орбиталларының азғыныўы (6.l) формулада l ҳәм m квант санларының болмаўының себебинен жүзеге келеди.

Радиаллық функциялардың салыстырмалы формасы ҳаққында төмендегилерди айтыўға болады:

1. Берилген орбиталық квант саны ушын $n - 1$ болған жағдайда сәйкес функция нолге тең (оларды түйинлер деп те атайды);

2. Орбиталық квант санынан ғәрезсиз барлық функциялар ядродан қашықлықтың үлкейиўи менен нолге умтылады. Бирақ, бас квант санының үлкейиўи менен бул тенденция әстелик пенен жүреди;

3. Тек бир s функция ғана ядроға сәйкес пикке ийе болады, ал қалғанлары нолге тең.

Водород атомы ушын Шредингер теңлемесин шешиўди жуўмақлаў ушын меншикли функциялардың ўақыттан ғәрезлигин есапқа алыў керек. Оның ушын (6.f) теңлемени шешиў зәрүр:

$$H_e\psi(r,\theta,\varphi,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,\theta,\varphi,t) = E\psi(r,\theta,\varphi,t).$$

Бул теңлемеде H_e арқалы $\mu \cong m_e$ жуўықлаўындағы квантлық механиканың гамильтонианы белгиленген.

$\psi(r,\theta,\varphi,t)$ меншикли функциясы ўақыттан ғәрезлиги бойынша кеңисликлик орбиталлардың көбеймеси түринде ажыратылады. Нәтийжеде теңлеме мынадай өзгерислерге ушырайды

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,\theta,\varphi)f(t) = E\psi(r,\theta,\varphi)f(t) \ \Rightarrow \qquad (4.4.m)$$
$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\ f(t) = \frac{E}{i\hbar}f(t) = -i\frac{E}{\hbar}f(t)$$

ҳәм улыўмалық шешим мынадай:

$$f(t) = e^{-{iEt}/{\hbar}}. \qquad (6.n)$$

Солай етип, (6.i) диң толық шешими мынадай түрге ийе болады:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\varphi)e^{-{iEt}/{\hbar}}.$$

Бул функцияны (6.h) теңлемеге қойып, биз (6.l) теңлемедеги энергияны аламыз. Бул электронның толық энергиясының ўақыттан ғәрезсиз екенлигин ҳәм сонлықтан қозғалыс интегралы болып табылатуғынлығын аңғартады. Солай етип, Шредингер теориясы қандай да бир ықтыярлы болжаўларды пайдаланбай-ақ водород атомының стабиллигин түсиндире алады ҳәм оның спектриниң пайда болыўын толық түсиндире алады.

7. Водород атомының мүйешлик моменти

Электронның қозғалысы ядроның дөгерегинде жүзеге келетуғын болғанлықтан, биз $\boldsymbol{L}$ векторы менен сүўретленетуғын оның мүйешлик моментин табыўымыз керек:

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} = det\begin{pmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{k} & \boldsymbol{l} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{pmatrix} =$$
$$= \boldsymbol{i}(yp_z - zp_y) + \boldsymbol{k}(zp_x - xp_z) + \boldsymbol{l}(xp_y - yp_x).$$

$\boldsymbol{L}$ векторының қураўшылары:

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y; \\ L_y &= \ zp_x - xp_z; \\ L_z &= \ xp_y - yp_x. \end{aligned} \qquad (7.a)$$

(7.а) дағы ҳәр бир скаляр қураўшы менен байланыслы болған квадрат операторды алыў ушын биз $\boldsymbol{p}$ ны $i\hbar\nabla$ операторы менен алмастырыўымыз керек. Ал $\boldsymbol{r}$ векторы болса өзгериссиз қалады. Бундай жағдайда (7.а) ның квантлық версиясы былайынша жазылады:

$$\begin{cases} \hat{L}_x = i\hbar\left(y\dfrac{\partial}{\partial z} - z\dfrac{\partial}{\partial y}\right); \\ \hat{L}_y = i\hbar\left(z\dfrac{\partial}{\partial x} - x\dfrac{\partial}{\partial z}\right); \\ \hat{L}_z = i\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial x}\right). \end{cases} \qquad (7.b)$$

Сфералық координаталарда бул операторлар былайынша жазылады:

$$\begin{cases} \hat{L}_x = i\hbar\left(-\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right); \\ \hat{L}_y = i\hbar\left(\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right); \\ \hat{L}_z = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}. \end{cases}$$

Енди скаляр көбейме қағыйдасы бойынша $\hat{L}$ векторының квадраты $\hat{L}^2$ шамасын есаплаймыз ҳәм мынадай аңлатпаны аламыз:

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

Бул оператор (6.h) гамильтонианының мүйешлик бөлими болып табылады. Бул

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = L^2 Y(\theta,\varphi)$$

дифференциаллық теңлемесиниң Шредингер теңлемесиниң шешимлериндей шешимлерге ийе болатуғынлығын аңғартады:

$$Y(\theta,\varphi) = \Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\varphi). \tag{7.c}$$

L^2 шамасының меншикли мәнислери $\hbar^2 l(l+1)$ ге тең ҳәм олар Лежандрдың дифференцаллық теңлемеси ушын тән болады. (7.c) өткен бөлимде есапланған сфералық гармоника болып табылады. Күтилгениндей, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторлары Эрмит операторлары болып табылады ҳәм затлық меншикли мәнислерге ийе болады.

8. Коммутациялық қатнаслар

Эрмит операторларының алгебрасында мынадай тастыйықлаў бар: егер еки оператор бирдей меншикли мәнислерге ийе болса, онда олар коммутацияланады (бирдей меншикли мәнислерге ийе болмаса коммутацияланбайды) [21]. Буннан алдыңғы бөлимде биз $\hat{L}^2$ операторы H_e гамильтонианының бирдей меншикли функцияларына ийе болатуғынын атап өттик. Бул еки оператордың коммутацияланатуғынлығын аңғартады, яғный $[H_e, \hat{L}^2] = 0$.

Енди 7-бөлимде алынған квантлық операторлардың арасындағы мүмкин болған коммутаторды таллаймыз:

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y], [\hat{L}_y,\hat{L}_z], [\hat{L}_x,\hat{L}_z], [\hat{L}^2,\hat{L}_x], [\hat{L}^2,\hat{L}_y], [\hat{L}^2,\hat{L}_z].$$

Дәслеп биз айқын түрдеги (7.b) операторлық формаларды есапқа алған ҳалда биринши операторды былайынша есаплаймыз:

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]f(x,y,z) = \hat{L}_x\hat{L}_y f(x,y,z) - \hat{L}_y\hat{L}_x f(x,y,z).$$

Екинши ағзадағы еки ағзаны өз алдына есаплап ҳәм Шварц (Schwartz) теоремасын пайдаланып, мынаны аламыз:

$$\hat{L}_x\hat{L}_y f(x,y,z) = (i\hbar)^2\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(z\frac{\partial f}{\partial x} - x\frac{\partial f}{\partial z}\right) =$$

$$= (i\hbar)^2\left(y\frac{\partial f}{\partial x} + yz\frac{\partial^2 f}{\partial z\partial x} - yx\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2 f}{\partial y\partial x} + zx\frac{\partial^2 f}{\partial z\partial y}\right);$$

$$\hat{L}_y\hat{L}_x f(x,y,z) = (i\hbar)^2\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(y\frac{\partial f}{\partial z} - z\frac{\partial f}{\partial y}\right) =$$
$$= (i\hbar)^2\left(zy\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial z} - z^2\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y} - xy\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} + x\frac{\partial f}{\partial y} + xz\frac{\partial^2 f}{\partial z\partial y}\right).$$

Усы еки теңликти бир биринен алсақ, мынаған ийе боламыз:

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] f(x,y,z) = (i\hbar)\left(y\frac{\partial f}{\partial x} - x\frac{\partial f}{\partial y}\right).$$

Қаўсырманың ишиндеги аңлатпа $-\hat{L}_z$ болып табылады:

$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right] = -i\hbar\hat{L}_z.$$

Биз $\left[\hat{L}_x,\hat{L}_y\right]$ коммутаторы нолге тең емес ҳәм еки $\hat{L}_x$ ҳәм $\hat{L}_y$ операторлары бирдей меншикли функцияларға ийе емес деп жуўмақ шығарамыз. Квантлық механикада әдетте оларды бир ўақытта меншикли ҳалларға ийе болмайды деп айтады. Бул жағдай фундаменталлық әҳмийетке ийе ҳәм Гейзенбергтиң анықсызлық принципи менен байланыслы [22]. Басқа еки коммутатор ушын да сондай қатнасларды аламыз:

$$\left[\hat{L}_y,\hat{L}_z\right] = -i\hbar\hat{L}_x,$$
$$\left[\hat{L}_x,\hat{L}_z\right] = -i\hbar\hat{L}_y.$$

$\hat{L}$ операторының қураўшылары болған Эрмит операторлары коммутацияланбайды ҳәм олар бир ўақытта меншикли мәнислерге ийе болмайды.

Енди $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_x\right]$ коммутаторын қараймыз ҳәм есаплаўларды әпиўайыластырыў ушын бир өлшемли жағдай орын алған деп болжаймыз:

$$\hat{L}_x = xi\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hat{L}^2 = \hat{L}_x\cdot\hat{L}_x = (i\hbar)^2 x\left(\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right).$$

Коммутатордың айқын формасы $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_x\right] = \hat{L}^2\,\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}^2$ түрине ийе. Биринши ағзаны былайынша ашып жаза аламыз:

$$\hat{L}^2\,\hat{L}_x = (i\hbar)^3\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) = (i\hbar)^3 x\left(\frac{\partial}{\partial x} + 3x\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^3\frac{\partial^3}{\partial x^3}\right).$$

Ал, екиншиси мынаған тең болады:

$$\hat{L}_x\hat{L}^2 = (i\hbar)^3\left(x\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) = (i\hbar)^3 x\left(\frac{\partial}{\partial x} + 3x\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^3\frac{\partial^3}{\partial x^3}\right).$$

Еки операторлық көбейме де бирдей, сонлықтан $\left[\hat{L}^2,\hat{L}_x\right]$ коммутаторы нолге тең. Тап усындай жоллар менен

$$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}^2,\hat{L}_y\right] = \left[\hat{L}^2,\hat{L}_z\right] = 0$$

теңлигиниң орынланатуғынлығына исениўге болады.

$\hat{L}$ квантлық мүйешлик моменттиң барлық қураўшылары $\hat{L}^2$ операторы менен коммутацияланады ҳәм бирдей меншикли мәнислерге ийе болады. Егер коммутациялық қатнаслар орынланатуғын болса, онша шешилиўи зәрүрли болған дифференциаллық теңлемелердиң саны кемейеди. Бул жағдай атомлық системаны изертлеўди әпиўайыластырады. Мысалы,

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)Y(\theta,\varphi)$$

дифференциаллық теңлемесиниң шешими бир ўақытта мүйешлик моменттиң қураўшылары менен байланысқан дифференциаллық теңлемелердиң шешимлерин де береди.

Енди төмендегидей коммутаторларды есаплаймыз:

$$\left[x,\hat{p}_y\right],[x,\hat{p}_z],[y,\hat{p}_x],[y,\hat{p}_z],[z,\hat{p}_x],\left[z,\hat{p}_y\right]. \qquad (8.a)$$

Коммутаторлардың биринщисинен баслап ҳәм импульстиң сызықлы операторы болған (7.b) ның айқын формасын еске түсирип, мынаны аламыз:

$$\left[x,\hat{p}_y\right]=x\hat{p}_y-\hat{p}_yx=xi\hbar\frac{\partial}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}x=i\hbar\frac{\partial}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}=0.$$

Бул нәтийжени коммутатор менен функцияға тәсир етип аңсат дәлиллеўге болады:

$$\left[x,\hat{p}_y\right]f(x,y,z)=xi\hbar\frac{\partial f}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial f}{\partial y}[x\,f(x,y,z)]=$$

$$=\;xi\hbar\frac{\partial f}{\partial y}-f(x,y,z)i\hbar\frac{\partial x}{\partial y}-xi\hbar\frac{\partial f}{\partial y}=0.$$

Бул теңликлерде $f(x,y,z)i\hbar\frac{\partial x}{\partial y}$ ағза нолге тең, себеби x функциясы $\frac{\partial}{\partial y}$ операторына қарата константа болып табылады. Тап усындай процедура бойынша $\left[x,\hat{p}_y\right]$ коммутаторы сыяқлы барлық коммутаторлардың нолге тең екенлигин ҳәм орынға сәйкес келетуғын вектордың Декарт координаталарының импульс операторының басқа ҳәр қыйлы Декарт проекциялары менен коммутацияланатуғынлығын дәлиллей аламыз. Егер орынның векторының қураўшылары менен импульстиң қураўшылары бир Декарт көшерине сәйкес келетуғын болса, онда мынадай жағдайға ийе боламыз:

$$[x,\hat{p}_x]\neq 0,\left[y,\hat{p}_y\right]\neq 0,[z,\hat{p}_z]\neq 0. \qquad (8.b)$$

Бул жағдай бизди Гейзенбергтиң анықсызлық принципине алып келеди. Бул тастыйықлаўды дәлиллеў ушын, әдеттегидей, биз биринши коммутаторды қараймыз ҳәм оның менен келтирип шыгарылған қәлеген функцияға тәсир етемиз:

$$[x,\hat{p}_x]f(x)=xi\hbar\frac{\partial f}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial f}{\partial y}[x\,f(x)]=$$

$$=\;xi\hbar\frac{\partial f}{\partial x}-i\hbar f(x)-xi\hbar\frac{\partial f}{\partial x}=-i\hbar f(x).$$

Биз $[x,\hat{p}_x]=\left[y,\hat{p}_y\right]=[z,\hat{p}_z]=-i\hbar$ нәтийжесин аламыз ҳәм орын менен импульс операторларының бирдей меншикли функцияларға ийе болмайды деп жуўмақ шығарамыз.

Коммутаторлар ҳаққындағы пикирлеримиз Гамильтон механикасындағы Пуассон қаўсырмаларын еске түсиреди. Бул классикалық ҳәм квантлық механиклардың физикалық мәнислериниң пүткиллей ҳәр қыйлы болыўына қарамастан, олардың арасында терең байланыстың бар екенлигиниң және бир дәлили болып табылады. Оның ушын Пуассон қаўсырмаларының қәсийетлерин (антисимметрия, сызықлылық, Лейбниц қағыйдасы ҳәм Якоби теппе-теңлиги) квантлық коммутаторлардың да қанаатландыратуғынлығын аңсат дәлиллеўге болады:

$$[A,B]=-[B,A]\ \text{(антисимметрия)},$$

$$[c_1A+c_2B,C]=c_1[A,C]+c_2[B,C]\ \text{(сызықлылық)}$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad \text{(Лейбниц қағыйдасы)}$$
$$\big[[A, B], C\big] = \big[[B, C], A\big] + \big[[C, A], B\big] = 0 \quad \text{(Якоби теппе – теңлиги)}$$

Егер коммутаторлар менен байланыслы болған (әдетте квантлық шәртлер деп аталады) барлық дифференциаллық теңлемелер шешилген болса, онда квантлық системаның толық ҳалы белгили болып табылады.

9. Меншикли функцияларды итималлықлық интерпретациялаў

$\mathbb{R}^3$ кеңислигиндеги водород атомының меншикли функцияларының мәнислери анықланған деп есаплаймыз. Олардың мәнислери әдетте комплексли болады. Квант санларының үшеўин өзгертип, олар гамильтон операторының ортогоналлық базисин пайда етеди. Егер математикалық көз-қарастан оператордың меншикли мәнислери бизди қызықтыратуғын бақланатуғын шамалар болса да бул функциялардың физикалық мәнисин түсиндириў қыйын.

Макс Борн

1926-жылы Макс Борн берилген потенциалдың тәсириндеги бөлекшениң шашыраўын үйрениўдиң барысында меншикли функцияның итималлықлық интерпретациясын усынды [11, 23-25]. Функцияның модулиниң квадраты $|\psi|^2$ барлық ўақытта ҳақыйқый, оның мәниси бөлекшени кеңисликтиң берилген бөлиминде табыўдың итималлығының тығызлығын көрсетеди (биз $|\psi|^2$ шамасын ўақыттан ғәрезсиз деп болжаймыз). Эксперименталлық нәтийжелердиң көпшилиги тәрепинен бул интерпретацияның дурыс екенлиги тастыйықланды ҳәм 1927-жылы өткерилген Сольвей конгрессинде бул интерпретация илимий жәмәәт тәрепинен қабыл етилди. Итималлықтың тығызлығының функциясын атқарыўы ушын $|\psi|^2$ функциясына қойылатуғын талап мынадан ибарат:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r} = 1. \tag{9.a}$$

Бул барлық кеңисликте бөлекшениң табыўдың 1 ге тең болыўының керек екенлигин аңғартады. Бул шәрт водород атомының меншикли функцияларының

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r} = 1 \tag{9.b}$$

шәртине сәйкес нормировкаланатуғынлығын аңғартады.

(9.b) шәрти Шредингердиң ҳәр бир мәселеси ушын шегаралық шәрт болып табылады. Биз мынадай жуўмаққа келемиз: меншикли функциялар гамильтон операторы ушын ортонормаллық базис ҳәм биз 1.8-параграфта танысқан $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ гильберт кеңислигиниң элементлери болып табылады.

$R_{n,l}(\boldsymbol{r})$ радиаллық функцияларға қайтып келип, биз ns орбиталлардың функция нолге тең болатуғын $n-1$ түйинге ийе болатуғынлығын атап өтемиз. Бул $|ns|^2$ функциясының да тап соншама түйинге ийе болатуғынлығын аңғартады. Бундай түйинлерде бөлекшелерди табыўдың итималлығы нолге тең.

Тап усындай таллаўларды водород атомы ушын барлық басқа орбиталлар ушын да жүргизиўге болады. Шредингер теориясынан келип шығатуғын басқа әҳмийетли нәтийже бас квант саны үлкейгенде меншикли функциялардың әстелик пенен нолге умтылыўынан ибарат (бул 6-бөлимде айтылды). Басқа сөзлер менен айтқанда, атом ядросының бар болыўы себепли пайда болған потенциаллық барьерге тереңирек кириўге алып келеди (водород атомында ол гиперболалық формаға ийе болады). Бул қубылыс былайынша түсиндириледи: бас квант санының үлкейиўи менен электронның энергиясы үлкейеди, нәтийжеде оның потенциал барьер арқалы кем-кемнен көбирек өтиўи орын алады.

Меншикли функцияның итималлықлық интерпретациясы дым әпиўайы ҳәм ол еркин бөлекше ушын толқын функциясының физикалық интерпретациясы жөниндеги Шердингерде пайда болған гүманды толығы менен шешеди: толқын пакети ўақыттың өтиўи менен физикалық реаллығының төменлеўи емес, ал оның қайсы орында жайласқанлығы ҳаққындағы информацияның жоғалыўы болып табылады.

*****

Буннан былай биз Дирактың бра ҳәм кет белгилеўлеринен пайдаланамыз:

- $|\psi(r,t)\rangle$ - квантлық бөлекшениң ҳалына сәйкес келетуғын кет-вектор, квантлық қозғалыс теңлемесиниң шешими болып табылады.
- $\langle\psi(r,t)|$ - бра векторы. Ол кет векторына түйинлес вектор болып табылады.
- $\langle\psi_1(r,t)|\,\psi_2(r,t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(r,t)^\dagger\psi_2(r,t)drdt$.
- $\langle\psi_1(r,t)|H|\psi_2(r,t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(r,t)^\dagger H\,\psi_2(r,t)drdt$. Бул аңлатпада H - квантлық оператор.

10. Гейзенберг теңлемелери

Шредингер картинасында квантлық системаның ҳалы

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(r,t)\rangle = H(t)|\psi(r,t)\rangle$$

теңлемесин қанаатландыратуғын вектор болып табылады.

Ўақытқа байланыслы эволюция операторын киргиземиз, ол t_0 ўақыт моментиндеги $|\psi(r,t_0)\rangle$ ҳалын t ўақыт моментиндеги $|\psi(r,t)\rangle$ ҳалына түрлендиреди:

$$|\psi(r,t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(r,t_0)\rangle. \qquad (10.a)$$

Бул оператор мынадай қәсийетлерге ийе:

а) $U(t,t_0) = \mathbb{1}$,

b) $U(t,t_0)[c_1|\psi(r,t_0)\rangle + c_2|\psi(r,t_0)\rangle] = c_1|\psi(r,t_0)\rangle + c_2|\psi(r,t_0)\rangle$,

c) $U(t,t_0) = U(t,t_1)U(t,t_0)$.

c) қәсийеттен мынадай жағдай келип шығады:

$$U(t_0,t_0) = U(t,t_0)U(t_0,t) = \mathbb{1}$$

ямаса

$$U(t_0,t) = U^{-1}(t,t_0) = \mathbb{1}.$$

Бул теңлик ўақыт бойынша эволюция операторының унитарлық екенлиги келип шығады. Бул қәсийетти дәлиллеў ушын $|\psi_1(r,t)\rangle$ ҳәм $|\psi_2(r,t)\rangle$ ҳалларын қараймыз. Ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемеси пайдаланып, мынаны аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_1(r,t)|\psi_2(r,t)\rangle = \left\langle\dot{\psi}_1(r,t)\middle|\psi_2(r,t)\right\rangle + \left\langle\psi_1(r,t)\middle|\dot{\psi}_2(r,t)\right\rangle =$$
$$= \frac{i}{\hbar}[-\langle\psi_1(r,t)|H|\psi_2(r,t)\rangle + \langle\psi_1(r,t)|H|\psi_2(r,t)\rangle] = 0.$$

Бул нәтийже $\langle\psi_1(r,t)|\psi_2(r,t)\rangle$ матрицасының элементлериниң ўақыттан ғәрезсиз екенлиги менен байланыслы. Солай етип, биз

$$U^\dagger(t_0,t) = U^{-1}(t,t_0)$$

теңлиги орынлы деп тастыйықлай аламыз. (10.a) да берилген бул $|\psi(r,t)\rangle$ шамасының мәнисин ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемесине қоямыз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(r,t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[U(t,t_0)|\psi(r,t_0)\rangle] =$$
$$= HU(t,t_0)|\psi(r,t_0)\rangle = H|\psi(r,t_0)\rangle.$$

Бул теңлемениң еки орайлық ағзасына дыққат аўдарып, биз мынаны жаза аламыз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,U(t,t_0) = HU(t,t_0). \tag{10.b}$$

Егер Гамильтон операторы ўақыттан айқын түрде ғәрезсиз болса (орнықлы ҳаллар), онда меншикли векторлар мынадай түрге ийе болады:

$$|\psi(r,t)\rangle = |\psi(r)\rangle \exp\left\{-i\frac{E(t-t_0)}{\hbar}\right\}. \tag{10.c}$$

Жоқарыда экспоненциаллық ағзаның унитарлық нормаға ийе болатуғынлығын ҳәм меншикли мәнислерди есаплаўға тәсир жасамайтуғынлығын көрип едик. Оның үстине, экспоненциаллық функция комплексли болғанлықтан 2π ол өзгериў дәўирине ийе ҳәм оның $|\psi(r)\rangle$ векторына тәсири берилген бағыттың дөгерегинде $\nu = E/\hbar$ жийилиги менен айланыўдан ибарат:

$$f(t) = \exp\{-2\pi i\nu\}(t-t_0).$$

Сонлықтан, Шредингер картинасында гамильтониан ўақыттан айқын түрде ғәрезсиз болған жағдайда $|\psi(r)\rangle$ векторлары гармоникалық $f(t)$ функциясындай болып эволюцияға ушырайды. Ол вектордың узынлығын өзгертпейди, ал оның кеңисликтеги бағытын өзгертеди. Басқа сөзлер менен айтқанда, орнықлы ҳалдың Шредингерлик меншикли ҳаллары гильберт кеңислигинде берилген бағыттың дөгерегинде $\nu = E/\hbar$ жийилиги менен айланады екен. Орнықлы ҳалдың энергиясы қаншама үлкен болса айланыўдың мүйешлик жийилиги де үлкен болады. Жуўмақ: Шредингер картинасында бақланатуғын шамалар менен байланыслы болған операторлар ўақыттың өтиўи менен өзгериске ушырамайды, ал орнықлы ҳалларға жуўап беретуғын олардың меншикли векторлары эволюцияға ушырайды. Бизиң мына жағдайды жақсы түсиниўимиз керек: Шредингер картинасы физикалық бақланатуғын шамалар ўақытқа байланыслы эволюцияға ушырайтуғын классикалық механикадан дым алыста жайласқан.

(10.c) ны дыққатқа алсақ, экспоненциаллық ағзаны былайынша жазыўға болатуғынлығын көремиз:

$$|\psi(r,t)\rangle = \exp\left\{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right\}|\psi(r)\rangle.$$

Бул теңликти (10.a) теңлеме менен салыстырып, ўақыт бойынша эволюция операторының айқын формасын алыўға болады:

$$U(t,t_0) = \exp\left\{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right\}. \qquad (10.d)$$

Бул аңлатпадан ўақыт бойынша туўынды алсақ, биз мынаны аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = \frac{\partial}{\partial t}\exp\left\{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right\} =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}H\exp\left\{-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right\} = -\frac{i}{\hbar}HU(t,t_0).$$

Егер Гамильтон операторы ўақыттан айқын түрде ғәрезсиз болса, онда оны Тейлор қатарына жайыўға болады:

Қатарға жайыўды орынлап, мынаған ийе боламыз:

$$U(t,t_0) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left(-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right)^k}{k!}.$$

Қатарға жайыўды $k = 2$ менен тоқтатамыз.

$$U(t,t_0) = 1 - \ i\frac{H(t-t_0)}{\hbar} - \frac{1}{2}\left(-i\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right)^2.$$

Бул операторды кет $|\psi(r,t_0)\rangle$ ге қолланып,

$$U(t,t_0)|\psi(r,t_0)\rangle = |\psi(r,t_0)\rangle - \frac{iE}{\hbar}(t-t_0)|\psi(r,t_0)\rangle -$$

$$-\frac{1}{2}\frac{E^2}{\hbar^2}(t-t_0)^2(t-t_0)$$

теңликлерине ийе боламыз. Бул мысал (10.d) тәрепинен берилетуғын оператордың ҳақыйқатында да кет екенлигин көрсетеди. Гейзенберг классикалық механиканың нызамларын еске түсирип квантлық механиканың жаңа картинасын усынды. Бул картинада операторлар ўақыттың өтиўи менен эволюцияға ушырайды, ал векторлар стационар болып қалады. Шредингердиң жумысын билмей-ақ Гейзенбергтиң өзиниң теориясын дөреткени айқын болыўы керек: еки теория да еки физик тәрепинен 1925-1926 жыллары дерлик бир ўақытта дөретилди [26].

Вернер Гейзенберг

Гейзенбергтиң картинасы бақланатуғын шамалар ўақытқа байланыслы эволюцияға ушырайтуғын классикалық механиканың картинасына жүдә уқсас. Ҳақыйқатында, Гейзенбергтиң өзиниң картинасын дөретиўдеги жақынласыўы Шредингер пайдаланған жақынласыўға диаметраллық қарама-қарсы болса да, олар бирдей болған меншикли мәнислерди алады. Бул айырма еки түрли көз-қараста турып басланыў менен байланыслы: Шредингер (толқынлық тәбият ҳаққындағы) де Бройль гипотезасын пайдаланды, ал Гейзенберг болса өзиниң теориясын коммутативлик емес алгебраға тийкарланған анықсызлық принципине тийкарланып дөретти [22].

$|\psi(r,t)\rangle$ векторларын басланғыш ҳалға алып келетуғын унитарлық операторды қараймыз. Бул оператор бурын киргизилген $U(t,t_0)$ операторының түйинлеси болып табылады:

$$U^{\dagger}(t,t_0) = U(t,t_0).$$

Буннан былай биз Шредингер ҳәм Гейзенберг картиналарын айырыў ушын S ҳәм H белгилеўлерин пайдаланамыз. Соңғы теңликтен баслап, мынадай теңликлерди жазамыз:

$$|\psi_S(r,t)\rangle = U(t,t_0)|\psi_H(r,t)\rangle,$$
$$|\psi_H(r,t)\rangle = U^{\dagger}(t_0,t)|\psi_S(r,t)\rangle.$$

Бул еки картинаның бир бирине эквивалент болыўы ҳәм күтилген шаманың бирдей орташа мәнислерине алып келиўи керек:

$$\langle\psi_S|A_S|\psi_S\rangle = \langle\psi_H|A_H|\psi_H\rangle = \langle\psi_H|U^{\dagger}A_S U|\psi_H\rangle.$$

Бул аңлатпада A арқалы бақланатуғын a шамасы менен байланыслы болған оператор белгиленген. Математикалық күтилетуғын шамалардың орташа мәнислериниң тең болатуғынлығына байланыслы мынаны аламыз:

$$A_H = U^{\dagger}A_S U = U^{-1}A_S U. \qquad (10.e)$$

Себеби U унитарлық болып табылады ҳәм $U^{\dagger} = U^{-1}$. Егер оператор матрицаның жәреминде берилген болса, онда (10.e) қатнасы матрицалардың арасындағы уқсаслықтың қатнасынан басқа ҳеш нәрсе емес. (10.e) аңлатпасы Гейзенберг картинасында оператордың барлық ўақытта ўақыттан ғәрезли болатуғынлығын көрсетеди. Операторлар ўақыттан ғәрезли ҳәм усындай ғәрезликти тәрийиплейтуғын теңлемени табыўымыз керек болады. Оның ушын (10.e) ден ўақыт бойынша туўынды аламыз:

$$\frac{dA_H}{dt} = \left(\frac{dU^{\dagger}}{dt}\right)A_S U + U^{\dagger}\left(\frac{dA_S}{dt}\right)U + U^{\dagger}A_S\left(\frac{dU}{dt}\right).$$

Буннан кейин (10.b) теңлемени пайдаланып, мынаған ийе боламыз:

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}H_S U^{\dagger}A_S U + U^{\dagger}\left(\frac{dA_S}{dt}\right)U - \frac{i}{\hbar}U^{\dagger}A_S H_S U =$$
$$= \frac{i}{\hbar}U^{\dagger}H_S A_S U + U^{\dagger}\left(\frac{dA_S}{dt}\right)U - \frac{i}{\hbar}U^{\dagger}A_S H_S U.$$

Бул аңлатпаларда H_S операторының өзине өзи түйинлес екенлиги есапқа алынды. Кери (10.e) қатнасын пайдаланып, биз мынаны аламыз:

$$H_S = U H_H U^{\dagger}$$

ҳәм

$$A_S = U A_H U^{\dagger}.$$

Бул нәтийжелерди соңғы $\frac{dA_H}{dt}$ ушын жазылған аңлатпаға қойып, мынаны аламыз:

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{i}{\hbar}U^\dagger U A_H U^\dagger A_S U + U^\dagger\left(\frac{dA_S}{dt}\right)U - \frac{i}{\hbar}U^\dagger A_S U H_H U^\dagger U =$$

$$= \frac{i}{\hbar}H_H A_H + U^\dagger\left(\frac{dA_S}{dt}\right)U - \frac{i}{\hbar}H_H A_H =$$

$$= \frac{i}{\hbar}[H_H, A_H] + U^\dagger\left(\frac{dA_S}{dt}\right)U.$$

Бул аңлатпада $[H_H, A_H]$ - еки H_H ҳәм A_H оператордың коммутаторы болып табылады. Алынған теңлемени қайта ислеп ҳәм $[H_H, A_H] = -[A_H, H_H]$ теңлигиниң орынлы екенлигин нәзерде тутып, мынаны аламыз:

$$i\hbar\frac{dA_H}{dt} = [A_H, H_H] + i\hbar\left(\frac{dA_H}{dt}\right). \tag{10.f}$$

Бул жағдайда биз

$$U^\dagger\left(\frac{dA_S}{dt}\right)U = \frac{dA_H}{dt}$$

теңлигиниң орынлы екенлигин есте тутамыз.

(10.f) - Гейзенберг картинасындағы квантлық оператор ушын қозғалыс теңлемеси болып табылады. Бул теңлеме ўақыттан ғәрезли болған Шердингер теңлемесине эквивалент. Егер оператор ўақыттан айқын түрде ғәрезли болмаса, онда $\frac{dA_H}{dt}$ туўындысы нолге тең болады. Сонлықтан теңлеме мынадай түрге ийе болады:

$$i\hbar\frac{dA_H}{dt} = [A_H,\ H_H]. \tag{10.g}$$

Егер Гейзенберг картинасында A операторы H_H гамильтонианы менен коммутацияланатуғын болса, онда $\frac{dA_H}{dt} = 0$ теңлигине ийе боламыз. Бул оператордың қозғалыс константасы болып табылатуғынлығын аңғартады ҳәм оның орташа күтилетуғын мәниси ўақыттың өтиўи менен турақлы болып қалады.

(10.f) теңлемесинде бар әҳмийетли дәлиллердиң бири коммутатордың бар болыўы болып табылады: Гейзенберг картинасында операторлар коммутативлик емес алгебраға бағынады. Бул нәтийже Шредингер картинасындағы операторлар ушын да дурыс, бирақ айқын түрде емес.

Гейзенберг теңлемесиниң ең ақырғы формулировкасына келиў ушын биз коммутаторлардың қәсийетлерин қарап өтиўимиз керек. Бундай жағдайда A, B ҳәм C операторлары бар болсын. Бундай жағдайда мынадай қатнаслар орын алады:

a) $[A, B] = -[A, B]$;

b) $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$;

c) $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$;

d) $[A, [B, C]\ ] + [B, [C, A]\ ] + [C, [A, B]]$;

e) $[A, B]^\dagger$=$[B^\dagger,\ A^\dagger]$.

5-бөлимде биз классикалық импульс p менен $\hat{p} = i\hbar\nabla$ операторының байланыслы екенлигин дәлилледик. Улыўмалық ушын зәлел келтирмей $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ операторы менен де байланыстырыўға болады. Ҳақыйқатында бул оператор барлық ўақытта эрмитлик болып табылады [21]:

$$\hat{p}^\dagger = i\hbar\nabla^\dagger = i\hbar(-\nabla) = -i\hbar\nabla = \hat{p}.$$

Оның үстине меншикли мәнислерди табыў ушын жазылған

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+U\right)\psi = E\psi$$

ҳәм

$$\hat{p}\psi = p\psi$$

теңлемелери $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ операторын пайдаланганда өзгермейди, ал тек коммутатордың белгиси ғана өзгериске ушырайды. Бирақ бул өзгерис коммутаторды абстракт мазмунға айландырып нәтийжениң физикалық мәнисин өзгертпейди. Ал, бул физикалық мазмунның физикалық бақланатуғын шама менен байланыслы бола алмайды. Импульс операторы ушын 8-бөлимде киргизилген тийкарғы $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ операторды еске түсирип, биз мынаған ийе боламыз:

$[q,p] = i\hbar;$

$[q_i, q_i] = 0;$

$[p_i, p_i] = 0.$

Бул аңлатпаларда q ҳәм p лар орын менен импульс координаталары. Квантлық операторлардың коммутативлик емес алгебрасы менен классикалық бақланатуғын шамалардың коммутативлик алгебрасы арасындағы айырманы есапқа алмаўға болады деп болжаймыз. Коммутативлик қатнасларды төмендегидей түрде жазыўға бола ма?

a) $[q_i,p_i] = i\hbar\frac{\partial p_i}{\partial p_i}$,

b) $[p_i,q_i] = i\hbar\frac{\partial q_i}{\partial q_i}$,

c) $[q_i,q_i] = i\hbar\frac{\partial q_i}{\partial p_i} = 0$,

d) $[p_i,p_i] = i\hbar\frac{\partial p_i}{\partial q_i} = 0$.

Усының менен бирге, егер F түйинлес координаталардың улыўмалық функциясы болып табылатуғын болса, онда, c) менен b) ға сәйкес мынаған ийе боламыз:

$$\begin{cases}[q_i,F] = i\hbar\dfrac{\partial F}{\partial p_i},\\ [p_i,F] = i\hbar\dfrac{\partial F}{\partial q_i}\end{cases} \tag{10.h}$$

Бизлер пайдаланып атырған есаплаў классикалық физикадағы Пуассон қаўсырмасына тийкарланған:

$$\{u,v\} = \left[\frac{\partial u}{\partial q_i}\frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i}\frac{\partial v}{\partial q_i}\right].$$

Бул теңликте u менен v лар классикалық өзгериўшилер болып табылады. $\hbar \to 0$ шегинде (10.h) коммутаторлары классикалық коммутаторларға умтылады; Гейзенбергтиң қозғалыс теңлемелери Бордың сәйкес келиў принципине тийкарланған.

(10.g) теңлемени пайдаланып q_i ҳәм p_i операторлары ушын ўақытқа байланыслы эволюция теңлемесин келтирип шығарыўға болады:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[q_i,H] = \frac{1}{i\hbar}i\hbar\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial H}{\partial p_i},$$

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) = -\frac{\partial H}{\partial q_i}.$$

Бул аңлатпада H - еки түйинлес p_i ҳәм q_i өзгериўшилерниң функциясы. Жуўмақлай келе:

$$\begin{cases} \dfrac{dq_i}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial p_i}, \\ \dfrac{dp_i}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \tag{10.i}$$

теңлемелерине ийе боламыз. Бул Гейзенберг теңлемелери болып табылады ҳәм ол классикалық механикадағы Гамильтон теңлемесине уқсас:

$$\{A, H\} \Rightarrow \frac{1}{i\hbar}[A, H].$$

Пуассон қаўсырмалары формализми эрмитлик операторлардың коммутаторына сәйкес келеди. (10.i) теңлемедеги шамалардың матрицалар екенлигин, ал оператор болса түйинлес бақланатуғынлар менен байланыслы болған барлық матрицалардың функциясы екенлигин еске саламыз:

$$H = H(q_1, q_2, q_3, \dots, q_n, p_1, p_2, p_3, \dots, p_n).$$

Демек, Гейзенберг картинасында классикалық механика менен болған байланыс жақсы көринип тур.

(10.i) теңлемелери операторлар ўақыттан айқын түрде ғәрезли емес деген гипотеза тийкарында алынды. Бундай болмаған жағдайда (10.i) ға (10.f) теңлемеге сәйкес $\frac{dq_i}{dt}$ ҳәм $\frac{dp_i}{dt}$ ағзаларын қосыў керек.

(10.e) теңлемеге қайтып келемиз:

$$A_H = U^\dagger A_S U = U^{-1} A_S U.$$

Шредингер картинасында A_S операторы ўақыттан айқын түрде ғәрезли емес деп болжап, би Гейзенберг картинасында тап сол оператор ўақыттан ғәрезли болады деп тастыйықлай аламыз. Оның үстине, (10.d) айқын формасын пайдалансақ, оператордың Шредингер картинасындағы меншикли векторларға салыстырганда қарама-қарсы бағытта айланатуғынлығын көремиз. Гейзенберг картинасындағы қәсийетлер классикалық механикадағы бақланатуғын шамалардың қәсийетлерине толық усайды.

Гейзенберг өзиниң теориясын пүткиллей басқа көз-қарасларда турып дөретти. Бордың теориясынан руўхланған Гейзенберг жаңа гипотезаны усынды ҳәм бул гипотеза бойынша водород атомындағы электронның траекториясының ықтыярлы дәлликте белгили болыўы мүмкин емес. Бирақ, динамиканың тийкарғы нызамлары өз күшинде қалады. Жаңа теория водородтың спектрин беретуғын квантлық өтиўлерди түсиндириўи керек еди. Егер Бор теориясы тийкарында нәзерде тутылған стационар орбиталардың классикалық теңлемесин белгилейтуғын болсақ, онда оның айқын түрин Фурье қатары түринде көз алдыға елеслетиў керек:

$$r(n, t) = \sum_{a=-\infty}^{\infty} c_\alpha(n) \exp\{i\alpha\omega(n)t\}.$$

Бул аңлатпада $\omega(n)$ n- ҳалдағы электронның мүйешлик тезлиги. Сәйкеслик принципине тийкарланған Гейзенберг Фурье қатарының ҳәр бир ағзасын берилген электронлық өтиў менен байланыстырыўды усынды. Бул классикалық

$c_\alpha(n)\exp\{i\alpha\omega(n)t\}$ аңлатпаларды басқа типтеги $c_\alpha(n,m)\exp\{i\alpha\omega(n,m)t\}$ түриндеги аңлатпа менен алмастырыўды аңғартады. Бул аңлатпада m арқалы n-ҳалдан басқа орнықлы ҳал белгиленген. Демек бир ҳалдан екинши ҳалға ҳәр бир өтиў есапқа алынады екен. Солай етип, классикалық $r(n,t)$ функция жаңа математикалық бирлик пенен алмастырылады екен. Оның структурасы қураўшылары r_{nm} болған матрицаның структурасы менен бирдей. Егер электронлық өтиў руқсат етилген болса, онда матрицаның қураўшысы нолге тең емес. Гейзенберг классикалық бақланатуғын шама менен байланысқан оператор түсинигине келди. Оның теориясынан фундаменталлық аспект келип шығады: еки ҳалдың арасындағы өтиў жүзеге келгенде электронның орны белгили болады. Бул бизиң өлшеў ўақытында квантлық ҳалдың коллапсы деп атаған жағдай болып табылады.

Электронның импульсин матрицаның элементлерин дифференциаллаў арқалы аңсат есаплаўға болады:

$$p_{nm} = m\dot{r}_{nm} = mc_\alpha(n,m)i\alpha\omega(n,m)\exp\{i\alpha\omega(n,m)t\} = im\omega_{nm}r_{nm}.$$

Бул нәтийжелердиң тийкарында Гейзенберг Бор-Зоммерфельдтиң квантланыў қағыйдасын қайтадан ислеп шықты:

$$\oint pdq = 2\pi n\hbar.$$

Электронлық өтиўлер дискрет болғанлықтан Гейзенберг бул қағыйданың еки қоңсылас ҳалларға салыстырғандағы интеграллардың айырмасы сыпатында қайтадан жазылыўы керек деп болжады:

$$\oint pdq\bigg|_n - \oint pdq\bigg|_{n-1} = 2\pi\hbar.$$

Түйинлес өзгериўшилер ушын бурын алынған аңлатпаны алмастырып, мынаны аламыз:

$$2m\sum_{\alpha=0}^{\infty}\{|c_\alpha(n+\alpha)|^2\omega(n+\alpha,n) - |c_\alpha(n-\alpha)|^2\omega(n-\alpha,n)\} = \hbar.$$

Бул қатнас спектраллық сызықлардың амплитудаларының бир бири менен байланыслы болатуғынлығын көрсететуғын квантлық қағыйданы береди.

Ал ω_{nm} матрицалары ҳаққында не айтыўға болады? Биз олардың элементлериниң барлық электронлық өтиўлер менен байланыслы екенлигин билемиз; биз ағзаның энергия болатуғынын да билемиз. Сонлықтан биз m ҳалынан n ҳалына өтиўде бөлинип шығатуғын энергияның шамасын да жаза аламыз:

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m.$$

Биз водород атомындағы өтиўилерди көрсететуғын жаңа матрицаны алдық. Оның барлық диагоналлық элементлери нолге тең болады. Бул мүмкин болған орнықлы ҳалда турған электронның энергиясының турақлы болатуғынлығын аңғартады; бул жағдай атомлық электронның орнықлы ҳалының диагоналлық матрица менен берилиўиниң мүмкин екенлигин болжайды. Оның жәрдеминде соңғы аңлатпаны былайынша жазыўға болады:

$$\hbar\omega_{nm} = H_{nn} - H_{mm}.$$

Гейзенберг теориясының қалған бөлими гамильтонлық механиканың тийкарында раўажландырылады (яғный, Гейзенберг тәрепинен динамиканың екинши нызамының сақланыўы). Мысалы, егер биз гамильтонианның биринши классикалық теңлемесиндеги жоқарыда жазылған Гейзенберг операторын алмастыратуғын болсақ, онда мынаны аламыз:

$$\dot{q}_{nm} = \frac{i}{\hbar}[(E_n - E_m)c_{nm}\exp\{i\omega_{mn}t\}] = \frac{i}{\hbar}(H_{nn}q_{nm} - q_{nm}H_{mm}).$$

Бул белгили болған матрицалық теңлемеге эквивалент:

$$\frac{d\hat{q}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, q].$$

11. Гейзенберг-Паулидиң факторластырыўў усылы

Гейзенберг механикасының шеклеринде квантлық теңлемени шешиў факторизация усылын пайдаланыўды талап етеди. Бул усылда Эрмит операторын еки ағзаның көбеймеси түринде жазады. Олардың бири екиншисиниң түйенлеси болыўы керек (эрмитлик болыўы шәрт емес):

$$\hat{A} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \lambda\mathbb{1}.$$

Бул аңлатпада λ арқалы $\hat{A}$ операторының меншикли мәниси белгиленген. $\hat{A}$ операторы бирден көп санлы факторластырыўға ушырайтуғын болса, онда ең үлкен болған меншикли мәнисти беретуғынын сайлап алыў керек [27]. $\hat{a}$ ҳәм $\hat{a}^{\dagger}$ операторларын пайда етиў ҳәм жоқ қылыў операторлары деп атайды. Тилекке қарсы, бундай факторластырыўды табыў ушын алгоритм жоқ, бирақ есаплаўлардың табысы үйренилетуғын машқаланы шешиў менен шуғылланатуғын қәнигениң қәбилетликлеринен ғәрезли.

Гейзенбергтиң мақсети эрмитлик оператордың меншикли мәнислерин есаплаў болса да, факторизация усылының жәрдеминде кет векторының айқын формасын табыўға болады.

12. Матрицалық механика картинасындағы водород атомы

Енди Гейзенберг картинасындағы водород атомын қараймыз. Гейзенберг картинасы эрмитлик матрицалар алгебрасына тийкарланған болғанлықтан, бизди энергияның меншикли мәнислерин есаплаў қызықтырады.

Водород атомы ушын Гамильтон операторы былайынша жазылады:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Бул аңлатпада L - электронның мүйешлик момент операторы, ал потенциаллық энергияны жазғанда турақлы ағза $4\pi\varepsilon_0$ қалдырып кетилген. Мүйешлик момент операторының квадраты ушын 8-бөлимде алынған нәтийжени былайынша жазыўға болады:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}. \tag{12.a}$$

Енди биз H операторын комплексли түйинлес матрицалардың көбеймеси түринде жазыў мақсетинде факторизация усылын пайдаланамыз:

$$H_n = \hat{a}_n^{\dagger}\hat{a}_n + \lambda_n\mathbb{1}.$$

Бул теңлик водород атомының улыўмалық n-ҳалына тийисли. Биз пайда етиў ҳәм жоқ етиў операторларын былайынша беремиз:

$$\hat{a}_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[p + i\left(\alpha_n + \beta_n \frac{1}{r}\right)\right],$$
$$\hat{a}_n^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[p + i\left(\alpha_n - \beta_n \frac{1}{r}\right)\right].$$

Бул аңлатпада α_n менен β_n арқалы есапланыўы зәрүрли болған затлық санлар белгиленген. $\hat{a}_n^{\dagger}\hat{a}_n$ операторлық көбеймени орынлаймыз:

$$\hat{a}_n^{\dagger}\hat{a}_n = \frac{1}{2m}\left[p^2 + \alpha_n^2 + \frac{2\alpha_n\beta_n}{r} + \frac{\beta_n^2 - \hbar\beta_n}{r^2}\right]. \tag{12.b}$$

Бундай жағдайда факторластырыў мынадай түрге ийе болады:

$$H_n = \hat{a}_n^{\dagger}\hat{a}_n + \lambda_n\mathbb{1} = \frac{1}{2m}\left[p^2 + \alpha_n^2 + \frac{2\alpha_n\beta_n}{r} + \frac{\beta_n^2 - \hbar\beta_n}{r^2}\right] + \lambda_n\mathbb{1}. \tag{12.c}$$

(12.c) менен (12.a) аңлатпаларын салыстырыў жолы менен төмендегилерге ийе боламыз:

$$\frac{2\alpha_n\beta_n}{r} = -\frac{2me^2}{r}, \frac{\beta_n^2 - \hbar\beta_n}{r^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}, \lambda_n = -\frac{\alpha_n^2}{2m}.$$

Бизиң алгебралық есаплаўларды жүргизе алыў қәбилетлигимиздиң арқасында α_n ҳәм β_n санлық константаларын таптық. Тийкарғы ҳал ушын бул санлардың мәнислери мынадай бола алады:

$$\alpha_0 = \frac{me^2}{\hbar l}, \beta_0 = -\hbar l.$$

Бул мәнислер E_0 ушын

$$E_0 = -\frac{\alpha_0^2}{2m} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 l^2}.$$

формуласын береди.

Бирақ тийкарғы ҳал ушын алынған нәтийжениң $l = 0$ болған жағдай ушын мәниске ийе емес екенлигин билемиз. Бундай жағдайда бизлер санлардың жаңа жыйнағы менен ис алып барамыз:

$$\alpha_0 = -\frac{me^2}{\hbar(l+1)}, \beta_0 = \hbar(l+1).$$

Бул шамалар жаңа E_0 меншикли мәнислерин береди:

$$E_0 = -\frac{\alpha_0^2}{2m} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(l+1)^2}.$$

Бул мәнис Бор ҳәм Шредингердлер тапқан мәнис пенен сәйкес келеди. Факторизация усылы менен итерациялық есаплаўды даўам етип, биз n-ҳал ушын санлардың төмендегидей жыйнағын аламыз:

$$\alpha_n = -\frac{me^2}{\hbar(l+1)}, \beta_0 = \hbar(l+1).$$

Бул жыйнаққа E_0 энергияның

$$E_{n,l} = -\frac{\alpha_0^2}{2m} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n+l)^2}.$$

мәниси сәйкес келеди.

n саны оң ҳәм пүтин сан болып табылады, ал l терис емес пүтин мәнислерге ийе болыўы керек [27].

13. Толқынлық ҳәм матрицалық механикалардың эквивалентлиги

Жоқарыда гәп етилген еки формализмниң математикалық эквивалентнлиги Шредингер тәрепинен 1926-жылы үйренилди ҳәм шешилди [15, 21]. Матрицалық механиканың машқаласы мынадан ибарат: сызықлы импульс ҳәм орын (координата) менен байланыслы болған P ҳәм Q Эрмит операторларын табыў ҳәм бул операторлардың $[P,Q]=i\hbar$ коммутаторын қанаатландырыўы, P ҳәм Q лардың функциясы болған H матрицасының диагоналлық болыўы керек. Егер бул матрицалар бундай формаға ийе болмаса, онда олардың диагоналлық формаға ийе болыўы ушын керек болатуғын S инвертациялайтуғын матрицаны барлық ўақытта табыўға болады (яғный $S^{-1}HS$ диагоналлық). Егер X берилген базиске салыстырғандағы матрица менен байланыслы болған меншикли кеңисликтиң векторы болса (алгебрадан матрицаның меншикли кеңислигиниң базиси матрицаны пайда ететуғын вектор-бағаналардың көплиги екенлиги белгили), онда меншикли мәнислердиң төмендегидей теңлемеси қанаатландырылады:

$$\sum_{n'} H_{nn'}X_{n'} = \lambda X_{n}, \qquad n = 1,2,\ldots \tag{13.a}$$

Бул теңликте $H_{nn'}$ - матрицаның, ал $X_{n'}$ - вектор-бағананың қураўшылары. Бундай контекстте Гейзенберг теориясы түсиникли ҳәм дурыслығы жақсы дәлилленеди. Толқынлық механикада болса, буның орнына тийкарғы мәселе төмендегидей дифференциаллық теңлеме менен бериледи:

$$H\psi(q_1,q_2,\ldots,q_k) = \lambda\psi(q_1,q_2,\ldots,q_k). \tag{13.b}$$

Оның структурасы (13.a) ның структурасы менен бирдей. Бирақ, еки теңлеме де меншикли мәнислер теңлемелери болып табылатуғын болса да, (13.a) теңлеме сызықлы алгебралық теңлеме болып табылады, ал екинши теңлеме болса дифференциаллық теңлеме. Енди биз олардың математикалық эквивалентлигин табайық (егер усындай эквивалентлик ҳақыйқатында да бар болса). Оның ушын (13.a) дағы n индексиниң (13.b) дағы H операторы менен байланыслы болған Ω конфигурациялық кеңисликтиң өлшемлерине уқсас екенлигин атап өтемиз. Сонлықтан, $\sum_n$ қосылыўшыларының Ω кеңислигинде есапланған көлемлик интеграл менен уқсас:

$$\sum_{n'} \ldots \leftrightarrow \int_{\Omega} dq_1' \ldots dq_k' = \int_{\Omega} dV.$$

Бул қатнастан

$$X_n \leftrightarrow H_{nn'}X_{n'},$$

$$\psi(q_1,q_2,\ldots,q_k) \leftrightarrow \int_{\Omega} H\,(q_1,\ldots,q_k;\ q_1'\ldots q_k')dq_1' \ldots dq_k'$$

қатнаслары да келип шығады. Буннан кейин меншикли мәнислер ҳаққындағы (13.a) мәселесин былайынша жаза аламыз:

$$\int_{\Omega} H\,(q_1,\ldots,q_k;\ q_1'\ldots q_k')dq_1' \ldots dq_k' = \lambda\psi(q_1,q_2,\ldots,q_k). \tag{13.c}$$

Сонлықтан, алгебралық теңлемеден баслап биз интеграллық теңлемеге ийе болдық. Ол (13.b) теңлеме менен улыўмалық ҳеш нәрсеге ийе емес. Бирақ, улыўмалық функциялар областында (бундай областқа Дирак областы да киреди) барлық ўақытта дифференциаллық операторды

$$\frac{\partial^n}{\partial q^n}\psi(q) = \frac{\partial^n}{\partial q^n}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\delta(q-q')\psi(q')dq' =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^n}{\partial q^n}\delta(q-q')\psi(q')dq' = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial^n}{\partial q^n}\delta^{(n)}(q-q')\psi(q')dq'$$

интегралы түринде көрсетиўге болады. Туўынды алыў интеграл астында жүзеге келтирилген, себеби ол интеграллаў өзгериўшисине тәсир етпейди. Усындай көз-қарасты пайдаланып, биз (13.c) теңлемесин былайынша жаза аламыз:

$$\int\limits_{\Omega} H\,(q_1,\dots,q_k;\ q_1',\dots,q_k')\psi(q_1',\dots,q_k')dq_1' \dots\ dq_k' =$$

$$= \int\limits_{-\infty}^{\infty}\dots\int\limits_{-\infty}^{\infty}\delta(q_1-q_1')\dots\delta(q_k-q_k')\psi\,(q_1',\dots,q_k')dq_1'\dots\ dq_k' = \tag{7.9.d}$$

$$= \lambda\psi(q_1,q_2,\dots,q_k).$$

X_n векторына ψ векторлық функциясы, $\sum_{n'}$ қосылыўшысына $\int_\Omega\ dq_1' \dots dq_k'$ интегралы, суммалаў индексине $q_1' \dots q_k'$ координаталары, n индексине $q_1,\dots,q_k$ координаталары, ал матрица элементлери $H_{nn'}$ ке $\delta(q_1-q_1')\dots\delta(q_k-q_k')$ ядросы сәйкес келеди деп жуўмақ шығарамыз. Усындай жоллар менен еки теорияның математикалық эквивалентлиги дәлилленеди.

* * *

Формализмлердиң эквивалентлигине ҳәм оның Гамильтон механикасы менен тығыз байланысына қарамастан, физиклер тәрепинен матрицалық механика ҳеш қашан системалы түрде пайдаланылған жоқ. Ал Шредингер формализмин физиклер системалы түрде пайдаланды. Бул физиклердиң мәселени әдетте дифференциаллық таллаўдың жәрдеминде шешиўди артықмаш көретуғынлығы ҳәм XX әсирде математикалық таллаўдың күшли раўажланғанлығы менен байланыслы. Гейзенберг теориясы электронды кеңисликте ҳәм ўақыт бойынша локализациялаўдан бас тартады ҳәм дыққатты өлшенетуғын шамаларға аўдарады. Паули сыяқлы оғада ақыллы адамның водород атомы проблемасын матрицалық механиканың жәрдеминде шешиў ушын жүдә аўыр жумысты орынлағаны тосыннан емес [27].

14. Релятивистлик квантлық теория

Жоқарыда келтирилген квантлық теория релятивистлик емес жақынласыўға тийкарланған. Себеби әсиресе жеңил атомлардағы электронлардың тезликлери жақтылықтың тезлигинен киши. Мысалы, егер водород атомының Бор моделин қарайтуғын болсақ, онда электронның тезлиги былайынша анықланады:

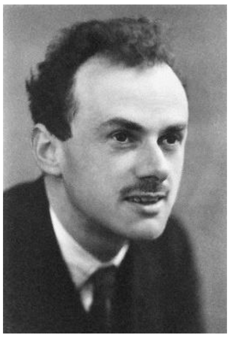
$$v = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}.$$

Электронды тийкарғы ҳалда турыпты деп есапласақ, онда оның тезлигиниң $2{,}18 \cdot 10^6$ м/с, яғный жақтылықтың тезлигиниң шама менен 1/137 бөлимине тең екенлигин көремиз. Сонлықтан релятивистлик емес квантлық механиканың экспериментлердиң нәтийжелери менен жақсы сәйкес келетуғын нәтийжелерди беретуғынлығы тосыннан болған жағдай емес. Бундай жағдайда мынадай сораўдың пайда болыўы тәбиийий: егер қолымызда бар болған моделлер жақсы нәтийжелерди беретуғын болса, онда математикалық формализмди оннан да қурамаластырыўдың қандай зәрүрлиги бар? Биз алдымызда элегант ҳәм қуўатлы формализм менен тәрийипленетуғын релятивистлик жақынласыўдың спинниң бар екенлигин ҳәм оннан келип шығатуғын қубылысларды болжаўға алып келетуғынлығын көремиз [28]. Мысалы, водород атомындағы электрон ушын релятивистлик теңлемени келтирип шығарыў спин-орбиталлық байланыс операторы болған $\hat{J}^2$ операторын тиккелей есаплаўға мүмкиншилик береди. Биз Шредингер теориясында зәрүрли болған қандай да бир шаманы анықлаў ушын ықтыярлы ямаса импровизацияланған шешимди қабыл етиўдиң зәрүрли екенлигин атап өтемиз. Ал Дирак теориясында бундай ҳәрекет етиўдиң кереги жоқ. Басқа сөзлер менен айтқанда, релятивистлик теңлемелер экспериментлер менен сәйкес келетуғын теориялық нәтийжелерге қандай да бир қосымша гипотезаларсыз алып келетуғынлығын тастыйықлаўға болады. Усының менен бирге квантлық механикаға салыстырмалық теориясын қосыў XX әсирдиң биринши ярымындағы физиклерге майданның квантлық теориясы деп аталатуғын илимниң жаңа областын пайда етиўге алып келди.

Тарийхый жақтан салыстырмалық теориясын квантлық механикаға биринши қолланыў П.А.М. Дираққа тийисли. Ол 1928-жылы өзиниң атақлы теңлемесин еркин электрон ҳәм водород атомы ушын қолланды. Бул водород атомының жуқа спектрин дурыс түсиндириўге ҳәм бар екенлиги бир неше жылдан кейин тестыйықланған антибөлекшелердиң бар екенлигин болжаўға алып келди. Дирак теңлемесиниң ең қызықлы аспекти тийкарынан математикалық жақынласыў тийкарында келтирип шығарылды. Бул алгебраның ямаса таллаўдың инструментлери болған абстракт аппарат әмелий жақтан қолланыла ма ямаса қолланылмай ма, оннан ғәрезсиз ислеп шығылған еди. Дирак тәбиятты көбинесе абстракт ҳәм ең сулыўырақ теңлемелердиң жәрдеминде тәрийиплеўге ҳәм оны түсиндириўге болатуғынлығын аңғарды.

14.1. Дирак теңлемеси

Бул бөлимдеги физикалық-математикалық таллаў Дирактың релятивистлик электронлық теңлемени келтирип шығарыў бойынша жумысынан алынды.



П.А.М. Дирак

Барлық координаталар симметриялы болған релятивистлик теңлемени излеймиз. Соның менен бирге теңлемениң биринши тәртипли болыўы керек (бул Клейн-Гордонның релятивистлик теңлемесиндегидей терис мәнисли итималлықтың тығызлығын алыўдан қутылыў ушын зәрүрли) [29]. Егер бизге ўақыт бойынша биринши туўынды керек болса, онда буннан координаталар бойынша да туўындының биринши тәртипли болатуғынлығы келип шығады. Бул Дирак теңлемесин алыў ушын басланғыш ноқат болып табылады ҳәм ол Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлық шәртинен келип шығады. Еркин электрон ушын теңлемени былайынша жазыўға болады:

$$\sum_{k=0}^{3} \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} |\psi\rangle = 0. \tag{14.1.a}$$

x^0 координатасы ct түринде жазылады ҳәм соған байланыслы қосылыўшылардың биринши ағзасын $\alpha_0 \frac{\partial}{\partial ct}$ түринде жазыўға болады. Егер $\alpha_0 = 1$ теңлиги орынлы болса, онда (14.1.a) мынадай түрге енеди:

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{k=0}^{3} \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k}\right) |\psi\rangle = 0. \tag{14.1.b}$$

Косылыўшылардың барлығының өлшем бирликлериниң кери узынлық ҳәм $\hat{p}$ төрт-вектордың операторлық қураўшыларына пропорционал екенлигин екенлигин аңғарамыз:

$$\hat{p} = -i\hbar \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right).$$

α_k коэффициентлери санлар болып табылады ҳәм кеңисликлик-ўақытлық координаталардан да, импульстен де ғәрезли емес. Сонлықтан бул коэффициентлер координаталар x^k менен де, импульс $\hat{p}$ пенен де коммутацияланады.

Принципинде (14.1.b) теңлеме бирлиги кери узынлық болған санлық константаға да ийе бола алады. Биз излейтуғын релятивистлик теңлеменың қурамалы болыўының мүмкин екенлигине байланыслы, биз турақлы ағзаны $\frac{imc}{\hbar}\beta$ түринде жазамыз, β арқалы санлық коэффициент белгиленген. (14.1.b) теңлемени былайынша толық формада жазыўға болады:

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{k=1}^{3} \alpha_k \frac{\partial}{\partial x^k} + \frac{imc}{\hbar}\beta\right) |\psi\rangle = 0. \tag{14.1.c}$$

β санлы коэффициент болғанлықтан, оның x^k ҳәм $\hat{p}$ менен коммутацияланыўы керек. Көринип турғанындай, α_k ҳәм β санлы коэффициентлери электронның релятивистлик таллаўда пайда болмайтуғын жаңа еркинлик дәрежесин тәрийиплеўи керек. (14.1.c) ның еки ағзасын да $\frac{\hbar}{i} = -i\hbar$ қа көбейтип, мынаны аламыз:

$$\left(-\frac{1}{c}i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \sum_{k=1}^{3}\alpha_k i\hbar\frac{\partial}{\partial x^k} + \beta mc\right)|\psi\rangle = 0. \tag{14.1.d}$$

Қосылыўшылардың биринши ағзасының төрт-векторлық импульс екенлиги анық:

$$(p_0 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta mc)|\psi\rangle = 0. \tag{14.1.d'}$$

Дирак меншикли функция $|\psi\rangle$ ны үлкен санлы қураўшыларға ийе вектор сыпатында қараўды усынды; бул гипотеза бойынша α_k менен β коэффицентлери өлшемлери $|\psi\rangle$ векторының өлшемлериндей болған квадрат матрицалар болып табылады. (14.1.d) теңлемени былайынша жазыўға болады:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \left(-\sum_{k=1}^{3}c\alpha_k i\hbar\frac{\partial}{\partial x^k} + \beta mc^2\right)|\psi\rangle. \tag{14.1.e}$$

Бул ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемесин еске түсиреди, бул теңлемеде Гамильтон операторы мынадай түрге ийе:

$$H = -\sum_{k=1}^{3}c\alpha_k i\hbar\frac{\partial}{\partial x^k} + \beta mc^2. \tag{14.1.f}$$

(14.1.e) теңлемесиниң релятивистлик екенлигине исениў ушын энергия-импульс қатнасын қанаатландырыў керек:

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 - p_1^2 - p_2^2 - p_3^2 = m^2c^2.$$

Бул теңликте $\left(\frac{E}{c}\right)^2$ ағза биринши p_0^2 шамасының квадраты болып табылады. Оның ушын (14.1.d') теңлемесиниң еки ағзасын да $(p_0 - \alpha_1 p_1 - \alpha_2 p_2 - \alpha_3 p_3 - \beta mc)$ операторына көбейтемиз ҳәм α_k менен β лар матрицалар болғанлықтан, биз көбейтиў тәртибин бузбаўымыз керек. Оның үстине, биз α_k менен β шамалары жаңа еркинлик дәрежесин беретуғын болғанлықтан, бул матрицалардың эрмитлик болыўы тийис. Көбейтиўди орынлап, биз мынаны аламыз:

$$\begin{gathered}
(p_0 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta mc)(p_0 - \alpha_1 p_1 - \\
-\alpha_2 p_2 - \alpha_3 p_3 - \beta mc)|\psi\rangle = 0, \\
\{p_0^2 - [\alpha_1 p_1^2 + \alpha_2 p_2^2 + \alpha_1 p_3^2 + \\
+(\alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1)p_1 p_2 + (\alpha_1\alpha_3 + \alpha_3\alpha_1)p_1 p_3 + \\
+(\alpha_2\alpha_3 + \alpha_3\alpha_2)p_2 p_3 + (\alpha_1\beta + \beta\alpha_1)p_1 mc + \\
+(\alpha_2\beta + \beta\alpha_2)p_2 mc + (\alpha_3\beta + \beta\alpha_3)p_3 mc] - \\
-\beta^2 m^2 c^2\}|\psi\rangle = 0.
\end{gathered} \tag{14.1.g}$$

(14.1.g) теңлеме екинши тәртипли дифференциаллық теңлемелер системасы болып табылады. Егер ол

$$\begin{cases} \alpha_k\alpha_l + \alpha_l\alpha_k = 2\delta_{kl}, \\ \alpha_k\beta + \beta\alpha_k = 0, \\ (\alpha_k)^2 = \beta^2 = \mathbb{1} \end{cases}$$

шәртин қанаатландыратуғын болса Клейн-Гордон теңлемесине алып келинеди. Бул аңлатпаларда k ҳәм l индекслери (14.1.g) аңлатпада ушырасатуғын барлық орынларға қойыўларға қатнасады. (14.1.h) қатнаслары α_k менен β матрицаларының антикоммутацияланатуғынлығын, ал олардың квадратының бирлик матрица екенлигин көрсетеди. Таллаўды даўам етпестен бурын (14.1.d) теңлемесиниң $|\psi\rangle$ шешимлериниң (14.1.g) ның да шешимлери екенлигин, бирақ керисиниң барлық ўақытта дурыс бола бермейтуғынлығын анықлап алыў керек. Дирак σ_x, σ_y ҳәм σ_z Паули матрицаларын пайдаланып

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Бул матрицалардың барлығы эрмитлик болып табылады ҳәм (14.1.h) тың қәсийетлерин тастыйықлайды. Солай етип, Дирактың жумысында қандай да бир жаңа гипотезаны киргизбей-ақ спинди алыўға мүмкиншилик береди екен. Буннан спинниң электронның релятивистлик қәсийети менен байланыслы болған физикалық қәсийети екенлиги келип шығады. Бирақ атомдагы электронлардың көпшилиги жақтылықтың тезлигинен киши тезликке ийе, бирақ соған қарамастан олар барлық ўақытта спинге ийе болады. Ҳақыйқатында да, спинниң тәбияты ҳәзирге шекем белгисиз; спин электронның (ҳәм басқа да элементар бөлекшелердиң) ажыратыўға болмайтуғын қәсийети болып табылады. Ал бул жағдай оның тезликтен ғәрезсиз екенлигин көрсетеди.

α_k менен β лар 4х4 матрицалар болып табылады, бул релятивистлик кеңисликтиң төрт өлшемге ийе екенлиги менен байланыслы. Сонлықтан (14.1.d) төрт дифференциаллық теңлемелер системасына эквивалент, олардың ҳәр қайсысы $|\psi\rangle$ векторының бир қураўшысын есаплаўға мүмкиншилик береди.

(14.1.d) теңлемени еки ағзаны β матрицаға көбейтиў жолы менен әпиўайыластырыўға болады:

$$\left(-\frac{1}{c}\beta\frac{\partial}{\partial t} - \sum_{k=1}^{3}\alpha_k\beta\frac{\partial}{\partial x^k} + \frac{\beta^2 mc}{i\hbar}\right)|\psi\rangle = 0.$$

$\beta^2 = \mathbb{1}$ екенлигин ҳәм оны $\gamma^0 = \beta$ ҳәм $\alpha_k\beta = \gamma^k$ ға қойып, мынаған ийе боламыз:

$$\left(-\frac{1}{c}\gamma^0\frac{\partial}{\partial t} - \sum_{k=1}^{3}\gamma^k\frac{\partial}{\partial x^k} + \frac{mc}{i\hbar}\mathbb{1}\right)|\psi\rangle = 0. \qquad (14.1.i)$$

Егер γ^0 матрицасы эрмитлик болатуғын болса, онда γ^k матрицасының антиэрмитлик болатуғынлығын атап өтемиз:

$$(\gamma^k)^\dagger = -\gamma^k,$$
$$(\gamma^k)^2 = \mathbb{1}.$$

Усының менен бирге, бул матрицалар төмендегидей коммутациялық қатнасларды қанаатландырады:

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}\mathbb{1}.$$

(14.1.i) теңлемени былайынша қайтадан жазыўға болады:

$$\left(\sum_{k=1}^{3} i\hbar\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} + mc\mathbb{1}\right)|\psi\rangle = 0.$$

$\frac{\partial}{\partial x^{\mu}}$ операторын ∂_{μ} символы менен белгилеймиз ҳәм Дирак теңлемесиниң ең ақырғы ҳәм ең компактлы формасына келемиз:

$$\left(\gamma^{\mu}p_{\mu} - mc\mathbb{1}\right)|\psi\rangle = \left(\gamma_{\mu}p^{\mu} - mc\mathbb{1}\right)|\psi\rangle = 0. \quad (14.1.l)$$

Бул аңлатпада тензорлық көбеймениң екеўи де көрсетилген (γ ның контрвариантлық қураўшылары p ның ковариантлық қураўшыларына көбейтиледи ҳәм керисинше). Биз $|\psi\rangle$ меншикли функциясының төрт векторлық екенлигин дәлилледик, оның қураўшыларының комплексли болыўы мүмкин. Демек, биз итималлық тығызлығы функциясын былайынша анықлай аламыз:

$$\rho = \langle\psi|\psi\rangle = \psi^{\dagger}\psi.$$

Солай етип, функцияның мәниси барлық ўақытта анықланған ҳәм оң. Оның үстине итималлықлар ағысы $\boldsymbol{J}$

$$J^{k} = c\psi^{\dagger}\alpha^{k}\psi \quad (14.1.m)$$

түринде берилетуғын төрт қураўшыға ийе болады. Бул вектордың қураўшыларын α^{k} ның орнына γ^{k} матрицасын пайдаланып жазыўға болады. Оның ушын

$$\gamma^{k} = \beta\alpha^{k}$$

теңлигиниң орынлы екенлигин еске түсиремиз ҳәм бул аңлатпанаң еки тәрепин β ға көбестсек бизге

$$\beta\gamma^{k} = \beta^{2}\alpha^{k} = \alpha^{k}$$

теңлигин береди. Бул нәтийжени (14.1.m) аңлатпадағы шама менен алмастырып, мынаны аламыз:

$$J^{k} = c\psi^{\dagger}\beta\gamma^{k}\psi = c\psi^{\dagger}\gamma^{0}\gamma^{k}\psi = \bar{\psi}\gamma^{k}\psi. \quad (14.1.n)$$

Бул аңлатпадағы екинши ағзадағы $k = 1, 2, 3, \ldots$, $\bar{\psi}$ арқалы ψ ге комплексли түйинлес оператор белгиленген.

(14.1.n) теңлеме кеңисликлик-ўақытлық координаталарға қарата симметриялы ҳәм бул шәрт теңлемениң релятивистлик болыўы ушын зәрүрли. Бирақ, биз оның Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант екенлигин дәлиллеўимиз керек. Демек, биз Диракtың матрицаларының Лоренц түрлендириўлеринде өзгериссиз қалатуғынлығын дәлиллеўимиз керек. Түрлердирилген $|\psi\rangle$ векторын биз ψ' арқалы белгилеймиз ҳәм ол ψ диң сызықлы түрлендирилиўи болып табылады:

$$\psi' = S\psi.$$

Соның менен бирге түрлендириў матрицасы S тиң мына шәртти қанаатландырыўы керек:

$$S^{-1}\gamma^{k}S = \Lambda_{\mu}^{k}\gamma^{\mu}.$$

Бул теңликте Λ_{μ}^{k} - Лоренц түрлендириўине сәйкес келетуғын тензор:

$$\Lambda_{\mu}^{k} = \begin{pmatrix} \Gamma & \Gamma B & 0 & 1 \\ \Gamma B & \Gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Бул аңлатпада $\Gamma = (1 - B^{2})^{-1/2}$ ҳәм $B = v/c$ арқалы K' есаплаў системасының K есаплаў системасына салыстырғандағы салыстырмалы тезлиги белгиленген. Бул мартица бир есаплаў системасынан екинши есаплаў системасына өткендеги кеңисликлик-ўақытлық координаталарды түрлендиреди:

$$x^k = \Lambda^k_\mu x^\mu.$$

Комплексли-түйинлес $|\psi\rangle$ вектор былайынша түрдлендирилеледи:

$$\overline{\psi'} = \bar{\psi} S^{-1}.$$

Енди биз итималлық ағысының Лоренц түрлердириўлеринде қандай өзгерислерге ушырайтуғынын баҳалаймыз:

$$(J^k)' = \overline{\psi'}\gamma^k\psi' = \bar{\psi}S^{-1}\gamma^k S\psi = \bar{\psi}\Lambda^k_\mu\gamma^\mu\psi = \Lambda^k_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu\psi = \Lambda^k_\mu J^\mu.$$

Бул оның Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығын аңғартады. Биз еркин электрон ушын жазылған Дирак теңлемесиниң релятивистлик инвариантлы екенлигин дәлилледик.

Бир $|\psi\rangle$ векторының өлшемлери ушын өткерилген алдыңғы таллаўларға қайтамыз; Дирактың матрицалары 4х4 өлшемге ийе болғанлықтан ол төрт қураўшыға ийе болады. Бирақ, биз электронның спининиң тек еки квантланған қураўшыға ийе екенлигин билемиз. Ондай болса, неликтен $|\psi\rangle$ еки қураўшыға емес, ал төрт қураўшыға ийе? $|\psi\rangle$ векторының физикалық жақтан бар болыўына руқсат етилмейтуғын қандай да бир қураўшылары бар ма? Бул сораўларға жуўаплар келеси бөлимде бериледи. Бул бөлимде Дирак теңлемесиниң қалайынша жаңа бөлекшениң (позитронның) бар екенлигин болжай алғанлығы көрсетиледи. Бул бөлекше Дирактың жумысы баспада жарық көргеннен кейин бир неше жылдан кейин ашылды.

Төрт векторы $|\psi\rangle$ векторын спинор деп атайды. Себеби ол бөлекшениң ярым пүтин спини ҳаққындағы информацияға ийе вектор болып табылады; бирақ оны Минковский кеңислигиндеги вектор менен алжастырмаў керек (бул вектор Лоренц түрлендириўлерин сәйкес түрлендирилмейди). Усы себепке байланыслы Дирактың теңлемесин әдетте спинорлық теңлеме деп атайды.

14.2. Еркин релятивистлик электрон

(14.1.d) теңлеме еркин электронның релятивистлик қәсийетин тәрийиплейди. Оның шешими қураўшылары

$$\psi_j = u_j(\boldsymbol{p})\exp\left\{-i\,\frac{p\cdot x}{\hbar}\right\}$$

аңлатпасының жәрдеминде берилетуғын тегис толқынлар болып табылады.

(14.1.d) теңлемеде $|\psi\rangle$ векторының вектор-бағанасын алмастырып ҳәм α_k менен β матрицаларының айқын формаларын пайдаланып төрт сызықлы дифференциаллық теңлемелердиң системасын аламыз. Бул системадағы мына функциялар белгисиз шамалар болып табылады:

$$\Bigg[-i\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}-$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_2}\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix}-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_3}\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{pmatrix}+$$

$$+mc\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\Bigg]\begin{pmatrix}u_0(\boldsymbol{p})e^{-i\frac{p\cdot x}{\hbar}}\\ u_1(\boldsymbol{p})e^{-i\frac{p\cdot x}{\hbar}}\\ u_2(\boldsymbol{p})e^{-i\frac{p\cdot x}{\hbar}}\\ u_3(\boldsymbol{p})e^{-i\frac{p\cdot x}{\hbar}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\end{pmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix}-i\hbar\partial_{x_0} & 0 & -i\hbar\partial_{x_3} & (-i\hbar\partial_{x_1}-i\hbar\partial_{x_2})\\ 0 & (-i\hbar\partial_{x_0}+mc) & (-i\hbar\partial_{x_1}+i\hbar\partial_{x_2}) & -i\hbar\partial_{x_3}\\ -i\hbar\partial_{x_3} & (-i\hbar\partial_{x_0}-i\hbar\partial_{x_2}) & (-i\hbar\partial_{x_0}-mc) & 0\\ (-i\hbar\partial_{x_1}+i\hbar\partial_{x_2}) & -i\hbar\partial_{x_3} & 0 & (-i\hbar\partial_{x_0}-mc)\end{bmatrix}\times$$

$$\times\begin{bmatrix}u_0(\boldsymbol{p})\\ u_1(\boldsymbol{p})\\ u_2(\boldsymbol{p})\\ u_3(\boldsymbol{p})\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\end{bmatrix}.$$

$$\begin{cases}-i\hbar\partial_{x_0}u_0(\boldsymbol{p})-i\hbar\partial_{x_0}u_2(\boldsymbol{p})+(i\hbar\partial_{x_1}-i\hbar\partial_{x_2})u_3(\boldsymbol{p})=0,\\ (-i\hbar\partial_{x_0}+mc)u_1(\boldsymbol{p})+(i\hbar\partial_{x_1}+i\hbar\partial_{x_2})u_2(\boldsymbol{p})+i\hbar\partial_{x_3}u_3(\boldsymbol{p})=0,\\ -i\hbar\partial_{x_3}u_0(\boldsymbol{p})+(-i\hbar\partial_{x_0}-i\hbar\partial_{x_2})u_1(\boldsymbol{p})+(i\hbar\partial_{x_0}-mc)u_2(\boldsymbol{p})=0,\\ (-i\hbar\partial_{x_1}+i\hbar\partial_{x_2})u_0(\boldsymbol{p})+i\hbar\partial_{x_3}u_1(\boldsymbol{p})+(-i\hbar\partial_{x_0}-mc)u_3(\boldsymbol{p})=0.\end{cases}\qquad(14.2.a)$$

Бул аңлатпаларда кеңисликлик-ўақытлық координаталар бойынша дара туўындылар ∂_{x_i} арқалы белгиленген.

Егер коэффициентлер матрицасының анықлаўшысы нолге тең болса (14.2.a) сызықлы теңлемелер системасы қурамалы шешимге ийе. Бул анықлаўшының, яғный релятивистлик энергияның мәниси мынаған тең:

$$E^2-p^2c^2-m^2c^4=0.\qquad(14.2.b)$$

(14.2.b) ның түбирлери мынаған тең:

$$E=\pm\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}.$$

Күткенимиздей, еркин электронның энергиясы квантланбаған, себеби импульс қәлеген мәниске ийе бола алады. Бирақ, релятивистлик пикирлеў энергияның терис мәниске де ийе бола алатуғынлығын көрсетеди. Бул нәтийже Дирак теңлемеси тәрепинен киргизилген жаңалық болып табылады. (14.2.a) системасының оң энергияға ийе шешими де бар деп болжайық. Релятивистлик гамильтониан (14.1.f) түринде жазылады. Оны компактлы түрде былайынша жазыўға болады:

$$H=c\alpha\cdot\frac{\hbar}{i}\nabla+\beta mc^2=c\alpha\cdot\boldsymbol{p}+\beta mc^2.$$

$|\psi\rangle$ векторы (14.1.d) теңлемениң шешими болғанлықтан, $u_+(\boldsymbol{p})$ функциясы Гамильтон операторының меншикли векторы болып табылады:

$$(c\alpha\cdot\boldsymbol{p}+\beta mc^2)u_+(\boldsymbol{p})=E(\boldsymbol{p})u_+(\boldsymbol{p}).\qquad(4.12.c)$$

Бул меншикли векторды былайынша жазыўға болады:

$$u_+(\boldsymbol{p})=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix}.$$

Бундай жағдайда (14.2.c) еки дифференциаллық теңлемелер системасына айланады:

$$\begin{cases}c\sigma\cdot\boldsymbol{p}u_2+mc^2u_1=E(\boldsymbol{p})u_1,\\ c\sigma\cdot\boldsymbol{p}u_1+mc^2u_2=E(\boldsymbol{p})u_2.\end{cases}\qquad(14.2.d)$$

Бул теңликте σ арқалы Паули матрицалары белгиленген. (14.2.d) ның екинши теңлемесинен мынаны аламыз:

$$u_2 = c\frac{\sigma \cdot \boldsymbol{p}}{E(\boldsymbol{p}) + mc^2}u_1. \qquad (14.2.d)$$

Сонлықтан u_1 шамасын ықтыярлы түрде бериў сәйкес u_2 функциясын алыўға мүмкиншилик береди. (14.2.d) теңлеме $\boldsymbol{p}$ импульстиң ҳәр бир мәниси ушын сызықлы ғәрезсиз шешимлерди береди. u_1 ди былайынша жазып

$$u_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ямаса } u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

биз меншикли векторлардың айқын формасын аламыз:

$$u_+^{(1)}(\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ c\dfrac{\sigma \cdot \boldsymbol{p}}{E(\boldsymbol{p}) + mc^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad u_+^{(2)}(\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ c\dfrac{\sigma \cdot \boldsymbol{p}}{E(\boldsymbol{p}) + mc^2} \end{pmatrix}.$$

Бул еки векторды $u^*u = 1$ шәртиниң тийкарында нормировкалаў керек. Релятивистлик емес шекте $E(\boldsymbol{p})$ ның шамасы mc^2 тың шамасына салыстырғанда киши. Сонлықтан вектордың $c\frac{\sigma \cdot \boldsymbol{p}}{E(\boldsymbol{p})+mc^2}$ қураўшысын $\frac{\sigma \cdot \boldsymbol{p}}{mc}$ түринде аппроксимациялаўға болады. Бундай жағдайда (14.2.e) мынадай түрге енеди:

$$u_2 = \frac{\sigma \cdot \boldsymbol{p}}{mc}u_1.$$

(14.2.d) теңлемелер системасының биринши теңлемесиндеги u_2 қураўшысын алмастырып, биз мынаны аламыз:

$$c(\sigma \cdot \boldsymbol{p})\frac{\sigma \cdot \boldsymbol{p}}{2mc}u_1 + mc^2 u_1 = E(\boldsymbol{p})u_1,$$

$$\left[\frac{(\sigma \cdot \boldsymbol{p})^2}{mc} + mc^2 - E(\boldsymbol{p})\right]u_1 = 0.$$

Бул релятивистлик mc^2 ағзасы қосылған Шредингер теңлемеси болып табылады:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} + mc^2\right]u_1 = E(\boldsymbol{p})u_1.$$

Ҳақыйқатында $\sigma \cdot \boldsymbol{p}$ көбеймеси мынадай матрицалық суммаға сәйкес келеди:

$$\sum_{k=1}^{3} \sigma_k p^k = -i\hbar \sum_{k=1}^{3} \sigma_k \frac{\partial}{\partial x^k} = -ik \sum_{k=1}^{3} \sigma_k \partial_{x^k}.$$

Символларды Паули матрицаларының айқын түри менен алмастырып

$$-i\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\partial_x - i\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\partial_y - i\hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\partial_z =$$

$$= \begin{pmatrix} -i\hbar\partial_z & i\hbar\partial_y - i\hbar\partial_x \\ -i\hbar\partial_x - i\hbar\partial_y & i\hbar\partial_z \end{pmatrix}.$$

теңлигине ийе боламыз. Бундай жағдайда $(\sigma \cdot \boldsymbol{p})^2$ ағзасы диагоналлық матрица болып табылады. Оның кемеймейтуғын элементлери ∇^2 болып табылады. Бул жағдай жоқарыда жазылған Шредингер теңлемесиндеги кинетикалық энергия операторының формасының дурыс екенлигин дәлиллейди. Еркин электрон ушын Дирак теңлемесиниң шешимлери болған ҳәм оң энергияға ийе $|\psi\rangle$ меншикли функциялар мыналар болып табылады:

$$\begin{cases} |\psi\rangle^{(1)} = u_+^{(1)}(\boldsymbol{p}) \exp\left\{-i\hbar \dfrac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right\}, \\ |\psi\rangle^{(2)} = u_+^{(2)}(\boldsymbol{p}) \exp\left\{-i\hbar \dfrac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right\}. \end{cases} \qquad (4.2.f)$$

Олар спинлик ҳаллар ушын айрылады.

Енди терис энергиялы шешимди қараймыз. Дирак теңлемесиниң ҳәр қыйлы спинге сәйкес келетуғын, (14.2.f) теңликлери сыяқлы бир биринен ғәрезсиз еки сызықлы шешиминиң бар екенлигине аңсат исениўге болады. Бул шешимлерди әпиўайы интерпретацияланыўы ушын энергияның мәниси $-mc^2$ шамасына жақын болған релятивистлик емес шекти қараймыз ҳәм бул жақынласыўда мынаны аламыз:

$$u_2 = -\frac{\sigma\cdot\boldsymbol{p}}{mc}u_1.$$

Бул теңликте u_1 менен u_2 лер $u_-(\boldsymbol{p})$ векторының қураўшылары. Бундай жағдайда Шредингер теңлемеси мынадай түрге енеди:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + mc^2\right]u_1 = -|E(\boldsymbol{p})|u_1.$$

Бул теңлемеде массаның белгиси терис. Бундай жағдайда биз мынадай жағдайды тастыйықлай аламыз: релятивистлик электрон ушын терис масса ҳәм қарама-қарсы спинге ийе терис кинетикалық энергияға ийе еки ҳалдың болыўы мүмкин. Бул ҳаллар Паулидиң қадаған етиў принципине бағынады. Терис энергияға ийе ҳалдан басқа оң энергияға өтиў итималлығы нолге тең емес екенлигин биз дәлиллей аламыз. Сонлықтан бул әдеттегидей болмаған ҳаллар физикалық мәниске ийе. Терис энергияға ийе ҳалларды түсиндириў ушын Дирак тесиклер теориясының моделин усынды. Бул теория бойынша терис энергияға ийе ҳаллардың барлығы Паулидиң қадаған етиў принципине сәйкес толтырылған. Сонлықтан, бузылмаған ситуацияда терис ҳалдан оң ҳалға өтиўдиң жүзеге келиўи орын алмайды. Бул терис энергияға ийе болған ҳаллардың "көринбейтугынлығын" аңғартады. Сыртқы майданлардың тәсиринде бузылған бул жасырын ҳаллардың биринен бөлекшени екиншисине өткериўге болады. Бундай жағдайда электронның массасына, бирақ оң зарядқа ийе объект көринетуғын объектке айланады. 1928-жылы Дирак тәрепинен постулатланған бул бөлекшени ҳәзирги ўақытлары позитрон деп атайды ҳәм ол 1932-жылы космос нурларында Карл Андерсон тәрепинен табылды [30].

Еркин электрон ушын Дирак теңлемесиниң ең улыўмалық шешими оның оң ҳәм терис энергиялар ушын алынған барлық шешимлериниң суммасы болып табылады (релятивистлик толқын пакети). Сонлықтан, егер релятивистлик электронның орнын өлшесе (жоқары энергиялы фотонларды пайдаланып) электрон-позитрон жубының пайда болыўы мүмкин: бул қубылыс пүткиллей тосыннан жүзеге келетуғын қубылыс болып табылады ҳәм сонлықтан өлшеўдиң ўақтында қадағалаўға алынбайды. Солай етип қайсы бөлекшениң орны өлшенеди? деген сораў пайда болады. Квантлық бөлекшениң ийелеген орнын өлшеў ҳаққында гәп етиўдиң үлкен мәниске ийе болмайтуғынлығын аңсат түсиниўге болады. Электромагнит толқындағы фотонлар сыяқлы релятивистлик квантлық система шексиз көп еркинлик дәрежесине ийе болады. Енди биз массаның сақланыў нызамының да мәнисин жоғалтатуғынын ҳәм тек энергияның сақланыў нызамының ғана мәнисин сақлайтуғынлығын түсинемиз.

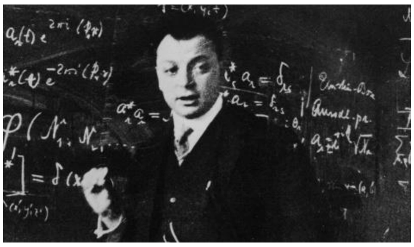
Ҳәзирги ўақытлардағы релятивистлик квантлық теорияда математикалық формализм болып пайда етиў-жоғалтыў операторы хызмет етеди. Бундай оператор менен биз матрицалық механика теориясында ушырастық.

Ең ақырында, мынадай жағдайды атап өтемиз: Дирак теңлемеси релятивистлик болғанлықтан, гамильтониан ўақыттан ғәрезли болады. Демек, биз Гейзенберг картинасында жумыс алып барамыз ҳәм барлық релятивистлик квантлық механика усы формализмге сәйкес раўажланады.

14.3. Электронның спини

Электронның спини квантлық механикадағы ең әҳмийетли ашылыўлардың бири болып табылады ҳәм атомлар менен молекулалардың көплеген қәсийетлерин түсиндире алады. Спинди үйрениўге ең үлкен үлес қосқан физик Паули болды. Ол XX әсирдиң биринши ярымында ҳәзирги ўақытлары "қадаған етиў" принципи деп аталатуғын принципти келтирип шығарды [31].

Вольфганг Паули



Жоқарыда дәлилленгендей, спин - электронның қәсийети менен байланыслы болған еркинлик дәрежеси. Принципинде, бул жағдай бөлекшениң спин деп аталатуғын әдеттегидей емес импульс моментиниң салдарынан жүзеге келген қозғалысы менен байланыслы бола алады. Бул шама қозғалыс турақлысы болып табылады ҳәм оның ушын ол мынадай коммутациялық қатнасты қанаатландырыўы керек:

$$[H, \hat{S}] = 0.$$

Электрон менен байланыслы болған мүйешлик момент операторын қараймыз:

$$\hat{L} = r \times \hat{p} = i\hbar \boldsymbol{r} \times \nabla.$$

Бул теңликтиң орынлы болыўы ушын релятивистлик еркин электронның гамильтонианы былайынша жазылыўы керек:

$$H = -i\hbar c\alpha\nabla + \beta mc^2.$$

$[H, \hat{S}]$ коммутаторының нолге тең емес екенлигине ҳәм мүйешлик моменттиң оның қозғалысының константасы болып табылмайтуғынына аңсат исениўге болады. Ал, егер биз $\hat{L}$ операторы менен $\hat{S} = \frac{1}{2}\hbar\sigma$ операторларының арасындағы сумманы алсақ, онда спин-орбиталық байланыс операторын аламыз:

$$\hat{J} = \hat{L} + \frac{1}{2}\hbar\sigma.$$

Бул оператор релятивистлик гамильтониан менен коммутацияланады. Бул оның қозғалыс константасы екенлигин дәлиллейди. Сонлықтан (14.1.d) Дирак теңлемеси ярым пүтин спинге ийе болған еркин бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплейди.

Биз z көшериниң бойындағы спинниң қураўшыларының $\hbar/2$ ҳәм -$\hbar/2$ түринде берилген еки дискрет мәнисти қабыл ете алатуғынын билемиз. Электрон менен позитрон ушын спинлик ҳаллар былайынша жазылады:

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle, \qquad \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

Ал, бөлекшениң улыўма ҳалы мынадай болады:

$$|\chi\rangle = c_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + c_2\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Бул аңлатпаларда c_1 менен c_2 - комплексли коэффициентлер болып табылады, олардың модулиниң квадраты бөлекшениң $\hbar/2$ ямаса -$\hbar/2$ ге тең z-қураўшыға ийе болыў итималлығының тығызлығын береди.

Турақлы магнит майданының түсирилиўи спинниң еки ҳалының бир биринен ажыралыўына алып келеди (Зееманның аномаллық эффекти). Бул жағдайда гамильтониан мынадай түрге ийе болады:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\hbar\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - eV - 2\mu_B\hat{S}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{\hbar}. \tag{14.3.a}$$

Бул аңлатпада V - бөлекшениң потенциаллық энергиясы, $\boldsymbol{B}$ - магнит майданы ҳәм $\boldsymbol{A}$ - векторлық потенциал. Олар мынадай шәртти қанаатландырады:

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times (\boldsymbol{A} + \nabla\Phi).$$

Бул теңликте Φ - скаляр майдан. (14.3.a) аңлатпасын квадратқа көтерип ҳәм векторлық потенциалдың квадратын есапқа алмай, мынаған ийе боламыз:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - eV - \mu_B\hat{L}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{\hbar} - 2\mu_B\hat{S}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{\hbar}. \tag{14.3.b}$$

Соңғы операторлық ағзадағы 2 саны эксперименталлық өлшеўлерде бар екенлиги анықланған симметрия факторы болып табылады. Ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемесин еске түсирип ҳәм меншикли функцияның еки қураўшыға ийе вектор екенлигин есапқа алып (бир релятивистлик емес жағдайды қарадық), биз Паули теңлемесине келемиз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - eV\mu_B\hat{L}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{\hbar} - 2\mu_B\hat{S}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{\hbar}\right)\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix}. \tag{14.3.c}$$

Бул теңлеме эксперименталлық нәтийжелерге тийкарланған ҳәм спин-орбиталлық байланысқа сәйкес келетуғын ағзаға ийе емес.

Енди биз тап сол нәтийжени басқа жол менен алыўға болатуғынлығын дәллилеўге умтыламыз. Оның ушын теорияны эксперименталлық нәтийжелерге жасалма түрде сәйкес келтириўге урынбаймыз. Оның ушын биз релятивистлик $H = c\alpha\cdot\boldsymbol{p} + \beta mc^2$гамильтониандағы импульсти төрт векторды $p^k - \frac{e}{c}A^k$ векторына алмастырамыз (бундай алмастырыўды минималлық алмастырыў деп атайды):

$$H = c\sum_{k=1}^{3}\alpha_k\left(p^k - \frac{e}{c}A^k\right) - eV + mc^2 =$$

$$= c\sum_{k=1}^{3}\alpha_k p^k + \beta mc^2 + c\sum_{k=1}^{3}\alpha_k\left(-\frac{e}{c}A^k\right) - eV =$$

$$= H_0 - c\sum_{k=1}^{3}\alpha_k A^k - eV = H_0 - e\sigma\cdot\boldsymbol{A} - eV.$$

Бул теңликлерде H_0 - релятивистлик өзгериске ушырамаған гамильтон операторы, ал V - электрлик скалярлық потенциал (бөлекшениң сыртқы электромагнит майдан менен тәсирлесетуғынын еске саламыз). Бундай жағдайда Дирак теңлемесин мына түрде жазамыз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \left[c\alpha\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+\beta mc^2 - eV\right]|\psi\rangle.$$

$|\psi\rangle$ векторын еки қураўшыдан пайда болған ҳәм $\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)=\pi$ теңлиги орынлы деп болжап α_k менен β арқалы матрицаның айкын формасын берип, мынадай теңлемеге келемиз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\binom{\varphi'}{\chi'} = c\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\binom{\varphi'}{\chi'} + mc^2\binom{\varphi'}{\chi'} - eV\binom{\varphi'}{\chi'}. \tag{14.3.d}$$

Шредингер картинасында меншикли функцияның эволюциясы $\exp\left\{-i\frac{Et}{\hbar}\right\}$ түринде бериледи, ал релятивистлик еркин электрон болған жағдайда бул көбейтиўши $\exp\left\{-i\frac{(mc^2+T)t}{\hbar}\right\}$ түрине енеди, T арқалы кинетикалық энергия белгиленген. Релятивистлик емес шекте массаға байланыслы болған энергиялық ағза басқалардан үлкен болады ҳәм бундай жағдайда мынадай аңлатпаны жазыўға болады:

$$\binom{\varphi'}{\chi'} = \exp\left\{-i\frac{(mc^2+T)t}{\hbar}\right\}\binom{\varphi}{\chi} \cong \exp\left\{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}\right\}\binom{\varphi}{\chi}. \tag{14.3.e}$$

Бул аңлатпада φ менен χ шамалары тек кеңисликлик ҳәм спинлик координаталардан ғәрезли болған векторлық функциялар. (14.3.d) теги (14.3.e) жуўықлаўын алмастырсақ, онда мынаған ийе боламыз:

$$\begin{gathered}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\exp\left\{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}\right\}\binom{\varphi}{\chi} = \\
= \left\{c\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\binom{\varphi}{\chi} + mc^2\binom{\varphi}{\chi} - eV\binom{\varphi}{\chi}\right\}\exp\left\{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}\right\}, \\
i\hbar\binom{\varphi}{\chi} + mc^2\binom{\varphi}{\chi} = c\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\binom{\chi}{\varphi} + mc^2\binom{\varphi}{-\chi} - eV\binom{\varphi}{\chi}. \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\binom{\varphi}{\chi} = c\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\binom{\chi}{\varphi} + mc^2\left[\binom{\varphi}{-\chi} - \binom{\varphi}{\chi}\right] - eV\binom{\varphi}{\chi}, \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\binom{\varphi}{\chi} = c\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\binom{\chi}{\varphi} - 2mc^2\left[\binom{0}{\chi}\right] - eV\binom{\varphi}{\chi}.
\end{gathered} \tag{14.3.f}$$

(14.3.f) бир бири менен байланысқан еки дифференциаллық теңлемелердиң системасы болып табылады. Биз олардың екиншисине дыққат аўдарамыз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi = c\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\varphi - 2mc^2\chi - eV\chi. \tag{14.3.g}$$

Егер биз функция ўақыттың өтиўи менен әстелик пенен өзгереди деп болжасақ, онда бул жағдай $\frac{\partial\chi}{\partial t}=0$ теңлигиниң орынланатуғынлығын, бөлекшениң электр потенциалы V менен тәсирлесиўи тап сол зарядланған бөлекше пайда еткен майданға салыстырғанда есапқа алмастай дәрежеде киши екенлигин аңлатады ҳәм бундай жағдайда (14.3.g) мынадай түрге енеди:

$$c\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\varphi-2mc^2\chi=0.$$

Оның жәрдеминде биз мынаны аламыз:

$$\chi=\frac{\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}}{2mc}\varphi.$$

Бул нәтийжени (14.3.f) тиң биринши теңлемесине қойсақ мынаған ийе боламыз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=c\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\frac{\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}}{2mc}\varphi-eV\varphi,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\frac{1}{2m}(\sigma\cdot\boldsymbol{\pi})^2\varphi-eV\varphi.$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\frac{1}{2m}\left[\sigma\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2\varphi-eV\varphi.$$

Енди $(\sigma\cdot\boldsymbol{\pi})^2$ көбеймесин есаплаймыз:

$$\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}\sigma\cdot\boldsymbol{\pi}=\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{\pi}+i\sigma(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\pi}).$$

$\boldsymbol{p}$ ны $-i\hbar\nabla$ ға алмастырып ҳәм соңғы аңлатпаны пайдаланып, биз мынаны аламыз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\frac{e\hbar}{2mc}\sigma\cdot\boldsymbol{B}-eV\right]\varphi.\qquad(14.3.h)$$

Бул аңлатпада квадрат ағзаларды есапқа алмаўға болады. Бор магнетонының (14.3.h) түринде ийе екенлигин еске түсиремиз. Сонлықтан мынадай аңлатпаны жаза аламыз:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\mu_B\sigma\cdot\boldsymbol{B}-eV\right]\varphi,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\mu_B\hat{S}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{\hbar}-eV\right]\varphi.\qquad(14.3.i)$$

(14.3.i) теңлеме Паулидиң (14.3.c) теңлемесине уқсас. φ - еки қураўшыға ийе вектор-бағана, олар спин координатасы ушын айрылады. (14.3.i) теңлемеде симметрия коэффициенти автомат түрде пайда болады. Биз Дирак теңлемеси ярым пүтин спинге ийе бөлекшелерди тәрийиплейтуғын Паули теңлемесин өзиниң ишине алады деген жуўмаққа келемиз. Әзви ҳәм бир текли магнит майданы бар болғанда (14.3.i) мынадай түрге енеди:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{e}{2mc}(\hat{L}+2\hat{S})\cdot\boldsymbol{B}\right]\varphi.$$

Бул теңлемеде спин-орбиталық байланыс операторы қатнасады.

14.4. Водород атомы ушын Дирак теориясы

Водород атомындағы электронның потенциаллық энергиясының айқын аңлатпасы болған $V(r)=-e^2/4\pi\varepsilon_0 r$ аңлатпасын пайдаланып (14.1.d) ны былайынша жазыўға болады:

$$\begin{cases}[E-V(r)-mc^2]\varphi=-i\hbar c\sigma\cdot\nabla\chi,\\ [E-V(r)+mc^2]\varphi=-i\hbar c\sigma\cdot\nabla\chi.\end{cases}\qquad(14.4.a)$$

Бул аңлатпада φ менен χ лар еки қураўшыға ийе вектор-бағаналар. Екинши теңлемеден χ ушын ҳәм оны $[E-V(r)-mc^2]^{-1}$ түринде өзгериўши бойынша дәрежели қатарға жайып, мынадай аңлатпаны аламыз:

$$\chi = -\frac{i\hbar}{2mc}\left[1-\frac{E-V(r)-mc^2}{2mc^2}+\cdots\right]\sigma\cdot\nabla\varphi.$$

$E-V(r)-mc^2$ ағзасының шамасы mc^2 шамасынан киши болғанлықтан биз он қосылыўшылардың екинши ағзасына шекемги дәлликти сақлап қалыўға сәйкес қысқарта аламыз. (14.4.a) ның биринши теңлемесиндеги жуўық векторлық функцияны алмастырып, мынаған ийе боламыз:

$$\left[E-V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{\hbar^2}{(2mc)^2}\big(\sigma\cdot\nabla\mathrm{V(r)}\big)\sigma\cdot\nabla+\frac{\hbar^2}{(2mc)^2}(E-V(r))\nabla^2\right]\varphi=0.$$

Квадрат қаўсырмадағы ағзаға былайынша қараўға болады:

$$\frac{\hbar^2}{(2mc)^2}\big(E-V(r)\big)\nabla^2=\frac{\hbar^2}{(2mc)^2}\big(\nabla^2V+2\nabla\mathrm{V}\cdot\nabla+\nabla^2(E-V)\big).$$

Бул аңлатпада $E-V$ айырмасы бөлекшениң $\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ операторы менен байланысқан кинетикалық энергиясы болып табылады. Сонлықтан, соңғы оператор мынадай түрге енеди:

$$\frac{\hbar^2}{(2mc)^2}\big(E-V(r)\big)\nabla^2=\frac{\hbar^2}{(2mc)^2}\left(\nabla^2V+2\nabla\mathrm{V}\cdot\nabla-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^4\right).$$

буннан алдыңғы теңлемедеги бул операторды алмастырамыз ҳәм мынаны аламыз:

$$\left[E-V+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+(\sigma\cdot\nabla V)\sigma\cdot\nabla+\frac{\hbar^2}{(2mc)^2}\nabla^2V+\frac{\hbar^2}{(2mc)^2}2\nabla\mathrm{V}\cdot\nabla-\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^4\right]\varphi=0.$$

$\nabla^2V=2\pi e^2\delta(r)/4\pi\varepsilon_0$ шамасының спин операторы $\hat{S}_k=\frac{1}{2}\hbar\sigma_k$ екенлигин, $\sigma_k^2=\mathbb{1}$, $\sigma_h\sigma_k=i\sigma_l=\sigma_k\sigma_h$, $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ лердиң (14.1.b) арқалы табылатуғынлығын есапқа алып ең ақырғы теңлемеге келемиз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V-\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^4+\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{L}\cdot\hat{S}+\frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\delta(r)\right]\varphi= \qquad (14.4.b)$$
$$=E\varphi.$$

(14.4.b) водород атомы ушын жазылған Дирак теңлемеси, ал квадрат қаўсырмадағы биринши еки ағза релятивистлик емес гамильтониан H_0 болып табылады. Оның шешимин $|n,l,m\rangle$. $-\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^4$ қосылыўшы электронның кинетикалық энергиясына қосылатуғын релятивистлик дүзетиў. $\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{L}\cdot\hat{S}$ қосылыўшысы спин-орбиталық тәсирлесиў энергиясының операторы. Айқын түрде ол былайынша жазылады:

$$\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{L}\cdot\hat{S}=\mu_B\frac{1}{mc^2e\hbar}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{L}\cdot\hat{S}.$$

Бул тәсирлесиўдиң бар екенлигиниң теорияны эксперименталлық нәтийжелерге сәйкеслендириў жолы менен емес, ал тек математикалық есаплаўлардан келип шығыўының таң қаларлық екенлигин және бир атап өтемиз. Ақырында, соңғы операторлық ағзаның Дарвинлик ағза екенлигин ҳәм тек меншикли функциялар ушын энергиялық үлести қосатуғынын, бул функциялар ушын итималлықтың тығызлығының ядрода нолге тең емес екенлигин еслетемиз ($l=0$ теңлиги орынланатуғын меншикли функциялар ҳаққында айтылып атыр).

(14.4.b) теңлемесин ҳәтте жуўық түрде шешиўдиң өзи де үлкен қыйыншылықларға алып келеди. Сонлықтан релятивистлик шешимлерди алып үш релятивистлик ағзаның күтилиўиниң орташа мәнислерин есаплаў қолайлы. Бул уйытқыў теориясында қолланылатуғын ең әпиўайы жақынласыў энергияға релятивистлик дүзетиўлердиң шамасының Шредингер энергиясынан киши болыўы менен ақланады. Биз Томасқа тийисли деп есапланатуғын $-\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^4$ ағзасынан баслаймыз:

$$E_T = \left\langle n,l,m \middle| \frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^4 \middle| n,l,m \right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left\langle n,l,m \middle| \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)^2 \middle| n,l,m \right\rangle$$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ кинетикалық энергия операторы болып табылады ҳәм ол релятивистлик емес гамильтониан H_0 ден алынады:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \ \rightarrow\ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = H_0 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}.$$

E_T ушын жазылған аңлатпаға бул шаманы былайынша киргиземиз:

$$E_T = -\frac{1}{2mc^2}\left\langle n,l,m \middle| \left(H_0 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)^2 \middle| n,l,m \right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left\langle n,l,m \middle| \left(H_0 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)\left(H_0 + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right) \middle| n,l,m \right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left\langle n,l,m \middle| H_0^2 + H_0\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}H_0 + \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{r^2} \middle| n,l,m \right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 2E_n\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left\langle n,l,m \middle| \frac{1}{n} \middle| n,l\,,m \right\rangle\right].$$

Квадрат қаўсырмалардағы еки интегралдың нәтийжелери мыналар:

$$\left\langle n,l,m \middle| \frac{1}{r} \middle| n,l\,,m \right\rangle = \frac{Z}{a_B n^2},$$

$$\left\langle n,l,m \middle| \frac{1}{r^2} \middle| n,l\,,m \right\rangle = \frac{Z^2}{a_B^2 n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)}.$$

Бул аңлатпада Z арқалы водород ушын 1 ге тең атомлық номер белгиленген. Соңғы аңлатпадағы бул интегралларды алмастырып, биз Томас энергиясы ушын жазылатуғын аңлатпаның ең соңғы формасын аламыз:

$$E_T = -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 2E_n\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_B n^2} + \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{a_B^2 n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)}\right] = \qquad (8.7.c)$$

$$= -E_n\frac{\alpha^2}{n^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right].$$

Бул аңлатпада $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c\hbar}$ арқалы жуқа структураның турақлысы белгиленген. Спин-орбиталық тәсирлесиўдиң энергиясы мынаны береди:

$$E_{SO} = -\frac{E_n}{2n}\alpha^2\frac{J(J+1) - l)l+1) - 3/4}{l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}. \qquad (14.4.d)$$

J арқалы $l + s$ аңлатпасы менен берилетуғын спин-орбиталық байланыстың квант саны белгиленген. Ең ақырында биз Дарвин энергиясын есаплаўымыз керек:

$$E_{Dw} = \left\langle n, l, m \left| \frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \delta(r) \right| n, l, m \right\rangle = \begin{cases} l \neq 0 \text{ болса } 0, \\ l = 0 \text{ болса} - E_n \dfrac{\alpha^2}{n}. \end{cases} \qquad (14.4.e)$$

Релятивистлик теорияға сәйкес, таза $|n, l, m\,\rangle$ ҳалы ушын (жуўық) толық энергия мынаған тең болады:

$$E_{rel} = E_n - E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left[\frac{3}{4} - \frac{n}{l + \frac{1}{2}} \right] -$$

$$- \frac{E_n}{2n} \alpha^2 \frac{J(J+1) - l(l+1) - 3/4}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} - E_n \frac{\alpha^2}{n} =$$

$$= \frac{E_n}{2n} \alpha^2 \left[\frac{1}{n} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l + \frac{1}{2}} \right) - \frac{1}{2} \frac{J(J+1) - l)l + 1) - 3/4}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} - 1 \right]. \qquad (14.4.f)$$

Егер $l \neq 0$ теңсизлиги орынланса квадрат қаўсырманың ишиндеги 1 жоғалады. Релятивистлик жақынласыў водород атомының ҳалларының энергияларының тек ғана бас квант саны n нен ғана емес (бундай жағдай релятивистлик емес квантлық механикада орын алады), ал l ҳәм s санларынан да ғәрезли екенлигин көрсетеди. Келеси бөлимде (14.4.f) аңлатпасының водород атомының спектриниң жуқа структурасын интерпретациялаў ушын фундаменталлық әҳмийетке ийе екенлигин көрсетеди.

E_n Томас энергиясының барлық ўақытта терис екенлигин атап өтиў керек (барлық электронлық ҳаллар байланысқан). Сонлықтан релятивистлик дүзетиў Шредингер теңлемеси бойынша есапланған кинетикалық энергияны стабилизациялайды. Спин-орбиталлық тәсирлесиў $l = 0$ ушын руқсат етилмейди (сфералық симметрияға ийе орбиталлар), сонлықтан релятивистлик емес энергияларды дүзетиў сфералық емес ҳаллар ушын ғана жүргизиледи. $s = \frac{1}{2}$ болған жағдайда E_{SO} оң, ал $s = -\frac{1}{2}$ теңлиги орынланған жағдайда E_{SO} ның мәниси терис екенлигин атап өтемиз. $l \neq 0$ болған жағдайда Дарвин энергиясы нолге тең, $l = 0$ теңлиги орын алған жағдайда оң мәниске ийе. Бул оның сфералық симметрияға ийе болған ҳаллардың орнықсыз болыўына тырысатугынлығын аңғартады. Ақырында биз (14.4.d) аңлатпада $l = 0$ болған жағдайда 0/0 анықсызлығы орын алады. Бирақ, алымдағы ҳәм бөлимдеги шексиз киши ағзалар мәниси бойынша бирдей тәртипке ийе, сонлықтан:

$$\lim_{l \to 0} \left[-\frac{E_n}{2n} \alpha^2 \frac{J(J+1) - l(l+1) - 3/4}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \right] = -\frac{E_n}{2n} \alpha^2.$$

Бул Дарвин энергиясының толық энергияға қосқан үлеси болады. Бул нәтийжениң физикалық мәниси мыналардан ибарат: s-типиндеги орбиталлар ушын спин-орбиталық дүзетиўдиң оң бөлими Дарвинниң дүзетиўиниң салдарынан жүзеге келеди.

14.5. Водород атомының жуқа структурасы

Кирисиў бөлиминде водородтың спектрин жоқары ажырата алатуғын әсбаплар менен изертлегенде сызықлардың басқа да, жуқарақ болған сызықлардан тура туғынлығын белгили болды. Спектрдиң бул структурасы жуқа структура бойынша анықланады ҳәм оның пайда болыўы тек релятивистлик квантлық теорияның жәрдеминде түсиндириледи. Спин-орбиталық тәсирлесиўди киргизиў спектраллық сызықлардың бир неше сызықларға ажыралыўын түсиндириўге алып келеди. Бирақ, атап айтқанда, Дирак теңлемесиниң жәрдеминде жуқа структураның интерпретациясы өзиниң ақырғы формасына ийе болады.

Водород атомының биринши қәддин қараймыз, ол $|1{,}0{,}0\rangle$ ҳалына сәйкес келеди. Шредингер теңлемесиниң жәрдеминде есапланған оның энергиясы $E = -13{,}6$ эВ қа тең. (14.4.f) аңлатпаға сәйкес релятивистлик дүзетиў

$$\frac{1}{4}\alpha^2\left[\frac{1}{2}\left(\frac{3}{4}-2\right)-1\right]$$

шамасына тең. Бул шама $n = 1$ ҳәм $l = 0$ теңлиги орынлы болғанлықтан спин-орбиталық тәсирлесиўди есапқа алмаў жолы менен алынады. Шредингер энергиясын усы коэффициентке көбейтсек, $|1{,}0{,}0\rangle$ ҳалының 181·10^{-6} эВ шамасында (дурыс болмаған шаманың 0,0013 процентин курайтуғын жүдә киши шама, бул өз гезегинде биз буннан бурынғы бөлимде қабыл еткен уйытқыўлар теориясы жақынласыўының дурыс екенлигин дәлиллейди).

Водород атомының екинши қәдди төрт азғынған ҳал $|2{,}0{,}0\rangle$, $|2{,}1{,}0\rangle$, $|2{,}1{,}1\rangle$ ҳәм $|2{,}1,-1\rangle$ менен пайда болады; Бул орбиталлар ушын Шредингер энергиясы $E = -3{,}4$ эВ қа тең. Релятивистлик теорияны қолланғанда $2s$ ҳәм $2p$ қәддилериниң биринши ажыралыўы орын алады ҳәм Томас дүзетиўиниң салдарынан биринshiси 147,088·10^{-6} эВ ҳәм екиншиси 26,4·10^{-6} эВ тең шамаға ҳалда стабилизациялайды. Дарвин ағзасы болса 2s орбиталды орнықлы емес етеди. Дарвин ағзасы тек $2s$ орбитаны 90,5159·10^{-6} эВ шамаға жылыстырады, себеби $2p$ қәддилери ушын l саны 1 ге тең. Улыўма айтқанда Томас ҳәм Дарвин эффектлери $2s$ орбитасын 56,5721·10^{-6} эВ шамасында орнықлы етеди. $l = 1$ теңлиги орынлы болған $2p$ қәддилери ушын спин-орбиталық тәсирлесиў орын алады ҳәм бул тәсирлесиў олардың жаңа сызықларға ажыралыўын тәмийинлейди. $J = 1/2$ квант санына ийе 2p орбиталы ушын 30,172·10^{-6} эВ шамасы орынлы, ал усындай ўақытта $J = 3/2$ квант санына ийе 2p орбитал 15,086·10^{-6} эВ шамасына орнықсызланған. Улыўма айтқанда 2p орбиталы 56,572·10^{-6} шамасында орнықлы болады, бул 2s$_{1/2}$ орбиталының энергиясына тең, ал усы жағдайда 2p$_{3/2}$ қәдди 11,28·10^{-6} эВ шамасында стабиллескен.

Энергияның үшинши қәдди ушын биз $n = 2$ ислегендей схема бойынша ҳәрекет етемиз ҳәм бул жағдайда 3d орбиталарының $l = 2 \neq 0$ квант саны менен тәрийипленетуғынлығын еске аламыз. Улыўма айтқанда $J = 1/2$ теңлиги орынланатуғын 3s ҳәм 3p қәддилери 20,08·10^{-6} эВ, $J = 3/2$ теңлиги орынлы болған 3p ҳәм 3d қәддилери 6,69·10^{-6} эВ шамасында ҳәм, ақырында, $J = 5/2$ квант санына ийе орбиталлар 2,23·10^{-6} эВ шамасында стабилизацияланған. Төмендеги 7-санлы кестеде Дирак теңлемесиниң жәрдеминде алынатуғын водород атомы ушын жуқа структураға байланыслы болған барлық мағлыўматлар берилген:

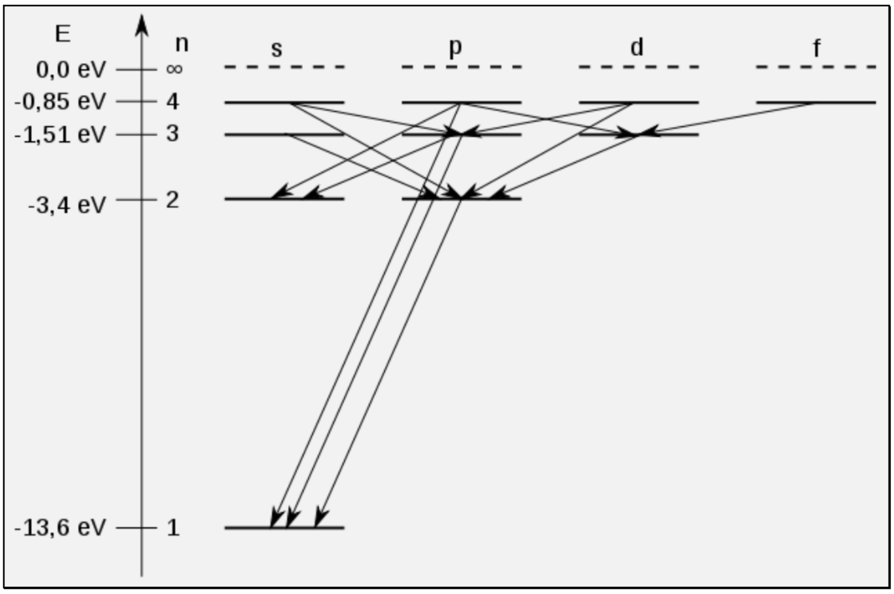
7-кесте.

Қәдди	Шредингер энергиясы	Спин-орбиталық энергия (10^{-6} эВ)	Томас энергиясы (10^{-6} эВ)	Дарвин энергиясы (10^{-6} эВ)	$\Delta E_{\text{рел}-\text{Шр}}$ (10^{-6} эВ)
1s1/2	-13,598	0	-905,159	724,128	-181,032
2p1/2	-3,399	-30,172	-26,400	0	-56,572
2p3/2	-3,399	15,086	-26,400	0	-11,314
2s1/2	-3,399	0	-147,088	90,515	-56,572
3p1/2	-1,510	-8,939	-11,174	0	-20,114
3p3/2	-1,510	4,449	-11,174	0	-6,704
3s1/2	-1,510	0	-46,934	26,819	-20,114
3d3/2	-1,510	-2,681	-4,022	0	-6,704
3d5/2	-1,510	1,787	-4,022	0	-2,234
4p1/2	-0,849	-3,771	-5,421	0	-9,193
4p3/2	-0,849	1,885	-5,421	0	-3,535
4s1/2	-0,849	0	-20,507	11,314	-9,193
4d3/2	-0,849	-1,131	-2,404	0	-3,535
4d5/2	-0,849	0,757	-2,404	0	-1,650
4f5/2	-0,849	-0,538	-1,111	0	-1,650
4f7/2	-0,849	0,404	-1,111	0	-0,707
5p1/2	-0,543	-1,931	-2,993	0	-4,924
5p3/2	-0,543	0,965	-2,993	0	-2,027
5s1/2	-0,543	0	-10,717	5,793	-4,924
5d3/2	-0,543	-0,579	-1,448	0	-2,027
5d5/2	-0,543	0,386	-1,448	0	-1,062

7-кестеде келтирилген шамалардың тийкарында биз мыналарды тастыйықлай аламыз:

- барлық релятивистлик дүзетиўлердиң суммасы Шредингер қәддилерин орнықлы етеди, бул дүзетиўлердиң шамасы бас квант санының үлкейиўи менен киширейеди. Бундай жағдайды күтиўге болады, себеби бас квант санының үлкейиўи менен электронлардың тезлиги кемейеди (электронлардың Бор моделиниң жәрдеминде алынған тезликлери ушын жазылған аңлатпаға қараңыз);
- барлық релятивистлик дүзетиўлер Шредингер энергиясына бир неше тәртипке кем (уйытқыў теориясын қолланыў ушын жақсы жағдай);
- Томас энергиясы барлық ўақытта терис мәниске ийе болады (орнықлы ететуғын эффект);
- s-типиндеги орбиталлар ушын Дарвин энергиясы барлық ўақытта оң ҳәм $l = 0$ теңлиги орынланғанда нолге тең.

Спектрдиң барлық структурасын анықлаў ушын спектроскопиялық сайлап алыў қағыйдасын пайдаланып электронлардың ҳаллар арасындағы барлық руқсат етилген өтиўлерин алыўға болады. 3-сүўретте (Гротриан диаграммасы) водород атомы ушын Лайман, Бальмер ҳәм Пашен серияларын беретуғын электронлардың өтиўлери көрсетилген.



3-сүўрет.

Биз перпендикуляр бағыттағы өтиўлердиң жоқ екенлигин ҳәм тек қыя бағыттағы өтиўлердиң бар екенлигин атап өтемиз. Бул спектроскопиялық қағыйдаларға сәйкес келеди. Бул қағыйдалар бойынша ҳәр қыйлы геометрияға ийе болған орбиталлардың арасында ғана өтиўлер орын алады. Лайман сериясы спектрдиң ультрафиолет областында жайласқан ҳәм жоқарыдағы қәддилерден тийкарғы ҳалға өткенде пайда болады; ол ең энергиясы үлкен серия болып табылады. Бальмер сериясы көзге көринетуғын областта жайласқан ҳәм ол np орбиталлардан $2s$, np орбиталдан $2p$ орбиталға ҳәм nd орбиталдан $2p$ өткенде пайда болады. Ал, Пашен сериясы болса инфрақызыл жолақта жайласқан болып, $n > 4$ теңсизлиги орынлы болған ns, np, nd орбиталлардан $3s, 3p, 3d$ орбиталларға өтиўлерде жүзеге келеди.

15. Жуўмақлаў

Квантлық теория водород атомының спектри машқаласын шешиў мақсетинде дөретилди. Бирақ, алынған шешимлер еркин электрон, водород атомы, водород тәризли атомлар сыяқлы шекли сандағы ҳақыйқый жағдайлар ушын ғана алынады. Қурамалырақ болған жағдайлар ушын физикалық жақтан мүмкин болған болжаўларға тийкарланған жуўықлаўлар қолланылады. Бирақ, бул шеклеўлер атомлық теорияның жаңа шақасын раўажландырыўға мүмкиншилик берди. Бул шақа эксперименталлық нәтийжелерди түсиндириўге қәбилетли болған жаңа есаплаў усылларын излеў менен шуғылланады. Физикалық химияға қолланылған квантлық теорияның Менделеев кестесине киретуғын атомлардың, молекулалардың көпшилигиниң қәсийетлерин жоқары дәлликте түсиндире алыўы тосыннан болған ўақыя емес. Бул билимлер қәсийетлери жаңа технологиялардың раўажланыўы ушын үйренилип атырған жаңа бирикпелерди пайда етиўге мүмкиншилик берди. Биз жасап атырған дүньяда дөретилиўи усы жумыста қарап өтилген теңлемелердиң дурыс екенлиги менен байланыслы болған объектлер менен барлық ўақытта пайдаланамыз. Квантлық физика адамзатқа бир әсир даўамында классикалық физика мыңлаған жыллар даўамында берген билимлерден көбирек билимлерди берди.

16. Пайдаланылған әдебиятлардың дизими

1. H. Cavendish. On Airs Fittizi (1766).
2. A.J. Angstrom. "Recherches sur le Spectre Solaire, Spectre Normal du Soleil", Atlas de Six Planches, Upsal, W. Schultz, Imprimeur de l'universitè; Berlin, Ferdinand.
3. J.J. Thompson. Philosophical Magazine 44, 295 (1897).
4. J.J. Balmer. Annalen der Physik und Chemie 25, 80-85 (1885).
5. F. Paschen. Annalen der Physik 332 (13) – 537-570 (1908).
6. F. Brackett. Astrophysical Jurnal 56 – 154 (1922).
7. A.H. Pfund. Jurnal Opt. Soc. Am. 9 (3) – 193-196 (1924).
8. C.J. Humphreys. J. Research Nat. Bur. Standards 50 (1953).
9. N. Bohr. Philosophical Magazine, Series 6, Vol. 26, 1-25 (July 1913).
10. P. Weinberg. Phil. Mag. Letters, Vol. 86, n° 7, July 2006, 405-410.
11. M. Beller. Quantum Dialogue: the Making of a Revolution, Chicago University Pres (1999).
12. A. Sommerfeld. Annalen der Physik, 1916 [4] 51, 1-94.
13. L. de Broglie. Ann. De Phys. 10e serie, t. III (Janvier-Fevrier 1925).
14. L. de Broglie. J. De Physique (November 1922).
15. E. Schrodinger. Annalen der Physik 79 (4), 734-756 (1926).
16. E. Schrodinger. Annalen der Physik 79 (6), 489-527 (1926).
17. E. Schrodinger. Annalen der Physik 80 (13), 437-490 (1926).
18. E. Schrodinger. Annalen der Physik 81 (18), 109-139 (1926).
19. E. Schrodinger. Physical Review 28 (6), 1049-1070 (1926).
20. E. Schrodinger. Annalen der Physik 82 (2), 265-272 (1927).
21. J. von Neumann. Mathematical Foundation of Quantum Mechanics – Princenton Paperbacks.
22. W. Heisenberg. Zeitschr. F. Phys. (17), 1-26 (1927).
23. M. Born. Gott. Naschr 1926, p. 146: AA Vol. 2, p. 284.
24. M Born. Zeitschr. F. Phys. (37), 863, 1926; AA Vol. 2, p. 228.
25. M Born. Zeitschr. F. Phys. (38), 803, 1926; AA Vol. 2, p. 233.
26. W. Heisenberg. Zeitschr. F. Phys. (33), 879-893 (1925).
27. M. Razavy. Heisenberg's Quantum Mechanics, World Scientific Publishing (2011).
28. P.A.M. Dirac. The Quantum Theory of Electron, Proceeding of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engeneer Sciences 117 (778): 610 (1928).
29. L. Landau, E. Lifszit, P. Pitaevskij. Relativistic Quantum Theory – Volume IV of the Theoretical Physics Course – Mir Edition 1975, Moscow.
30. C. Anderson. Physical Review, Vol. 43, 491-498 (1033).
31. W. Pauli. Collected Scientific Papers, Vol. 1,2 – Interscience Publisher (1964).

Quantum Mechanics
Concepts and Applications
Second Edition
Nouredine Zettili
Jacksonville State University, Jacksonville, USA

Бир өлшемли мәселелер

Кирисиў

Буннан алдыңғы бапларда квантлық механиканың формализмин баянлағаннан кейин биз оларды физикалық мәселелерди шешиў ушын жақсылап қуралланғанбыз. Биз Шредингер теңлемеси бир өлшемли мәселелер ушын пайдаланамыз. Қозғалысы бир өлшемли болған физикалық қубылыслардың саны жеткиликли дәрежеде көп болғанлықтан бул мәселелер қызықлы. Шредингер теңлемесин бир өлшемли мәселелерди шешиў ушын пайдаланыў әпиўайы жоллар менен классикалық ҳәм квантлық механиканың болжаўларын салыстырып көриў мүмкиншилигин пайда етеди. Шешиўдиң әпиўайылығына қарамастан, бир өлшемли мәселелер базы бир классикалық болмаған эффектлерди сәўлелендириў ушын қолланылады.

Массасы m болған микроскопиялық бөлекшениң бир өлшемли ҳәм ўақыттан ғәрезсиз болған V(x) потенциалындағы динамикасын тәрийиплейтуғын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x). \tag{4.1}$$

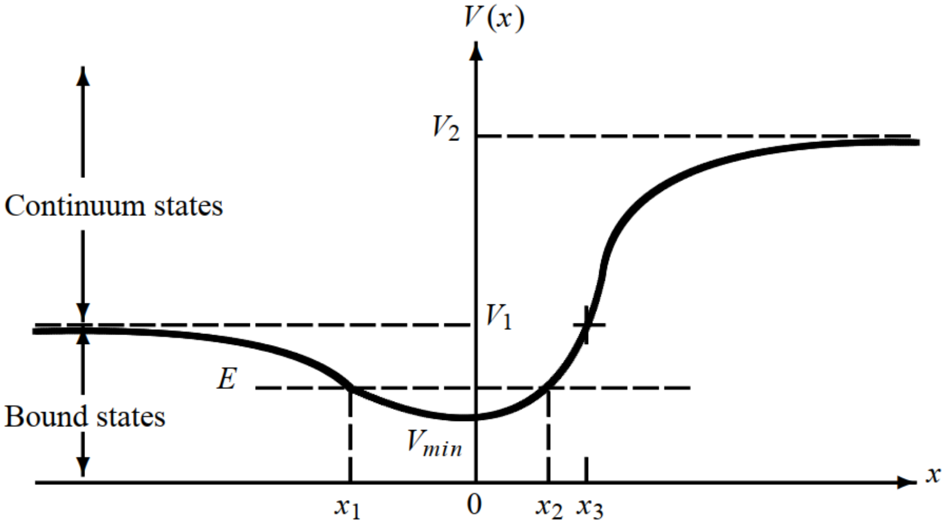
Бул теңлемеде E арқалы бөлекшениң толық энергиясы белгиленген. Бул теңлемениң шешимлери энергияның меншикли мәнислери болған E_n лерди ҳәм оларға сәйкес келетуғын меншикли функциялар $\psi_n(x)$ ларды береди. Бул теңлемени шешиў ушын $V(x)$ потенциалын ҳәм шегаралық шәртлерди бериў керек.

Шегаралық шәртлердиң системаға қойылатуғын физикалық талаплардан алыныўы мүмкин. Биз буннан алдыңғы бапта ўақыттан ғәрезсиз болған потенциаллар ушын шешимлердиң стационар болатуғынлығын көрдик:

$$\Psi(x,t)=\psi(x,t)e^{iEt/\hbar}. \tag{4.2}$$

Бул шешимлерден итималлықтың тығызлығының ўақыттан ғәрезсиз болатуғынлығы келип шығады. $\psi(x,t)$ ҳалының бирлигиниң $1/\sqrt{L}$ ге сәйкес келетуғынлығын еске түсиремиз, бул аңлатпадағы L узынлық болып табылады. Демек, $|\psi(x,t)|^2$ шамасының физикалық өлшеми $1/L$: [$|\psi(x,t)|^2$]= $1/L$.

Биз бир өлшемли қозғалыстың базы бир улыўмалық қәсийетлерин қараўдан баслаймыз ҳәм шешимлердиң симметриясының характерин таллаймыз. Буннан кейин баптың қалған бөлиминде Биз Шредингер теңлемеси ҳәр қыйлы бир өлшемли потенциалларға қолланамыз: еркин бөлекшеге, потенциал текшеге, шексиз терең потенциал шуқырға ҳәм гармоникалық осцилляторға. Ең ақырында Шредингер теңлемесин санлы шешиўдиң мүмкиншиликлерин көрсетемиз.



4.1-сүўрет. Улыўмалық потенциалдың формасы

4.2. Бир өлшемли қозғалыстың қәсийетлери

Бир өлшемли потенциалда қозғалатуғын жалғыз бөлекшениң динамикалық қәсийетлерин үйрениў ушын жеткиликли дәрежеде улыўмалық болған ҳәм сонлықтан ушырасатуғын барлық өзгешеликлерди иллюстрациялай алатуғын $V(x)$ потенциалын қараймыз. Усындай потенциаллардың бири 4.1-сүўретте көрсетилген. Ол $x \to \pm\infty, V(-\infty) = V_1$ ҳәм $V(+\infty) = V_2$, V_1 диң мәниси V_2 ден киши ҳәм оның минимумы V_{min} бар. Биз изертлеўлеримиздиң барысында дискрет ҳәм үзликсиз болған спектрлердиң пайда болыў шәртлерин де үйренемиз. Ҳаллардың характери системаның энергиясы бойынша толығы менен анықланатуғын болғанлықтан, биз энергияның шамасы потенциалдан киши ҳәм үлкен болған жағдайларды айырып қараймыз.

4.2.1. Дискрет спектр (шегаралық ҳаллар)

Бөлекше шексизликке шекем қозғала алмайтуғын жағдайлардың барлығында шегаралық шәртлер пайда болады. Бундай жағдайларда барлық энергиялардағы бөлекшениң қозғалысы кеңисликтиң шекли областында шекленген ямаса усы область пенен байланысқан. Бундай область еки классикалық бурылыў ноқатлары менен шекленген. Бундай областта Шредингер теңлемеси тек *дискрет* шешимлерге ийе болады. Шексиз терең туўры мүйешли (ямаса квадрат формасындағы) потенциал менен гармоникалық осциллятор байланысқан ҳалларды сәўлелендиретуғын ең көп тарқалған мысаллар бола алады. 4.1-сүўретте көрсетилген потенциалда бөлекшениң қозғалысы x_1 ҳәм x_2 классикалық бурылыў ноқатларының арасында шекленген. Сүўретте көрсетилген жағдайда бөлекшениң энергиясы V_{min} менен V_1 диң арасында жатады:

$$V_{min} < V_1 < E. \qquad (4.3)$$

Энергияның усы диапазонына сәйкес келетуғын ҳалларды *байланысқан ҳаллар* деп атайды. Бул ҳаллар ушын толқын функциялары $x \to \pm\infty$ шеклеринде шекли (ямаса ноллик); әдетте байланысқан ҳаллар V потенциалға салыстырғанда киши E энергиясына ийе болады. Байланысқан ҳаллардың пайда болыўы ушын $V(x)$ функциясы V_1 ден төменде болған ең кеминде бир минимумға ийе болыўы керек (яғный $V_{min} < V_1$). Байланысқан ҳаллардың энергиясының спектри дискрет. Бизлер шегаралық шәртлерди толқын функциясы менен энергияны табыў ушын пайдаланыўымыз керек.

Байланысқан ҳалларды үйрениў ушын әҳмийетли болған еки теореманы келтиремиз.

4.1-теорема. Бир өлшемли мәселелерде байланысқан ҳаллар системасының энергиясының қәдди дискрет ҳәм азғынбаған.

4.2-теорема. Бир өлшемли системаның толқын функциясы болған $\psi_n(x)$ функциясы n дана түйинге ийе болады (демек $\psi_n(x)$ функциясы $n + 1$ рет нолге айланады, яғный жоғалады).

Бул теоремада $n = 1$ теңлиги тийкарғы ҳалға сәйкес келеди.

4.2.2. Үзликсиз спектр (байланыспаған ҳаллар)

Системаның қозғалысы шекленбеген жағдайда байланыспаған ҳаллар жүзеге келеди; бундай ҳалға ең әпиўайы мысал - еркин бөлекше болып табылады. 4.1-сүўретте көрсетилген потенциал ушын бөлекшениң қозғалысы шексиз болған еки энергия диапазоны бар: $V_1 < E < V_2$ ҳәм $E > V_2$.

- $V_1 < E < V_2$ теңсизликлери орынланатуғын жағдай.

Бул жағдайда бөлекшениң қозғалысы $x = -\infty$ тәрепте шексиз, яғный бөлекше $x = x_3$ ҳәм $x \to \infty$ ноқатларының арасында қозғала алады, бул жағдайда x_3 ноқаты классикалық бурылыў ноқаты болып табылады. Энергия спектри үзликсиз ҳәм энергияның меншикли мәнислериниң ҳеш қайсысы да азғынған емес. Азғыныўдың жоқ екенлигин былайынша көрсетиўге болады. (4.1)-Шредингер теңлемеси екинши тәртипли дифференциаллық теңлеме болғанлықтан, ол берилген жағдай ушын еки ғәрезсиз сызықлы шешимге ийе ҳәм олардың тек биреўи ғана физикалық мәниске ийе болады. $x \leq x_3$ ушын шешим осцилляцияланатуғын ҳәм $x > x_3$ теңсизлиги орынланғанда тез сөнеди, $x \to \infty$ шегинде ол шекли (ноллик), себеби тарқалатуғын шешим физикалық мәниске ийе емес.

- $E > V_2$ теңсизлиги орынланатуғын жағдай

Энергия спектри үзликсиз ҳәм еки тәрептеги бөлекшениң қозғалысы шексиз (яғный $x \to \infty$ бағытында). Бул спектрдиң барлық энергия қәддилери еки рет азғынған. Бул жағдайдың дурыслығына исениў ушын (4.1)-теңлемениң улыўмалық шешиминиң бир биринен ғәрезсиз болған еки осцилляцияланатуғын шешимлердиң сызықлы комбинациясы екенлигин аңғарамыз. Олардың бири шеп тәрепке қарай, ал екиншиси оңға қарай қозғалады. Буннан алдыңғы шешимде тек бир шешим ғана сақланады, ал екиншиси $x \to +\infty$ шегинде тарқалады ҳәм сонлықтан бул шешимниң алып тасланыўы керек.

Байланысқан ҳаллардан айырмасы, байланыспаған ҳаллардың нормировкаланыўы мүмкин емес ҳәм бизлер шегаралық шәртлерди пайдалана алмаймыз.

4.2.3. Аралас спектр

Бөлекшени тек базы бир энергиялар ушын шеклейтуғын потенциаллар аралас спектрдиң пайда болыўына алып келеди; бундай потенциаллардағы бөлекшениң қозғалысы энергияның тек белгили болған мәнислеринде шекленген. Мысалы, 4.1-сүўретте көрсетилген потенциал ушын егер бөлекшениң энергиясының мәниси $V_{min} < E < V_1$ шеклеринде болса, онда бөлекшениң қозғалысы шекленген ҳәм оның спектри дискрет, бирақ, егер $E > V_2$ теңсизлиги орынлы болса, онда бөлекшениң қозғалысы байланыспаған ҳәм оның спектри үзликсиз (егер $V_1 < E < V_1$ теңсизликлери орынлы болса, онда бөлекшениң қозғалысы тек $x \to \infty$ бағытында байланыспаған). Аралас спектрлер ушырасатуғын басқа көп тарқалған мысаллардың сыпатында шекли квадрат шуқырдың потенциалы менен кулонлық ямаса молекулалық потенциалды көрсетиўге болады.

4.2.4. Симметриялық потенциаллар ҳәм жуплық

Микроскопиялық қәддиде ушырасатуғын потенциаллардың көпшилиги кеңисликтеги инверсияға байланыслы симметриялы (ямаса жуп), яғный $\hat{V}(x) = \hat{V}(-x)$. Бул симметрия есаплаўларды әдеўир әпиўайыластырады. $\hat{V}(x)$ жуп болған жағдайда оған сәйкес келетуғын $\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2y}{dx^2} + \hat{V}(x)$ гамильтониан да жуп болады. Биз жуп операторлардың жуплық операторы менен коммутацияланатуғынлығын билемиз. Демек, олар меншикли тийкарға ийе.

Биз ҳалдың жуплығы мәселесин толығырақ қараймыз.

Координаталар системасын өз-өзине параллель қалдырып жылжытыў менен бурыўлар менен бир қатарда (оларға қарата инвариантлық кеңисликтиң бир теклиги менен изотроплығын аңғартады) жабық системаның гамильтонианы өзгериссиз қалдыратуғын және бир түрлендириў бар. Ол кеңисликлик жуплық болып табылады. Бундай түрлендириўлерде барлық координаталардың белгилери, яғный барлық бағытлар қарама-қарсы тәрепке қарай бир ўақытта өзгертиледи. Оң координаталардың оң винтли система системасы терис винтли системаға, ал терис винтли система оң винтли системаға өтеди. Бул түрлендириўлерге қарата гамильтонианның инвариантлығы айналық шағылысыўларға қарата гамильтонианның инвариантлығын аңғартады. Классикалық механикада Гамильтон функциясының жуплыққа қарата инвариантлығы қандай да бир жаңа сақланыў нызамларына алып келмейди. Квантлық механикада болса ситуация пүткиллей басқаша.

$\psi(\boldsymbol{r})$ толқын функциясына тәсир координатаның белгисин өзгертиўге алып келетуғын $\hat{P}$ операторын киргиземиз:

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r}). \qquad ()$$

Бул оператордың меншикли мәнислери P ны табыў аңсат. Оның ушын

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{r}) = P\psi(\boldsymbol{r}) \qquad ()$$

теңлемесин шешиў керек. Оның ушын инверсия операторы менен еки рет тәсир етиўдиң теппе-теңликке алып келетуғынлығын аңғарамыз. Бундай жағдайда функциялардың аргументлери пүткиллей өзгермейди. Басқа сөзлер менен айтқанда

$$\hat{P}^2\psi(\boldsymbol{r}) = P^2\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}).$$

Буннан

$$P^2 = 1 \text{ ҳәм } P = \pm 1 \qquad ()$$

шамалары алынады. Солай етип, инверсия операторының меншикли функциялары оның тәсиринде өзгериске ушырамайды ямаса белгисин өзгертеди. Биринши жағдайда толқын функциясын (ҳәм сәйкес ҳалды) жуп, екинши жағдайда тақ деп атайды. Гамильтонианның инверсияға қатнасы бойынша инвариантлығы (яғный $\widehat{H}$ ҳәм $\hat{P}$ операторларының коммутативлиги) жуплықтың сақланыўы нызамын аңғартады: егер жабық системаның ҳалы белгили болған жуплыққа ийе болса (яғный ол жуп ямаса тақ болса), ўақыттың өтиўи менен бул жуплық сақланады.

Биз квантлық механикадағы жуплық операторы менен инверсия операторының ҳәр қыйлы болған еки математикалық оператор екенлигин атап өтемиз. $\hat{\mathcal{P}}$ арқалы белгиленетуғын жуплық операторы барлық кеңисликлик координаталарды өзгертеди, ал басқа барлық қәсийетлерди (мысалы, спинди) өзгериссиз қалдырады. Басқа сөз бенен айтқанда ол айнадағы шағылысыўға (айналық симметрияға) сәйкес келеди. Жуплық операторы кеңисликлик инверсиядағы системаның симметриясын тәрийиплеў ушын қолланылады. Солай етип, операторлардың екеўи де системаның белгили болған қәсийетлериниң белгисин өзгертетуғын болса да, олар қәсийетлердиң ҳәр қыйлы жыйнақларына тәсир етеди. Жуплық операторы тек кеңисликлик координаталардың белгисин, ал инверсия операторы барлық координаталардың белгилерин өзгертеди.

Енди жуплық операторы ҳаққындағы базы бир мағлыўматларды келтиремиз.

Кеңисликтиң координаталардың басына салыстырғандағы шағылысыўы инверсия ямаса жуплық операциясы деп аталады. Бул түрлендириў дискрет түрлендириў болып табылады. Жуплық операторы $\hat{\mathcal{P}}$ позициялық кеңисликтеги (орынлар кеңислигиндеги) оның $|\boldsymbol{r}\rangle$ кет векторына тәсири бойынша анықланады:

$$\hat{\mathcal{P}}|\boldsymbol{r}\rangle = |-\boldsymbol{r}\rangle, \ \ \langle\boldsymbol{r}|\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \langle-\boldsymbol{r}|.$$

Сонлықтан

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r}).$$

Жуплық операторы $\hat{\mathcal{P}}$ Эрмит операторы болып табылады, яғный $\hat{\mathcal{P}}^\dagger = \hat{\mathcal{P}}$.

Биз квантлық механикада позициялық кеңисликтиң математикалық кеңисликке тийисли екенлигин атап өтемиз. Бундай кеңислик үш өлшемли кеңисликтеги бөлекшениң орнын көрсетеди. Ал бөлекшениң орны үш қураўшыға ийе болған вектордың жәрдеминде тәрийипленеди, ал бул қураўшылар үш кеңисликлик өлшемлерге сәйкес келеди.

Квантлық механикада позициялық кеңислик бөлекшени белгили орында тубыўдың итималлығының тығызлығын анықлаў ушын қолланылады. Итималлықтың тығызлығы бөлекшениң орнына ғәрезли болған функция болып табылады ҳәм оны $|\psi(x,y,z)|^2$ символының жәрдеминде белгилейди. $\psi(x,y,z)$ арқалы бөлекшениң толқын функциясы белгиленген. Солай етип, позициялық кеңислик квантлық механикадағы әҳмийетли түсиниклердиң қатарына киреди ҳәм ол бөлекшениң үш өлшемли кеңисликтеги қәсийетлерин тәрийиплеўге мүмкиншилик береди.

Усы гамильтонианның азғынған ҳәм азғынбаған спектрлерге тийисли болған төмендегидей еки жағдайды қараймыз.

Азғынбаған спектр

Дәслеп биз симметриялық потенциалға сәйкес келетуғын гамильтонннианның меншикли мәнислериниң азғынған болмайтуғынлығын қараймыз. 4.1-теоремаға сәйкес бул гамильтониан байланысқан ҳалларды тәрийиплейди. Азғынбаған жуп оператордың жуплық операторының меншикли функцияларына ийе болатуғынлығын еске түсиремиз. Жуплық операторының меншикли мәнислери белгили жуплыққа ийе болғанлықтан, бир өлшемли потенциалда қозғалатуғын бөлекшениң байланысқан ҳаллары белгили бир жуплыққа ийе болады: олар жуп ямаса тақ:

$$\hat{V}(-x) = \hat{V}(x) \Rightarrow \hat{V}(x) = \pm\hat{V}(x). \qquad ()$$

Азғынған спектр

Егер симметрия потенциалға сәйкес келетуғын гамильтонианның спектри азғынған болса, онда меншикли мәнислер тек жуп ҳәм тақ ҳаллардың терминлеринде аңғартылады. Яғный меншикли мәнислер белгили болған жуплыққа ийе болмайды.

Жуўмақ: Биз таллап атырған бир өлшемли қозғалыстың ҳәр қыйлы қәсийетлерин былайынша жуўмақлаў мүмкин:

а). Системаның байланысқан ҳалға ийе ҳалының энергия спектри дискрет ҳәм азғынбаған.

b). Байланысқан ҳалдың толқын функциясы $\psi_n(x)$: егер тийкарғы ҳалға $n = 0$ сәйкес келсе, онда $n - 1$ түйинге, ал тийкарғы ҳалға $n = 1$ сәйкес келсе, онда n дана түйинге ийе болады

c). Жуп потенциалдағы байланысқан ҳалдың меншикли функциялары белгили жуплыққа ийе.

d). Жуп потенциалдағы азғынған спектрдиң меншикли функциялары белгили болған жуплыққа ийе емес.

4.3 Еркин бөлекше: үзликсиз ҳаллар

Бул ең әпиўайы болған бир өлшемли мәселе; бул мәселе қәлеген x ушын $V(x) = 0$ ге сәйкес келеди. Бундай жағдайда Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = 0. \qquad (4.5)$$

Бул теңлемеде $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, k - толқынлық сан.

(4.5)-теңлемениң ең улыўма болған шешими бир биринен сызықлы ғәрезсиз болған $\psi_+(x) = e^{ikx}$ ҳәм $\psi_-(x) = e^{-ikx}$ тегис толқынлардың комбинациясы болып табылады:

$$\psi_k(x) = A_+e^{ikx} + A_-e^{-ikx}. \tag{4.6}$$

Бул аңлатпадағы A_+ пенен A_- лер ықтыярлы константалар. Солай етип толық толқын функциясы төмендигедей стационар ҳал менен бериледи екен:

$$\begin{aligned}\Psi_k(x,t) &= A_+e^{i(kx-\omega t)} + A_-e^{-i(kx+\omega t)} = \\ &= A_+e^{i(kx-\hbar k^2t/2m)} + A_-e^{-i(kx+\hbar k^2t/2m)}.\end{aligned} \tag{4.7}$$

Бул $\Psi_k(x,t)$ функциясында $\omega = \frac{E}{\hbar} = \hbar k^2/2m$. $\Psi_+(x,t) = A_+e^{i(kx-\omega t)}$ биринши ағза оң тәрепке қарай қозғалатуғын толқынды, ал $\Psi_-(x,t) = A_+e^{-i(kx-\omega t)}$ екинши ағза шеп тәрепке қарай қозғалатуғын толқынды аңлатады. Бул толқынлардың интенсивлиги сәйкес $|A_+|^2$ ҳәм $|A_-|^2$ шамалары арқалы анықланады. Бизлер $\Psi_+(x,t)$ ҳәм $\Psi_-(x,t)$ толқынларының оң тәрепке қарай ҳәм шеп тәрепке қарай қозғалатуғын ҳәм импульслери $p_\pm = \hbar k$, энергиясы $E_\pm = \hbar^2k^2/2m$ шамаларына тең еркин бөлекше менен байланыслы екенлигин атап өтиўимиз керек. Азмаздан кейин биз бул жағдайдың физикалық жақтан нелерге алып келетуғынлығын таллаймыз. Егер шегаралық шәртлер болмаса, онда k менен E лерге ҳеш қандай шек қойылмайды; мәнислердиң барлығы да теңлемениң шешимлери бола береди.

Еркин бөлекшелер ҳаққындағы мәселени шешиў математикалық жақтан аңсат, бирақ бул мәселе физикалық жақтан бир қатар нәзик тәреплерге ийе. Биринщиден, шешимлердиң қәлеген биреўине сәйкес келетуғын итималлықтың тығызлығы

$$P_\pm(x,t) = \left|\Psi_\pm(x,t)\right|^2 = |A_+|^2 \tag{4.8}$$

константа болып табылады. Себеби ол x тан да, t дан да ғәрезли емес. Бул импульстиң $p_\pm = \hbar k$, энергияның $E_\pm = \hbar^2k^2/2m$ мәнислерине ийе ҳал ушын орын x пенен ўақыт t ҳаққындағы информацияның толық жоғалыўынан жүзеге келеди. Бул Гейзенбергтиң анықсызлық принципиниң нәтийжеси болып табылады: бөлекшениң энергиясы менен импульси белгили болғанда $\Delta p = 0$ ҳәм $\Delta E = 0$ теңликлери орынлы болады ҳәм, сонлықтан, бөлекшениң орны (позициясы) менен ўақытқа салыстырғанда толық анықсызлық орын алады: $\Delta x \to 0$ ҳәм $\Delta t \to 0$.

Екинши нәзиклик толқынның тезлиги менен бөлекшениң тезлигиниң арасындағы сәйкесликтиң жоқлығы менен байланыслы. $\Psi_\pm(x,t)$ тегис толқынының тезлиги

$$v_{tolq} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \frac{\hbar^2k^2/2m}{\hbar k} = \frac{\hbar k}{2m}. \tag{4.9}$$

Екинши тәрептен, бөлекшениң классикалық тезлиги[20]

$$v_{klassik} = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} = 2v_{tolq}. \tag{4.10}$$

---

[20] Классикалық тезлик ағыс пенен (ямаса тоқтың тығызлығы менен) былайынша байланысқан:

$$J_+ = i\hbar\frac{1}{2m}\left(\Psi_+\frac{\partial\Psi_+^*}{\partial x} - \Psi_+^*\frac{\partial\Psi_+}{\partial x}\right) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}.$$

Бул теңликте $A_+ = 1$ бирлиги қабыл етилген.

Бул бөлекшениң оған сәйкес келетуғын толқынға салыстырғанда еки есе үлкен тезлик пенен қозғалатуғынлығын аңғартады. Үшиншиден, толқын функциясын нормировкалаўдың мүмкиншилиги болмайды:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{\pm}^{*}(x,t)\Psi_{\pm}(x,t)dx = \left|A_{\pm}\right|^{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \to \infty. \tag{4.11}$$

Солай етип, $\Psi_{\pm}(x,t)$ шешими физикалық мәниске ийе емес; физикалық жақтан толқын функциясының квадратының интегралланыўы керек.

Пайда болған машқаланы мынаған алып келиўге болады: еркин бөлекше айқын түрде анықланған белгили бир импульске де, энергияға да ийе бола алмайды.

Жоқарыда гәп етилген үш нәзик жағдайды дыққатқа алып, биз (4.5)-теңлеме менен байланыслы болған физикалық жақтан пайдаланыўға болатуғын, тегис толқын болып табылмайтуғынлығын көремиз. Усының орнына биз тегис толқынлардың сызықлы комбинациясынан туратуғын физикалық шешимлерди қура аламыз. Бундай жағдайда жуўапты бизге белгили болған толқын пакетлери береди:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)e^{-(kx-\omega t)}dk. \tag{4.12}$$

Бул аңлатпада $\phi(k)$ - толқын пакетиниң амплитудасы, оның мәнислери $\psi(x,0)$ Фурье түрлендириўлериниң жәрдеминде

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,0)dx. \tag{4.13}$$

түринде анықланады.

Толқынлық шешим бизди жоқарыда еслетип өтилген барлық нәзик таманлардан қутқарады. Бириншиден, бөлекшениң импульсиниң, турған орнының, ҳәм энергиясының мәнислери дәл белгисиз. Екиншиден, (4.12)- толқын пакети менен бөлекше *группалық тезлик* $v_g = p/m$ ямаса барлық пакеттиң тезлиги деп аталатуғын бирдей тезлик пенен қозғалады. Үшиншиден, (4.12) толқын пакетин нормировкалаўға болады.

Жуўмақлай келип, биз еркин бөлекшениң бир (монохромат) тегис толқын менен тәрийиплениўиниң мүмкин емес екенлигин айта аламыз, еркин бөлекшеге толқын пакети сәйкес келеди. Солай етип, Шредингер теңлемесиниң физикалық шешимлери стационар шешимлер менен емес, ал толқын пакетлери түринде бериледи

4.4. Потенциаллық текше

Енди бөлекше потенциал текшениң бир тәрепинде пүткиллей еркин болған жағдайды қараймыз. Бундай текшени $x = 0$ ноқатында потенциал кескин түрде өсетуғын етип қурамыз (яғный ол ийтериўши ямаса тартатуғын болып шығады).

Усындай типтеги потенциалды потенциал текше деп атаймыз (қараңыз 4.2-сүўрет):

$$V(x) = \begin{cases} 0, x < 0, \\ V_0, x \geq 0. \end{cases} \tag{4.14}$$

Бул мәселеде биз шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалатуғын бөлекшелер ағысының динамикасын таллаўға тырысамыз (бөлекшелердиң барлығы бирдей m массаға ийе ҳәм бирдей тезлик пенен қозғалады). Биз бөлекшелердиң энергиялары V_0 ден үлкен ҳәм киши болған еки жағдайды қараймыз.

а) $\boldsymbol{E > V_0}$ болған жағдай

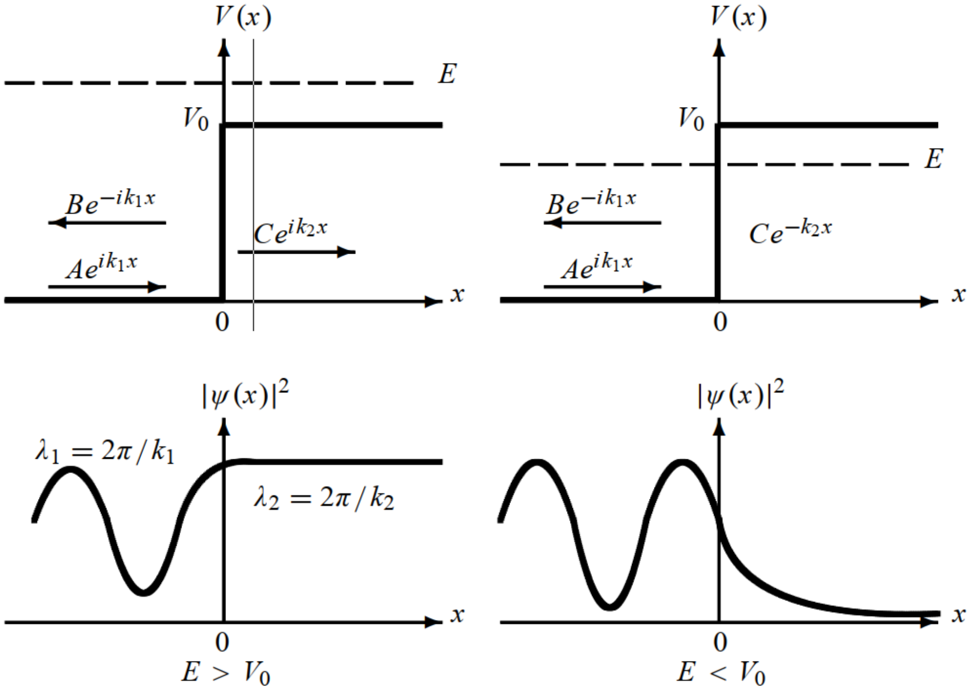
Бөлекшелер $x < 0$ болған областта еркин ҳәм $x = 0$ ноқатында басланатуғын потенциалда ийтериледи ҳәм $x > 0$ областында тегис (турақлы) болып қалады. Бөлекшелердиң бул ағысының динамикасын дәслеп классикалық усыл менен, буннан кейин квантлық-механикалық усыл менен таллайық.

Классикалық көз-қараслардан, бөлекше потенциаллық текшеге ямаса барьерге турақлы $\sqrt{2mE}$ импульси менен келеди. Бөлекшелер потенциалы V_0 шамасына тең $x \geq 0$ областына киргенде олардың импульси $\sqrt{2m(E - V_0)}$ шамасына шекем кемейеди, буннан кейин ол импульсиниң мәнисин турақлы етип сақлап, оң тәрепке қарай қозғалысын даўам етеди. Бөлекшелердиң $x \geq 0$ областына кириўи ушын олар жеткиликли энергияға ийе болады, нәтийжеде бул областқа толық өтиў жүзеге келеди: барлық бөлекшелер оң тәрепке қарай киширек $E - V_0$ кинетикалық энергиясы менен ушып өтеди. Сонлықтан, бул бир өлшемдеги әпиўайы шашыраў мәселеси болып табылады.

Бөлекшениң квантлық-механикалық динамикасы Шредингер теңлемесиниң жәрдеминде анықланады. Еки область ушын бул теңлеме былайынша жазылады:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_1^2\right)\psi_1(x) = 0, \qquad (x < 0). \tag{4.15}$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_2^2\right)\psi_2(x) = 0, \qquad (x < 0). \tag{4.16}$$



4.2-сүўрет. Потенциал текше, түсиўши ҳәм шағылысқан толқынлардың бағытлары ҳәм $E > V_0$ және $E < V_0$ болған жағдайлар ушын итималлықтың тығызлығы $|\psi(x)|^2$.

Бул теңлемелерде $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $k_2^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$. Бул теңлемелердиң ең улыўмалық шешимлери мынадай тегис толқынлар болып табылады:

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \ (x < 0), \tag{4.17}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, \qquad (x \geq 0). \tag{4.18}$$

Бул аңлатпаларда Ae^{ik_1x} менен Ce^{ik_2x} лер x тың оң бағытына қарай қозғалатуғын толқынлар, ал Be^{-ik_1x} менен De^{-ik_2x} функциялары x көшериниң шеп бағытында тарқалатуғын толқынлар болып табылады. Бизди бөлекшелер потенциаллық текшеге шеп тәрептен келип түсетуғын жағдай қызықтырады: олардың $x = 0$ болғанда шағылысыўы да, $x > 0$ областқа өтиўи де мүмкин. $x > 0$ областынан шеп тәрепке қарай ҳеш бир шағылыспайтуғын болғанлықтан, D турақлысының жоғалыўы керек. Биз стационар ҳаллар менен жумыс алып баратырмыз. Сонлықтан толқын функциясы мынадай формулалардың жәрдеминде бериледи:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} \psi_1(x)e^{-i\omega t} = Ae^{i(k_1x-\omega t)} + Be^{-i(k_1x-\omega t)}, x < 0, \\ \psi_2(x)e^{-i\omega t} = Ce^{i(k_2x-\omega t)}, \qquad x \geq 0. \end{cases} \tag{4.19}$$

Бул теңликлердеги $Ae^{i(k_1x-\omega t)}$ келип түскен толқынға, $BAe^{-i(k_1x-\omega t)}$ шағылысқан толқынға ҳәм $Ce^{i(k_2x-\omega t)}$ өткен толқынға сәйкес келеди. Олар, сәйкес оңға, шепке ҳәм шепке қарай тарқалады (4.2-сүўрет). 4.2-сүўреттеги төменги шеп графикте көрсетилген итималлықтың тығызлығы болған $|\psi(x)|^2$ шамасы $x > 0$ ушын туўры сызық болып табылады. Себеби, $|\psi_2(x)|^2 = \left|Ce^{i(k_2x-\omega t)}\right|^2 = |C|^2$.

Енди шағылысыў коэффициенти R менен өткериў коэффициенти T ны анықлайық. Оларды мынадай формулалардың жәрдеминде анықлаймыз:

$$R = \frac{|\text{shağılısqan toqtıń tığızlıği}|}{|\text{túsiwshi toqtıń tığızlıği}|} = \frac{|J_{\text{shağılısqan}}|}{|J_{\text{túsiwshi}}|}, T = \frac{|J_{\text{ótken}}|}{|J_{\text{túsiwshi}}|}. \tag{4.20}$$

R шамасы шағылысқан нурдың интенсивлигиниң түскен нурдың интенсивлигине қатнасына, ал T болса өткен нурдың интенсивлигиниң келип түскен нурдың интенсивлигине тең. Сонлықтан $|J_{\text{shağılısqan}}|$, $|J_{\text{túsiwshi}}|$, $|J_{\text{ótken}}|$ шамаларының мәнислерин билиўимиз керек. Түсиўши толқынның $\psi_i(x) = Ae^{k_1 x}$ түринде жазылатуғын болғанлықтан, түсиўши тоқтың тығызлығы (ямаса түсиўши тоқ)

$$J_{\text{túsiwshi}} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_i(x)\frac{d\psi_i^*(x)}{dx} - \psi_i^*(x)\frac{d\psi_i(x)}{dx}\right) = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2. \tag{4.21}$$

Тап сол сыяқлы, шағылысқан ҳәм өткен толқынлар $\psi_r(x) = Be^{-k_1 x}$ ҳәм $\psi_l(x) = Ce^{k_2 x}$ түринде жазылатуғын болғанлықтан, биз шағылысқан ҳәм өткен ағыстың шамаларының мыналарға тең екенлигине ийе боламыз:

$$J_{\text{shağılısqan}} = -\frac{\hbar k_1}{m}|B|^2, J_{\text{ótken}} = \frac{\hbar k_2}{m}|C|^2 \tag{4.22}$$

(4.20)- ҳәм (4.22)-аңлатпалардан мыналарды аламыз:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \qquad T = \frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2} \tag{4.23}$$

Солай етип, R менен T ларды есаплаў B ҳәм C константаларын анықлаўға алып келинеди екен. Оның ушын $x = 0$ теңлиги орынланған жағдайдағы толқын функциясына қойылатуғын шегаралық шәртлерди пайдаланыў керек. Толқын функциясының өзи менен оның биринши тәртипли tуўындысы $x = 0$ болған жағдайда үзликсиз болғанлықтан, мынадай теңликлерди жаза аламыз:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \qquad \frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}. \tag{4.24}$$

(4.17)- ҳәм (4.18)-теңлемелер мыналарды береди:

$$A + B = C, \qquad k_1(A - B) = k_2 C. \tag{4.25}$$

Бул теңликлерден мынадай формулаларды аламыз:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}A, \qquad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}A. \tag{4.26}$$

A константасына келетуғын болсақ, онда оның мәнисин толқын функциясының нормировка шәрти бойынша анықлаўға болады. R менен T константалары қатнаслар түринде анықланатуғын болғанлықтан бундай нормировканы анықлаўдың кереги жоқ. (4.23)-аңлатпаның (4.26)-аңлатпа менен комбинациясы мынадай аңлатпаларға алып келинеди:

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(1 - \mathcal{K})^2}{(1 + \mathcal{K})^2}, \qquad T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4\mathcal{K}}{(1 + \mathcal{K})^2}. \tag{4.27}$$

Бул теңликлерде $\mathcal{K} = \frac{k_2}{k_1} = \sqrt{1 - V_0/E}$. R менен T шамаларының қосындысы 1 ге (анықламасы бойынша 1 ге тең болыўы керек).

Классикалық механика бойынша ҳеш бир бөлекшениң шағылыспаўы керек. Ал (4.27)-теңлеме квантлық-механикалық R коэффициентиниң нолге тең емес екенлигин көрсетеди: энергиясының шамасы текшениң бийиклиги V_0 ден үлкен болса да айырым бөлекшелер шағылысады. Бул эффектти бөлекшелердиң *толқынлық қәсийетиниң көриниўи* сыпатында қабыл етиў керек.

(4.27)-аңлатпадан E ниң мәнисиниң киширейийўи менен T ның да кем-кемнен киширейетуғынлығын көремиз. $E = V_0$ теңлиги орынланған жағдайда T нолге, ал R коэффициенти 1 ге тең болады. Екинши тәрептен, $E \gg V_0$ теңсизлиги орынланғанда биз $\mathcal{K} = \sqrt{1 - V_0/E} \approx 1$ теңлигине ийе боламыз. Демек $R = 0$, $T = 1$. Бундай жуўмақты күтиўге болады, себеби түсиўши бөлекшелердиң энергиялары жүдә жоқары, ал потенциаллық текшениң бийиклиги жүдә киши болса, онда бул текше бөлекшелердиң қозғалысына сезилерликтей тәсир ете алмайды.

Ескертиў: шегаралық шәртлердиң физикалық мәниси

Биз таллаўларымыздың барысында (4.24)-теңликлерде көрсетилгендей толқын функциясы менен оның биринши тәртипли туўындысына қойылатуғын шегаралық шәртлер менен көп рет соқлығысамыз. Усындай үзликсизлик шәртлериниң тийкарында қандай физика жатыр? Биз еки бақлаўды өткере аламыз:

Бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы $|\psi(x)|^2$ қәлеген киши областта бир ноқаттан екинши ноқатқа өткенде үзликсиз түрде өзгеретуғын болғанлықтан, $\psi(x)$ толқын функциясы да x тың үзликсиз функциясы болыўы керек. Сонлықтан, (4.24)-аңлатпада көрсетилгендей $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ теңлигине ийе болыўымыз керек.

Бөлекшениң сызықлы импульси $P_x\psi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$ координата x тың үзликсиз функциясы екенлигине байланыслы бөлекшениң шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалыўында айрықша ($x = 0$ ноқатында) функцияның биринши туўындысы болған $\frac{d\psi(x)}{dx}$ шамасының да үзликсиз болыўы керек. Демек, (4.24)-аңлатпада көрсетилгениндей, $\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}$ теңлигиниң орын алыўы шәрт.

(b) $E < V_0$ болған жағдай

Потенциал текшеге шеп тәрептен келип түсетуғын бөлекшелер (импульси $p = \sqrt{2mE}$ шамасына тең) $x = 0$ ноқатында тоқтайды ҳәм олардың импульслери өзгериссиз қалған ҳалда кейин қарай серпинеди. Ҳеш бир бөлекше $x = 0$ барьериниң оң тәрепине өтпейди ҳәм бөлекшелердиң толық шағылысыўы орын алады. Солай етип потенциаллық барьер бөлекшелердиң қозғалысын қарама-қарсы бағыттағы қозғалысқа айландырады.

Квантлық-механикалық картина пүткиллей басқаша болады. Бул жағдайда $x < 0$ областында Шредингер теңлемеси менен толқын функциясы сәйкес (4.15)- ҳәм (4.17)-формулалары түринде жазылады. Бирақ $x > 0$ областында Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - k_2'^2\right)\psi_2(x) = 0, \ \ (x \geq 0). \tag{4.28}$$

Бул теңлемеде $k_2'^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Теңлемениң шешими мынадай түрге ийе болады:

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2' x} + De^{k_2' x}, \ (x \geq 0). \tag{4.29}$$

Толқын функциясы барлық орынларда шекли болыўы керек. Бирақ, $e^{k_2' x}$ ағзасы $x \to \infty$ шегинде шексизликке умтылады. Сонлықтан D турақлысының нолге тең болыўы керек. Демек, толық толқын функциясының былайынша жазылыўы керек:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} Ae^{i(k_1 x - \omega t)} + BAe^{-i(k_1 x - \omega t)}, & x < 0, \\ Ce^{-k_2' x} e^{-i\omega t}, & x \geq 0. \end{cases} \tag{4.30}$$

Енди өткен жағдай ушын орынлағанымыздай, шағылысыў ҳәм өткериў коэффициентлерин анықлаймыз. Дәслеп биз өткериў коэффициентиниң шамасының $\psi_t(x) = Ce^{-k_2' x}$ толқын функциясы менен байланыслы екенлигин атап өтиўимиз керек. Сонлықтан өткериў коэффициентиниң мәниси нолге тең, себеби ψ_tфункциясы затлық функция болып табылады $[\psi_t(x) = \psi_t^*(x)]$. Усының нәтийжесинде тоқтың тығызлығы ушын мынадай аңлатпаны аламыз:

$$J_{ótken} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi_t(x)\frac{d\psi_t(x)}{dx} - \psi_t(x)\frac{d\psi_t(x)}{dx}\right) = 0. \tag{4.31}$$

Демек, шағылыстырыў коэффициенти R диң мәниси 1 ге тең болыўы керек. Биз бул нәтийжени $x = 0$ ноқатындағы үзликсизлик шәртин (4.17)- ҳәм (4.29)-аңлатпаларға қойыў жолы менен ала аламыз:

$$B = \frac{k_1 - ik_2'}{k_1 + ik_2'}A, \qquad C = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2'}A. \tag{4.32}$$

Буннан шағылыстырыў коэффициенти ушын мынадай аңлатпа келип шығады:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{k_1^2 + k_2'^2}{k_1^2 + k_2'^2} = 1. \tag{4.33}$$

Демек, биз классикалық жағдайдағыдай толық шығылысыўдың орын алатуғынлығын көремиз. Бирақ классикалық физика бойынша $x > 0$ областта бир де бөлекше табылмайды. Ал квантлық-механика болса толқын функциясының классикалық физика қадаған ететуғын областта да нолге тең болмайтуғынлығын, усының нәтийжесинде усы областта бөлекшени табыўдың мүмкин екенлигин көрсетеди. Бул жағдайға исениў ушын итималлықтың салыстырмалы тығызлығының

$$P(x) = |\psi_t(x)|^2 = |C|^2 e^{-k_2' x} = \frac{4k_1^2|A|^2}{k_1^2 + k_2'^2}e^{-k_2' x} \tag{4.34}$$

формуласының жәрдеминде анықланатуғынлығына итибар бериў керек. Бул функция $x = 0$ ноқатынан баслап x тың өсиўи менен экспоненциаллық түрде киширейеди. Бул областтағы итималлық тығызлығының өзгериўи 4.2-сүўретте келтирилген.

4.5. Потенциаллық барьер ҳәм дийўал

Шеп тәрептен потенциаллық барьерге қарай қозғалатуғын массасы m болған бөлекшелердиң ағысын қараймыз:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a. \end{cases} \tag{4.35}$$

Ийтериўши характерге ийе болған бул потенциал ҳеш қандай байланысқан ҳаллардың пайда болыўына мүмкиншилик бермейди (4.3)-сүўрет. Бул жағдайда да потенциаллық текшедеги жағдайдағыдай, биз бир тәрепке қарай шағылысыўға ийе боламыз. бул жағдайда да бөлекшелердиң барьердиң бийиклигинен үлкен ҳәм киши болған энергиясы менен байланыслы болған еки жағдайды қараймыз.

4.5.1. $E > V_0$ болған жағдай

Классикалық механиканың көз-қарасы бойынша импульслери $p_1 = \sqrt{2mE}$ шамасына тең бөлекшелер шеп тәрептен барьерге жақынласып, $0 \le x \le a$ областында киргенде әстеленеди ҳәм импульси $p_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}$ шамасына шекем киширейеди. Олар бул p_2 шамасына тең импульсин $x = a$ ноқатына жетемен дегенше сақлайды. Буннан кейин олар $x = a$ ноқатының шеклеринен шығыўдан $p_3 = \sqrt{2mE}$ импульсине ийе болады ҳәм импульстиң усы мәниси $x > a$ областтың барлығында сақланады. Бөлекшелер барьер арқалы өтиў ушын жеткиликли дәрежедеги энергияға ийе болғанлықтан бөлекшелердиң биреўи де қарама-қарсы тәрепке қарай шағылыспайды; барлық бөлекшелер $x > a$ областына өтеди, барьер арқалы бөлекшелердиң *толық өтиўи* орын алады.

Потенциал текше ушын өткерген таллаўлар тийкарында бул жағдайды аңсат изертлеўге болады. Тек ғана толқын функциясының барлық үш областтағы тербелмели моделди сәўлелендиретуғынлығын еслетип өтиў керек. Бөлекше ҳәр сапары жаңа областқа өткенде толқын функциясының амплитудасы киширейеди (4.3-сүўрет):

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{ik_1x}, & x \le 0, \\ \psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, & 0 < x < a, \\ \psi_3(x) = Ge^{ik_1x}, & x \ge a. \end{cases} \tag{4.36}$$

Бул аңлатпада $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $k_1 = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$. B, C, D ҳәм G коэффициентлерин A коэффициенти арқалы шегаралық шәртлердиң тийкарында анықлаўға болады: $\psi(x)$ пенен $d\psi(x)/dx$ $x = 0$ ҳәм $x = a$ ноқатларында үзликсиз болыўы керек:

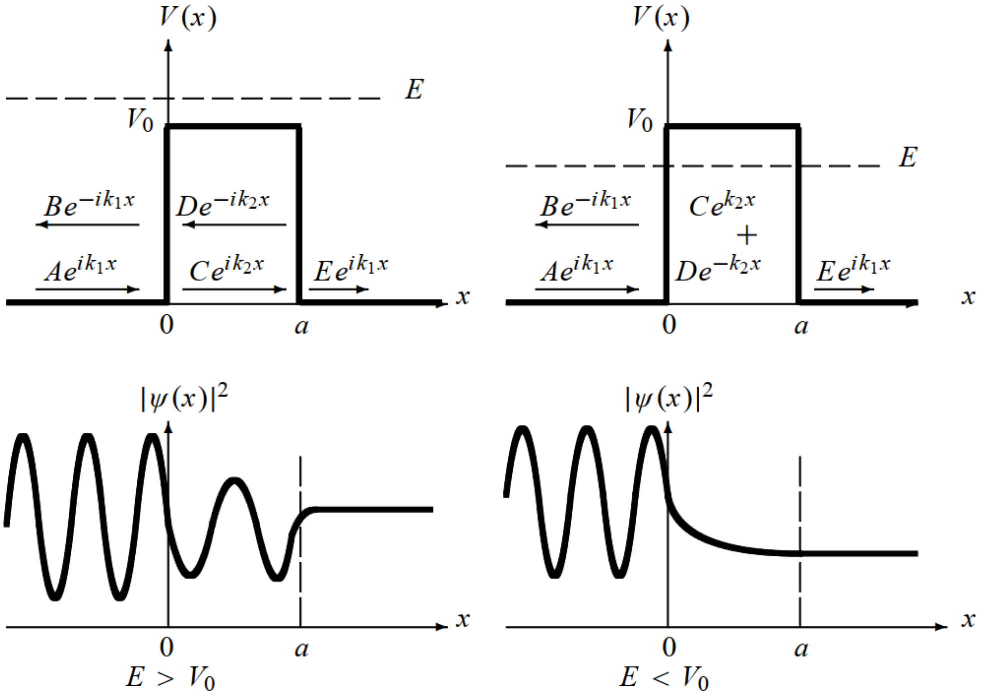
$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \qquad \frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}, \tag{4.37}$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a), \qquad \frac{d\psi_2(a)}{dx} = \frac{d\psi_3(a)}{dx}. \tag{4.38}$$

Бул теңлемелер төмендегилерди береди:

$$A + B = C + D, \qquad ik_1(A - B) = ik_2(C - D), \tag{4.39}$$

$$Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} = Ge^{ik_1a}, \qquad ik_2(Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a}) = ik_1Ge^{ik_1a}. \tag{4.40}$$



$E > V_0$ $E < V_0$

4.3-сүўрет. Потенциаллық барьер, түсиўши, шағылысқан ҳәм өткен толқынлардың тарқалыў бағытлары ҳәм $E > V_0$ жәнe $E > V_0$ теңсизликлери орынланатуғын жағдайлардағы итималлық тығызлығы $|\psi(x)|^2$.

Бул теңлемелерди G ға қарата шешип, мынаны аламыз:

$$G = \frac{4k_1k_2Ae^{-ik_1a}}{(k_1+k_2)^2e^{-ik_2a} - (k_1-k_2)^2e^{ik_2a}} = \\ = \frac{4k_1k_2Ae^{-ik_1a}}{4k_1k_2\cos(k_2a) - i(k_1^2+k_1^2)\sin(k_2a)}. \tag{4.41}$$

Демек, өткериў коэффициентин анықлаў ушын

$$\left(\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}\right)^2 = \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \tag{4.42}$$

теңлигиниң орынлы екенлигин есапқа алып, биз мынадай аңлатпаны аламыз:

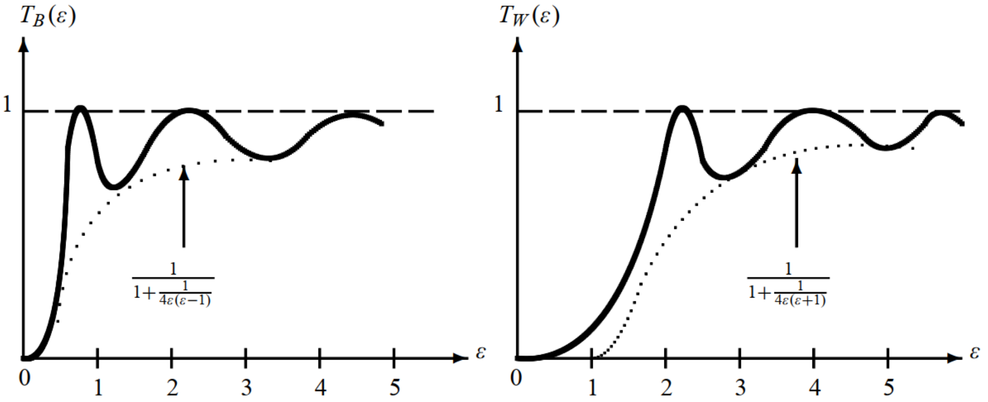
$$T = \frac{k_1|G|^2}{k_1|A|^2} = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}\right)^2 \sin^2(k_2a)\right]^{-1} = \\ = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)}\sin^2\left(a\sqrt{2mV_0/\hbar^2}\sqrt{\frac{E}{V_0}-1}\right)\right]^{-1}. \tag{4.43}$$

$\lambda = a\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ ҳәм $\varepsilon = E/V_0$ белгилеўлерин пайдаланып, биз T ны былайынша жаза аламыз:

$$T = \left[1 + \frac{1}{4\varepsilon(\varepsilon-1)}\sin^2\left(\lambda\sqrt{\varepsilon-1}\right)\right]^{-1}. \tag{4.44}$$

Тап усындай жоллар менен шағылыстырыў коэффициенти R ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$R = \frac{\sin^2\left(\lambda\sqrt{\varepsilon-1}\right)}{4\varepsilon(\varepsilon-1)+\sin^2\left(\lambda\sqrt{\varepsilon-1}\right)} = \left[1+\frac{4\varepsilon(\varepsilon-1)}{\sin^2\left(\lambda\sqrt{\varepsilon-1}\right)}\right]^{-1}. \tag{4.45}$$



4.4-сүўрет. Потенциаллық барьер ушын өтиў коэффициентлери: $T_B(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon(\varepsilon-1)}{4\varepsilon(\varepsilon-1)+\sin(\lambda\sqrt{\varepsilon-1})}$ ҳәм $T_W(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon(\varepsilon+1)}{4\varepsilon(\varepsilon+1)+\sin(\lambda\sqrt{\varepsilon+1})}$.

Айрықша жағдайлар

A. Егер $E \gg V_0$ теңсизлиги орынлы болса $\varepsilon \gg 1$ ҳәм өтиў коэффициенти T асимптоталық түрге 1 ге умтылады және $T \approx 1$ ҳәм $R \approx 0$ теңликлери орынлы болады. Солай етип, жүдә жоқары энергияларда ҳәм әззи потенциаллық барьерде бөлекшелер барьер эффектин сезбейди. Нәтийжеде бир толық өтиўге ийе боламыз.

B. Биз $\sin\left(\lambda\sqrt{\varepsilon-1}\right) = 0$ ҳәм $\lambda\sqrt{\varepsilon-1} = n\pi$ теңликлери орынланғанда да толық өтиўге ийе боламыз. 4.4-сүўретте көринип турғанындай, $T(\varepsilon_n) = 1$ толық өтиў түсиўши бөлекшениң энергиясы $\varepsilon_n = \frac{E_n}{V_0} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m\,a^2V_0} + 1$ теңлиги орынланғанда жүзеге келеди. Өтиў коэффициентиниң максимумының шамасы шексиз терең потенциал шуқырдың потенциалындағы бөлекшениң энергиясының меншикли мәнислерине сәйкес келгенде орын алады. Олар *резонанслар* атамасы менен белгили. Классикалық физикада ушыраспайтуғын резонанс қубылысы түсиўши ҳәм шағылысқан нурлардың интерференцияларының нәтийжеси болып табылады. Бундай қубылыс экспериментлерде (мысалы, төменги энергияға (E~0,1 эВ) ийе болған электронлардың қымбат баҳалы атомларда олардың симметриясына байланыслы шашыраўында бақланатуғын Рамзауэр-Таунсенд эффекти ҳәм нейтронлардың ядролардағы шашыраўында) бақланады.

C. $\varepsilon \to 1$ шегинде $\sin\left(\lambda\sqrt{\varepsilon-1}\right) \sim \lambda\sqrt{\varepsilon-1}$ теңлиги орынланады. Демек, (4.44)- ҳәм (4.45)-аңлатпалар мынадай түрге ийе болады:

$$T = \left(1+\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}\right)^{-1}, \qquad R = \left(1+\frac{2\hbar^2}{ma^2V_0}\right)^{-1}. \tag{4.46}$$

Потенциал шуқыр ($V_0 < 0$)

(4.44)-өтиў коэффициенти $V_0 > 0$ болған жағдай, яғный барьерлик потенциал ушын келтирип шығарылған еди. (4.44)-теңликке алып келген процедура менен жүрип, биз шекли потенциал шуқыр ушын (яғный $V_0 < 0$ теңсизлиги орынланатуғын жағдай) өтиў коэффицентиниң мынадай формула менен берилетуғынлығын көрсете аламыз:

$$T_W = \left[1 + \frac{1}{4\varepsilon(\varepsilon+1)} \sin^2(\lambda\sqrt{\varepsilon+1})\right]^{-1}. \tag{4.47}$$

Бул теңликте $\varepsilon = E/|V_0|$ ҳәм $\lambda = a\sqrt{2m|V_0|/\hbar^2}$. Толық өтиўдиң $\sin(\lambda\sqrt{\varepsilon+1}) = 0$ ямаса $\lambda\sqrt{\varepsilon+1} = n\pi$ теңлиги орын алғанда жүзеге келетуғынлығына итибар бериў керек. 4.4-сүўретте көрсетилгендей, $T_W(\varepsilon_n) = 1$ толық өтиўдиң $\varepsilon_n = E/|V_0| = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2V_0) - 1$ ямаса келип түсиўши бөлекшениң энергиясы $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2) - |V_0|$ шамасына тең болғанда орын алады. Биз 4.7-бөлимде симметриялы потенциаллық шуқырды толығырақ үйренемиз.

4.5.2. $E < V_0$ болған жағдай. Туннеллениў

Бундай жағдайда классикалық механика бойынша толық шығылысыўды күтиў керек: барьерге жетип келген ($x = 0$) қәлеген бөлекше қарама-қарсы тәрепке қарай шағылысады; ҳеш бир бөлекшениң барьер арқалы өтиўи мүмкин емес ал барьердиң ишинде ол терис кинетикалық энергияға ийе болған болар еди.

Биз ҳәзир квантлық-механикалық болжаўлардың классикалық аналоглардан кескин түрде өзгешеликлерге ийе екенлигин көрсетиўге тырысамыз. Себеби барьердиң арғы тәрепинде толқын функциясы нолге тең емес.

Үш область ушын Шредингер теңлемесиниң шешимлери (4.36) шешимлерге уқсас болады. Тек ғана бул жағдайда $\psi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$ функциясын $\psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$ функциясы менен алмастырыўға туўры келеди:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & x \le 0, \\ \psi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}, & 0 < x < a, \\ \psi_3(x) = Ge^{ik_1x}, & x \ge a. \end{cases} \tag{4.48}$$

Бул теңликте $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ ҳәм $k_1^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$. Бул толқын функциясына сәйкес келетуғын итималлық тығызлығының өзгериси 4.3-сүўретте көрсетилгендей болады деп күтиў керек. $x < 0$ ҳәм $x > a$ областларында тербелетуғын, ал $0 < x < a$ областында экспоненцияллық сөнетуғын болады.

Шағылыстырыў ҳәм өтиў коэффициентлери болған

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \qquad T = \frac{|G|^2}{|A|^2} \tag{4.49}$$

шамаларын табыў ушын A шамасының тийкарында B менен G шамаларын анықлаў керек. Толқын функциясының ҳәм оның $x = 0$ ҳәм $x = a$ ноқатларындағы үзликсизлик шәрти мыналарды береди:

$$\mathrm{A} + B = C + D, \tag{4.50}$$

$$ik_1(A - B) = k_1(C - D), \tag{4.51}$$

$$Ce^{k_2a} + De^{-k_2a} = Ge^{ik_1a}, \tag{4.52}$$

$$k_2(Ce^{k_2a} - De^{-k_2a}) = ik_1Ee^{ik_1a}. \tag{4.53}$$

Соңғы еки теңлеме C менен D ушын мынадай аңлатпаларға алып келеди:

$$C=\frac{E}{2}\left(1+i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{-(ik_1-k_2)a}, D=\frac{E}{2}\left(1-i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{(ik_1+k_2)a}. \quad (4.54)$$

Бул еки аңлатпаны (4.50)- ҳәм (4.51)- аңлатпаларға қойып ҳәм оларды A ға бөлип, бул еки теңлемениң

$$1+\frac{B}{A}=\frac{G}{A}e^{ik_1a}\left[\cosh(k_2a)-i\frac{k_1}{k_2}\sinh(k_2a)\right], \quad (4.55)$$

$$1-\frac{B}{A}=\frac{G}{A}e^{ik_1a}\left[\cosh(k_2a)+i\frac{k_2}{k_1}\sinh(k_2a)\right] \quad (4.56)$$

теңлемелерине алып келинетуғынлығын көрсете аламыз. Бул теңлемелерди $\frac{B}{A}$ менен $\frac{G}{A}$ ларға қарата шешип, биз мыналарды аламыз:

$$\frac{B}{A}=-i\frac{k_1^2+k_2^2}{k_1k_2}\sinh(k_2a)\left[2\cosh(k_2a)+i\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}\sinh(k_2a)\right]^{-1}, \quad (4.57)$$

$$\frac{G}{A}=2e^{ik_1a}\left[2\cosh(k_2a)+i\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}\sinh(k_2a)\right]^{-1}. \quad (4.58)$$

Солай етип, R ҳәм T коэффициентлери ушын төмендегидей формулаларды аламыз:

$$R=\left(\frac{k_1^2+k_2^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a)\left[4\cosh^2(k_2a)+i\left(\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a)\right]^{-1}, \quad (4.59)$$

$$T=\frac{|G|^2}{|A|^2}=4\left[4\cosh^2(k_2a)+i\left(\frac{k_1^2-k_2^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a)\right]^{-1}. \quad (4.60)$$

Биз R коэффициентин T арқалы былайынша аңлата аламыз:

$$R=\frac{1}{4}T\left(\frac{k_1^2+k_2^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a). \quad (4.61)$$

$\cosh^2(k_2a)=1+\sinh^2(k_2a)$ теңлигиниң орынлы екенлигин есапқа алсақ, онда (4.60)-формуланың орнына төмендегидей формуланы аламыз:

$$T=\left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{k_1^2+k_2^2}{k_1k_2}\right)^2\sinh^2(k_2a)\right]^{-1}. \quad (4.62)$$

T шамасының *шекли* екенлигине итибар бериў керек. Бул бөлекшениң $x\geq a$ областына өтиўиниң итималлығының нолге тең емес екенлигин аңғартады (бирақ, классикалық физикада $x\geq a$ областына өтиўдиң мүмкиншилиги жоқ) ҳәм *микроскопиялық объектлердиң толқынлық қәсийети менен байланыслы болған квантлық-механикалық эффект болып табылады*. Бул қубылыс *туннеллик эффект* атамасы менен белгили. Квантлық-механикалық объектлер классикалық көз-қараслар бойынша өтиў мүмкин болмаған барьерлер арқалы өте алады. Бул эффект ҳәзирги заман физикасының ҳәр қыйлы областларында қолланылады (элементар бөлекшелер физикасы менен ядролық физикадан баслап ярым өткизгишлерден соғылған әсбапларға шекем). Мысалы, радиоактив ыдыраўлар менен электронлық әсбаплардағы зарядтың алып жүрилиўи туннеллик эффекттиң ең көп тарқалған көриниўлери болып табылады.

$$\left(\frac{k_1^2+k_2^2}{k_1k_2}\right)^2=\left(\frac{V_0}{\sqrt{E(V_0-E)}}\right)^2=\frac{V_0^2}{E(V_0-E)} \quad (4.63)$$

теңликлерин пайдаланып биз (4.61)- ҳәм (4.62)-аңлатпаларды былайынша жаза аламыз:

$$R = \frac{1}{4}\frac{V_0^2 T}{E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right), \tag{4.64}$$

$$T = \left[1 + \frac{1}{4}\frac{V_0^2}{E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right)\right]^{-1} \tag{4.65}$$

ямаса

$$R = \frac{1}{4}\frac{T}{\varepsilon(1-\varepsilon)}\sinh^2\left(\lambda\sqrt{1-\varepsilon}\right), \tag{4.66}$$

$$T = \left[1 + \frac{1}{4}\frac{1}{\varepsilon(1-\varepsilon)}\sinh^2\left(\lambda\sqrt{1-\varepsilon}\right)\right]^{-1} \tag{4.67}$$

Бул теңликлерде $\lambda = a\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ ҳәм $\varepsilon = E/V_0$.

Айрықша жағдайлар

Егер $E << V_0$ теңсизлиги орынлы болса, онда $\varepsilon \ll 1, \lambda\sqrt{1-\varepsilon} \gg 1$ теңсизликлери келип шығады. Бундай жағдайда $\sinh\left(\lambda\sqrt{1-\varepsilon}\right) \approx \frac{1}{2}\exp\left(\lambda\sqrt{1-\varepsilon}\right)$ теңсизлиги орынланады ҳәм өтиў коэффициентин былайынша аппроксимациялай аламыз:

$$T \approx \left\{\frac{1}{4\varepsilon(1-\varepsilon)}\left[\frac{1}{2}e^{\lambda\sqrt{1-\varepsilon}}\right]^2\right\}^{-1} = 16\varepsilon(1-\varepsilon)e^{-2\lambda\sqrt{1-\varepsilon}} = \\ = \frac{16E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-(2a/\hbar)\sqrt{2m(V_0-E)}}. \tag{4.68}$$

Бул аңлатпа өтиў коэффициентиниң нолге тең емес, ал шекли мәниске ийе екенлигин көрсетеди (классикалық физикада нолге тең болыўы керек). Демек, квантлық механикада барьердиң арғы тәрепине ($x > a$ болған областқа) бөлекшениң туннеллениўи орын алады екен.

A. $E \approx V_0$, яғный $\varepsilon << 1$ болған жағдайда (4.66)- ҳәм (4.67)-аңлатпалардың (4.46)-аңлатпаға алып келетуғынлығын тексерип көриўге болады.

B. $\hbar \to 0$ классикалық шегин қабыл еткен жағдайда (4.66)- ҳәм (4.67)-коэффициентлер классикалық нәтийжеге өтеди: $R = 1$ ҳәм $T = 0$.

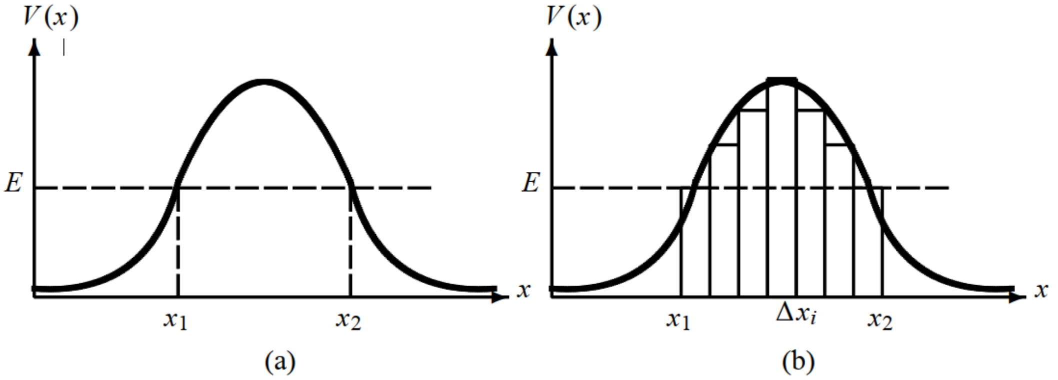
4.5.3 Туннеллик эффект

Улыўма жағдайда туннеллик эффект энергиясы потенциаллық энергиядан киши болған, яғный $E < V(x)$ теңсизлиги орынланатуғын областтағы тарқалыўынан ибарат. Классикалық жақтан $x_1 < x < x_2$ теңсизлиги менен анықланатуғын бул область (4.5-a сүўрет) усы областта кинетикалық энергиясы терис болатуғын бөлекше ушын қадаған етилген; x_1 менен x_2 ноқатлары классикалық бурылыў ноқатлары түринде белгили.

Бирақ, квантлық механикада бөлекшелер толқынлық қәсийетке ийе болғанлықтан, квантлық толқынлар барьердеги туннель арқалы өте алады.

Tuўrы mүyeshli barьer bolғan mısalda kөrsetilgendey, bөlekshenin barьer arqalı өtiўdiң itimallıғın nolge teң emes. Bunday jaғday ushın

$$T\sim \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[V(x)-E]}\,dx\right\}. \tag{4.79}$$



4.5-сүўрет. (a) Потенциал барьер арқалы туннеллениў. (b) Туўры мүйешли барьерлерге ийе әстелик пенен өзгеретуғын $V(x)$ потенциалын аппроксимациялаў.

Биз бул қатнасты турпайы жуўықлаўдың жәрдеминде ала аламыз. Оның ушын классикалық қадаған етилген $x_1 < x < x_2$ областын алыўымыз ҳәм оны үлкен болмаған Δx_i интервалларына бөлиўимиз керек (4.5-b сүўрет). Егер Δx_i шамасы жеткиликли дәрежеде киши болса, онда ҳәр бир x_i ноқатындағы $V(x_i)$ потенциалды туўры мүйешли потенциал барьер менен аппроксимациялаўға болады. Солай етип, биз өтиўдиң итималлығын есаплаў ушын $V(x_i)$ ға сәйкес келетуғын (4.68)-аңлатпаны пайдалана аламыз:

$$T_i\sim \exp\left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m[V(x_i)-E]}\right]. \tag{4.70}$$

4.5-сүўретте көрсетилген улыўмалық потенциал ушын ($x_1 < x < x_2$ аралығындағы бул улыўмалық потенциалды биз қалыңлығы Δx_i шамасына тең болған көп санлы интервалларға бөлдик) өтиўдиң итималлығы мынадай формуланың жәрдеминде бериледи:

$$T\sim \lim_{N\to\infty}\prod_{i=1}^{N}\exp\left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2m[V(x_i)-E]}\right] =$$

$$= \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\lim_{\Delta x_i\to 0}\sum_i \Delta x_i\sqrt{2m[V(x_i)-E]}\right] \to \tag{4.71}$$

$$\to \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[V(x_i)-E]}\,dx\right].$$

$V(x)$ потенциалы тегис ҳәм x қа байланыслы әстелик пенен өзгеретуғын болған жағдайда ғана усындай қатнастың алыныўына алып келетуғын жақынласыў дурыс болады.

4.6. Шексиз терең туўры мүйешли шуқырдың ишиндеги потенциал

4.6.1 Асимметриялық туўры мүйешли шуқыр

Шексиз терең ассимметриялы потенциаллық шуқырдың ишинде қозғалатуғын массасы m болған бөлекшени қараймыз.

$$V(x)=\begin{cases}+\infty, & x<0,\\ 0, & 0\le x\le a,\\ +\infty, & x>0.\end{cases} \tag{4.72}$$

Классикалық физика бойынша усындай шуқырдың ишиндеги бөлекше турақлы p импульси менен шуқырдың дийўалларындағы шағылысыўлардың салдарынан алға ҳәм артқа қарай қозғалыста болады. Квантлық механиканың көз-қараслары бойынша бул бөлекше тек байланысқан ҳаллардағы шешимлерге ҳәм азғынбаған энергия спектрине ийе болады. $0<x<a$ областының сыртында $V(x)$ шексиз үлкен болғанлықтан, бул шегараның сыртларында бөлекшениң толқын функциясы нолге тең болады. Демек, биз тек шуқырдың ишинде ғана шешимлерге ийе боламыз. Бул жағдайда Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0. \tag{4.73}$$

Бул теңлемеде $k=2mE/\hbar^2$, теңлемениң шешимлери мынадай түрге ийе болады:

$$\psi(x)=A'^{e^{ikx}}+B'^{e^{-ikx}}\Rightarrow\psi(x)=A\ \sin(kx)+B\cos(kx). \tag{4.74}$$

Толқын функциясы дийўалларда нолге айланады, $\psi(0)=\psi(a)=0$. $\psi(0)=0$ шәрти B коэффициентиниң нолге тең екенлигин аңғартады, ал $\psi(a)=0$ шәрти $\psi(a)=A\ \sin(ka)=0$ теңлигин береди, ал бул теңлик болса

$$k_na=n\pi,\qquad(n=1,2,3,\dots) \tag{4.75}$$

теңлигин береди. Бул шәрт $k=2mE/\hbar^2$ теңлиги менен биргеликте энергияның мәнислерин анықлаўға мүмкиншилик береди:

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2m}k_n^2=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2. \tag{4.76}$$

Энергия квантланады екен; энергияның тек белгили болған мәнислери жүзеге келеди. Бундай жағдайдың орын алатуғынлығын күтиўге болады, себеби бөлекшениң ҳаллары кеңисликтиң белгили болған областында шекленген ҳәм бул ҳаллар байланысқан ҳаллар болып табылады. Сонлықтан энергияның спектри дискрет. Бул жағдай классикалық физикадағы жағдайдан кескин түрдеги айырмаға ийе ҳәм бундай физикада бөлекшениң $E=p^2/2m$ формуласының жәрдеминде берилетуғын энергиясы үзликсиз өзгереди. Классикалық энергия үзликсиз түрде эволюцияға ушырайды.

(4.76)-формуладан қоңсылас қəддилердиң арасындағы энергия турақлы емес екенлиги көринип тур:

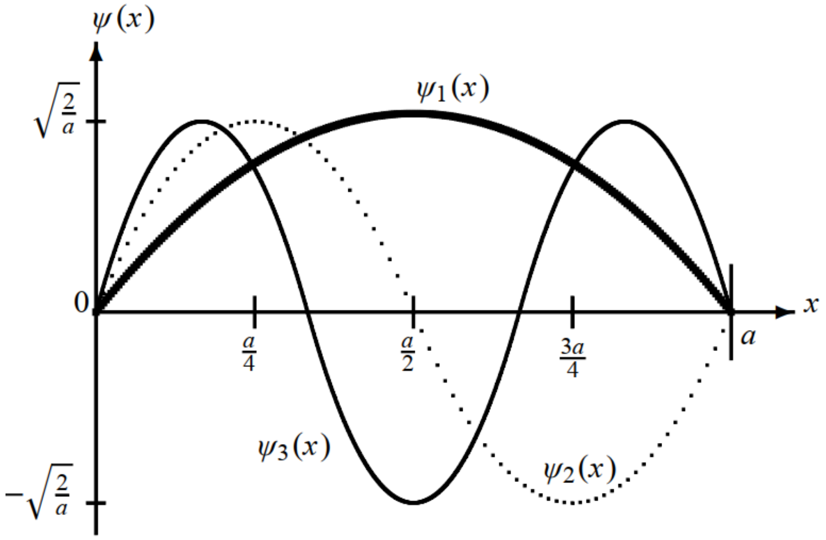
$$E_{n+1}-E_n=2n+1.$$

Бул мынадай жағдайға алып келеди:

$$\frac{E_{n+1}-E_n}{E_n}=\frac{(n+1)^2-n^2}{n^2}=\frac{n+1}{n^2}. \tag{4.78}$$

Классикалық $n\to\infty$ шегинде

$$\lim_{n\to\infty}\frac{E_{n+1}-E_n}{E_n}=\lim_{n\to\infty}\frac{n+1}{n^2}=0. \tag{4.79}$$



4.6-сүўрет. Шексиз терең потенциал шуқырдың ең төменги үш ҳалы. $\psi_n(x)=\sqrt{2/a}\sin(n\pi x/a)$; $\psi_{2n+1}(x)$ ҳəм $\psi_{2n}(x)$ ҳаллары $x=a/2$ ноқатына қарата сəйкес жуп ҳəм тақ.

Усының салдарынан қəддилер бир бирине жүдə жақын жайласады ҳəм оларды бир биринен ажыратыўдың мүмкиншилиги пүткиллей болмайды.

$B=0$ ҳəм $k_n=n\pi/a$ теңликлери орынлы болғанлықтан $\psi_n(x)=A\sin(n\pi x/a)$ функциясы орынлы. A турақлысының шамасы нормировка шəрти бойынша анықланады:

$$1=\int_0^a|\psi_n(x)|^2dx=|A|^2\int_0^a\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx\Rightarrow A=\sqrt{\frac{2}{a}}. \tag{4.80}$$

Демек, толқын функциялары ушын

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right),\quad (n=1,2,3,\dots) \tag{4.81}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Биринши бир неше функция 4.6-сүўретте келтирилген.

Солай етип, ўақыттан ғəрезсиз болған Шредингер теңлемесин шешиў бизге (4.76) энергия менен (4.81)- толқын функцияны берди. n квант санының оң мəнислерине сəйкес келетуғын дискрет энергия қəддилериниң шексиз избе-излиги орын алады екен. $n=0$ теңлиги бизге қызықлы емес нəтийжени беретуғынлығы айқын. Бундай жағдайда $\psi_0(x) = 0$ ҳәм $E_0 = 0$ теңлигине ийе боламыз. Кейинирек биз бул жағдайдың физикалық нәтийжелерин толығырақ қараймыз. Солай етип, ең төменги энергия ямаса тийкарғы ҳалдың энергиясы $n = 1$ болған ҳалға сәйкес келеди. Оның мәниси $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$. Ноллик энергияға ийе ҳал болмағанлықтан кейинирек бул энергияны ноллик ноқаттың энергиясы деп атаймыз. $n = 2, 3, 4, \dots$ шамаларына сәйкес келетуғын ҳалларды қозған ҳаллар деп атаймыз. Олардың энергиялары $E_n = E_1 n^2$ формуласының жәрдеминде бериледи. 4.2-теоремада еслетилип өтилгениндей, ҳәр бир $\psi_n(x)$ функциясы $n - 1$ түйинге ийе болады. 4.6-сүўретте шуқырдың орайына қарата $\psi_{2n+1}(x)$ функциясының жуп, ал $\psi_{2n}(x)$ функциясының тақ екенлиги көринип тур. Биз 4.6.2-бөлимде симметриялы шуқырды көргенимизде биз симметриялық потенциаллық шуқырды қараймыз. Энергия қәддилериниң барлығының азғынғанлығын (энергияның ҳәр бир қәддине тек бир меншикли функция сәйкес келеди), соның менен бирге энергияның ҳәр қыйлы қәддилерине сәйкес келетуғын толқын функцияларының ортогоналлығын көремиз:

$$\int_0^a \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}. \tag{4.82}$$

Биз стационар ҳаллар менен ис алып баратырмыз ҳәм $E_n = E_1 n^2$ теңлиги орынлы болғанлықтан, ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемесиниң ең улыўмалық шешими былайынша жазылады:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-in^2 E_1 t/\hbar}. \tag{4.83}$$

Ноллик ноқаттың энергиясы

Туўры мүйешли шуқырдың неликтен ноллик энергияға ийе болмайтуғынлығын қарайық. Егер бөлекше ноллик энергияға ийе болса, онда ол шуқырдың ишинде тынышлық ҳалында турыўы керек, ал бул жағдай Гейзенбергтиң анықсызлық принципине қайшы келеди. Бөлекшени кеңисликтиң шекленген областында локалластырсақ, онда ол кинетикалық энергияның минималлық мәнисине алып келетуғын шекли импульске ийе болады. Яғный бөлекшени $0 < x < a$ областында локализациялаў бөлекшениң орнын анықлаўдағы a шамасына тең анықсызлықтың пайда болыўына алып келеди. Ал бундай жағдайда Гейзенберг принципине сәйкес импульс $\Delta p \sim \hbar/a$ шамасына тең анықсызлыққа ийе болады. Ал, бул жағдай болса, өз гезегинде шамасы $\hbar^2/(2ma^2)$ минималлық кинетикалық энергиясын пайда етеди. Бул сапалық жақтан энергияның $E_1 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$ шамасына ең дәл мәнисине сәйкес келеди. Ҳақыйқатында да, (4.216)-теңликте Δp_1 диң мәнисин дәл баҳалаўдың энергияның $E_1 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$ шамасына дәл тең болатуғынлығы көрсетиледи. Импульстеги анықсызлықтың мәниси шуқырдың кеңлигине кери пропорционал болғанлықтан ($\Delta p \sim \hbar/a$), кеңликтиң шамасы киширейсе Δp_1 анықсызлығының мәниси үлкейеди. Бул бөлекшени кем-кемнен үлкен тезлик пенен қозғалыўға мәжбүрлейди, сонлықтан ноллик ноқаттың энергиясы да үлкейеди.

Керисинше, шуқырдың кеңлиги үлкейсе, ноллик ноқаттың энергиясы кемейеди, бирақ ол ҳеш ўақытта жоғалмайды.

Солай етип, ноллик ноқаттың энергиясы локализацияның себебинен бөлекшениң минималлық қозғалысын сәўлелендиреди. Байланыс потенциалы бар болған жағдайда ең киши энергияға ийе ҳалдың энергиясы минималлық потенциаллық энергиядан үлкен. Бул жағдай классикалық механиканың көз-қарасларына кескин түрде сәйкес келмейди ҳәм бунда мүмкин болған минималлық энергия кинетикалық энергия нолге тең болған жағдайдағы потенциаллық энергияның минималлық мәнисине тең. Бирақ, квантлық механикада потенциалдың өзи ең төменги ҳалды минималластырмайды, ал кинетикалық энергия менен потенциаллық энергияның суммасына тийисли. Ал бул жағдай шекли тийкарғы ҳалдың пайда болыўына ямаса ноллик ноқаттың энергиясына алып келеди. Бул концепция микроскопиялық дүнья сферасында жүдә әҳмийетли болған физикалық нәтийжелерге алып келеди. Мысалы, ноллик ноқатта қозғалыс болмағанда электронлар ядроға қулап, атомлар орнықлы болмаған болар еди. Усының менен бир қатарда ноллик ноқаттың энергиясы жүдә төменги температуралардағы гелийдиң қатты ҳалға өтиўинен сақлайды.

4.1-мысал. Ноллик ноқаттың энергиясы

Ноллик ноқаттың энергиясының макроскопиялық системалардан микроскопиялық системаларға өткенде үлкейетуғынлығын иллюстрациялаў ушын төмендегидей үш жағдай ушын шексиз потенциал шуқырдағы бөлекше ушын ноллик ноқаттың энергиясын есапլаңыз:

(а) узынлығы 5 м ге тең сызықлық бойында жайластырылған массасы 100 г болған шар ушын.

(б) қалыңлығы $2 \cdot 10^{-10}$ м болған пәнжерениң ишинде жайластырылған кислород атомы.

(в) сызықлы өлшеми 10^{-10} м болған атомның ишиндеги электрон.

Шешими:

(а). Узынлығы 5 м болған сызықта жайластырылған 100 граммлық шардың ноллик ноқатының энергиясы мынаған тең:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \cong \frac{10 \cdot 10^{-68}\,Dj}{2 \cdot 0.1 \cdot 25} \cong 2 \cdot 10^{-68}\,Dj = 1{,}25 \cdot 10^{-49}\,eV. \tag{4.84}$$

Бул энергияның шамасын белгили болған қандай да бир эксперименталлық усылдың жәрдеминде өлшеўдиң мүмкиншилиги жоқ.

(b). Өлшеми 2·10^{-10} м болған пәнжерениң ишинде жайластырылған кислород атомының ноллик ноқатының энергиясын есаплаў ушын оның 16 нуклонға ийе екенлигин ҳәм массасының $m = 26 \cdot 10^{-27}$ кг екенлигин итибарға аламыз. Солай етип, биз мынаған ийе боламыз:

$$E = \frac{10^{-67}\,Dj}{2 \cdot 26 \cdot 10^{-27} \cdot 4 \cdot 10^{-20}} \cong 0{,}5 \cdot 10^{-22}\,Dj \cong 3 \cdot 10^{-4}\,eV. \tag{4.85}$$

(c). Массасы $m \approx 10^{-30}$ кг болған ҳәм атомның ишинде шекленген ($a \sim 10^{-10}$ м) электронның ноллик ноқатының энергиясы мынаған тең:

$$E = \frac{10^{-67}\ Dj}{2 \cdot 10^{-30} \cdot 10^{-20}} \cong 0{,}5 \cdot 10^{-18}\ Dj \cong 30\ eV. \tag{4.86}$$

Бул энергия атомлық масштабта әҳмийетке ийе. Себеби водород атомындағы байланыс энергиясы шама менен 13,6 эВ ке тең. Солай етип, ноллик ноқаттың энергиясы макроскопиялық объектлер ушын есапқа алмастай дәрежеде киши, бирақ микроскопиялық системалар ушын әҳмийетли.

4.6.2. Симметриялық потенциал шуқыр

Енди симметриялы болыўы ушын (4.72)-потенциалды шеп тәрепке қарай $a/2$ аралығына жылыстырғанда не болар еди деген сораў беремиз. Бундай жағдайда мынадай шәртлерди жазыўымыз керек:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & x < -a/2\,, \\ 0, & -a/2 \le x \le a/2, \\ +\infty, & x > a/2\,. \end{cases} \tag{4.87}$$

Бириншиден, усындай жылыстырыўдың салдарынан (4.76)-энергия спектри өзгериссиз қалады деп күтиўимиз керек. Себеби гамильтониан кеңисликлик жылыстырыўларға қарата инвариант ҳәм ол тек кинетикалық бөлимге ийе, ол бөлекшениң импульси менен коммутацияланады $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$. Энергия спектри дискрет ҳәм азғынбаған.

Екиншиден, бул усы бапта симметриялы $V(-x) = V(x)$ потенциаллары ушын байланысқан ҳаллардың толқын функцияларының я жуп я тақ болатуғынлығын көрдик. (4.87)-потенциалға сәйкес келетуғын толқын функциясын былайынша жазыўға болады:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left[\frac{n\pi}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] =$$

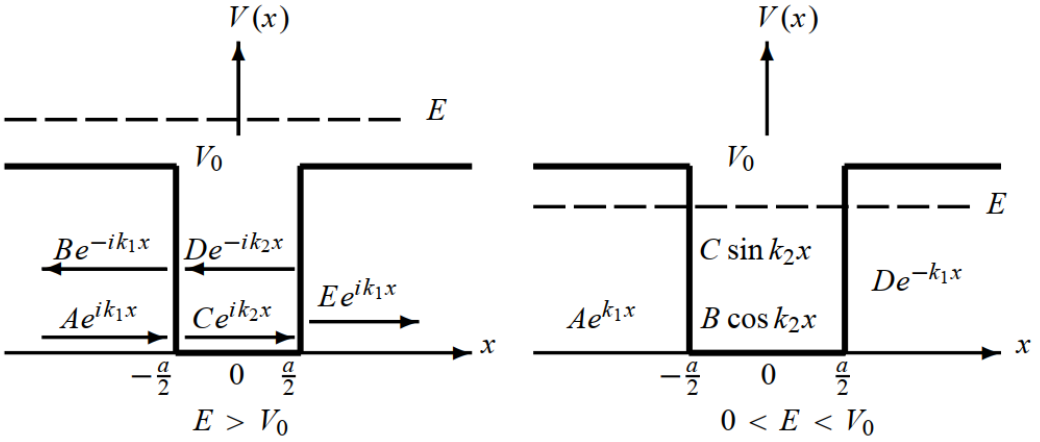
$$= \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \cos\left(\dfrac{n\pi}{a} x\right), & (n = 1, 3, 5, \dots), \\ \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin\left(\dfrac{n\pi}{a} x\right), & (n = 2, 4, 6, \dots). \end{cases} \tag{4.88}$$

Демек, $n = 1, 3, 5, \dots$ тақ квант санларына сәйкес келетуғын толқын функциялары симметриялы, $\psi(-x) = \psi(x)$, ал $n = 2, 4, 6, \dots$ санларына сәйкес келетуғын толқын функциялары антисимметриялы екен, $\psi(-x) = -\psi(x)$.

4.7. Тереңлиги шекли болған потенциал шуқырдағы бөлекше

Төмендегидей симметриялы потенциалда қозғалатуғын массасы m болған бөлекшени қараймыз:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < -a/2\,, \\ 0, & -a/2 \le x \le a/2, \\ V_0, & x > a/2\,. \end{cases} \tag{4.89}$$



4.7-сүўрет. Тереңлиги шекли болған потенциал шуқырдағы потенциал ҳәм $E > V_0$ ҳәм $E < V_0$ болған жағдайлар ушын түсиўши ҳәм шағылысқан толқынлардың тарқалыў бағытлары.

$E > V_0$ ҳәм $E < V_0$ теңсизликлери орын алатуғын жағдайлар физикалық жақтан ең қызықлы жағдайлар болып табылады (4.7-сүўрет). Биз $E > V_0$ болған жағдайда еки рет азғынған энергия спектрин ҳәм $E < V_0$ теңсизлиги орынланатуғын жағдайларда дискрет ҳәм азғынбаған спектрге ийе боламыз.

4.7.1. Шашыраў ушын шешимлер ($E > V_0$)

Классикалық көз-қарастан, егер бөлекше дәслеп шеп тәрептен турақлы $\sqrt{2m(E - V_0)}$ импульси менен келип түсетуғын болса, онда $-a/2 > x > a/2$ областында импульси $\sqrt{2mE}$ шамасына жеткенше тезленеди ҳәм $x > a$ областында өзиниң дәслепки импульсине ийе болатуғындай болып әстеленеди. Шеп тәрептен келип түсетуғын барлық бөлекшелердиң ҳеш қайсысы да кери тәрепке қарай шағылыстырылмайды, олардың барлығы оң тәрепке қарай өтеди; демек, $T = 1$ ҳәм $R = 0$.

Квантлық механиканың көз қарасларында турып, биз бундай мәселени текше тәризли ҳәм барьерлик потенциаллар ушын қарап өттик. Алынған нәтийжелер тийкарында биз шағылыстырыў коэффициенти ушын шекли мәнисти аламыз. Шешимди алыў қурамалы мәселе емес; буннан бурынғы бөлимлерде орынланған процедуралар бойынша жүриў керек. Толқын функциясы барлық үш областта тербелмели характерге ийе болады (қараңыз: 4.7-сүўрет).

4.7.2. Шекленген ҳаллардағы шешимлер ($0 < E < V_0$)

Классикалық көз-қараслар бойынша $E < V_0$ теңсизлиги орынланатуғын жағдайларда $-a/2 > x > a/2$ областында бөлекшениң қозғалысы толығы менен шекленген; ол $x = -a/2$ ҳәм $x = +a/2$ ноқатларының арасында турақлы $p = \sqrt{2mE}$ импульси менен алға ҳәм артқа қарай қозғалыста болады. Квантлық механика бойынша шешимлер жүдә қызықлы, себеби олар энергияның дискрет спектрин береди, $x < -a/2$ ҳәм $x > -a/2$ областларында толқын функциясы сөнеди, ал $-a/2 > x > a/2$ областында тербеледи. Бул үш областта Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - k_1^2\right)\psi_1(x) = 0, \quad \left(x < -\frac{1}{2}a\right), \tag{4.90}$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k_2^2\right)\psi_2(x) = 0, \quad \left(-\frac{1}{2}a \le x \le \frac{1}{2}a\right), \tag{4.91}$$

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - k_1^2\right)\psi_3(x) = 0, \quad \left(x > -\frac{1}{2}a\right). \tag{4.92}$$

Бул аңлатпаларда $k_1^2 = 2m\,(V_0 - E)/\hbar^2$ ҳәм $k_2^2 = 2m\,E/\hbar^2$. x тың өсиўи менен экспоненциаллық түрде өсетуғын физикалық жақтан пайдаланыўға болмайтуғын шешимлерди есапқа алмай, биз жоқарыда жазылған Шредингер теңлемелериниң $x < -\frac{1}{2}a$ ҳәм $x > -\frac{1}{2}a$ областлары ушын шешимлерин былайынша жаза аламыз:

$$\psi_1(x) = Ae^{k_1 x}, \qquad \left(x < -\frac{1}{2}a\right), \tag{4.93}$$

$$\psi_3(x) = Ae^{-k_1 x}, \qquad \left(x > -\frac{1}{2}a\right). \tag{4.94}$$

(4.4)-аңлатпа жазылғанда еслетилип өтилгениндей, симметриялы болған бир өлшемли гамильтонианлардың меншикли функциялары кеңисликтиң инверсиясында я тақ, я жуп болатуғын болғанлықтан, (4.90)-(4.92)-шешимлер антисимметриялы (тақ)

$$\psi_a(x) = \begin{cases} Ae^{k_1 x}, & \left(x < -\frac{1}{2}a\right) \\ C\sin(k_2 x)\,, & \left(-\frac{1}{2}a \le x \le \frac{1}{2}a\right) \\ De^{-k_1 x}, & \left(x > -\frac{1}{2}a\right) \end{cases} \tag{4.95}$$

ямаса симметриялы (жуп)

$$\psi_a(x) = \begin{cases} Ae^{k_1 x}, & \left(x < -\frac{1}{2}a\right) \\ B\cos(k_2 x)\,, & \left(-\frac{1}{2}a \le x \le \frac{1}{2}a\right) \\ De^{-k_1 x}, & \left(x > -\frac{1}{2}a\right). \end{cases} \tag{4.96}$$

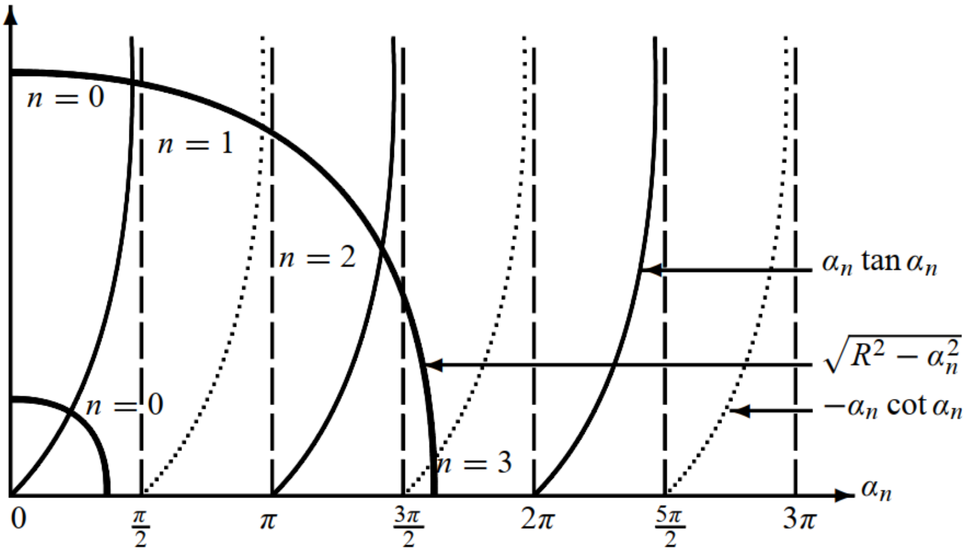
Меншикли мәнислерди анықлаў ушын $x = \pm\frac{1}{2}a$ теңликлери орынланған жағдайдағы үзликсизлик шәртлерин пайдаланыў керек. $x = \pm\frac{1}{2}a$ теңлиги орынланғандағы $\psi_a(x)$ функциясының логарифмлик туўындының үзликсизлиги $\frac{1}{\psi_a(x)}\frac{d\psi_a(x)}{dx}$ мынаны береди

$$k_2\cot\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = -k_1. \tag{4.97}$$

Тап сол сыяқлы $x = \pm\frac{1}{2}a$ теңлиги орынлы болғандағы $\frac{1}{\psi_S(x)}\frac{d\psi_S(x)}{dx}$ ның үзликсизлиги

$$k_2\tan\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = k_1 \tag{4.98}$$

теңлигин береди.



4.8-сүўрет. Тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциаллық шуқыр ушын графикалық шешимлер: бул шешимлер $\sqrt{R^2-\alpha_n^2}$ шеңбери менен $\alpha_n \tan\alpha_n$ ҳәм $-\alpha_n \cot\alpha_n$ функцияларының графиклериниң кесилисиў ноқатларынан турады. $\alpha_n^2 = (k_2a/2)^2 = ma^2E_n/(2\hbar^2)$ ҳәм $R^2 = ma^2V_0/(2\hbar^2)$.

(4.97)- ҳәм (4.98)-трансцендент теңлемелерди тиккелей шешиўге болмайды. Биз бул теңлемелерди шешиўдиң графикалық ямаса санлы түрде шешиў мүмкин екенлигин атап өтемиз ҳәм графикалық шешиў ушын оларды төмендегидей етип көргизбели түрде жазамыз:

$$-\alpha_n \cot\alpha_n = \sqrt{R^2-\alpha_n^2} \text{ (жуп ҳаллар ушын),} \tag{4.99}$$

$$\alpha_n \tan\alpha_n = \sqrt{R^2-\alpha_n^2} \text{ (тақ ҳаллар ушын).} \tag{4.100}$$

Бул теңликлерде $\alpha_n^2 = (k_2a/2)^2 = ma^2E_n/(2\hbar^2)$ ҳәм $R^2 = ma^2V_0/(2\hbar^2)$. Бул теңлемелер $k_1 = \sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$ ҳәм $k_2 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ шамаларын (4.97) менен (4.98) ге қойыў жолы менен алынған. (4.99)- менен (4.100)-аңлатпалардың шеп тәреплери тригонометриялық функциялардан, ал оң тәреплери радиусы R болған шеңберден турады. Шешимлер $\sqrt{R^2-\alpha_n^2}$ шеңбери менен $-\alpha_n \cot\alpha_n$ ҳәм $\alpha_n \tan\alpha_n$ функцияларының графиклериниң кесилисиў ноқатларынан ибарат (4.8-сүўрет). Шешимлер *дискрет* жыйнақты пайда етеди. 4.8-сүўретте көрсетилгендей, киши шеңбердиң $\alpha_n \tan\alpha_n$ функциясының графиги менен кесилисиўи $n=0$ ге сәйкес келетуғын тек бир байланысқан ҳалды пайда етеди. Ал, үлкен шеңбердиң $\alpha_n \tan\alpha_n$ функциясының графиги менен кесилисиўи $n=0,2$ санларына сәйкес келетуғын еки байланысқан ҳалдың пайда болыўына алып келеди ҳәм оның $\alpha_n \cot\alpha_n$ пенен кесилисиўи $n=1,3$ ке сәйкес келетуғын басқа еки байланысқан ҳалдың пайда болыўына алып келеди.

Шешимлердиң саны R диң шамасынан ғәрезли. Ал, өз гезегинде R диң өзи шуқырдың V_0 тереңлигинен ҳәм a кеңлигинен ғәрезли: $R = \sqrt{ma^2V_0/(2\hbar^2)}$. Шуқыр қаншама терең ҳәм кең болса, онда байланысқан ҳаллардың саны соншама көп. V_0

шамасы қанша киши болса да, ең кеминде бир байланысқан ҳалдың болатуғынлығына итибар бериў керек.

$$0 < R < \frac{\pi}{2} \text{ ямаса } 0 < V_0 < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} \tag{4.101}$$

теңсизликлери орынлы болған жағдайларда $n = 0$ ге сәйкес келетуғын тек бир байланысқан ҳал жүзеге келеди (4.8-сүўретке қараңыз). Бул жуп ҳал тийкарғы ҳал болып табылады.

$$\frac{\pi}{2} < R < \pi \text{ ямаса } \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} < V_0 < \pi^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} \tag{4.102}$$

теңликлери орынлы болғанда еки байланысқан ҳал бар болады: $n = 0$ ге сәйкес келетуғын жуп ҳал (тийкарғы ҳал) ҳәм $n = 1$ ге сәйкес келетуғын тақ сан. Енди, егер

$$\pi < R < \frac{3\pi}{2} \text{ ямаса } \pi^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} < V_0 < \left(\frac{3\pi}{2}\right)^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} \tag{4.103}$$

теңсизликлери орын алатуғын болса, онда үш байланысқан ҳал жүзеге келеди: тийкарғы ҳал (жуп ҳал), $n = 0$, $n = 1$ теңлигине сәйкес келетуғын биринши қозған ҳал (тақ ҳал) ҳәм $n = 2$ теңлигине сәйкес келетуғын екинши қозған ҳал (жуп ҳал). n дана ҳалға ийе болған шуқыр ушын улыўма жағдайда шуқырдың кеңлиги мынадай формула менен бериледи:

$$R = \frac{n\pi}{2} \text{ ямаса } V_0 = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} n^2. \tag{4.104}$$

Демек, спектр гезеклесип жайласатуғын жуп ҳәм тақ ҳаллардың жыйнағынан турады: ең төменги ҳал, яғный тийкарғы ҳал жуп, буннан кейинги ҳал (биринши қозған ҳал) тақ ҳәм усылай даўам етеди.

$V_0 \to \infty$ шеклик жағдайда шеңбердиң радиусы R де шексиз үлкен болады ҳәм, сонлықтан $\sqrt{R^2 - \alpha_n^2}$ функциясы $-\alpha_n \cot \alpha_n$ ҳәм $\alpha_n \tan \alpha_n$ функцияларының графиклерин $\alpha_n = n\pi/2$ асимптоталарында кеседи. Себеби $V_0 \to \infty$ болған жағдайда $\tan \alpha_n$ менен $\cot \alpha_n$ функциялары шексиз үлкен болады:

$$\tan \alpha_n \to \infty \implies \alpha_n = \frac{2n+1}{2}\pi \ \ (n = 0, 1, 2, 3, \dots), \tag{4.105}$$

$$\cot \alpha_n \to \infty \implies \alpha_n = \pi n \ \ (n = 1, 2, 3, \dots). \tag{4.106}$$

Бул еки жағдайды комбинациялап

$$\alpha_n = \frac{n\pi}{2} \ \ (n = 1, 2, 3, \dots) \tag{4.107}$$

теңлигиниң орынлы екенлигине көз жеткеремиз.

Биз $\alpha_n^2 = ma^2 E_n/(2\hbar^2)$ теңлиги орынлы болғанлықтан, биз шексиз терең болған шуқыр ушын энергияның аңлатпасын қайтадан тиклеймиз:

$$\alpha_n = \frac{n\pi}{2} \longrightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2. \tag{4.108}$$

4.2-мысал.

Тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциал шуқыр ушын байланысқан ҳаллардың саны менен сәйкес энергияларды табыңыз: (a) $R = 1$ (яғный $\sqrt{ma^2V_0/(2\hbar^2)} = 1$ ҳәм (b) $R = 2$.

Шешими

(a) 4.8-сүўретте $R = \sqrt{ma^2V_0/(2\hbar^2)} = 1$ болған жағдайда тек 1 байланысқан ҳалдың болатуғынлығын көринип тур, себеби $a_n \leq R$. Бул байланысқан ҳал $n = 0$ ге сәйкес келеди. Сәйкес энергия $\alpha_0 \tan\alpha_0$ функциясының графигиниң $\sqrt{1-\alpha_0^2}$ сызығының кесилисиў ноқатына сәйкес келеди:

$$\alpha_0 \tan\alpha_0 = \sqrt{1-\alpha_0^2} \implies \alpha_0^2(1+\tan^2\alpha_0) = 1 \implies \cos^2\alpha_0 = \alpha_0^2. \tag{4.109}$$

$\cos^2\alpha_0 = \alpha_0^2$ теңлемеси $\alpha_0 = 0{,}73909$ шамасын береди. Солай етип, сәйкес энергия $\sqrt{ma^2E_0/(2\hbar^2)} = 0{,}73909$ теңлемесиниң жәрдеминде анықланады. Биз $E_0 \cong 1{,}1\hbar^2/(2a^2)$ шамасына ийе боламыз.

(b) $R = 2$ теңлиги орынланатуғын жағдайда биз $\sqrt{4-\alpha_0^2}$ функциясының $\alpha_0 \tan\alpha_0$ ҳәм $-\alpha_1 \cot\alpha_1$ функцияларының кесилисиў ноқатларына сәйкес келетуғын еки байланысқан ҳал болады; олар сәйкес $n = 0$ ҳәм $n = 1$ ге сәйкес келеди. Сәйкес теңлемелердиң санлық шешимлери:

$$\alpha_0 \tan\alpha_0 = \sqrt{4-\alpha_0^2} \Longrightarrow 4\cos^2\alpha_0 = \alpha_0^2, \tag{4.110}$$

$$-\alpha_1 \cot\alpha_1 = \sqrt{4-\alpha_1^2} \Longrightarrow 4\sin^2\alpha_1 = \alpha_1^2. \tag{4.111}$$

Буннан $\alpha_0 \cong 1{,}03$ ҳәм $\alpha_1 \cong 1{,}9$ шамаларын аламыз. Сәйкес келетуғын энергиялар:

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{ma^2E_0}{2\hbar^2}} \simeq 1.03 \implies E_0 \simeq 2{,}12\frac{\hbar^2}{ma^2}, \tag{4.112}$$

$$\alpha_1 = \sqrt{\frac{ma^2E_1}{2\hbar^2}} \simeq 1.9 \implies E_1 \simeq 7{,}22\frac{\hbar^2}{ma^2}. \tag{4.113}$$

4.8. Гармоникалық тербелислердиң осцилляторы

Гармоникалық осциллятор - физика илиминиң барлық бөлимлери ушын әҳмийетли болған көп санлы болмаған машқалалардың бири болып табылады. Мысалы, классикалық механика, электродинамика, статистикалық механика, қатты денелер физикасы, атом, атом ядросы менен элементар бөлекшелер физикасы ис алып баратуғын ҳәр қыйлы тербелмели қубылыслар ушын пайдалы болған моделди береди. Квантлық механикада тийкарғы концепциялар менен формализмди иллюстрациялайтуғын бийбаҳа қуралдың хызметин атқарады.

Басқа бир өлшемли гармоникалық осцилляторлың тәсиринде ω мүйешлик тезлиги менен тербелетуғын массасы m болған бөлекшениң гамильтонианы былайынша жазылады:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2. \tag{4.114}$$

Мәселе бул гамильтонианның меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыўдан ибарат. Бул мәселени еки түрли усылдың жәрдеминде шешиў мүмкин. Биринши усыл аналитикалық усыл болып табылады ҳәм оны пайдаланған жағдайда ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемесин (қысқаша

TISE) (4.114)-гамильтониан шешиў керек. Баспалдақ ямаса алгебралық усыл деп аталатуғын екинши усылда Шредингер теңлемеси шешилмейди, ал оның орнына өзиниң ишине пайда етиў ҳәм жоқ етиў операторлары (ямаса баспалдақ операторлары) деп аталатуғын операторларды алады; мәниси жағынан бул усыл матрицалық формулировка болып табылады, себеби ол ҳәр қыйлы шамаларды матрицалар тилинде аңғартады ...

Аналитикалық усылдың қысқаша тәрийиплениўи

Бул усыл төмендегидей дифференциаллық теңлемени (Шредингер теңлемесин) шешиў ушын дәрежели қатарлар усылын пайдаланады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2(x)=E(x) \qquad (4.115)$$

Бул теңлемени мынадай теңлемеге алып келиў мүмкин:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{x^2}{x_0^4}\right)\psi(x)=0. \qquad (4.116)$$

Бул теңлемеде $x_0=\sqrt{\hbar/(m\omega)}$ - өлшем бирлиги узынлық болған константа. Кейинирек оның осциллятордың узынлығының масштабын беретуғынлығын көремиз. (4.116)-теңлемеге уқсас болған дифференциаллық теңлемелердиң шешими квантлық механика пайда болмастан әдеўир бурын математиклер тәрепинен ислеп шығылды (шешимлер Эрмит полиномлары деп аталатуғын базы бир арнаўлы функциялардың жәрдеминде бериледи).

(4.116)-теңлемедеги $x^2\psi(x)$ ағзасының пайда болыўы гаусс типиндеги шешимди алып көриў жөниндеги ойды пайда етеди[21]: $\psi(x)=f(x)\exp(-x^2/2x_0^2)$. Бул аңлаптада $f(x)$ арқалы x тың базы бир функциясы белгиленген. Бул сынап көрилетуғын $\psi(x)$ функциясын (4.116)-теңлемеге қойып, биз $f(x)$ ушын дифференциаллық теңлемени аламыз. Бул жаңа дифференциаллық теңлемени $f(x)$ функциясын дәрежели қатарға жайыў жолы менен шешиўге болады (яғный,

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nx^n$$

қатарына, бул аңлатпада a_n арқалы коэффициентлер белгиленген). Бул қатарды дифференциаллық теңлемеге қойсақ рекуррентлик қатнаслардың пайда болыўына алып келеди. $f(x)$ дәрежели қатарының n ниң базы бир шекли мәнисинде тамам болыўын талап еткен жағдайда (себеби $\psi(x)$ толқын функциясының барлық орынларда, айрықша $x\longrightarrow\pm\infty$ те шекли мәниске ийе болыўы шәрт) рекуррентли қатнаслар энергияның мәнислери ушын оның дискрет ямаса квантланған екенлигин көрсететуғын аңлатпаны береди:

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n=0,1,2,3,\ldots \qquad (4.117)$$

---

[21] $\psi(x)=f(x)\exp(x^2/2x_0^2)$ түриндеги шешимлерди физикалық мәниси бойынша пайдаланыўға болмайды, себеби $x\longrightarrow\infty$ шегинде бундай функция шексизликке умтылады (жайылады).

Базы бир есаплаўлардан кейин физикалық жақтан қанаатландырарлық ҳәм (4.116)-теңлемени қанаатландыратуғын толқын функцияларының

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!\, x_0}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \qquad (4.118)$$

формуласының жәрдеминде көрсетилетуғынлығына көз жеткериўге болады. Бул аңлатпада H_n арқалы *Эрмит полиномлары* деп аталатуғын n-тәртипли көп ағзалы белгиленген:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}. \qquad (4.119)$$

Бул қатнастың жәрдеминде көп ағзалының дәслепки ағзаларын есаплаў мүмкин:

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1, & H_1(y) &= 2y, \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2, & H_3(y) &= 8y^2 - 12y, \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12, & H_5(y) &= 32y^5 - 160y^3 + 120y. \end{aligned} \qquad (4.120)$$

6 бап

Үш өлшемли мәселелер

Кирисиў

Бул бапта биз үш өлшемли кеңисликте қозғалатуғын спинге ийе емес бөлекшелер ушын жазылған Шредингер теңлемесиниң қалай шешилетуғынлығын қараймыз. Изертлеўлерди декарт ҳәм сфералық координаталар системасында өткеремиз. Дәслеп декарт координаталар системасында бөлекшениң ҳәр қыйлы потенциаллардағы (еркин бөлекше, үш өлшемли туўры мүйешли потенциаллық шуқыр, гармоникалық осциллятордың потенциалындағы бөлекше) қозғалысын үйренемиз. Бул изертлеўлер бир өлшеўли қозғалысларда таллағанда алынған нәтийжелердиң әпиўайы улыўмаластырылыўы болып табылады. Бир өлшемли мәселелерге салыстырғанда үш өлшемли мәселелер базы бир симметрияға ийе потенциаллар болған жағдайда азғыныўға ийе болыўы менен айрылады. Екиншиден, сфералық координаталар системасын пайдаланыў жолы менен биз сфералық симметрияға ийе болған потенциалдағы бөлекшениң қозғалысын тәрийиплей аламыз. Еркин бөлекше менен гармоникалық осциллятордан баслап улыўмалық трактовкаларды көрсеткеннен кейин биз изертлеўлеримизди водород атомын қараў менен жуўмақлаймыз. Биз бул бапты магнит майданына жайластырылған водород атомының энергия қәддилерин есаплаў менен жуўмақлаймыз ҳәм магнит майданындағы атомның энергия қәддилериниң бир неше қәддилерге ажыралыўын Зеемен эффекти деп аталатуғынлығын еслетип өтемиз.

6.2. Декарт координаталарындағы үш өлшемли мәселелер

Биз бир өлшемли мәселелерди қарағанда пайдаланылған Шредингер теңлемесин үш өлшемли мәселелерди шешкенде қалайынша кеңейтиўге болатуғынлығын мәселесин қараймыз.

6.2.1. Улыўмалық усыл: Өзгериўшилерди ажыратыў

Спинге ийе болмаған ҳәм үш өлшемли потенциалдың тәсиринде қозғалатуғын бөлекше ушын ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(x,y,z,t)+\hat{V}(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t}. \qquad (6.1)$$

Бул теңлемеде $\vec{\nabla}^2$ - Лапласиан, $\vec{\nabla}^2=\partial^2/\partial x^2+\partial^2/\partial y^2+\partial^2/\partial z^2$. 4-бапта айтылып өтилгениндей, ўақыттан ғәрезсиз болған потенциалда қозғалатуғын бөлекшениң толқын функциясы кеңисликлик ҳәм ўақытлық қураўшылардың көбеймеси түринде жазылады:

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}. \qquad (6.2)$$

Бул аңлатпада $\psi(x,y,z)$ арқалы ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемесиниң шешими белгиленген:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(x,y,z)+\hat{V}(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z). \qquad (6.3)$$

Бул теңлеме $\widehat{H}\psi=E\psi$ формасына ийе.

Дара туўындыларға ийе болған бул дифференциаллық теңлемени әдетте шешиў дым қыйын. Бирақ, $\hat{V}(x,y,z)$ потенциалы бир биринен ғәрезсиз болған бир өлшемли ағзалардың қосындысына жайылады (оларды векторлар менен алжастырмаў керек:

$$V(x,y,z)=V_x(x)+V_y(y)+V_z(z). \qquad (6.4)$$

Бундай жағдайда (6.3)-теңлемени өзгериўшилерди ажыратыў усылының жәрдеминде шешиў мүмкин. Бул усыл (6.3)-түринде жазылған үш өлшемли Шредингер теңлемесин бир биринен ғәрезсиз болған бир өлшемли Шредингер теңлемелерине бөлиўден ибарат. Усындай ҳәрекеттиң қалайынша әмелге асырылатуғынлығын қарайық. (6.3)-теңлемениң (6.4)-аңлатпа менен бирликте былайынша жазылатуғынлығына итибар беремиз:

$$\left[\widehat{H}_x+\widehat{H}_y+\widehat{H}_z\right]\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z). \qquad (6.5)$$

Бул теңлемедеги $\widehat{H}_x$ былайынша жазылады:

$$\widehat{H}_x=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V_x(x). \qquad (6.6)$$

$\widehat{H}_y$ пенен $\widehat{H}_z$ операторлары да тап усындай тақлетте жазылады.

$\hat{V}(x,y,z)$ шамасы бир биринен ғәрезсиз болған үш ағзаға айрылатуғын болғанлықтан биз $\psi(x,y,z)$ функциясын ҳәр қайсысы бир өзгериўшиниң функциясы болған үш функцияның көбеймеси түринде жазамыз:

$$\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z). \qquad (6.7)$$

(6.7)-функцияны (6.5)-теңлемеге қойып ҳәм алынған аңлатпаны $X(x)Y(y)Z(z)$ көбеймесине бөлсек, мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+V_x(x)\right]+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}+V_y(y)\right]+ \tag{6.8}$$
$$+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}+V_z(z)\right]=E.$$

Квадрат қаўсырмалардың ишиндеги ҳәр бир аңлатпа x, y, z өзгериўшилериниң тек биреўинен ғәрезли ҳәм усы үш аңлатпалардың қосындысы E ге тең болғанлықтан, олардың қосындысы константаға тең болыўы керек, ал бул константа болса E ге тең болыўы керек. Мысалы, x тан ғәрезли болған аңлатпа былайынша жазылады:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}+V_x(x)\right]X(x)=E_xX(x). \tag{6.9}$$

Тап усындай теңлемелер y, z координаталары ушын да орынлы, оның үстине

$$E_x+E_y+E_z=E. \tag{6.10}$$

Өзгериўшилерди ажыратыў усылы мәниси бойынша (6.3)-Шредингер теңлемесин (6.9)-теңлеме сыяқлы үш дана бир өлшемли теңлемеге айландырыў жолы менен киширейтиў болып табылады.

6.2.2. Еркин бөлекше

Еркин бөлекше болған әпиўайы жағдайда (6.3)-Шредингер теңлемеси $V_x=0$, $V_y=0$ ҳәм $V_z=0$ теңликлери орынланатуғын жағдайда (6.9)-теңлемеге уқсас болған үш теңлемеге алып келинеди. x қураўшысына сәйкес келетуғын теңлемени (6.9)-теңлемеден алыў мүмкин:

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2}=-k_x^2X(x). \tag{6.11}$$

Бул теңлемеде $k_x^2=2mE_x/\hbar^2$ ҳәм $E_x=\hbar^2k_x^2/(2m)$. Бир өлшемли мәселелерди қарағанда өткерилген нормировкалаўдың салдарынан мынадай толқын функциясын аламыз:

$$X(x)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{ik_xx}. \tag{6.12}$$

Бул жағдайдан (6.3)-үш өлшемли Шредингер теңлемесиниң шешиминиң былайынша жазылатуғынлығын көремиз:

$$\psi_{\vec{k}}(x,y,z)=(2\pi)^{-3/2}e^{ik_xx}e^{ik_yy}e^{ik_zz}. \tag{6.13}$$

Бул аңлатпада $\vec{k}$ менен $\vec{r}$ лер бөлекшениң сәйкес толқын векторы менен орнын көрсететуғын радиус-вектор. Ал толық энергия E ге келетуғын болсақ, оның шамасы (6.11)-бир өлшемли теңлемелердиң меншикли мәнислериниң суммасына тең:

$$E=E_x+E_y+E_z=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+k_y^2+k_z^2\right)=\frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2. \tag{6.14}$$

(6.14) энергия тек $\vec{k}$ шамсынан ғәрезли болғанлықтан усы вектордың барлық ориентациялары (k_x, k_y, k_z лерди өзгертиў жолы менен алынған) мына шәртке бағынады:

$$\left|\vec{k}\right| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = const. \qquad (6.15)$$

Бул теңлик бойынша энергияның турақлы ҳәр бир мәниси ушын ҳәр қыйлы болған (6.13)-меншикли функцияларының алынатуғынлығы көринип тур. Бул шаманы турақлы етип қалдыратуғын $\vec{k}$ векторының ориентацияларының саны шексиз көп болғанлықтан, еркин бөлекшениң энергиясы шексиз азғынған.

Ўақыттан ғәрезли болған (6.1)-Шредингер теңлемеси (6.13)-функцияларды (6.2) ге қойыў жолы менен алынатуғынлығын аңғарамыз:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = \lambda(\vec{r})e^{-i\omega t} = (2\pi)^{-3/2}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}. \qquad (6.16)$$

Бул теңлемеде $\omega = E/\hbar$ шамасы $\vec{k}$ толқын векторына ийе тарқалатуғын толқынды көрсетеди. Бул толқын функциясының ортонормировкаланыў шәрт

$$\int \Psi_{\vec{k}}^*(\vec{r},t)\,\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)d^3r = \int \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r},t)\,\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)d^3r = \\ = \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')}\,d^3r = \delta\left(\vec{k}-\vec{k}'\right) \qquad (6.17)$$

формуласының жәрдеминде аңғартылады. Дирак белгилеўлеринде бул теңлеме былайынша жазылады:

$$\left\langle\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\middle|\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\right\rangle = \left\langle\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\middle|\psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\right\rangle = \delta\left(\vec{k}-\vec{k}'\right). \qquad (6.18)$$

3-бапта көрсетилип өтилгениндей, еркин бөлекшени толқын пакети түринде көрсетиўге болады (ҳәр қыйлы толқын векторларына сәйкес келетуғын толқын функцияларының суперпозициясы):

$$\Psi(\vec{r},t) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\int A\left(\vec{k},t\right)\Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t)\,d^3k = \\ = (2\pi)^{-3/2}\int A\left(\vec{k},t\right)e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}d^3k. \qquad (6.19)$$

Бул аңлатпада $A\left(\vec{k},t\right)$ функциясы $\Psi(\vec{r},t)$ функциясының Фурье-түрлендириўи болып табылады:

$$A\left(\vec{k},t\right) = (2\pi)^{-3/2}\int \Psi(\vec{r},t)\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}d^3r. \qquad (6.20)$$

1- ҳәм 4-бапларда классикалық жақтан бөлекшениң ийелеген орнының толқын пакетиниң орайында сәйкес келетуғынлығы көрсетилди.

6.2.3. Шуқырдың потенциалы

Биз симметрияға ийе болмаған туўры мүйешли шуқырдың потенциалынан басламақшымыз. Буннан кейин x, y, z көшерлери эквивалент болғанлықтан жоқары симметрияға ийе болған туўры мүйешли потенциалды қараймыз.

6.2.3.1. Туўры мүйешли шуқырдың потенциалы

Дәслеп тәреплериниң узынлығы a, b, c болған туўры мүйешли шуқырда жайласқан массасы m болған бөлекшени қараймыз:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c, \\ & \infty, \quad \text{басқа орынларда.} \end{cases} \qquad (6.21)$$

Бул потенциалды былайынша жазыўға болады: $V(x,y,z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$ ҳәм

$$V_x(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & \text{басқа орынларда.} \end{cases} \tag{6.22}$$

$V_y(y)$ ҳәм $V_z(z)$ потенциаллары да тап сондай түрге ийе болады.

Шуқырдың дийўалларында $\psi(x,y,z)$ толқын функцияларының нолге айланыўы керек. Усының менен бирге, биз 4-бапта усындай потенциал ушын шешимниң мынадай түрге ийе болатуғынлығын көрдик:

$$X(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right), \qquad n_x = 1, 2, 3, \ldots \tag{6.23}$$

Усы толқын функцияларына сәйкес келетуғын энергияның меншикли мәнислери ушын жазылған формула мынадай түрге ийе:

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n_x^2. \tag{6.24}$$

Бул аңлатпалардан биз нормировкаланған үш өлшемли меншикли функцияларды ҳәм оларға сәйкес келетуғын энергияларды жаза аламыз:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right), \tag{6.25}$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right), \qquad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \ldots \tag{6.26}$$

6.1-кесте. $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ формуласы орынлы болған кублық потенциал ушын энергияның қәддилери ҳәм олардың азғыныўы

$E_{n_x n_y n_z}/E_1$	(n_x, n_y, n_z)	g_n
3	(111)	1
6	(211), (1,2,1), (1,1,2)	3
9	(221), (212), (122)	3
11	(311), (113), (131)	3
12	(222)	1
14	(321), (312), (231), (213), (132), (123)	6

6.2.3.2. Туўры мүйешли потенциал

Туўры мүйешли потенциал шуқырдың ең әпиўайы түри қабырғасының узынлығы L болған кублық потенциал болып табылады. Бундай жағдайда $a = b = c = L$. Бундай жағдайда (6.26) ның орнына мынадай теңликти аламыз:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right). \tag{6.27}$$

Тийкарғы ҳал $n_x = n_y = n_z = 1$ ге сәйкес келеди. Бундай жағдайда энергияның шамасы ушын

$$E_{111} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = 3E_1 \qquad (6.28)$$

түриндеги формуланы аламыз.

4-бапта E_1 ушын $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ түриндеги аңлатпаны алып един. Бул бир өлшемли шуқырдағы бөлекшениң ең киши энергиясы болып табылады. Солай етип, үш өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекшениң энергиясы бир өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекшениң энергиясынан 3 есе үлкен болады екен. 3 саны бөлекшениң қозғалысын симметриялы түрде 3 өлшем бойынша шеклеўдиң нәтийжесинде пайда болды.

Биринши қозған ҳал үш $\psi_{211}(x,y,z)$, $\psi_{121}(x,y,z)$, $\psi_{112}(x,y,z)$ ҳалларына сәйкес келетуғын квант санларының $(n_x, n_y, n_z) = (2,1,1), (1,2,1), (1,1,2)$ жыйнағына ийе. Олардың ишиндеги $\psi_{211}(x,y,z)$ функциясы былайынша жазылады:

$$\psi_{211}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}z\right). \qquad (6.29)$$

$\psi_{121}(x,y,z)$ ҳәм $\psi_{112}(x,y,z)$ функциялары ушын аңлатпаларды $\psi_{211}(x,y,z)$ ушын жазылған аңлатпадай етип келтирип шығарыўға болады. Сол үш ҳалдың бирдей энергияға ийе болатуғынлығына итибар бериў керек:

$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = 6E_1. \qquad (6.30)$$

Солай етип, биринши қозған ҳал үш қайтара азғынған ҳал екен.

Мәселеде симметрия болған жағдайда ғана азғыныў пайда болады. Биз қарап өткен кублық шуқырда барлық үш өлшем эквивалент болғанлықтан жоқары симметрия орын алады. Туўры мүйешли шуқыр ушын азғыныўдың жоқ екенлигине итибар бериў керек. Бул жағдайда бар болған үш өлшем бир бирине эквивалент емес. Усының менен бирге биз бир өлшемли мәселелерди қарағанда азғыныўдың болмағанлығына итибар бериў керек. Себеби бундай жағдайда тек бир квант санының пайда болыўы жүзеге келеди.

Екинши қозған ҳал да ҳәр қыйлы болған үш ҳалдан турады, демек ол үш қайтара азғынған ҳал болып табылады. Оның энергиялары $9E_1$ ге тең: E_{221}, E_{212}, E_{122}.

Энергия спектри 6.1-кестеде көрсетилген, бул кестеде ҳәр бир n-қәдди энергиясы, квант санлары ҳәм азғыныў g_n менен тәрийипленеди.

6.2.4. Гармоникалық тербелислер осцилляторы

Биз дәслеп симметрияға ийе болмаған анизотроп осциллятордан баслаймыз. Буннан кейин барлық xyz көшерлери эквивалент болған изотроп осцилляторға өтемиз.

6.2.4.1. Анизотроп осциллятор

Үш өлшемли анизотроп осцилляторлық потенциалда қозғалатуғын массасы m болған бөлекшени қараймыз.

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}m\omega_x^2\hat{X}^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2\hat{Y}^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2\hat{Z}^2. \qquad (6.31)$$

(6.9) ға сәйкес бундай потенциал ушын жазылған Шредингер теңлемеси үш теңлемеге ажыралады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega_x^2x^2X(x)=E_xX(x). \tag{6.32}$$

$Y(y)$ ҳәм $Z(z)$ ушын теңлемелер де тап усындай түрге ийе болады. (6.31) ге сәйкес келетуғын меншикли мәнислер былайынша жазылады:

$$E_{n_xn_yn_z}=E_{n_x}+E_{n_y}+E_{n_z}= \tag{6.33}$$
$$=\left(n_x+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x+\left(n_y+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y+\left(n_z+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z.$$

Бул теңликте $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Сәйкес стационар ҳаллар мыналар болып табылады:

$$\psi_{n_xn_yn_z}(x,y,z)=X_{n_x}(x)\,Y_{n_y}(y)Z_{n_z}(z). \tag{6.34}$$

Бул аңлатпадағы $X_{n_x}(x)$, $Y_{n_y}(y)$ ҳәм $Z_{n_z}(z)$ лер гармоникалық осциллятордың бир өлшемли толқын функциялары болып табылады. Бул ҳаллар азғынған емес, себеби (6.31) түриндеги потенциал симметрияға ийе емес (ол анизотроп).

6.2.4.2. Изотроп гармоникалық осциллятор

Енди изотроп гармоникалық осциллятордың потенциалын қараймыз. Оның энергиясының мәнислерин (6.33)-аңлатпаға $\omega_x=\omega_y=\omega_z=\omega$ теңликлерин қойыў жолы менен келтирип шығарыўға болады:

$$E_{n_xn_yn_z}=\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega. \tag{6.35}$$

Энергия n_x, n_y, n_z санларының суммасынан ғәрезли болғанлықтан, бирдей суммаға ийе болған квант санларының қәлеген жыйнағы бирдей энергияға ийе ҳалларға сәйкес келеди.

Энергиясы $E_{000}=\frac{3}{2}\hbar\omega$ ға тең тийкарғы ҳал азғынған емес. Биринши қозған ҳал үш қайтара азғынған. Себеби бирдей $\frac{5}{2}\hbar\omega$ энергияға ийе үш ψ_{100}, ψ_{010} ҳәм ψ_{001} ҳаллары үш қайтара азғынған. Екинши қозған ҳал алты қайтара азғынған; оның энергиясы $\frac{7}{2}\hbar\omega$ ға тең.

Улыўма жағдайда биз n-қозған ҳалдың азғыныўы g_n шамасының терис болмаған n_x, n_y, n_z санларын суммалаўдың усылларының санына тең. Оның мәниси

$$g_n=\frac{1}{2}(n+1)(n+2) \tag{6.36}$$

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул теңликте $n=n_x+n_y+n_z$. 6.2-кестеде бир неше энергия қәддилери азғыныўлары менен көрсетилген.

6.2-кесте. Изотроп гармоникалық осциллятор ушын энергияның қәддилери менен олардың азғыныўлары

n	$2E_n/(\hbar\omega)$	$(n_xn_yn_z)$	g_n
0	3	(000)	1
1	5	(100), (010), (001)	3
2	7	(200), (020), (002),	6

		(110), (101), (011)	
3	9	(300), (030), (003), (210), (201), (120), (102), (012),(021), (111)	10

6.3. Сфералық координаталардағы үш өлшемли мәселелер

6.3.1. Орайлық потенциал

Бул бөлимде биз сфералық симметрияға ийе потенциалда қозғалатуғын массасы m болған бөлекше ушын жазылған Шредингер теңлемесиниң структурасы менен танысамыз.

$$V(\vec{r}) = V(r) \tag{6.41}$$

шәрти орынланатуғын потенциал *орайлық потенциал* атамасы менен белгили.

Импульси $i\hbar\vec{\nabla}$ ҳәм ийелеген орны $\vec{r}$ векторы менен анықланатуғын бундай бөлекше ушын ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемеси былайынша жазылады[22]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{6.42}$$

Гамильтониан сфералық симметрияға ийе болғанлықтан биз (r, θ, φ) сфералық координаталарынан пайдаланамыз. Олар менен декарт координаталарының арасында мынадай қатнаслар бар:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi\,, y = r\sin\alpha\sin\varphi\,, z = r\cos\theta. \tag{6.43}$$

∇^2 лапласиан радиаллық бөлим ∇_r^2 менен мүйешлик бөлим ∇_Ω^2 болып төмендегидей болып бөлинеди (5-бапқа қараңыз):

$$\begin{aligned}\nabla^2 = \nabla_r^2 - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\nabla_\Omega^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\vec{L}}^2 = \\ = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\vec{L}}^2.\end{aligned} \tag{6.44}$$

Бул теңликте $\hat{\vec{L}}^2$ арқалы орбиталық қозғалыс муғдарының моменти белгиленген.

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{6.45}$$

Усы аңлатпаларға байланыслы сфералық координаталардағы Шредингер теңлемеси мынадай түрге енеди:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{2Mr^2}\hat{\vec{L}}^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{6.46}$$

Бул теңлемедеги биринши ағзаны радиаллық кинетикалық энергия деп қараўға болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r = \frac{\hat{P}_r^2}{2M}. \tag{6.47}$$

---

[22] Бул бөлимниң барлығында биз m азимуталлық квант саны менен алжасықтың болмаўы мақсетинде бөлекшениң массасын M арқалы белгилеймиз.

Себеби радиаллық импульс операторы мынадай эрмитлик формула менен бериледи[23]:

$$\hat{P}_r = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\vec{r}}{r}\right)\cdot\hat{\vec{P}} + \hat{\vec{P}}\cdot\left(\frac{\vec{r}}{r}\right)\right] = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \equiv -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r. \qquad (6.48)$$

(6.46) дағы екинши ағза болған $\frac{\hat{\vec{L}}^2}{2Mr^2}$ ағзасын айланыўдың кинетикалық энергиясына сәйкес келеди деп есаплаў керек, себеби бул ағза бөлекшени координата басының дөгерегинде "таза" айландырыўдың нәтийжесинде пайда болады (яғный r өзгериўшиси өзгермей қалатуғын жағдайда, Mr^2 шамасы координата басына салыстырғандағы бөлекшениң инерция моменти).

(6.45)-аңлатпада $\hat{\vec{L}}^2$ шамасының r ден ғәрезсиз екенлиги көрсетилди. Сонлықтан ол $\hat{V}(r)$ менен де, радиаллық кинетикалық энергия менен де коммутацияланады; демек, ол $\hat{H}$ гамильтонианы менен де коммутацияланады деген сөз. Усының менен бирге $\hat{L}_z$ операторы $\hat{\vec{L}}^2$ операторы менен коммутацияланатуғын болғанлықтан, үш $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторлары бир бири менен коммутацияланады:

$$[\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0. \qquad (6.49)$$

Солай етип, $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады. 5-бапта биз $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторларының бир ўақыттағы меншикли функцияларының $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ сфералық гармоникалары менен берилетуғынлығын көрдик:

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad (6.50)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi). \qquad (6.51)$$

(6.46)-аңлатпадағы гамильтониан радиаллық ҳәм мүйешлик бөлимлердиң қосындысы болғанлықтан, радиаллық бөлим менен мүйешлик бөлимниң көбеймеси түринде жазылатуғын ҳәм мүйешлик бөлим тек сферикалық гармоника $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ болып табылатуғын шешимлерди излеўимиз керек:

$$\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|nlm\rangle = \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi). \qquad (6.52)$$

Орайлық потенциалда қозғалатуғын системаның орбиталық импульс моментиниң сақланатуғынлығын аңғарамыз, себеби (6.49)-аңлатпада көрсетилгендей, ол гамильтониан менен коммутацияланады.

$R_{nl}(r)$ радиаллық толқын функциясы еле табылған жоқ. n квант саны $\hat{H}$ тың меншикли мәнислерин идентификациялаў ушын киргизиледи:

$$\hat{H}|nlm\rangle = E|nlm\rangle. \qquad (6.53)$$

(6.52)-аңлатпаны (6.46)-аңлатпаға қойып ҳәм $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ толқын функциясының $\hat{\vec{L}}^2$ операторының меншикли функциясы екенлигин, соның менен бирге меншикли мәнислердиң $l(l+1)\hbar^2$ шамасына тең екенлигин пайдаланып, буннан кейин $R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ көбеймесине бөлип ҳәм $2Mr^2$ шамасына көбейтип, биз радиаллық ҳәм мүйешлик еркинлик дәрежелери ажыралған теңлемени аламыз:

---

[23] Орынды белгилейтуғын $\hat{r}$ операторы менен радиаллық импульс операторы $\hat{p}_r$ арасындағы коммутатор ушын $[\hat{r},\hat{p}_r] = i\hbar$ теңлигиниң орынланатуғынлығын аңсат көрсетиўге болады.

$$\left[-\hbar^2\frac{r}{R_{nl}}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR_{nl})+2Mr^2(V(r)-E)\right]+\left[\frac{\hat{\vec{L}}^2Y_{lm}(\theta,\varphi)}{Y_{lm}(\theta,\varphi)}\right]=0. \tag{6.54}$$

Биринши квадрат қаўсырмадағы ағзалар θ дан ғәрезсиз, ал екинши квадрат қаўсырманың ишиндеги ағзалар r ден ғәрезсиз. Сонлықтан, бул қаўсырмалардың ҳәр қайсысы константаға тең болыўы, ал сол еки константаның қосындысының нолге тең болыўы керек. Екинши квадрат қаўсырма $\hat{\vec{L}}^2$ операторының меншикли мәнислерин анықлайтуғын (6.50)-теңлеме болып табылады; демек, оның мәниси $l(l+1)\hbar^2$ шамаларына тең. Ал биринши қаўсырмаға келсек, онда оның $-l(l+1)\hbar^2$ шамасына тең болыўы керек; бул орайлық майданның потенциалы ушын белгили болған радиаллық теңлемеге алып келеди:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_{nl}(r)\big)+\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}\right]\big(rR_{nl}(r)\big)=E_n\big(rR_{nl}(r)\big). \tag{6.55}$$

Системаның энергиясының қәддилерин беретуғын (6.55)-теңлемениң магнит квант саны m нен ғәрезсиз екенлигине итибар бериў керек. Сонлықтан, E_n энергия $(2l+1)$ қайтара азғынған болып шығады. Себеби берилген l саны ушын ҳәр қыйлы болған $(2l+1)$ дана ψ_{nlm} меншикли функция болады (яғный, $\psi_{nl\,-l},\psi_{nl\,-l+1},\dots,\psi_{nl\,l}$). Олардың барлығына E_n меншикли энергиясының бир мәниси сәйкес келеди. Бул азғыныў қәсийети орайлық симметрияға ийе майдан ушын тән.

(6.55)-теңлемениң бир өлшем болған r ушын бир өлшемли теңлемениң структурасын береди:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2}+\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}\right]U_{nl}(r)=E_nU_{nl}(r) \tag{6.56}$$

ямаса

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2}+V_{eff}(r)U_{nl}(r)=E_nU_{nl}(r). \tag{6.57}$$

Бул теңлемелердиң шешимлери системаның энергиясының қәддилерин береди. $U_{nl}(r)$ толқын функциясы

$$U_{nl}(r)=rR_{nl}(r) \tag{6.58}$$

түринде, ал потенциал

$$V_{eff}(r)=\ V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \tag{6.59}$$

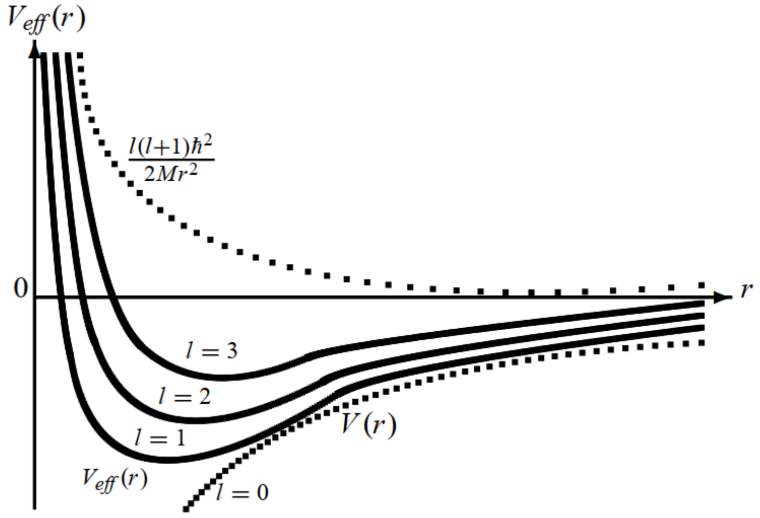
түринде бериледи. Бул аңлатпа эффектив ямаса орайдан қашыўшы атамасы менен белгили, $V(r)$ - орайлық потенциал, ал $l(l+1)\hbar^2/2Mr^2$ ағза болса орбиталық момент пенен байланыслы болған ийтеретуғын ямаса орайдан қашыўшы потенциал болып табылады. Ол бөлекшени орайдан сыртқа қарай ийтеретуғын орбиталық импульс моменти менен байланыслы. Кейинирек, атомлар болған жағдайда $V(r)$ потенциалының ядро менен электронлар арасындағы тартысыўдың салдарынан пайда болатуғын кулонлық потенциал екенлиги көрсетиледи. (6.57)-теңлеме меншикли мәнислерди табыў ушын арналған бир өлшемли теңлемениң структурасына ийе болса да, оның бир өлшемли Шредингер теңлемесинен айырмаға ийе екенлигине итибар бериў керек. Себеби r терис мәниске ийе болмайды ҳәм $r=0$ ден $r=\infty$ ге шекем өзгереди. Усы жағдайға сәйкес

$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ функциясының r диң нолден баслап ∞ ке шекемги мәнислериниң барлығында шекли болыўы керек. Бирақ, егер $R_{nl}(0)$ шекли болса, онда $r = 0$ ноқатында $rR_{nl}(r)$ шамасы нолге айланыўы керек, яғный

$$\lim_{r\to 0}[rR_{nl}(r)] = U_{nl}(0) = 0. \qquad (6.60)$$

Солай етип, (6.57)-радиаллық теңлемени меншикли мәнислерди анықлайтуғын эквивалентли бир өлшемли мәселеге айландырыў ушын $r > 0$ бөлекшениң потенциалы эффективлик $V_{eff}(r)$ потенциалы менен, ал $r \leq 0$ ушын инфинитлик потенциал менен бериледи деп болжаў керек.

Меншикли мәнислерди анықлаў ушын арналған (6.57)-теңлемениң байланысқан ҳалларды тәрийиплеўи ушын $V(r)$ потенциалының тартылысқа сәйкес келиўи (яғный терис болыўы) керек, себеби $l(l+1)\hbar^2/2Mr^2$ ағзасы ийтериўге сәйкес келеди. 6.1-сүўретте l диң үлкейиўи менен $V_{eff}(r)$ потенциалының тереңлигиниң кемейетуғынлығы, ал оның минимумының координата басынан алыслайтуғынлығы көринип тур. Бөлекше координата басынан қаншама қашықлаған сайын оның байланыслы болыўы кемейеди. Бул бөлекшениң мүйешлик моментиниң үлкейиўи менен кем-кемнен әззи байланысатуғынлығы менен байланыслы.



6.1-сүўрет. $l = 0, 1, 2, 3$ шамаларына сәйкес келетуғын $V_{eff}(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/(2Mr^2)$ эффективлик потенциал; $V(r)$ - орайлық тартыў потенциалы, $\hbar^2 l(l+1)/(2Mr^2)$ шамасы болса ийтериўши (орайдан қашыўшы) потенциал.

Жуўмақ шығаратуғын болсақ, онда сфералық симметрияға ийе потенциаллар ушын (6.46)-Шредингер теңлемесиниң $\hat{\vec{L}}^2$ ушын (6.50)-тривиаллық мүйешлик теңлемеге ҳәм (6.57)-бир өлшемли радиаллық теңлемеге алып келинетуғынлығын атап өтиўимиз керек.

Ескертиў

Бөлекше орбиталлық ҳәм спинлик еркинлик дәрежелерине ийе болатуғын жағдайда, оның толқын функциясы $|\Psi\rangle$ еки бөлимниң көбеймесинен турады: бириншиси кеңисликлик бөлим $\psi(\vec{r})$, екиншиси спинлик бөлим $|s, m_s\rangle$; яғный $|\Psi\rangle =$

$|\psi\rangle|s,m_s\rangle$. Орайлық майданда қозғалатуғын электрон болған жағдайда оның ҳалын толық тәрийиплеў ушын n, l, m_l квант санлары менен бирге төртинши квант саны болған спин m_s ти киргизиў талап етиледи: $|nlm_lm_s\rangle = |nlm_l\rangle|s,m_s\rangle$; демек

$$\Psi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}) = \psi_{nlm_l}(\vec{r})|s,m_s\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\varphi)\ |s,m_s\rangle. \qquad (6.61)$$

Спин кеңисликлик еркинлик дәрежесинен ғәрезли емес, сонлықтан айландырыў операторы $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ кеңисликлик толқын функциясына тәсир етпейди; бирақ тек $|s,m_s\rangle$ айланыў бөлимине тәсир етеди.

6.3.2. Сфералық координаталардағы еркин бөлекше

Биз буннан былай жоқарыда массасы M ҳәм энергиясы $E_k = \hbar^2k^2/(2M)$ болған бөлекше ушын ислеп шығылған формализмди қараймыз. k арқалы толқынлық сан белгиленген ($k = |\vec{k}|$). Еркин бөлекшениң гамильтонианының $\widehat{H} = -\hbar^2\nabla^2/(2M)$ түринде жазылатуғынлығын ҳәм оның $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторлары менен коммутацияланатуғынлығын еске түсиремиз. Себеби $V(r) = 0$ теңлиги орын алғанда (еркин бөлекше ушын) гамильтониан айланыўға қарата инвариант. Бундай жағдайда еркин бөлекшени орайлық потенциаллардың дара жағдайы деп қараўға болады. Биз жоқарыда толқын функциясының радиаллық ҳәм мүйешлик бөлимлериниң ажыратылыўының мүмкин екенлигин көрсеткен едик. $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \langle r,\theta,\varphi|klm\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$.

Еркин бөлекше ушын радиаллық теңлеме (6.55)-теңлемеде $V(r) = 0$ теңлигин есапқа алыў менен алынады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_{nl}(r)\big) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}R_{nl}(r) = E_nR_{nl}(r). \qquad (6.62)$$

Бул теңлемени былайынша көширип жазыўға болады:

$$-\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_{kl}(r)\big) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}R_{kl}(r) = k^2R_{kl}(r). \qquad (6.63)$$

Бул теңлемеде $k^2 = 2ME_k/\hbar^2$.

6.3-кесте. Бессель менен Нейманның биринши
бир неше сфералық функциялары

Бессель функциясы, $j_l(r)$	Нейман функциясы, $n_l(r)$
$j_0(r) = \frac{\sin r}{r}$	$n_0(r) = -\frac{\cos r}{r}$
$j_1(r) = \frac{\sin r}{r^2} - \frac{\cos r}{r}$	$n_1(r) = -\frac{\cos r}{r^2} - \frac{sin\, r}{r}$
$j_2(r) = \left(\frac{3}{r^3} - \frac{1}{r}\right)\sin r - \frac{3}{r^2}\cos r$	$n_2(r) = -\left(\frac{3}{r^3} - \frac{1}{r}\right)\cos r - \frac{3}{r^2}\sin r$

$\rho = kr$ өзгериўшисин пайдаланып, алынған теңлемени мынадай теңлемеге алып келе аламыз:

$$\frac{d^2\mathcal{R}_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d\mathcal{R}_l(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\mathcal{R}_l(\rho) = 0. \qquad (6.64)$$

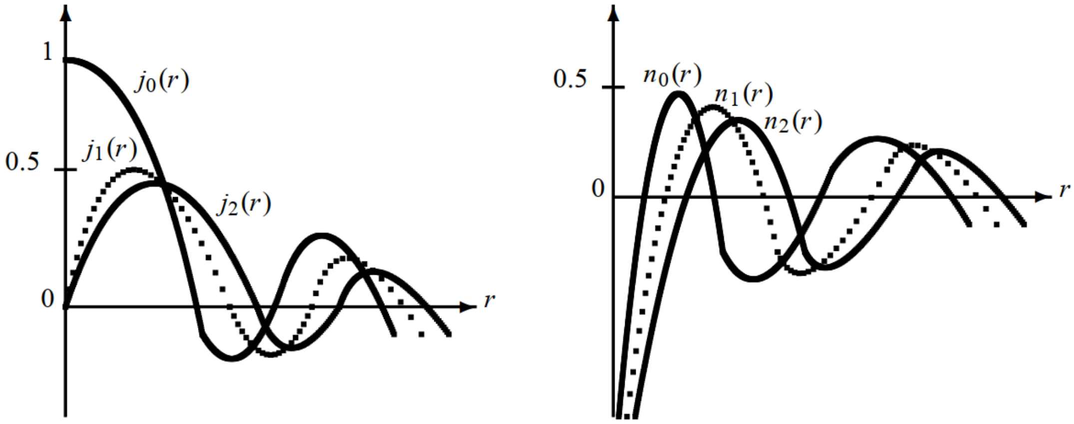
Бул теңлемеде $\mathcal{R}_l(\rho) = \mathcal{R}_l(kr) = R_{kl}(r)$. Бул дифференциаллық теңлеме Бессель сфералық теңлемеси атамасы менен белгили. Бул теңлемениң улыўмалық шешими *Бесселдиң сфералық функциялары* $j_l(\rho)$ менен *Нейманның сфералық функциялары* $n_l(\rho)$ диң сызықлы комбинациясы түринде бериледи:

$$\mathcal{R}_l(\rho) = A_l j_l(\rho) + B_l n_l(\rho). \qquad (6.65)$$

Бул теңликте $j_l(\rho)$ менен $n_l(\rho)$ функциялары былайынша бериледи:

$$j_l(r) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\sin\rho}{\rho}, n_l(r) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \frac{\cos\rho}{\rho}. \qquad (6.66)$$

Бессель менен Нейманның биринши бир неше сфералық функциялары 6.2-кестеде, ал олардың формалары 6.2-сүўретте берилген.



6.2-сүўрет. Бесселдиң сфералық функциялары $j_l(\rho)$ менен Нейманның сфералық функциялары $n_l(\rho)$. Координата басында тек Бесселдиң сфералық функциялары ғана шекли.

$\sin\rho/\rho$ менен $\cos\rho/\rho$ ларды ρ бойынша дәрежели қатарға жайып, ρ ның киши мәнислеринде (яғный координаталар басында жақын орынларда) $j_l(\rho)$ менен $n_l(\rho)$ функцияларының мынадай аңлатпаларға алып келинетуғынлығын көремиз:

$$j_l(\rho) \simeq \frac{2^l l!}{(2l+1)!}\rho^l, \qquad n_l(\rho) \simeq -\frac{(2l)!}{2^l l!}\rho^{-l-1}, \qquad \rho \ll 1. \qquad (6.67)$$

Ал, l диң үлкен мәнислери ушын:

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right), \; n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right). \qquad (6.68)$$

Нейман функциясы $j_l(\rho)$ координата басында тарқалатуғын ҳәм ψ_{klm} толқын функциялары кеңисликтиң барлық бөлимлеринде шекли болатуғын болғанлықтан, $n_l(\rho)$ функциялары машқаланың ақылға муўапық шешими бола алады. Демек, тек Бесселдиң сфералық функциялары ғана еркин бөлекшениң меншикли функцияларына үлес қоса алады:

$$\psi_{klm}(r,\theta,\varphi) = j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi). \qquad (6.69)$$

Бул аңлатпада $k = \sqrt{2ME_k}/\hbar$. 6.2-сүўретте көринип турғанындай, функциялардың амплитудалары r диң үлкейиўи менен кем-кемнен киширейеди. Үлкен қашықлықларда толқын функциялары сфералық толқынлар түринде көрсетиледи.

$E_k = \hbar^2 k^2/(2M)$ аңлатпасындағы k индекси үзликсиз өзгеретуғын болғанлықтан еркин бөлекшениң энергия спектриниң шексиз көп қайтара азғынған екенлигин аңғарамыз. Бул кеңисликтеги k ның барлық ориентацияларының энергияның бир мәнисине сәйкес келетуғынлығы менен байланыслы.

Ескертиў

Биз еркин бөлекшени декарт ҳәм сфералық координаталар системаларында үйрендик. Усы координаталар системаларының екеўинде де энергияның бирдей болған $E_k = \hbar^2 k^2/(2M)$ аңлатпасы менен аңлатылатуғынлығын итибарға алып, декарт координаталар системаларында толқын функцияларының $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ түриндеги тегис толқын менен [қараңыз: (6.13)], ал сфералық координаталар системасында $j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ түриндеги сфералық толқынлар [қараңыз: (6.69)] менен берилетуғынлығын көремиз. Бирақ, толқын функцияларының еки жыйнағының бир бири менен эквивалентли екенлигин көремиз. Себеби, биз $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ түринде жазылған тегис толқынларды $j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ сфералық толқынлары тилинде тәрийиплей аламыз. Мысалы, биз тегис толқынды бирдей k ға, бирақ ҳәр қыйлы l менен m ге ийе болған сфералық ҳаллардың сызықлы комбинациясы түринде пайда ете аламыз:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a_{lm} j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{6.70}$$

Солай етип, машқала a_{lm} қатарға жайыў коэффициентлерин табыўға алып келинеди екен. Мысалы, $\vec{k}$ ның бағыты z көшерине параллель болса, онда $m = 0$ ҳәм

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)\, j_l(kr)P_l(\cos\theta). \tag{6.71}$$

Бул аңлатпада $P_l(\cos\theta)$ - Лежандрдың көп ағзалысы, оның үстине $Y_{0m}(\theta,\varphi) \sim P_l(\cos\theta)$. $\psi_{klm}(r,\theta,\varphi) = j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ толқын функциялары энергиясы E_k, импульс моменти l болған еркин бөлекшени тәрийиплейди. Бирақ, сол толқын функциялары $\vec{p}$ сызықлы импульс ҳаққындағы ҳеш қандай информацияны бермейди (ψ_{klm} функциясы $\widehat{H}, \widehat{\vec{L}}^2$ ҳәм L_z ге сәйкес келетуғын меншикли ҳалды тәрийиплейди, бирақ $\widehat{\vec{P}}^2$ ға сәйкес келетуғын ҳалды тәрийплемейди). Екинши тәрептен, $\widehat{H}$ пенен $\widehat{\vec{P}}^2$ лардың $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ меншикли толқын функциялары $\widehat{\vec{L}}^2$ ҳәм L_z лердиң меншикли функциялары болып табылмайды. Демек, биз пайдаланып атырған шамалар бөлекшениң мүйешлик моменти ҳаққында ҳеш қандай информацияны бермейди. Яғный, тегис толқынлар дәл анықланған сызықлы импульслерге ийе ҳалларды, бирақ жаман анықланған моментке ийе ҳалларды тәрийиплейди екен.

6.3.3. Туўры мүйешли шуқырдың сфералық потенциалы

Енди туўры мүйешли шуқырдың тартыў потенциалындағы массасы M болған бөлекше ҳаққындағы мәселени қараймыз.

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases} \tag{6.72}$$

$0 < r < a$ ҳәм $r > a$ теңликлери орынлы болатуғын жағдайларды өз алдына қараймыз.

6.3.3.1. $\mathbf{0 < r < a}$ болған жағдай

Шуқырдың иши болған $0 < r < a$ областында ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемесин (6.55)-теңлемеден алып жазыўға болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_l(r)\big) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}R_l(r) = (E+V_0)R_l(r). \tag{6.73}$$

$\rho = k_1 r$ өзгериўшисин пайдаланамыз ҳәм бул көбеймедеги k_1 енди $k_1 = \sqrt{2M/(E+V_0)}/\hbar$ формуласының жәрдеминде анықланады. Бундай жағдайда (6.73)-теңлеме (6.64)-Бесселдиң сфералық дифференциаллық теңлемесине алып келинеди. Еркин бөлекше болған жағдайдағыдай, радиаллық толқын функциясы барлық орынларда шекли болады ҳәм ол Бесселдиң сфералық функциялары $j_l(k_1 r)$ тилинде $r < a$ болған жағдайда былайынша жазылады:

$$R_l(r) = Aj_l(k_1 r) = Aj_l\left(\frac{\sqrt{2M/(E+V_0)}}{\hbar}\right). \tag{6.74}$$

Бул аңлатпада A - нормировка бойынша анықланатуғын коэффициенти.

6.3.3.2. $\mathbf{r > a}$ болған жағдай

Шуқырдың дийўалларының сыртында бөлекше еркин қозғалады, бундай жағдайда Шредингер теңлемеси (6.62) түринде жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_{kl}(r)\big) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}R_{kl}(r) = E_k R_{kl}(r). \tag{6.75}$$

Бундай жағдайда энергияның оң ямаса терис болыўына байланыслы еки жағдай орын алады.

А. Терис энергияға ийе жағдай байланысқан ҳалларға (яғный энергияның дискрет спектрине) сәйкес келеди. (6.75) тиң улыўма шешими (6.63)-шешимлерге уқсас, бирақ k енди жормал шама болып табылады, яғный биз k ны ik_2 шамасы менен алмастырыўымыз керек, яғный бул жағдайда $j_l(ik_2 r)$ ҳәм $n_l(ik_2 r)$ функцияларының сызықлы комбинациясынан турады:

$$R_l(ik_2 r) = B[j_l(ik_2 r) \pm n_l(ik_2 r)]. \tag{6.76}$$

Бул аңлатпада B - нормировка шәрти бойынша анықланатуғын коэффициент, $k_2 = \sqrt{-2NE}/\hbar$. **Ескертиў**: $j_l(\rho)$ менен $n_l(\rho)$ функцияларының сызықлы комбинациялары Хенкелдиң биринши әўлад сфералық функциялары $h_l^{(1)}(\rho)$ ҳәм екинши әўлад сфералық функциялары $h_l^{(2)}(\rho)$ тилинде былайынша жазылыўы мүмкин:

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho), \tag{6.77}$$

$$h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho) = \left(h_l^{(1)}(\rho)\right)^*. \tag{6.78}$$

Хенкелдиң биринши әўлад сфералық функцияларының ең биринshilери мынадай түрге ийе:

$$h_0^{(1)}(\rho) = -i\frac{e^{i\rho}}{\rho}, h_1^{(1)}(\rho) = -\left(\frac{1}{\rho} + \frac{i}{\rho^2}\right)e^{i\rho},$$
$$h_2^{(1)}(\rho) = \left(\frac{i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2} - \frac{3i}{\rho^3}\right)e^{i\rho}. \tag{6.79}$$

$\rho \longrightarrow \infty$ шегиндеги Хенкель функцияларының асимптоталық қәсийетлерин (6.68) ден келтирип шығарыўға болады:

$$h_l^{(1)}(\rho) \longrightarrow -\frac{i}{\hbar}e^{i(\rho - l\pi/2)}, \qquad h_l^{(2)}(\rho) \longrightarrow \frac{i}{\hbar}e^{-i(\rho - l\pi/2)}. \tag{6.80}$$

(6.76) да сақланыўы керек болған шешимлердиң барлық орынларда шекли болыўы керек. (6.80)-теңлемелерден тек биринши әўлад Хенкель функциялары болған $h_l^{(1)}(r)$ функцияларының r диң үлкен мәнислеринде шекли болатуғынлығын көриўге болады ($h_l^{(2)}(r)$ функциялары r диң үлкен мәнислеринде жайылады). Солай етип, шуқырдың сыртында Хенкелдиң биринши әўлад функциялары менен аңғартылған толқын функциялары физикалық мәниске ийе болады [қараңыз: (6.76)]:

$$R_l(ik_2r) = Bh_l^{(1)}\left(i\frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar}r\right) = Bj_l\left(i\frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar}r\right) +$$
$$+iBn_l\left(i\frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar}r\right). \tag{6.81}$$

$r = a$ теңлиги орынланғандағы радиаллық функцияның ҳәм оның үзликсизлиги мынаны береди:

$$\frac{1}{h_l^{(1)}(ik_2r)}\frac{dh_l^{(1)}(ik_2r)}{dr}\bigg|_{r=a} = \frac{1}{j_l(k_1r)}\frac{dj_l(k_1r)}{dr}\bigg|_{r=a}. \tag{6.82}$$

$l = 0$ ҳаллары ушын бул теңлеме

$$-k_2 = k_1\cot(k_1a) \tag{6.83}$$

теңлигине алып келеди. Бул үзликсизлик шәрти тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциал шуқырды қарағанда 4-бапта алған трансцендент теңлемеге усайды.

B. Оң мәнисли энергия үзликсиз спектрге сәйкес келеди (байланыспаған ямаса шашыратыўшы ҳаллар). Бундай жағдайда шешим асимптоталық тербелмели болады. Шешим $j_l(k'r)$ ҳәм $n_l(k'r)$ функцияларының сызықлы комбинацияларынан турады. $k' = \sqrt{2ME}/\hbar$. Шешимниң барлық орынларда шекли болыўы ушын $r = a$ теңлиги орынланатуғын жағдайдағы үзликсизлик шәрти сызықлы комбинацияның коэффициентлерин анықлайды. Бөлекше шекли болған $E = \hbar^2k^2/(2M)$ кинетикалық энергиясы менен еркин түрде шексизликке кете алады.

4.8. Гармоникалық тербелислердиң осцилляторы

Гармоникалық осциллятор - физика илиминиң барлық бөлимлери ушын әҳмийетли болған көп санлы болмаған машқалалардың бири болып табылады. Мысалы, классикалық механика, электродинамика, статистикалық механика, қатты денелер физикасы, атом, атом ядросы менен элементар бөлекшелер физикасы ис алып баратуғын ҳәр қыйлы тербелмели қубылыслар ушын пайдалы болған моделди береди. Квантлық механикада тийкарғы концепциялар менен формализмди иллюстрациялайтуғын бийбаҳа қуралдың хызметин атқарады.

Басқа бир өлшемли гармоникалық осциллятордың тәсиринде ω мүйешлик тезлиги менен тербелетуғын массасы m болған бөлекшениң гамильтонианы былайынша жазылады:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2. \tag{4.114}$$

Мәселе бул гамильтонианның меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыўдан ибарат. Бул мәселени еки түрли усылдың жәрдеминде шешиў мүмкин. Биринши усыл аналитикалық усыл болып табылады ҳәм оны пайдаланған жағдайда ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемесин (қысқаша TISE) (4.114)-гамильтониан шешиў керек. Баспалдақ ямаса алгебралық усыл деп аталатуғын екинши усылда Шредингер теңлемеси шешилмейди, ал оның орнына өзиниң ишине пайда етиў ҳәм жоқ етиў операторлары (ямаса баспалдақ операторлары) деп аталатуғын операторларды алады; мәниси жағынан бул усыл матрицалық формулировка болып табылады, себеби ол ҳәр қыйлы шамаларды матрицалар тилинде аңғартады ...

Аналитикалық усылдың қысқаша тәрийиплениўи

Бул усыл төмендегидей дифференциаллық теңлемени (Шредингер теңлемесин) шешиў ушын дәрежели қатарлар усылын пайдаланады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2(x) = E(x) \tag{4.115}$$

Бул теңлемени мынадай теңлемеге алып келиў мүмкин:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{x^2}{x_0^4}\right)\psi(x) = 0. \tag{4.116}$$

Бул теңлемеде $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ - өлшем бирлиги узынлық болған константа. Кейинирек оның осциллятордың узынлығының масштабын беретуғынлығын көремиз. (4.116)-теңлемеге уқсас болған дифференциаллық теңлемелердиң шешими квантлық механика пайда болмастан әдеўир бурын математиклер тәрепинен ислеп шығылды (шешимлер Эрмит полиномлары деп аталатуғын базы бир арнаўлы функциялардың жәрдеминде бериледи).

(4.116)-теңлемедеги $x^2\psi(x)$ ағзасының пайда болыўы гаусс типиндеги шешимди алып көриў жөниндеги ойды пайда етеди[24]: $\psi(x) = f(x)\exp(-x^2/2x_0^2)$. Бул аңлаптада $f(x)$ арқалы x тың базы бир функциясы белгиленген. Бул сынап көрилетуғын $\psi(x)$ функциясын (4.116)-теңлемеге қойып, биз $f(x)$ ушын дифференциаллық теңлемени аламыз. Бул жаңа дифференциаллық теңлемени $f(x)$ функциясын дәрежели қатарға жайыў жолы менен шешиўге болады (яғный,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$$

қатарына, бул аңлатпада a_n арқалы коэффициентлер белгиленген). Бул қатарды дифференциаллық теңлемеге қойсақ рекуррентлик қатнаслардың пайда болыўына алып келеди. $f(x)$ дәрежели қатарының n ниң базы бир шекли мәнисинде тамам болыўын талап еткен жағдайда (себеби $\psi(x)$ толқын функциясының барлық орынларда, айрықша $x \longrightarrow \pm\infty$ те шекли мәниске ийе болыўы шәрт) рекуррентли қатнаслар энергияның мәнислери ушын оның дискрет ямаса квантланған екенлигин көрсететуғын аңлатпаны береди:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0, 1, 2, 3, \dots \tag{4.117}$$

Базы бир есаплаўлардан кейин физикалық жақтан қанаатландырарлық ҳәм (4.116)-теңлемени қанаатландыратуғын толқын функцияларының

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!\, x_0}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \tag{4.118}$$

формуласының жәрдеминде көрсетилетуғынлығына көз жеткериўге болады. Бул аңлатпада H_n арқалы *Эрмит полиномлары* деп аталатуғын n-тәртипли көп ағзалы белгиленген:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}. \tag{4.119}$$

Бул қатнастың жәрдеминде көп ағзалының дәслепки ағзаларын есаплаў мүмкин:

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1, & H_1(y) &= 2y, \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2, & H_3(y) &= 8y^2 - 12y, \\ H_4(y) &= 16y^4 - 48y^2 + 12, & H_5(y) &= 32y^5 - 160y^3 + 120y. \end{aligned} \tag{4.120}$$

6 бап

Үш өлшемли мәселелер

Кирисиў

---

[24] $\psi(x) = f(x)\exp(x^2/2x_0^2)$ түриндеги шешимлерди физикалық мәниси бойынша пайдаланыўға болмайды, себеби $x \longrightarrow \infty$ шегинде бундай функция шексизликке умтылады (жайылады).

Бул бапта биз үш өлшемли кеңисликте қозғалатуғын спинге ийе емес бөлекшелер ушын жазылған Шредингер теңлемесиниң қалай шешилетуғынлығын қараймыз. Изертлеўлерди декарт ҳәм сфералық координаталар системасында өткеремиз. Дәслеп декарт координаталар системасында бөлекшениң ҳәр қыйлы потенциаллардағы (еркин бөлекше, үш өлшемли туўры мүйешли потенциаллық шуқыр, гармоникалық осциллятордың потенциалындағы бөлекше) қозғалысын үйренемиз. Бул изертлеўлер бир өлшеўли қозғалысларда таллағанда алынған нәтийжелердиң әпиўайы улыўмаластырылыўы болып табылады. Бир өлшемли мәселелерге салыстырғанда үш өлшемли мәселелер базы бир симметрияға ийе потенциаллар болған жағдайда азғыныўға ийе болыўы менен айрылады. Екиншиден, сфералық координаталар системасын пайдаланыў жолы менен биз сфералық симметрияға ийе болған потенциалдағы бөлекшениң қозғалысын тәрийиплей аламыз. Еркин бөлекше менен гармоникалық осциллятордан баслап улыўмалық трактовкаларды көрсеткеннен кейин биз изертлеўлеримизди водород атомын қараў менен жуўмақлаймыз. Биз бул бапты магнит майданына жайластырылған водород атомының энергия қәддилерин есаплаў менен жуўмақлаймыз ҳәм магнит майданындағы атомның энергия қәддилериниң бир неше қәддилерге ажыралыўын Зеемен эффекти деп аталатуғынлығын еслетип өтемиз.

6.2. Декарт координаталарындағы үш өлшемли мәселелер

Биз бир өлшемли мәселелерди қарағанда пайдаланылған Шредингер теңлемесин үш өлшемли мәселелерди шешкенде қалайынша кеңейтиўге болатуғынлығын мәселесин қараймыз.

6.2.1. Улыўмалық усыл: Өзгериўшилерди ажыратыў

Спинге ийе болмаған ҳәм үш өлшемли потенциалдың тәсиринде қозғалатуғын бөлекше ушын ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(x,y,z,t)+\hat{V}(x,y,z,t)\Psi(x,y,z,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,y,z,t)}{\partial t}. \qquad (6.1)$$

Бул теңлемеде $\vec{\nabla}^2$ - Лапласиан, $\vec{\nabla}^2=\partial^2/\partial x^2+\partial^2/\partial y^2+\partial^2/\partial z^2$. 4-бапта айтылып өтилгениндей, ўақыттан ғәрезсиз болған потенциалда қозғалатуғын бөлекшениң толқын функциясы кеңисликлик ҳәм ўақытлық қураўшылардың көбеймеси түринде жазылады:

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar}. \qquad (6.2)$$

Бул аңлатпада $\psi(x,y,z)$ арқалы ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемесиниң шешими белгиленген:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(x,y,z)+\hat{V}(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z). \qquad (6.3)$$

Бул теңлеме $\hat{H}\psi=E\psi$ формасына ийе.

Дара туўындыларға ийе болған бул дифференциаллық теңлемени әдетте шешиў дым қыйын. Бирақ, $\hat{V}(x,y,z)$ потенциалы бир биринен ғәрезсиз болған бир өлшемли ағзалардың қосындысына жайылады (оларды векторлар менен алжастырмаў керек:

$$V(x,y,z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z). \tag{6.4}$$

Бундай жағдайда (6.3)-теңлемени өзгериўшилерди ажыратыў усылының жәрдеминде шешиў мүмкин. Бул усыл (6.3)-түринде жазылған үш өлшемли Шредингер теңлемесин бир биринен ғәрезсиз болған бир өлшемли Шредингер теңлемелерине бөлиўден ибарат. Усындай ҳәрекеттиң қалайынша әмелге асырылатуғынлығын қарайық. (6.3)-теңлемениң (6.4)-аңлатпа менен бирликте былайынша жазылатуғынлығына итибар беремиз:

$$\left[\widehat{H}_x + \widehat{H}_y + \widehat{H}_z\right]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z). \tag{6.5}$$

Бул теңлемедеги $\widehat{H}_x$ былайынша жазылады:

$$\widehat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_x(x). \tag{6.6}$$

$\widehat{H}_y$ пенен $\widehat{H}_z$ операторлары да тап усындай тақлетте жазылады.

$\widehat{V}(x,y,z)$ шамасы бир биринен ғәрезсиз болған үш ағзаға айрылатуғын болғанлықтан биз $\psi(x,y,z)$ функциясын ҳәр қайсысы бир өзгериўшиниң функциясы болған үш функцияның көбеймеси түринде жазамыз:

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z). \tag{6.7}$$

(6.7)-функцияны (6.5)-теңлемеге қойып ҳәм алынған аңлатпаны $X(x)Y(y)Z(z)$ көбеймесине бөлсек, мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} + V_x(x)\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} + V_y(y)\right] + \\ + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} + V_z(z)\right] = E. \tag{6.8}$$

Квадрат қаўсырмалардың ишиндеги ҳәр бир аңлатпа x, y, z өзгериўшилериниң тек биреўинен ғәрезли ҳәм усы үш аңлатпалардың қосындысы E ге тең болғанлықтан, олардың қосындысы константаға тең болыўы керек, ал бул константа болса E ге тең болыўы керек. Мысалы, x тан ғәрезли болған аңлатпа былайынша жазылады:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} + V_x(x)\right]X(x) = E_xX(x). \tag{6.9}$$

Тап усындай теңлемелер y, z координаталары ушын да орынлы, оның үстине

$$E_x + E_y + E_z = E. \tag{6.10}$$

Өзгериўшилерди ажыратыў усылы мәниси бойынша (6.3)-Шредингер теңлемесин (6.9)-теңлеме сыяқлы үш дана бир өлшемли теңлемеге айландырыў жолы менен киширейтиў болып табылады.

6.2.2. Еркин бөлекше

Еркин бөлекше болған әпиўайы жағдайда (6.3)-Шредингер теңлемеси $V_x = 0$, $V_y = 0$ ҳәм $V_z = 0$ теңликлери орынланатуғын жағдайда (6.9)-теңлемеге уқсас болған үш теңлемеге алып келинеди. x қураўшысына сәйкес келетуғын теңлемени (6.9)-теңлемеден алыў мүмкин:

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2} = -k_x^2 X(x). \tag{6.11}$$

Бул теңлемеде $k_x^2 = 2mE_x/\hbar^2$ ҳәм $E_x = \hbar^2 k_x^2/(2m)$. Бир өлшемли мәселелерди қарағанда өткерилген нормировкалаўдың салдарынан мынадай толқын функциясын аламыз:

$$X(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{ik_x x}. \tag{6.12}$$

Бул жағдайдан (6.3)-үш өлшемли Шредингер теңлемесиниң шешиминиң былайынша жазылатуғынлығын көремиз:

$$\psi_{\vec{k}}(x, y, z) = (2\pi)^{-3/2} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}. \tag{6.13}$$

Бул аңлатпада $\vec{k}$ менен $\vec{r}$ лер бөлекшениң сәйкес толқын векторы менен орнын көрсететуғын радиус-вектор. Ал толық энергия E ге келетуғын болсақ, оның шамасы (6.11)-бир өлшемли теңлемелердиң меншикли мәнислериниң суммасына тең:

$$E = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2. \tag{6.14}$$

(6.14) энергия тек $\vec{k}$ шамсынан ғәрезли болғанлықтан усы вектордың барлық ориентациялары (k_x, k_y, k_z лерди өзгертиў жолы менен алынған) мына шәртке бағынады:

$$\left|\vec{k}\right| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = const. \tag{6.15}$$

Бул теңлик бойынша энергияның турақлы ҳәр бир мәниси ушын ҳәр қыйлы болған (6.13)-меншикли функцияларының алынатуғынлығы көринип тур. Бул шаманы турақлы етип қалдыратуғын $\vec{k}$ векторының ориентацияларының саны шексиз көп болғанлықтан, еркин бөлекшениң энергиясы шексиз азғынған.

Ўақыттан ғәрезли болған (6.1)-Шредингер теңлемеси (6.13)-функцияларды (6.2) ге қойыў жолы менен алынатуғынлығын аңғарамыз:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \lambda(\vec{r}) e^{-i\omega t} = (2\pi)^{-3/2} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}. \tag{6.16}$$

Бул теңлемеде $\omega = E/\hbar$ шамасы $\vec{k}$ толқын векторына ийе тарқалатуғын толқынды көрсетеди. Бул толқын функциясының ортонормировкаланыў шәрт

$$\begin{gathered}\int \Psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}, t)\, \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) d^3r = \int \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}, t)\, \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) d^3r = \\ = \int e^{i(\vec{k} - \vec{k}')}\, d^3r = \delta\left(\vec{k} - \vec{k}'\right)\end{gathered} \tag{6.17}$$

формуласының жәрдеминде аңғартылады. Дирак белгилеўлеринде бул теңлеме былайынша жазылады:

$$\left\langle \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) \middle| \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) \right\rangle = \left\langle \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) \middle| \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) \right\rangle = \delta\left(\vec{k} - \vec{k}'\right). \tag{6.18}$$

3-бапта көрсетилип өтилгениндей, еркин бөлекшени толқын пакети түринде көрсетиўге болады (ҳәр қыйлы толқын векторларына сәйкес келетуғын толқын функцияларының суперпозициясы):

$$\begin{gathered}\Psi(\vec{r}, t) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int A\left(\vec{k}, t\right) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)\, d^3k = \\ = (2\pi)^{-3/2} \int A\left(\vec{k}, t\right) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} d^3k.\end{gathered} \tag{6.19}$$

Бул аңлатпада $A(\vec{k},t)$ функциясы $\Psi(\vec{r},t)$ функциясының Фурье-түрлендириўи болып табылады:

$$A(\vec{k},t) = (2\pi)^{-3/2}\int \Psi(\vec{r},t)\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} d^3r. \tag{6.20}$$

1- ҳәм 4-бапларда классикалық жақтан бөлекшениң ийелеген орнының толқын пакетиниң орайында сәйкес келетуғынлығы көрсетилди.

6.2.3. Шуқырдың потенциалы

Биз симметрияға ийе болмаған туўры мүйешли шуқырдың потенциалынан басламақшымыз. Буннан кейин x, y, z көшерлери эквивалент болғанлықтан жоқары симметрияға ийе болған туўры мүйешли потенциалды қараймыз.

6.2.3.1. Туўры мүйешли шуқырдың потенциалы

Дәслеп тәреплериниң узынлығы a, b, c болған туўры мүйешли шуқырда жайласқан массасы m болған бөлекшени қараймыз:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c, \\ & \infty, \quad \text{басқа орынларда.} \end{cases} \tag{6.21}$$

Бул потенциалды былайынша жазыўға болады: $V(x,y,z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$ ҳәм

$$V_x(x) = \begin{cases} \quad 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & \text{басқа орынларда.} \end{cases} \tag{6.22}$$

$V_y(y)$ ҳәм $V_z(z)$ потенциаллары да тап сондай түрге ийе болады.

Шуқырдың диййўалларында $\psi(x,y,z)$ толқын функцияларының нолге айланыўы керек. Усының менен бирге, биз 4-бапта усындай потенциал ушын шешимниң мынадай түрге ийе болатуғынлығын көрдик:

$$X(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right), \qquad n_x = 1, 2, 3, \dots \tag{6.23}$$

Усы толқын функцияларына сәйкес келетуғын энергияның меншикли мәнислери ушын жазылған формула мынадай түрге ийе:

$$E_{n_x} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n_x^2. \tag{6.24}$$

Бул аңлатпалардан биз нормировкаланған үш өлшемли меншикли функцияларды ҳәм оларға сәйкес келетуғын энергияларды жаза аламыз:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{n_x\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n_y\pi}{a}y\right)\sin\left(\frac{n_z\pi}{a}z\right), \tag{6.25}$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{c^2}\right), \qquad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \tag{6.26}$$

6.1-кесте. $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$ формуласы орынлы болған кублық потенциал ушын энергияның қәддилери ҳәм олардың азғыныўы

$E_{n_x n_y n_z}/E_1$	(n_x, n_y, n_z)	g_n
3	(111)	1
6	(211), (1,2,1), (1,1,2)	3
9	(221), (212), (122)	3
11	(311), (113), (131)	3
12	(222)	1
14	(321), (312), (231), (213), (132), (123)	6

6.2.3.2. Туўры мүйешли потенциал

Туўры мүйешли потенциал шуқырдың ең әпиўайы түри қабырғасының узынлығы L болған кублық потенциал болып табылады. Бундай жағдайда $a = b = c = L$. Бундай жағдайда (6.26) ның орнына мынадай теңликти аламыз:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right). \tag{6.27}$$

Тийкарғы ҳал $n_x = n_y = n_z = 1$ ге сәйкес келеди. Бундай жағдайда энергияның шамасы ушын

$$E_{111} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = 3E_1 \tag{6.28}$$

түриндеги формуланы аламыз.

4-бапта E_1 ушын $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ түриндеги аңлатпаны алып едик. Бул бир өлшемли шуқырдағы бөлекшениң ең киши энергиясы болып табылады. Солай етип, үш өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекшениң энергиясы бир өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекшениң энергиясынан 3 есе үлкен болады екен. 3 саны бөлекшениң қозғалысын симметриялы түрде 3 өлшем бойынша шеклеўдиң нәтийжесинде пайда болды.

Биринши қозған ҳал үш $\psi_{211}(x,y,z), \psi_{121}(x,y,z), \psi_{112}(x,y,z)$ ҳалларына сәйкес келетуғын квант санларының $\left(n_x, n_y, n_z\right) = (2,1,1), (1,2,1), (1,1,2)$ жыйнағына ийе. Олардың ишиндеги $\psi_{211}(x,y,z)$ функциясы былайынша жазылады:

$$\psi_{211}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}z\right). \tag{6.29}$$

$\psi_{121}(x,y,z)$ ҳәм $\psi_{112}(x,y,z)$ функциялары ушын аңлатпаларды $\psi_{211}(x,y,z)$ ушын жазылған аңлатпадай етип келтирип шығарыўға болады. Сол үш ҳалдың бирдей энергияға ийе болатуғынлығына итибар бериў керек:

$$E_{211} = E_{121} = E_{112} = 6\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = 6E_1. \tag{6.30}$$

Солай етип, биринши қозған ҳал үш қайтара азғынған ҳал екен.

Мәселеде симметрия болған жағдайда ғана азғыныў пайда болады. Биз қарап өткен кублық шуқырда барлық үш өлшем эквивалент болғанлықтан жоқары симметрия орын алады. Туўры мүйешли шуқыр ушын азғыныўдың жоқ екенлигине итибар бериў керек. Бул жағдайда бар болған үш өлшем бир бирине эквивалент емес. Усының менен бирге биз бир өлшемли мәселелерди қарағанда азғыныўдың болмағанлығына итибар бериў керек. Себеби бундай жағдайда тек бир квант санының пайда болыўы жүзеге келеди.

Екинши қозған ҳал да ҳәр қыйлы болған үш ҳалдан турады, демек ол үш қайтара азғынған ҳал болып табылады. Оның энергиялары $9E_1$ ге тең: E_{221}, E_{212}, E_{122}.

Энергия спектри 6.1-кестеде көрсетилген, бул кестеде ҳәр бир n-қәдди энергиясы, квант санлары ҳәм азғыныў g_n менен тәрийипленеди.

6.2.4. Гармоникалық тербелислер осцилляторы

Биз дәслеп симметрияға ийе болмаған анизотроп осциллятордан баслаймыз. Буннан кейин барлық xyz көшерлери эквивалент болған изотроп осцилляторға өтемиз.

6.2.4.1. Анизотроп осциллятор

Үш өлшемли анизотроп осцилляторлық потенциалда қозғалатуғын массасы m болған бөлекшени қараймыз.

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}m\omega_x^2\hat{X}^2+\frac{1}{2}m\omega_y^2\hat{Y}^2+\frac{1}{2}m\omega_z^2\hat{Z}^2. \tag{6.31}$$

(6.9) ға сәйкес бундай потенциал ушын жазылған Шредингер теңлемеси үш теңлемеге ажыралады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega_x^2x^2X(x)=E_xX(x). \tag{6.32}$$

$Y(y)$ ҳәм $Z(z)$ ушын теңлемелер де тап усындай түрге ийе болады. (6.31) ге сәйкес келетуғын меншикли мәнислер былайынша жазылады:

$$E_{n_xn_yn_z}=E_{n_x}+E_{n_y}+E_{n_z}= \tag{6.33}$$
$$=\left(n_x+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x+\left(n_y+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y+\left(n_z+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z.$$

Бул теңликте $n_x,n_y,n_z=0,1,2,3,\ldots$ Сәйкес стационар ҳаллар мыналар болып табылады:

$$\psi_{n_xn_yn_z}(x,y,z)=X_{n_x}(x)\,Y_{n_y}(y)Z_{n_z}(z). \tag{6.34}$$

Бул аңлатпадағы $X_{n_x}(x)$, $Y_{n_y}(y)$ ҳәм $Z_{n_z}(z)$ лер гармоникалық осциллятордың бир өлшемли толқын функциялары болып табылады. Бул ҳаллар азғынған емес, себеби (6.31) түриндеги потенциал симметрияға ийе емес (ол анизотроп).

6.2.4.2. Изотроп гармоникалық осциллятор

Енди изотроп гармоникалық осциллятордың потенциалын қараймыз. Оның энергиясының мәнислерин (6.33)-аңлатпаға $\omega_x=\omega_y=\omega_z=\omega$ теңликлерин қойыў жолы менен келтирип шығарыўға болады:

$$E_{n_xn_yn_z}=\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega. \tag{6.35}$$

Энергия n_x,n_y,n_z санларының суммасынан ғәрезли болғанлықтан, бирдей суммаға ийе болған квант санларының қәлеген жыйнағы бирдей энергияға ийе ҳалларға сәйкес келеди.

Энергиясы $E_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$ ға тең тийкарғы ҳал азғынған емес. Биринши қозған ҳал үш қайтара азғынған. Себеби бирдей $\frac{5}{2}\hbar\omega$ энергияға ийе үш ψ_{100}, ψ_{010} ҳәм ψ_{001} ҳаллары үш қайтара азғынған. Екинши қозған ҳал алты қайтара азғынған; оның энергиясы $\frac{7}{2}\hbar\omega$ ға тең.

Улыўма жағдайда биз n-қозған ҳалдың азғыныўы g_n шамасының терис болмаған n_x, n_y, n_z санларын суммалаўдың усылларының санына тең. Оның мәниси

$$g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) \tag{6.36}$$

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул теңликте $n = n_x + n_y + n_z$. 6.2-кестеде бир неше энергия қәддилери азғыныўлары менен көрсетилген.

6.2-кесте. Изотроп гармоникалық осциллятор ушын энергияның қәддилери менен олардың азғыныўлары

n	$2E_n/(\hbar\omega)$	$(n_x n_y n_z)$	g_n
0	3	(000)	1
1	5	(100), (010), (001)	3
2	7	(200), (020), (002), (110), (101), (011)	6
3	9	(300), (030), (003), (210), (201), (120), (102), (012),(021), (111)	10

6.3. Сфералық координаталардағы үш өлшемли мәселелер

6.3.1. Орайлық потенциал

Бул бөлимде биз сфералық симметрияға ийе потенциалда қозғалатуғын массасы m болған бөлекше ушын жазылған Шредингер теңлемесиниң структурасы менен танысамыз.

$$V(\vec{r}) = V(r) \tag{6.41}$$

шәрти орынланатуғын потенциал *орайлық потенциал* атамасы менен белгили.

Импульси $i\hbar\vec{\nabla}$ ҳәм ийелеген орны $\vec{r}$ векторы менен анықланатуғын бундай бөлекше ушын ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемеси былайынша жазылады[25]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \tag{6.42}$$

Гамильтониан сфералық симметрияға ийе болғанлықтан биз (r, θ, φ) сфералық координаталарынан пайдаланамыз. Олар менен декарт координаталарының арасында мынадай қатнаслар бар:

---

[25] Бул бөлимниң барлығында биз m азимуталлық квант саны менен алжасықтың болмаўы мақсетинде бөлекшениң массасын M арқалы белгилеймиз.

$$x = r\sin\theta\cos\varphi\,, y = r\sin\alpha\sin\varphi\,, z = r\cos\theta. \qquad (6.43)$$

∇^2 лапласиан радиаллық бөлим ∇_r^2 менен мүйешлик бөлим ∇_Ω^2 болып төмендегидей болып бөлинеди (5-бапқа қараңыз):

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\nabla_\Omega^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\vec{L}}^2 = \\ = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{\vec{L}}^2. \qquad (6.44)$$

Бул теңликте $\hat{\vec{L}}^2$ арқалы орбиталық қозғалыс муғдарының моменти белгиленген.

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \qquad (6.45)$$

Усы аңлатпаларға байланыслы сфералық координаталардағы Шредингер теңлемеси мынадай түрге енеди:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{2Mr^2}\hat{\vec{L}}^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}). \qquad (6.46)$$

Бул теңлемедеги биринши ағзаны радиаллық кинетикалық энергия деп қараўға болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r = \frac{\hat{P}_r^2}{2M}. \qquad (6.47)$$

Себеби радиаллық импульс операторы мынадай эрмитлик формула менен бериледи[26]:

$$\hat{P}_r = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\vec{r}}{r}\right)\cdot\hat{\vec{P}} + \hat{\vec{P}}\cdot\left(\frac{\vec{r}}{r}\right)\right] = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \equiv -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r. \qquad (6.48)$$

(6.46) дағы екинши ағза болған $\frac{\hat{\vec{L}}^2}{2Mr^2}$ ағзасын айланыўдың кинетикалық энергиясына сәйкес келеди деп есаплаў керек, себеби бул ағза бөлекшени координата басының дөгерегинде "таза" айландырыўдың нәтийжесинде пайда болады (яғный r өзгериўшиси өзгермей қалатуғын жағдайда, Mr^2 шамасы координата басына салыстырғандағы бөлекшениң инерция моменти).

(6.45)-аңлатпада $\hat{\vec{L}}^2$ шамасының r ден ғәрезсиз екенлиги көрсетилди. Сонлықтан ол $\hat{V}(r)$ менен де, радиаллық кинетикалық энергия менен де коммутацияланады; демек, ол $\hat{H}$ гамильтонианы менен де коммутацияланады деген сөз. Усының менен бирге $\hat{L}_z$ операторы $\hat{\vec{L}}^2$ операторы менен коммутацияланатуғын болғанлықтан, үш $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторлары бир бири менен коммутацияланады:

$$[\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0. \qquad (6.49)$$

Солай етип, $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады. 5-бапта биз $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторларының бир ўақыттағы меншикли функцияларының $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ сфералық гармоникалары менен берилетуғынлығын көрдик:

---

[26] Орынды белгилейтуғын $\hat{r}$ операторы менен радиаллық импульс операторы $\hat{p}_r$ арасындағы коммутатор ушын $[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar$ теңлигиниң орынланатуғынлығын аңсат көрсетиўге болады.

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{6.50}$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{6.51}$$

(6.46)-аңлатпадағы гамильтониан радиаллық ҳәм мүйешлик бөлимлердиң қосындысы болғанлықтан, радиаллық бөлим менен мүйешлик бөлимниң көбеймеси түринде жазылатуғын ҳәм мүйешлик бөлим тек сферикалық гармоника $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ болып табылатуғын шешимлерди излеўимиз керек:

$$\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|nlm\rangle = \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{6.52}$$

Орайлық потенциалда қозғалатуғын системаның орбиталық импульс моментиниң сақланатуғынлығын аңғарамыз, себеби (6.49)-аңлатпада көрсетилгендей, ол гамильтониан менен коммутацияланады.

$R_{nl}(r)$ радиаллық толқын функциясы еле табылған жоқ. n квант саны $\widehat{H}$ тың меншикли мәнислерин идентификациялаў ушын киргизиледи:

$$\widehat{H}|nlm\rangle = E|nlm\rangle. \tag{6.53}$$

(6.52)-аңлатпаны (6.46)-аңлатпаға қойып ҳәм $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ толқын функциясының $\hat{\vec{L}}^2$ операторының меншикли функциясы екенлигин, соның менен бирге меншикли мәнислердиң $l(l+1)\hbar^2$ шамасына тең екенлигин пайдаланып, буннан кейин $R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ көбеймесине бөлип ҳәм $2Mr^2$ шамасына көбейтип, биз радиаллық ҳәм мүйешлик еркинлик дәрежелери ажыралған теңлемени аламыз:

$$\left[-\hbar^2 \frac{r}{R_{nl}} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR_{nl}) + 2Mr^2(V(r)-E)\right] + \left[\frac{\hat{\vec{L}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi)}{Y_{lm}(\theta,\varphi)}\right] = 0. \tag{6.54}$$

Биринши квадрат қаўсырмадағы ағзалар θ дан ғәрезсиз, ал екинши квадрат қаўсырманың ишиндеги ағзалар r ден ғәрезсиз. Сонлықтан, бул қаўсырмалардың ҳәр қайсысы константаға тең болыўы, ал сол еки константаның қосындысының нолге тең болыўы керек. Екинши квадрат қаўсырма $\hat{\vec{L}}^2$ операторының меншикли мәнислерин анықлайтуғын (6.50)-теңлеме болып табылады; демек, оның мәниси $l(l+1)\hbar^2$ шамаларына тең. Ал биринши қаўсырмаға келсек, онда оның $-l(l+1)\hbar^2$ шамасына тең болыўы керек; бул орайлық майданның потенциалы ушын белгили болған радиаллық теңлемеге алып келеди:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_{nl}(r)\big) + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}\right]\big(rR_{nl}(r)\big) = E_n\big(rR_{nl}(r)\big). \tag{6.55}$$

Системаның энергиясының қәддилерин беретуғын (6.55)-теңлемениң магнит квант саны m нен ғәрезсиз екенлигине итибар бериў керек. Сонлықтан, E_n энергия $(2l+1)$ қайтара азғынған болып шығады. Себеби берилген l саны ушын ҳәр қыйлы болған $(2l+1)$ дана ψ_{nlm} меншикли функция болады (яғный, $\psi_{nl\,-l}, \psi_{nl\,-l+1}, \dots, \psi_{nl\,l}$). Олардың барлығына E_n меншикли энергиясының бир мәниси сәйкес келеди. Бул азғыныў қәсийети орайлық симметрияға ийе майдан ушын тән.

(6.55)-теңлемениң бир өлшем болған r ушын бир өлшемли теңлемениң структурасын береди:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}\right]U_{nl}(r) = E_nU_{nl}(r) \tag{6.56}$$

ямаса

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2}+V_{eff}(r)U_{nl}(r)=E_nU_{nl}(r). \tag{6.57}$$

Бул теңлемелердиң шешимлери системаның энергиясының қәддилерин береди. $U_{nl}(r)$ толқын функциясы

$$U_{nl}(r)=rR_{nl}(r) \tag{6.58}$$

түринде, ал потенциал

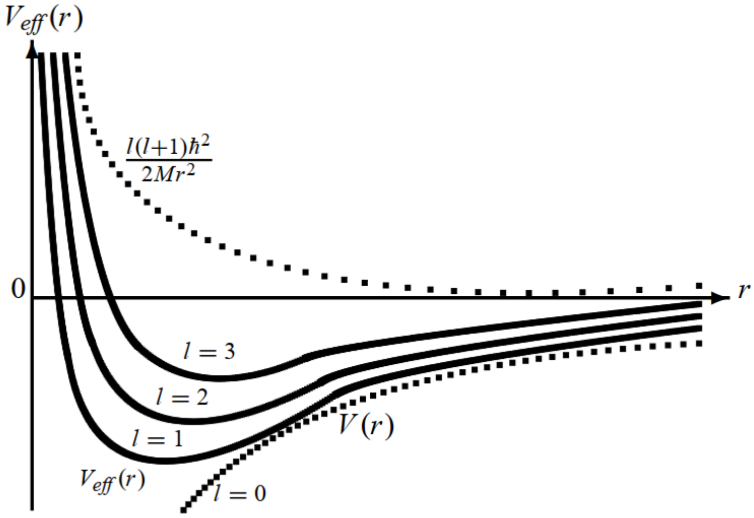
$$V_{eff}(r)= V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \tag{6.59}$$

түринде бериледи. Бул аңлатпа эффектив ямаса орайдан қашыўшы атамасы менен белгили, $V(r)$ - орайлық потенциал, ал $l(l+1)\hbar^2/2Mr^2$ ағза болса орбиталық момент пенен байланыслы болған ийтеретуғын ямаса орайдан қашыўшы потенциал болып табылады. Ол бөлекшени орайдан сыртқа қарай ийтеретуғын орбиталық импульс моменти менен байланыслы. Кейинирек, атомлар болған жағдайда $V(r)$ потенциалының ядро менен электронлар арасындағы тартысыўдың салдарынан пайда болатуғын кулонлық потенциал екенлиги көрсетиледи. (6.57)-теңлеме меншикли мәнислерди табыў ушын арналған бир өлшемли теңлемениң структурасына ийе болса да, оның бир өлшемли Шредингер теңлемесинен айырмаға ийе екенлигине итибар бериў керек. Себеби r терис мәниске ийе болмайды ҳәм $r=0$ ден $r=\infty$ ге шекем өзгереди. Усы жағдайға сәйкес $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ функциясының r диң нолден баслап ∞ ке шекемги мәнислериниң барлығында шекли болыўы керек. Бирақ, егер $R_{nl}(0)$ шекли болса, онда $r=0$ ноқатында $rR_{nl}(r)$ шамасы нолге айланыўы керек, яғный

$$\lim_{r\to 0}[rR_{nl}(r)]=U_{nl}(0)=0. \tag{6.60}$$

Солай етип, (6.57)-радиаллық теңлемени меншикли мәнислерди анықлайтуғын эквивалентли бир өлшемли мәселеге айландырыў ушын $r>0$ бөлекшениң потенциалы эффективлик $V_{eff}(r)$ потенциалы менен, ал $r\leq 0$ ушын инфинитлик потенциал менен бериледи деп болжаў керек.

Меншикли мәнислерди анықлаў ушын арналған (6.57)-теңлемениң байланысқан ҳалларды тәрийиплеўи ушын $V(r)$ потенциалының тартылысқа сәйкес келиўи (яғный терис болыўы) керек, себеби $l(l+1)\hbar^2/2Mr^2$ ағзасы ийтериўге сәйкес келеди. 6.1-сүўретте l диң үлкейиўи менен $V_{eff}(r)$ потенциалының тереңлигиниң кемейетуғынлығы, ал оның минимумының координата басынан алыслайтуғынлығы көринип тур. Бөлекше координата басынан қаншама қашықлаған сайын оның байланыслы болыўы кемейеди. Бул бөлекшениң мүйешлик моментиниң үлкейиўи менен кем-кемнен әззи байланысатуғынлығы менен байланыслы.



6.1-сүўрет. $l = 0, 1, 2, 3$ шамаларына сәйкес келетуғын $V_{eff}(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/(2Mr^2)$ эффективлик потенциал; $V(r)$ - орайлық тартыў потенциалы, $\hbar^2 l(l+1)/(2Mr^2)$ шамасы болса ийтериўши (орайдан қашыўшы) потенциал.

Жуўмақ шығаратуғын болсақ, онда сфералық симметрияға ийе потенциаллар ушын (6.46)-Шредингер теңлемесиниң $\hat{\vec{L}}^2$ ушын (6.50)-тривиаллық мүйешлик теңлемеге ҳәм (6.57)-бир өлшемли радиаллық теңлемеге алып келинетуғынлығын атап өтиўимиз керек.

Ескертиў

Бөлекше орбиталлық ҳәм спинлик еркинлик дәрежелерине ийе болатуғын жағдайда, оның толқын функциясы $|\Psi\rangle$ еки бөлимниң көбеймесинен турады: биринshi кеңисликлик бөлим $\psi(\vec{r})$, екинши спинлик бөлим $|s, m_s\rangle$; яғный $|\Psi\rangle = |\psi\rangle|s, m_s\rangle$. Орайлық майданда қозғалатуғын электрон болған жағдайда оның ҳалын толық тәрийиплеў ушын n, l, m_l квант санлары менен бирге төртинши квант саны болған спин m_s ти киргизиў талап етиледи: $|nlm_l m_s\rangle = |nlm_l\rangle|s, m_s\rangle$; демек

$$\Psi_{n,l,m_l,m_s}(\vec{r}) = \psi_{nlm_l}(\vec{r})|s, m_s\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)\,|s, m_s\rangle. \qquad (6.61)$$

Спин кеңисликлик еркинлик дәрежесинен ғәрезли емес, сонлықтан айландырыў операторы $\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ кеңисликлик толқын функциясына тәсир етпейди; бирақ тек $|s, m_s\rangle$ айланыў бөлимине тәсир етеди.

6.3.2. Сфералық координаталардағы еркин бөлекше

Биз буннан былай жоқарыда массасы M ҳәм энергиясы $E_k = \hbar^2 k^2/(2M)$ болған бөлекше ушын ислеп шығылған формализмди қараймыз. k арқалы толқынлық сан белгиленген ($k = |\vec{k}|$). Еркин бөлекшениң гамильтонианының $\hat{H} = -\hbar^2\nabla^2/(2M)$ түринде жазылатуғынлығын ҳәм оның $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторлары менен коммутацияланатуғынлығын еске түсиремиз. Себеби $V(r) = 0$ теңлиги орын алғанда (еркин бөлекше ушын) гамильтониан айланыўға қарата инвариант. Бундай жағдайда еркин бөлекшени орайлық потенциаллардың дара жағдайы деп қараўға болады. Биз жоқарыда толқын функциясының радиаллық ҳәм мүйешлик бөлимлериниң ажыратылыўының мүмкин екенлигин көрсеткен едик. $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \langle r,\theta,\varphi|klm\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$.

Еркин бөлекше ушын радиаллық теңлеме (6.55)-теңлемеде $V(r) = 0$ теңлигин есапқа алыў менен алынады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_{nl}(r)\big) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}R_{nl}(r) = E_nR_{nl}(r). \quad (6.62)$$

Бул теңлемени былайынша көширип жазыўға болады:

$$-\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_{kl}(r)\big) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}R_{kl}(r) = k^2R_{kl}(r). \quad (6.63)$$

Бул теңлемеде $k^2 = 2ME_k/\hbar^2$.

6.3-кесте. Бессель менен Нейманның биринши бир неше сфералық функциялары

Бессель функциясы, $j_l(r)$	Нейман функциясы, $n_l(r)$
$j_0(r) = \frac{\sin r}{r}$	$n_0(r) = -\frac{\cos r}{r}$
$j_1(r) = \frac{\sin r}{r^2} - \frac{\cos r}{r}$	$n_1(r) = -\frac{\cos r}{r^2} - \frac{sin\, r}{r}$
$j_2(r) = \left(\frac{3}{r^3} - \frac{1}{r}\right)\sin r - \frac{3}{r^2}\cos r$	$n_2(r) = -\left(\frac{3}{r^3} - \frac{1}{r}\right)\cos r - \frac{3}{r^2}\sin r$

$\rho = kr$ өзгериўшисин пайдаланып, алынған теңлемени мынадай теңлемеге алып келе аламыз:

$$\frac{d^2\mathcal{R}_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d\mathcal{R}_l(\rho)}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\mathcal{R}_l(\rho) = 0. \quad (6.64)$$

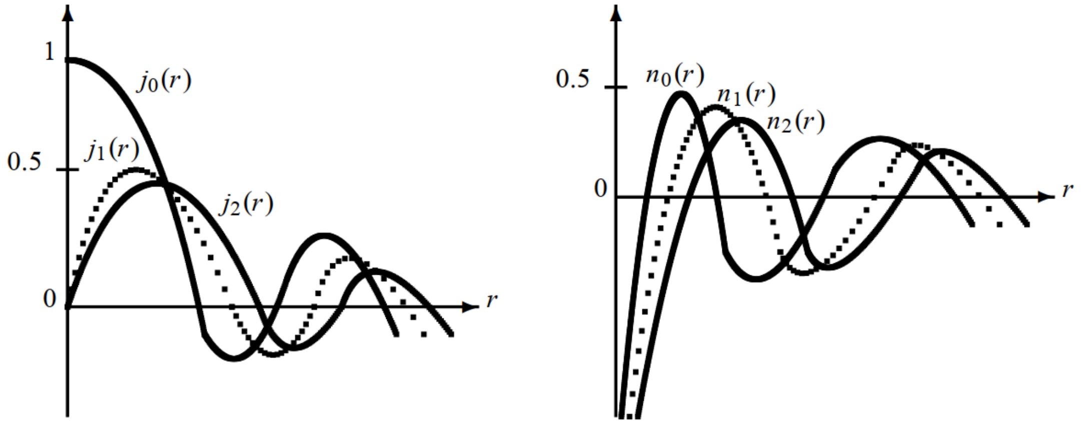
Бул теңлемеде $\mathcal{R}_l(\rho) = \mathcal{R}_l(kr) = R_{kl}(r)$. Бул дифференциаллық теңлеме Бессель сфералық теңлемеси атамасы менен белгили. Бул теңлемениң улыўмалық шешими *Бесселдиң сфералық функциялары* $j_l(\rho)$ менен *Нейманның сфералық функциялары* $n_l(\rho)$ диң сызықлы комбинациясы түринде бериледи:

$$\mathcal{R}_l(\rho) = A_lj_l(\rho) + B_ln_l(\rho). \quad (6.65)$$

Бул теңликте $j_l(\rho)$ менен $n_l(\rho)$ функциялары былайынша бериледи:

$$j_l(r) = (-\rho)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\frac{\sin\rho}{\rho}, n_l(r) = -(-\rho)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\frac{\cos\rho}{\rho}. \quad (6.66)$$

Бессель менен Нейманның биринши бир неше сфералық функциялары 6.2-кестеде, ал олардың формалары 6.2-сүўретте берилген.



6.2-сүўрет. Бесселдиң сфералық функциялары $j_l(\rho)$ менен Нейманның сфералық функциялары $n_l(\rho)$. Координата басында тек Бесселдиң сфералық функциялары ғана шекли.

$\sin\rho/\rho$ менен $\cos\rho/\rho$ ларды ρ бойынша дәрежели қатарға жайып, ρ ның киши мәнислеринде (яғный координаталар басында жақын орынларда) $j_l(\rho)$ менен $n_l(\rho)$ функцияларының мынадай аңлатпаларға алып келинетуғынлығын көремиз:

$$j_l(\rho) \simeq \frac{2^l l!}{(2l+1)!}\rho^l, \qquad n_l(\rho) \simeq -\frac{(2l)!}{2^l l!}\rho^{-l-1}, \qquad \rho \ll 1. \tag{6.67}$$

Ал, l диң үлкен мәнислери ушын:

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right),\ n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho}\cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right). \tag{6.68}$$

Нейман функциясы $j_l(\rho)$ координата басында тарқалатуғын ҳәм ψ_{klm} толқын функциялары кеңисликтиң барлық бөлимлеринде шекли болатуғын болғанлықтан, $n_l(\rho)$ функциялары машқаланың ақылға муўапық шешими бола алады. Демек, тек Бесселдиң сфералық функциялары ғана еркин бөлекшениң меншикли функцияларына үлес қоса алады:

$$\psi_{klm}(r,\theta,\varphi) = j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{6.69}$$

Бул аңлатпада $k = \sqrt{2ME_k}/\hbar$. 6.2-сүўретте көринип турғанындай, функциялардың амплитудалары r диң үлкейиўи менен кем-кемнен киширейеди. Үлкен қашықлықларда толқын функциялары сфералық толқынлар түринде көрсетиледи.

$E_k = \hbar^2k^2/(2M)$ аңлатпасындағы k индекси үзликсиз өзгеретуғын болғанлықтан еркин бөлекшениң энергия спектриниң шексиз көп қайтара азғынған екенлигин аңғарамыз. Бул кеңисликтеги k ның барлық ориентацияларының энергияның бир мәнисине сәйкес келетуғынлығы менен байланыслы.

Ескертиў

Биз еркин бөлекшени декарт ҳәм сфералық координаталар системаларында үйрендик. Усы координаталар системаларының екеўинде де энергияның бирдей болған $E_k = \hbar^2k^2/(2M)$ аңлатпасы менен аңлатылатуғынлығын итибарға алып, декарт координаталар системаларында толқын функцияларының $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ түриндеги тегис толқын менен [қараңыз: (6.13)], ал сфералық координаталар системасында

$j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ түриндеги сфералық толқынлар [қараңыз: (6.69)] менен берилетуғынлығын көремиз. Бирақ, толқын функцияларының еки жыйнағының бир бири менен эквивалентли екенлигин көремиз. Себеби, биз $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ түринде жазылған тегис толқынларды $j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ сфералық толқынлары тилинде тәрийиплей аламыз. Мысалы, биз тегис толқынды бирдей k ға, бирақ ҳәр қыйлы l менен m ге ийе болған сфералық ҳаллардың сызықлы комбинациясы түринде пайда ете аламыз:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a_{lm} j_l(kr) Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{6.70}$$

Солай етип, машқала a_{lm} қатарға жайыў коэффициентлерин табыўға алып келинеди екен. Мысалы, $\vec{k}$ ның бағыты z көшерине параллель болса, онда $m = 0$ ҳәм

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)\, j_l(kr) P_l(\cos\theta). \tag{6.71}$$

Бул аңлатпада $P_l(\cos\theta)$ - Лежандрдың көп ағзалысы, оның үстине $Y_{0m}(\theta,\varphi) \sim P_l(\cos\theta)$. $\psi_{klm}(r,\theta,\varphi) = j_l(kr)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ толқын функциялары энергиясы E_k, импульс моменти l болған еркин бөлекшени тәрийиплейди. Бирақ, сол толқын функциялары $\vec{p}$ сызықлы импульс ҳаққындағы ҳеш қандай информацияны бермейди (ψ_{klm} функциясы $\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2$ ҳәм L_z ге сәйкес келетуғын меншикли ҳалды тәрийиплейди, бирақ $\hat{\vec{P}}^2$ ға сәйкес келетуғын ҳалды тәрийплемейди). Екинши тәрептен, $\hat{H}$ пенен $\hat{\vec{P}}^2$ лардың $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ меншикли толқын функциялары $\hat{\vec{L}}^2$ ҳәм L_z лердиң меншикли функциялары болып табылмайды. Демек, биз пайдаланып атырған шамалар бөлекшениң мүйешлик моменти ҳаққында ҳеш қандай информацияны бермейди. Яғный, тегис толқынлар дәл анықланған сызықлы импульслерге ийе ҳалларды, бирақ жаман анықланған моментке ийе ҳалларды тәрийиплейди екен.

6.3.3. Туўры мүйешли шуқырдың сфералық потенциалы

Енди туўры мүйешли шуқырдың тартыў потенциалындағы массасы M болған бөлекше ҳаққындағы мәселени қараймыз.

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases} \tag{6.72}$$

$0 < r < a$ ҳәм $r > a$ теңликлери орынлы болатуғын жағдайларды өз алдына қараймыз.

6.3.3.1. $0 < r < a$ болған жағдай

Шуқырдың иши болған $0 < r < a$ областында ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемесин (6.55)-теңлемеден алып жазыўға болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_l(r)\big)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}R_l(r)=(E+V_0)R_l(r). \tag{6.73}$$

$\rho = k_1 r$ өзгериўшисин пайдаланамыз ҳәм бул көбеймедеги k_1 енди $k_1 = \sqrt{2M/(E+V_0)}/\hbar$ формуласының жәрдеминде анықланады. Бундай жағдайда (6.73)-теңлеме (6.64)-Бесселдиң сфералық дифференциаллық теңлемесине алып келинеди. Еркин бөлекше болған жағдайдағыдай, радиаллық толқын функциясы барлық орынларда шекли болады ҳәм ол Бесселдиң сфералық функциялары $j_l(k_1 r)$ тилинде $r < a$ болған жағдайда былайынша жазылады:

$$R_l(r) = Aj_l(k_1 r) = Aj_l\left(\frac{\sqrt{2M/(E+V_0)}}{\hbar}\right). \tag{6.74}$$

Бул аңлатпада A - нормировка бойынша анықланатуғын коэффициенти.

6.3.3.2. $r > a$ болған жағдай

Шуқырдың дийўалларының сыртында бөлекше еркин қозғалады, бундай жағдайда Шредингер теңлемеси (6.62) түринде жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\big(rR_{kl}(r)\big)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}R_{kl}(r)=E_kR_{kl}(r). \tag{6.75}$$

Бундай жағдайда энергияның оң ямаса терис болыўына байланыслы еки жағдай орын алады.

А. Терис энергияға ийе жағдай байланысқан ҳалларға (яғный энергияның дискрет спектрине) сәйкес келеди. (6.75) тиң улыўма шешими (6.63)-шешимлерге уқсас, бирақ k енди жормал шама болып табылады, яғный биз k ны ik_2 шамасы менен алмастырыўымыз керек, яғный бул жағдайда $j_l(ik_2 r)$ ҳәм $n_l(ik_2 r)$ функцияларының сызықлы комбинациясынан турады:

$$R_l(ik_2 r) = B[j_l(ik_2 r) \pm n_l(ik_2 r)]. \tag{6.76}$$

Бул аңлатпада B - нормировка шәрти бойынша анықланатуғын коэффициент, $k_2 = \sqrt{-2NE}/\hbar$. **Ескертиў**: $j_l(\rho)$ менен $n_l(\rho)$ функцияларының сызықлы комбинациялары Хенкелдиң биринши әўлад сфералық функциялары $h_l^{(1)}(\rho)$ ҳәм екинши әўлад сфералық функциялары $h_l^{(2)}(\rho)$ тилинде былайынша жазылыўы мүмкин:

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho), \tag{6.77}$$

$$h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho) = \left(h_l^{(1)}(\rho)\right)^*. \tag{6.78}$$

Хенкелдиң биринши әўлад сфералық функцияларының ең бириншилери мынадай түрге ийе:

$$h_0^{(1)}(\rho) = -i\frac{e^{i\rho}}{\rho}, h_1^{(1)}(\rho) = -\left(\frac{1}{\rho}+\frac{i}{\rho^2}\right)e^{i\rho},$$
$$h_2^{(1)}(\rho) = \left(\frac{i}{\rho}-\frac{3}{\rho^2}-\frac{3i}{\rho^3}\right)e^{i\rho}. \tag{6.79}$$

$\rho \longrightarrow \infty$ шегиндеги Хенкель функцияларының асимптоталық қәсийетлерин (6.68) ден келтирип шығарыўға болады:

$$h_l^{(1)}(\rho) \longrightarrow -\frac{i}{\hbar}e^{i(\rho - l\pi/2)}, \qquad h_l^{(2)}(\rho) \longrightarrow \frac{i}{\hbar}e^{-i(\rho - l\pi/2)}. \tag{6.80}$$

(6.76) да сақланыўы керек болған шешимлердиң барлық орынларда шекли болыўы керек. (6.80)-теңлемелерден тек биринши әўлад Хенкель функциялары болған $h_l^{(1)}(r)$ функцияларының r диң үлкен мәнислеринде шекли болатуғынлығын көриўге болады ($h_l^{(2)}(r)$ функциялары r диң үлкен мәнислеринде жайылады). Солай етип, шуқырдың сыртында Хенкелдиң биринши әўлад функциялары менен аңғартылған толқын функциялары физикалық мәниске ийе болады [қараңыз: (6.76)]:

$$R_l(ik_2r) = Bh_l^{(1)}\left(i\frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar}r\right) = Bj_l\left(i\frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar}r\right) + \\ +iBn_l\left(i\frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar}r\right). \tag{6.81}$$

$r = a$ теңлиги орынланғандағы радиаллық функцияның ҳәм оның үзликсизлиги мынаны береди:

$$\frac{1}{h_l^{(1)}(ik_2r)}\frac{dh_l^{(1)}(ik_2r)}{dr}\bigg|_{r=a} = \frac{1}{j_l(k_1r)}\frac{dj_l(k_1r)}{dr}\bigg|_{r=a}. \tag{6.82}$$

$l = 0$ ҳаллары ушын бул теңлеме

$$-k_2 = k_1\cot(k_1a) \tag{6.83}$$

теңлигине алып келеди. Бул үзликсизлик шәрти тереңлиги шекли болған түўры мүйешли потенциал шуқырды қарағанда 4-бапта алған трансцендент теңлемеге усайды.

B. Оң мәнисли энергия үзликсиз спектрге сәйкес келеди (байланыспаған ямаса шашыратыўшы ҳаллар). Бундай жағдайда шешим асимптоталық тербелмели болады. Шешим $j_l(k'r)$ ҳәм $n_l(k'r)$ функцияларының сызықлы комбинацияларынан турады. $k' = \sqrt{2ME}/\hbar$. Шешимниң барлық орынларда шекли болыўы ушын $r = a$ теңлиги орынланатуғын жағдайдағы үзликсизлик шәрти сызықлы комбинацияның коэффициентлерин анықлайды. Бөлекше шекли болған $E = \hbar^2k^2/(2M)$ кинетикалық энергиясы менен еркин түрде шексизликке кете алады.

6.3.4. Изотроп гармоникалық осциллятор

Гармоникалық осциллятордың

$$V(r) = \frac{1}{2}M\omega^2r^2 \tag{6.84}$$

түриндеги изотроп потенциалға ийе массасы M болған гармоникалық осциллятор ушын (6.57) ден алынған Шредингер теңлемесиниң радиаллық бөлими былайынша жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[\frac{1}{2}M\omega^2r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}\right]U_{nl}(r) = EU_{nl}(r). \tag{6.85}$$

Шешимлердиң асимптоталық шеклердеги қәсийетлерин үйрениў жолы менен бул теңлемени шешиўге кирисемиз (r диң жүдә киши ҳәм жүдә үлкен болған мәнислериндеги). Бир тәрептен $r \longrightarrow 0$ шегинде E менен $M\omega^2 r^2/2$ шамаларының мәнислери $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}$ шамасының мәнисинен жүдә киши болады. Демек, $r \longrightarrow 0$ шегинде (6.85)-теңлеме

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}U(r)=0 \qquad (6.86)$$

теңлемесине айланады. Бул теңлемениң шешимлери $U(r){\sim}r^{l+1}$ түрине ийе. Екинши тәрептен, $r \longrightarrow \infty$ шегинде E менен $M\omega^2 r^2/2$ шамаларының мәнислери $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}$ шамасының мәнисинен жүдә үлкен болады ҳәм, усыған байланыслы, $r \longrightarrow \infty$ шегинде (6.85) тиң асимптоталық формасы мынадай түрге ийе болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\frac{1}{2}M\omega^2 r^2 U(r)=0 \qquad (6.87)$$

Бул теңлемениң шешими $U(r){\sim}e^{-M\omega r^2/2\hbar}$ түринде жазылады. (6.86) менен (6.87) ни комбинациялап, биз (6.85)-теңлемениң шешимин былайынша жазамыз:

$$U(r)=f(r)r^{l+1}e^{-M\omega^2 r^2/2\hbar}. \qquad (6.88)$$

Бул аңлатпада $f(r)$ арқалы r диң функциясы белгиленген. Бул аңлатпаны (6.85) ке қойыў жолы менен $f(r)$ ушын теңлемени аламыз:

$$\frac{d^2f(r)}{dr^2}+2\left(\frac{l+1}{r}-\frac{M\omega}{\hbar}r\right)\frac{df(r)}{dr}+ \\ +\left[\frac{2ME}{\hbar^2}-(2l+3)\frac{M\omega}{\hbar}\right]f(r)=0. \qquad (6.89)$$

Енди шешимди дәрежели қатарлардың жәрдеминде табыўға тырысайық.

$$f(r)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n r^n=a_0+a_1 r+a_2 r^2+\cdots+a_n r^n+\cdots. \qquad (6.90)$$

Бул функцияны (6.89)-теңлемеге қойсақ, мынадай теңлемени аламыз:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{n(n-1)a_n r^{n-2}+2\left(\frac{l+1}{r}-\frac{M\omega}{\hbar}r\right)na_n r^{n-1}\right. \\ \left.+\left[\frac{2ME}{\hbar^2}-(2l+3)\frac{M\omega}{\hbar}\right]a_n r^n\right\}=0. \qquad (6.91)$$

Бул өз гезегинде төмендегидей теңлемениң алыныўына алып келеди:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{n(n+2l+1)a_n r^{n-2}+\left[-\frac{2M\omega}{\hbar}n+\frac{2ME}{\hbar^2}-(2l+3)\frac{M\omega}{\hbar}\right]a_n r^n\right\}=0. \qquad (6.92)$$

Бул теңлемениң дурыс болыўы ушын r диң ҳәр қыйлы дәрежелериниң алдындағы коэффициентлердиң ҳәр қайсысы өз алдына нолге тең болыўы керек. Мысалы, $n=0$ теңлиги орынланғанда r^{-2} шамасының алдында турған коэффициент нолге тең болады:

$$0\cdot(2l+1)a_0=0. \qquad (6.93)$$

Бул теңлемениң орынланыўы ушын a_0 шамасының нолге тең болыўының шәрт емес екенлигине дыққат аўдарыў керек. r^{-1} шамасы (6.92) деги $n=1$ ге сәйкес келеди; усы коэффициенттиң нолге айланыўы ушын мынаған ийе болыўымыз керек:

$$1\cdot(2l+2)a_1=0. \qquad (6.94)$$

$2l + 2$ шамасының нолге тең болыўы мүмкин емес, себеби l квант саны пүтин оң сан болып табылады. Сонлықтан a_1 шамасының нолге тең болыўы керек.

r^n коэффициенти мынадай қатнастың нәтийжеси болып табылады:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{(n+2)(n+2l+1)a_{n+2}+\left[\frac{2ME}{\hbar^2}-\frac{M\omega}{\hbar}(2n+2l+3)\right]a_n\right\}r^n=0. \tag{6.95}$$

Бул теңлеме мынадай рекуррент теңлемеге алып келеди:

$$(n+2)(n+2l+1)a_{n+2}=\left[\frac{2ME}{\hbar^2}-\frac{M\omega}{\hbar}(2n+2l+3)\right]a_n. \tag{6.96}$$

$a_1 = 0$ теңлиги орынлы болғанлықтан [қараңыз: (6.94)], бул рекуррент формула n ниң тақ мәнислерине сәйкес келетуғын a_n коэффициентлериниң нолге тең болатуғынлығын көрсетеди. Демек, $f(r)$ функциясы r диң жуп дәрежелерине ийе болыўы керек:

$$f(r)=\sum_{n=0}^{\infty}a_{2n}r^{2n}=\sum_{n'=0,2,4,\ldots}^{\infty}a_{n'}r^{n'}. \tag{6.97}$$

Бул теңликте a_{2n} коэффициентлериниң барлығы ($n \geq 1$ ден басқасы) a_0 ге пропорционал болыўы керек.

Енди $n \longrightarrow \infty$ шегинде $f(r)$ функциясының тарқалатуғынлығын аңғарамыз, себеби ол e^{r^2} сыяқлы асимптоталық қәсийетке ийе. Шекли шешимди алыў ушын (6.97) қатарының $r^{n'}$ тың максималлық дәрежесинде тоқтаўын талап етиўимиз керек. Бул қатардың полиномиаллық болыўының кереклигин аңғартады. Оның ушын $a_{n'+2}$ ниң нолге тең болыўын талап етеди. Солай етип $a_{n'+2} = 0$ шамасын рекуррентли формулаға қойып, биз дәрҳәл *квантланыў шәртине* ийе боламыз:

$$2\frac{M}{\hbar^2}E_{n'l}-\frac{M\omega}{\hbar}(2n'+2l+3)=0 \tag{6.98}$$

ямаса

$$E_{n'l}=\left(n'+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega. \tag{6.99}$$

Бул теңликте n' - жуп сан [қараңыз: (6.97)]. n' ты $2N$ ($N = 0, 1, 2, 3, \ldots$) арқалы белгилеп, биз энергия ушын жазылған бул аңлатпаны былайынша көширип жазамыз:

$$E_n=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \qquad (n=0,1,2,3,\ldots). \tag{6.100}$$

Бул формулада $n = n' + l = 2N + 1$.

Энергиясы $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ шамасына тең тийкарғы ҳал азғынған ҳал емес; биринши қозған ҳал $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ үш қайтара, ал екинши қозған ҳал $E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$ алты қайтара азғынған ҳал болып табылады (6.4-кесте). Келеси мысалда көрсетилгениндей, n-қәдди ушын азғыныў қатнасы мынадай формуланың жәрдеминде бериледи:

$$g_n=\frac{1}{2}(n+1)(n+2). \tag{6.101}$$

Бул аңлатпа изотроп гармоникалық осциллятор ушын декарт координаталарында жазылған (6.36)-аңлатпаға сәйкес келеди.

Ең ақырында, радиаллық толқын функциясы $R_{nl}(r) = U_{nl}(r)/r$ арқалы берилетуғын болғанлықтан (бул теңликтеги $U_{nl}(r)$ функциясы (6.88) де көрсетилген, ал $f(r)$ болса дәрежеси $(n-l)/2$ дәрежеге ийе r^{2l} полиномы болып табылады) изотроп гармоникалық осциллятордың толық толқын функциясы мынадай түрге ийе болады:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) =$$
$$= \frac{U_{nl}(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) = r^l f(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)e^{-M\omega r^2/2\hbar}. \tag{6.102}$$

Бул аңлатпада l тек жуп ямаса тек тақ мәнислерди қабыл етеди. Мысалы, тийкарғы ҳал $(n,l,m) = (0,0,0)$ ге сәйкес келеди. Оның толқын функциясы былайынша жазылады:

$$\psi_{000}(r,\theta,\varphi) = R_{00}(r)Y_{00}(\theta,\varphi) = \tag{6.103}$$
$$= \frac{2}{\sqrt{\sqrt{\pi}}}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{3/4} e^{-M\omega r^2/2\hbar}\, Y_{00}(\theta,\varphi).$$

6.4-кесте. Изотроп гармоникалық осциллятор ушын энергия қәддилери E_n менен азғыныў g_n

n	E_n	$N\ l$	m	g_n
0	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	0 0	0	1
1	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	0 1	$\pm1, 0$	3
2	$\frac{7}{2}\hbar\omega$	1 0 0 2	0 $\pm2, \pm1, 0$	6
3	$\frac{9}{2}\hbar\omega$	1 1 0 3	$\pm1, 0$ $\pm3, \pm2, \pm1, 0$	10

Биринши, екинши, үшинши қозған ҳаллардың n,l,m конфигурациялары былайынша анықланады. Биринши қозған ҳал үш азғынған ҳалға ийе: $(1,1,m)$, $m = -1,0,1$. Екинши қозған ҳал 6 азғынған ҳалға ийе: $(2,0,0)$ ҳәм $(2,2,m)$, $m = -2,-1,0,1,2$. Үшинши қозған ҳал 10 азғынған ҳалға ийе: $(3,1,m)$, $m = -1,0,1$ ҳәм $(3,3,m)$, $m = -3,-2,-1,0,1,2,3$. Бул толқын функцияларының айырымлары төмендегидей формулалардың жәрдеминде бериледи:

$$\psi_{11m}(r,\theta,\varphi) = R_{11}(r)Y_{1m}(\theta,\varphi) =$$
$$= \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}}}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{5/4} e^{-M\omega r^2/2\hbar}\, Y_{1m}(\theta,\varphi). \tag{6.104}$$

$$\psi_{200}(r,\theta,\varphi) = R_{20}(r)Y_{00}(\theta,\varphi) =$$
$$= \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}}}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{3/4}\left(\frac{3}{2}-\frac{M\omega}{r^2}\right)e^{-M\omega r^2/2\hbar}\, Y_{00}(\theta,\varphi). \tag{6.105}$$

$$\psi_{31m}(r,\theta,\varphi) = R_{31}(r)Y_{1m}(\theta,\varphi) =$$
$$= \frac{4}{\sqrt{15\sqrt{\pi}}}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{7/4} r^2 e^{-M\omega r^2/2\hbar}\, Y_{1m}(\theta,\varphi). \tag{6.106}$$

6.3.5. Водород атомы

Водород атомы электрон менен протоннан турады. Әпиўайылық ушын биз олардың айланыўын есапқа алмаймыз. Бундай жағдайда толқын функциясы алты r кординатасынан ғәрезли болады: $\vec{r}_e(x_e, y_e, z_e)$ ҳәм $\vec{r}_p(x_p, y_p, z_p)$. Бул белгилеўлерде $\vec{r}_e$ менен $\vec{r}_p$ арқалы электрон менен протонның орынларының радиус-векторлары белгиленген. Толқын функциясының итималлықлық интерпретациясына сәйкес $\left|\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t)\right|^2 d^3\vec{r}_e d^3\vec{r}_p$ шамасы электрон менен протонның орынларын бир t ўақытында өлшегенде электронның $d^3\vec{r}_e$ көлеминде, ал протонның $d^3\vec{r}_p$ көлеминде табылыўының итималлығын береди.

Водород атомы ушын ўақыттан ғәрезли болған Шредингер теңлемеси

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 + V(r)\right]\Psi\left(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t) \qquad (6.112)$$

түринде жазылады. Бул теңликте ∇_p^2 менен ∇_e^2 шамалары протон менен электронның еркинлик дәрежелерин есапқа алатуғын лапласианлар болып табылады, $\nabla_p^2 = \partial^2/\partial x_p^2 + \partial^2/\partial y_p^2 + \partial^2/\partial z_p^2$, $\nabla_e^2 = \partial^2/\partial x_e^2 + \partial^2/\partial y_e^2 + \partial^2/\partial z_e^2$, $V(r)$ - протон менен электронның өз-ара тәсирлесиў потенциалы. Протон менен электронның ара қашықлығы r ден ғана ғәрезли болған бул потенциал кулонлық потенциал болып табылады:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}. \qquad (6.113)$$

Ескертиў: биз кулонлық потенциал ушын CGS бирликлер системасын пайдаланамыз, бул системада $V(r) = -e^2/r$ түринде жазылады (бирақ, MKS системасында $V(r) = -e^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$ түринде жазылады).

V шамасы ўақыттан ғәрезсиз болғанлықтан (6.112)-теңлемениң шешимлери стационар болады ҳәм, сонлықтан оларды биз былайынша жазамыз:

$$\Psi\left(\vec{r}_e, \vec{r}_p, t\right) = \chi(\vec{r}_e, \vec{r}_p)e^{-iEt/\hbar}. \qquad (6.114)$$

E арқалы электрон-протон системасының толық энергиясы белгиленген. (6.114)-функцияны (6.112) ге қойып, биз водород атомы ушын ўақыттан ғәрезсиз болған Шредингер теңлемесин аламыз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_p}\nabla_p^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 + \frac{e^2}{\left|\vec{r}_e - \vec{r}_p\right|}\right]\chi\left(\vec{r}_e, \vec{r}_p\right) = E\chi\left(\vec{r}_e, \vec{r}_p\right). \qquad (6.115)$$

6.3.5.1. Массалар орайының қозғалысын ажыратыў

V шамасы электрон менен протонның арасындағы қашықлық r ден ғана ғәрезли болғанлықтан $\vec{r}_e$ ҳәм $\vec{r}_p$ координаталарының орнына (электрон менен протонның ийелеген орынларының радиус-векторлары) массалары орайының координаталары $\vec{R} = X\vec{\imath} + Y\vec{\jmath} + Z\vec{k}$ ны ҳәм электронның протонға салыстырғандағы координаталары $\vec{r} = x\vec{\imath} + y\vec{\jmath} + z\vec{k}$ ларды пайдаланған мақсетке муўапық келеди. $\vec{r}_e$, $\vec{r}_p$ лерден $\vec{R}, \vec{r}$ ге түрлендириў

$$\vec{R} = \frac{m_e\vec{r}_e + m_p\vec{r}_p}{m_e + m_p}, \qquad \vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p. \qquad (6.116)$$

Биз ∇_e^2 ҳәм ∇_p^2 лапласианларын былайынша байланысқан екенлигин көрсете аламыз:

$$\nabla_R^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}, \qquad \nabla_r^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{6.117}$$

$$\frac{1}{m_e}\nabla_e^2 + \frac{1}{m_p}\nabla_p^2 = \frac{1}{M}\nabla_R^2 + \frac{1}{\mu}\nabla_r^2. \tag{6.118}$$

Бул аңлатпаларда

$$M = m_e + m_p, \qquad \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \tag{6.119}$$

шамалары толық ҳәм келтирилген массалар болып табылады. Нәтийжеде ўақыттан ғәрезсиз болған (6.115)-Шредингер теңлемеси мынадай түрге енеди:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)\right]\Psi_E(\vec{R},\vec{r}) = E\Psi_E(\vec{R},\vec{r}). \tag{6.120}$$

Бул теңлемеде $\Psi_E(\vec{R},\vec{r}) = \chi(\vec{r}_e,\vec{r}_p)$. Енди бул теңлемени өзгериўшилерди ажыратыў усылы менен шешейик; яғный биз

$$\Psi_E(\vec{R},\vec{r}) = \Phi(\vec{R})\psi(\vec{r}) \tag{6.121}$$

түриндеги шешимди излеймиз. Бул аңлатпада $\Phi(\vec{R})$ менен $\psi(\vec{r})$ функциялары сәйкес массалар орайындағы ҳәм салыстырмалы қозғалыслардағы толқын функциялары. Бул толқын функциясын (6.120)-теңлемеге қойып ҳәм алынған теңликти $\Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$ көбеймесине бөлип, мынаны аламыз:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\Phi(\vec{R})}\nabla_R^2\Phi(\vec{R})\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi(\vec{r})}\nabla_r^2\psi(\vec{r}) + V(r)\right] = E. \tag{6.122}$$

Биринши қаўсырма тек $\vec{R}$ ден, ал екинши қаўсырма тек $\vec{r}$ ден ғәрезли. $\vec{R}$ менен $\vec{r}$ шамалары бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан (6.122)-теңлемениң шеп тәрепиндеги еки аңлатпа өз алдына турақлы болыўы керек. Солай етип (6.122)-теңлемени еки теңлемеге алып келиўге болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Phi(\vec{R}) = E_R\Phi(\vec{R}), \tag{6.123}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r}). \tag{6.124}$$

Бул теңлемелерде

$$E_R + E_r = E. \tag{6.125}$$

Солай етип, биз R ҳәм r өзгериўшилерине ийе (6.120)-Шредингер теңлемесин ҳәр қайсысы тек бир өзгериўшиден ғәрезли болған еки (6.123)- ҳәм (6.124)-теңлемелерге ажыраттық. (6.123)-теңлемениң массалар орайының массасы M болған бөлекшедей болып қозғалатуғынлығына итибар бериў керек. Бундай теңлемени шешиў усы бапта қаралған еди. Шешим төмендегидей түрге ийе:

$$\Phi(\vec{R}) = (2\pi)^{-3/2}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}. \tag{6.126}$$

Бул аңлатпада $\vec{k}$ арқалы массалар орайы менен байланысқан толқын вектор белгиленген. $E_R = \hbar^2k^2/(2M)$ турақлысы лабораториялық системадағы массалар орайының кинетикалық энергиясын береди (улыўмалық M массасы массалар орайы координаталарының басында жайласқан).

(124)-теңлемениң екинши теңлемеси орайлық $-e^2/r$ потенциалында қозғалатуғын массасы μ болған жалған бөлекше ушын Шредингер теңлемеси болып табылады.

$\Psi_E(\vec{R},\vec{r}) = \Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$ толық толқын функциясының сийрек қолланылатуғынлығын атап өтиў керек. Водород атомының машқаласы ҳаққында гәп еткенде, $\psi(\vec{r})$ ҳәм E_r шамалары еске түсириледи. Яғный, водород атомы изертленгенде толқын функциясы Ψ_E менен энергия E емес, ал $\psi(\vec{r})$ толқын функциясы ҳәм E_r энергия нәзерде тутылады.

6.3.5.2. Водород атомы ушын радиаллық теңлемени шешиў

Салыстырмалы қозғалыс ушын (6.124)-Шредингер теңлемеси орайлық потенциал ушын жазылған теңлемениң түрине ийе. $\psi(\vec{r})$ толқын функциясы, яғный бул теңлемениң шешими мүйешлик ҳәм радиаллық бөлимлердиң көбеймеси болап табылады, ал мүйешлик бөлим $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ сфералық гармоникасы менен бериледи. Радиаллық бөлим болған $R(r)$ функциясын төмендегидей радиаллық теңлемени шешиў жолы менен алыў мүмкин:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right]U(r) = EU(r). \tag{6.127}$$

Бул теңлемеде $U(r) = rR(r)$. Бул радиаллық теңлемени шешиўдиң алдында биз оның асимптоталық шешимлерин қараймыз, ал оннан кейин дәрежели қатардың жәрдеминде теңлемениң шешимин табыўға тырысамыз.

(a) Радиаллық толқын функциясының асимптоталық қәсийети

r диң жүдә киши мәнислеринде (6.127) мынадай теңлемеге алып келинеди:

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}U(r) = 0. \tag{6.128}$$

Бул теңлемениң шешими мынадай түрге ийе:

$$U(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}. \tag{6.129}$$

Бул аңлатпада A менен B арқалы константалар белгиленген. $U(r)$ функциясы $r = 0$ теңлиги орынланғанда нолге тең болатуғын болғанлықтан r диң нолге умтылыўы менен шексизликке умтылатуғын r^{-l} ағзасын пайдаланбаўымыз керек. Солай етип, киши r лер ушын

$$U(r) \sim r^{l+1} \tag{6.130}$$

шешимин пайдаланыўымыз керек.

Енди r диң жүдә үлкен мәнислеринде (6.127)-теңлемени

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}U(r) = 0 \tag{6.131}$$

түрине алып келиўге болады. Байланысқан ҳаллар ушын (бундай ҳалларда электрон менен протон бир бири менен байланысқан) E энергиясының мәнисиниң терис болыўының шәрт екенлигине итибар бериўимиз керек. Демек, бул теңлемениң шешими $U(r) \sim e^{\pm\lambda r}$ түрине ийе, бул аңлатпада $\lambda = \sqrt{2\mu(-E)}/\hbar$. Теңлемениң минус белгиси менен алынған шешимин пайдаланыўға болады, себеби $e^{\lambda r}$ функциясы r

диң үлкен мәнислеринде шексизликке умтылады. Демек, r диң үлкен мәнислеринде $U(r)$ функциясы мынадай түрге ийе болады:

$$U(r) \longrightarrow e^{-\lambda r}. \tag{6.132}$$

(6.127)-теңлемениң шешимлериниң (6.130)- ҳәм (6.132)-аңлатпаларды бириктириў жолы менен алыныўы мүмкин:

$$U(r) = r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}. \tag{6.133}$$

Бул аңлатпадағы $f(r)$ функциясы r ден ғәрезли болған функция болып табылады. (6.133)-функцияны (6.127) ге қойып, биз $f(r)$ функциясының түрин анықлайтуғын дифференциаллық теңлемени аламыз:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + 2\left(\frac{l+1}{r} - \lambda\right)\frac{df}{dr} + 2\left[\frac{-\lambda(l+1) + \mu e^2/\hbar^2}{r}\right] f(r) = 0. \tag{6.134}$$

(b) Радиаллық теңлемени шешиў ушын дәрежели функцияны пайдаланыў

Үш өлшемли гармоникалық осциллятор ушын мәселени шешкендегидей, (6.134)-теңлемени шешиў ушын дәрежели функциядан пайдаланамыз:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k. \tag{6.135}$$

Бул аңлатпаны (6.134)-аңлатпаға қойып, мынаған ийе боламыз:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left\{k(k+2l+1) b_k r^{k-2} + 2\left[-\lambda(k+l+1) + \frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right] b_k r^{k-1}\right\} = 0. \tag{6.136}$$

Бул теңлеме төмендегидей рекуррентли қатнасқа алып келеди (соңғы ағзада k ны $k-1$ ге алмастырыў жолы менен):

$$ҳk(k+2l+1) b_k = 2\left[-\lambda(k+l+1) + \frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right] b_{k-1}. \tag{6.137}$$

k ның үлкен мәнислериниң шеклеринде избе-из коэффициентлердиң қатнасы

$$\frac{b_k}{b_{k-1}} = \frac{2\left[-\lambda(k+l+1) + \frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right]}{k(k+2l+1)} \tag{6.138}$$

түринде жазылады ҳәм ол мынадай қатнасқа алып келинеди:

$$\frac{b_k}{b_{k-1}} \longrightarrow \frac{2\lambda}{k}. \tag{6.139}$$

Бундай қәсийет экспоненциаллық қатардың қәсийетине тән, себеби қатардағы қоңсылас коэффициентлердиң қатнасы $e^{2x} = \sum_{k=0}^{\infty}(2x)^k/k!$ төмендегидей түрде бериледи:

$$\frac{2^k}{k!}\frac{(k-1)!}{2^{k-1}} = \frac{2}{k}. \tag{6.140}$$

Демек, (6.135) тиң асимптоталық қәсийети мынадай түрге ийе болады:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \longrightarrow e^{2\lambda r}. \tag{6.141}$$

демек, (6.133)-теңлемениң радиаллық шешими

$$U(r) = r^{l+1} e^{2\lambda r} e^{-\lambda r} = r^{l+1} e^{\lambda r} \tag{6.142}$$

түрине ийе болады. Бирақ, бул аңлатпа (6.133)-аңлатпаға қарама-қарсы келмейди: r диң үлкен мәнисиндеги физикалық жақтан қолланыўға болатуғын (6.133)-радиаллық функция $e^{-\lambda r}$, ал соның менен бир ўақытта (6.142) ниң қәсийети $e^{\lambda r}$ арқалы бериледи; солай етип, (6.142)-форма физикалық жақтан жарамсыз (λ ниң оң мәнислеринде).

(c) Энергияның квантланыўы

Физикалық жақтан жарамлы шешимлердиң алыныўы ушын (6.135) қатарының N ниң берилген мәнисинде тоқтаўы керек; демек, $f(r)$ функциясы N-тәртипли көп ағзалы болып табылады:

$$f(r) = \sum_{k=0}^{N} b_k r^k. \tag{6.143}$$

Бул жағдай b_{N+1}, b_{N+2}, b_{N+3}, ... коэффициентлериниң барлығының нолге тең болыўын талап етеди. $b_{N+1} = 0$ болған жағдайда (6.137)-рекуррентли формула мынаны береди

$$\lambda(N + l + 1) - \frac{\mu e^2}{\hbar^2} = 0. \tag{6.144}$$

$\lambda = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2}$ шамасынан баслап ҳәм

$$n = N + l + 1 \tag{6.145}$$

белгилеўин пайдаланып (бул теңликте n бас квант саны, ал N радиаллық квант саны атамасы менен белгили), биз энергияның мәнисин келтирип шығара аламыз:

$$E_n = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{6.146}$$

Водород атомы ушын Бор теориясы бойынша Бор радиусы $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$ ҳәм сонлықтан $\mu/\hbar^2 = 1/(e^2\, a_0)$ теңлигине ийе боламыз. Сонлықтан (6.146)-формуланы былайынша жаза аламыз:

$$E_n = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}. \tag{6.147}$$

λ шамасын a_0 арқалы былайынша жаза алатуғынлығымызға итибар бериў керек:

$$\lambda = \sqrt{-2\frac{\mu}{\hbar^2}E_n} = \sqrt{2\frac{1}{e^2 a_0}\frac{e^2}{2a_0 n^2}} = \frac{1}{n a_0}. \tag{6.148}$$

$N = 0, 1, 2, 3, \ldots$ теңлиги орын алғанлықтан n қабыл ететуғын шамалар ноллик емес пүтин санлар болып табылады: $n = l + 1, l + 2, l + 3, \ldots$ Берилген n квант саны ушын орбиталық квант саны болған l саны 0 ден $n - 1$ ге шекемги мәнислерге ийе бола алады (яғный, $l = 0, 1, 2, \ldots, n - 1$).

Ескертиўлер

A. (6.147)-аңлатпаның Бордың квантланыў шәрти бойынша энергия ушын алынатуғын аңлатпаға уқсас екенлигине итибар бериў керек. Оны Ридберг константасы $\mathcal{R} = m_e e^4/(2\hbar^2)$ арқалы былайынша жазыў мүмкин:

$$E_n = -\frac{m_p}{m_p + m_e}\frac{\mathcal{R}}{n^2}. \tag{6.149}$$

Бул жағдайда $\mathcal{R} = 13{,}6$ эВ. m_e/m_p шамасының жүдә киши екенлигин есапқа аламыз ($m_e/m_p \ll 1$). Сонлықтан жоқарыдағы теңлемени былайынша аппроксимациялай аламыз:

$$E_n = -\left(1 + \frac{m_e}{m_p}\right)^{-1}\frac{\mathcal{R}}{n^2} \simeq -\left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right)^{-1}\frac{\mathcal{R}}{n^2}. \tag{6.150}$$

Солай етип, егер биз протонның массасын электронның массасына салыстырғанда дым үлкен деп есапласақ, онда биз Бор тәрепинен алынған $E_n = -\frac{\mathcal{R}}{n^2}$ түринде жазылатуғын аңлатпаға келемиз.

B. Водород тәризли атомлардың энергиясы: Ядросының заряды Ze ге тең, бирақ тек бир электроны бар атом ямаса ион ушын энергияның формуласын қалай аламыз[27]? Сол бир электрон тәрепинен сезилетуғын Ze зарядының потенциалы $V(r) = -Ze^2/r$ формуласының жәрдеминде берилетуғын болғанлықтан, электронның энергиясын (6.147)-аңлатпадан e^2 шамасын Ze^2 шамасы менен алмастырыў жолы менен алыўға болады:

$$E_n = -\frac{m_e(Ze^2)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2E_0}{n^2}. \tag{6.151}$$

Бул теңликте $E_0 = e^2/(2a_0) = 13{,}6$ эВ; бул қатнасты келтирип шығарғанда биз ядроның массасы электронның массасына салыстырғанда шексиз үлкен деп есапладық.

(d) Водород атомының радиаллық толқын функциялары

$R_{nl}(r)$ радиаллық толқын функциясын (6.143) ти (6.133) ке қойыў жолы менен алынады:

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) = \frac{1}{r}U_{nl}(r) = A_{nl}r^l e^{-\lambda r}\sum_{k=0}^{N} b_k r^k = \\ = A_{nl}r^l e^{-r/na_0}\sum_{k=0}^{N} b_k r^k. \end{aligned} \tag{6.152}$$

(6.148)-теңликте $\lambda = 1/(na_0)$ екенлиги көрсетилген еди, сонлықтан A_{nl} шамасы нормировкадан алынатуғын константа болып табылады.

$R_{nl}(r)$ ушын аңлатпаны қалайынша алыўға болады? Бул сораў $r^l\sum_{k=0}^{N} b_k r^k$ көп ағзалысының ҳәм нормировкадан алынатуғын A_{nl} шамасының түрин анықлаўға алып келинеди. Оның ушын биз еки усылдан пайдаланамыз: биринши усыл әпиўайы түрдеги есаплаўларға тийкарланған, ал екинши усыл арнаўлы функцияларды пайдаланады.

---

[27] Мысалы, $Z = 1$ шамасы H қа, , $Z = 2$ шамасы He^+ ке, $Z = 3$ шамасы Li^{2+} ке, $Z = 4$ шамасы Be^{+3} ке, $Z = 5$ шамасы B^{+4} ке, $Z = 6$ шамасы C^{+5} ке тийисли ҳ.т.б.

(i) Биринши усыл: $R_{nl}(r)$ функциясын әпиўайы түрде есаплаў

Бул усыл $R_{nl}(r)$ функциясын әпиўайы түрде қурыўдан ибарат; биз биринши бир неше аңлатпалардың қалайынша қурылатуғынлығын көрсетпекшимиз. Мысалы, егер $n = 1$ ҳәм $l = 0$ болса, онда $N = 0$ теңлигиниң орынлы болғанлықтан, (6.152)-аңлатпаны былайынша жаза аламыз:

$$R_{10}(r) = A_{10}e^{-r/a_0}\sum_{k=0}^{0} b_k r^k = A_{10}b_0 e^{-r/a_0}. \tag{6.153}$$

Бул аңлатпадағы $A_{10}b_0$ шамасын $R_{10}(r)$ функциясының нормировка шәртинен ала аламыз: $\int_0^\infty x^n e^{-ax}dx = n!/a^{n+1}$ формуласын пайдаланып, мынадай теңликлерге ийе боламыз:

$$1 = \int_0^\infty r^2|R_{10}(r)|^2 dr = A_{10}^2 b_0^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0}dr = A_{10}^2 b_0^2 \frac{a_0^3}{4}. \tag{6.154}$$

Демек, $A_{10} = 1$ ҳәм $b_0 = 2(a_0)^{-3/2}$ теңликлери орынлы екен. Солай етип, $R_{10}(r)$ функциясы

$$R_{10}(r) = 2(a_0)^{-3/2}e^{-2r/a_0} \tag{6.155}$$

түринде жазылады екен.

Енди $R_{20}(r)$ функциясын табамыз. $n = 2, l = 1$ теңликлери орынланған жағдайда $N = 2 - 0 - 1 = 1$ шамасына ийе боламыз ҳәм

$$R_{20}(r) = A_{20}e^{-r/2a_0}\sum_{k=0}^{1} b_k r^k = A_{20}(b_0{+}b_1 r)e^{-r/2a_0} \tag{6.156}$$

(6.138)-аңлатпадан биз b_1 ди b_0 арқалы былайынша аңлата аламыз:

$$b_1 = \frac{2\lambda(k+l) - 2/a_0}{k(k+2l+1)}b_0 = -\frac{1}{2a_0}b_0 = -\frac{1}{a_0\sqrt{a_0^3}}. \tag{6.157}$$

Себеби, $\lambda = 1/(2a_0), k = 1$ ҳәм $l = 1$. Солай етип, (6.157) ни (6.156) ге қойып ҳәм нормировкалап, биз $A_{20} = 1/(2\sqrt{2})$ теңлигине ийе боламыз, демек

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0} \tag{6.158}$$

теңлигине ийе болады екенбиз.

Есаплаўларды усындай жоллар менен даўам етип, биз $R_{nl}(r)$ радиаллық толқын функциясының қәлегени ушын аңлатпаны ала аламыз; $b_0 = 2(a_0)^{-3/2}$ ни билип, биз (6.128)-рекуррентли қатнасты пайдаланып барлық b_1, b_2, b_3, ... коэффициентлерин анықлай аламыз.

(ii) Екинши усыл: $R_{nl}(r)$ функцияларын арнаўлы функциялардың жәрдеминде анықлаў

(6.152)-аңлатпада қатнасатуғын $r^l\sum_{k=0}^{N} b_k r^k$ көп ағзалы дәрежеси $N + 1$ ге ямаса $n - 1$ тең көп ағзалы болып табылады, себеби $n = N + l + 1$. Бул көп ағзалыны $L_k^N(r)$ арқалы белгилейди ҳәм оны *Лагердиң бириктирилген полиномлары* деп атайды. Соның менен бирге ол (6.134)-аңлатпа түринде жазылған Шредингер теңлемесиниң шешими болып табылады. (6.134) түриндеги дифференциаллық теңлемениң шешимлери квантлық механика туўылмастан әдеўир ўақыт бурын Лагер тәрепинен үйренилген еди. Оның менен байланыслы болған Лагер полиномы k-тәртипли Лагер полиномы $L_k(r)$ арқалы анықланады:

$$L_k^N(r) = \frac{d^N}{dr^N} L_k(r). \tag{6.159}$$

Бул аңлатпада

$$L_k(r) = e^r \frac{d^k}{dr^k}(r^k e^{-r}). \tag{6.160}$$

6.5-кесте. Лагердиң дәслепки бир неше полиномлары ҳәм олар менен бириктирилген Лагер полиномлары

Лагер полиномлары	Лагердиң бириктирилген полиномлары
$L_0 = 1$	
$L_1 = 1 - r$	$L_1^1 = -4 + 2r$
$L_2 = 2 - 4r + r^2$	$L_2^2 = 2$
$L_3 = 6 - 18r + 9r^2 - r^3$	$L_3^1 = -18 + 18r - 3r^2,$ $L_3^2 = 18 - 6r,$ $L_3^3 = -6$
$L_4 = 24 - 96r + 72r^2 -$ $-16r^3 + r^4$	$L_4^1 = -96 + 144r - 48r^2 + 4r^3,$ $L_4^2 = 144 - 96r + 12r^2,$ $L_4^3 = 24r - 96, L_4^4 = 24$
$L_5 = 120 - 600r + 600r^2 -$ $-200r^3 + 25r^4 - r^5$	$L_5^1 = -600 + 1200r + 300r^2 - 20r^3,$ $L_5^2 = 1200 - 1200r + 300r^2 - 20r^3,$ $L_5^3 = -1200 + 600r - 60r^2,$ $L_5^4 = 600 - 120r, L_5^5 = -120$

Лагердиң бир неше полиномлары 6.5-кестеде келтирилген.

Биз $L_k(r)$ менен $L_k^N(r)$ лердиң төмендегидей дифференциаллық теңлемелерди қанаатландыратуғынын тексерип көре аламыз:

$$r\frac{d^2 L_k(r)}{dr^2} + (1 - r)\frac{dL_k(r)}{dr} + kL_k(r) = 0, \tag{6.161}$$

$$r\frac{d^2 L_k^N(r)}{dr^2} + (N + 1 - r)\frac{dL_k^N(r)}{dr} + (k - N)L_k(r) = 0. \tag{6.162}$$

Бул соңғы теңлеме водород атомы ушын радиаллық (6.134)-теңлеме менен бирдей. Бул жағдайды былайынша дәлиллеймиз.

$$\rho = 2\lambda r = 2\frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar} r \qquad ()$$

өзгериўшисин ҳәм усының менен бирге $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$ белгилеўинен пайдаланып (бул Бор радиусы), (6.134)-аңлатпаның

$$\rho\frac{d^2 g(\rho)}{d\rho^2} + [(2l + 1) + 1 - \rho]\frac{dg(\rho)}{d\rho} + \\ +[(n + 1) - (2l + 1)]g(\rho) = 0 \tag{6.164}$$

теңлемесине алып келинетуғынлығына көз жеткеремиз. Бул теңлемеде $f(r) = g(\rho)$. (6.164)-теңлемени келтирип шығарғанда биз $\frac{1}{\lambda a_0} = n$ теңлигиниң орынлы екенлигин есапқа алдық [қараңыз: (6.148)]. (6.162)-ҳәм (6.164)-теңлемелердиң бирдей екенлигин аңғарамыз. Демек, (6.134)-теңлемениң шешими Лагердиң сәйкес полиномы $L_{n+1}^{2l+1}(2\lambda r)$ арқалы бериледи екен.

Бундай жағдайда водород атомының радиаллық толқын функциясы мынадай түрге ийе болады:

$$R_{nl}(r) = N_{nl}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right). \tag{6.165}$$

N_{nl} константасы $R_{nl}(r)$ радиаллық толқын функциясының нормировка шәртинен анықланады:

$$\int_0^\infty r^2 R_{nl}^2(r)dr = 1. \tag{6.166}$$

6.6-кесте. Водород атомы биринши бир неше $R_{nl}(r)$ толқын функциялары

$R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2}e^{-r/a_0}$	$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{6a_0^3}}\frac{r}{2a_0}e^{-r/2a_0}$
$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-r/2a_0}$	$R_{31}(r) =$ $= \frac{8}{9\sqrt{6a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{6a_0}\right)\left(\frac{r}{3a_0}\right)e^{-r/3a_0}$
$R_{30}(r) =$ $= \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}}\left(1 - \frac{2}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}$	$R_{32}(r) =$ $= \frac{4}{9\sqrt{30a_0^3}}\left(\frac{r}{3a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$

Лагердиң бириктирилген функцияларының нормировка шәртин пайдаланып,

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{2l}[L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2\rho^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)]^3}{(n-l-1)!} \tag{6.167}$$

шамасын аламыз. Бул аңлатпада $\rho = 2\lambda r = 2r/(na_0)$ ҳәм сонлықтан биз N_{nl} шамасы ушын

$$N_{nl} = -\left(\frac{1}{na_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)]^3}} \tag{6.168}$$

аңлатпасын аламыз.

Водород атомының толқын функциясы былайынша жазылады:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{6.169}$$

Бул аңлатпадағы радиаллық толқын функциясы $R_{nl}(r)$ ушын аңлатпа мынадай түрге ийе:

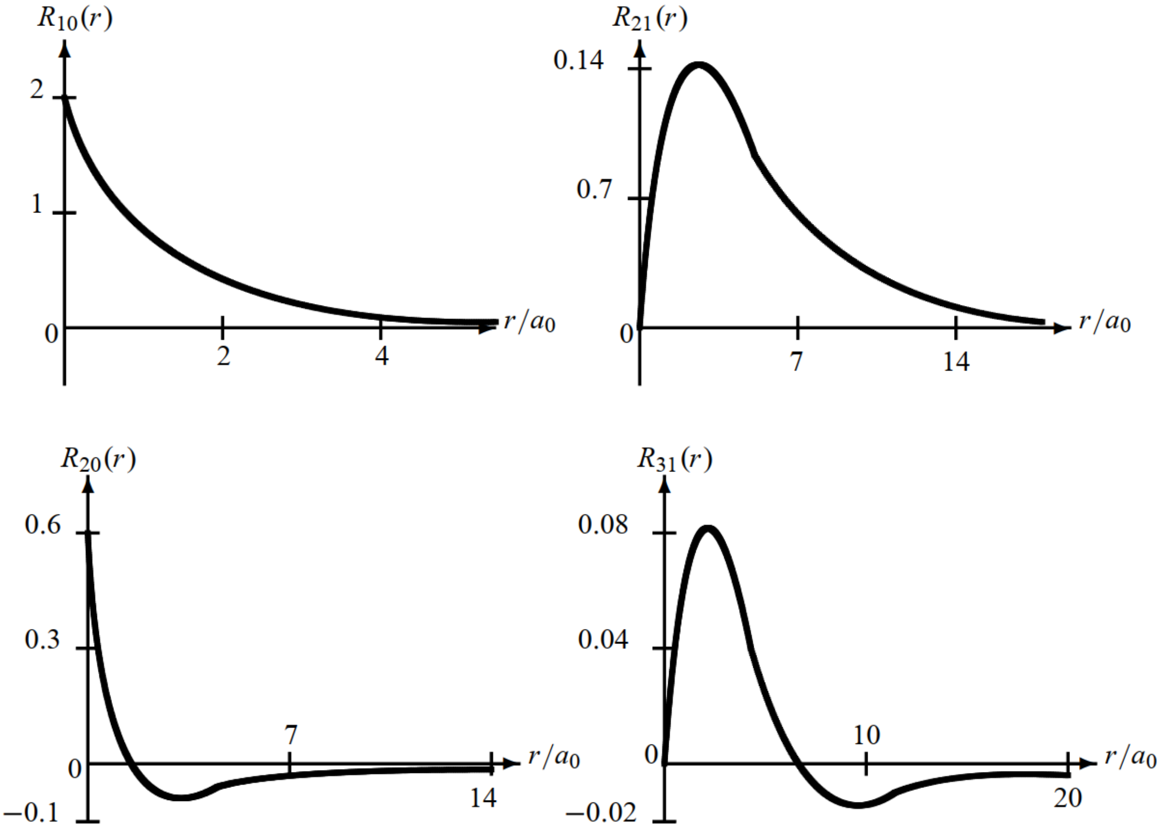
$$R_{nl}(r) = -\left(\frac{1}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right). \tag{6.170}$$

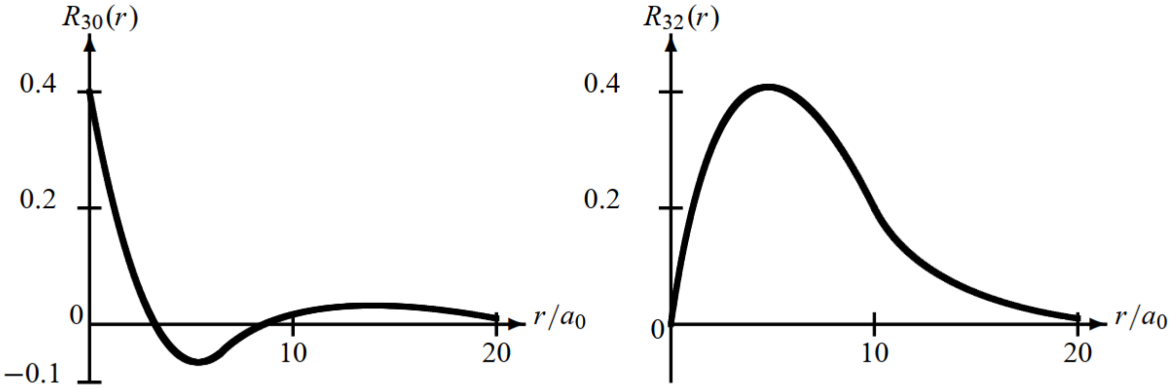
Биринши бир неше радиаллық толқын функциялары 6.6-кестеде келтирилген; (6.155)-ҳәм (6.158)-аңлатпаларда олардың $R_{nl}(r)$ функциясын қурыўда алынған аңлатпалар менен бирдей екенлиги көринип тур. Бул радиаллық функциялардың айырымлары 6.3-сүўретте көрсетилген

(e) Водородтың радиаллық функцияларының қәсийетлери

Водород атомының радиаллық толқын функциялары төмендегидей қәсийетлерге ийе (6.3-сүўретке қараңыз):

- Киши r лер ушын олар r^l функциясының қәсийетиндей қәсийетлерге ийе болады.
- Үлкен r лерде олар экспоненциаллы түрде киширейеди, себеби бундай жағдайларда функцияның өзгериўи тийкарынан L_{n+l}^{2l+1} менен байланыслы.
- Ҳәр бир $R_{nl}(r)$ функциясы $n-l-1$ радиаллық түйинге ийе болады, себеби $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ полиномы $n-l-1$ дәрежели көп ағзалы болып табылады.





6.3-сүўрет. Водород атомы ушын бир неше $R_{nl}(r)$ радиаллық толқын функциялары; радиаллық узынлық Бор радиусы $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$ шамасында аңлатылған. $R_{nl}(r)$ функциясының $(n - l - 1)$ түйинге ийе болатуғынлығына итибар бериңиз.

6.7-кесте. Водородтың энергияларының қәддилери ҳәм электронның спинин есапқа алмаған жағдайдағы олардың азғыныўлары

n	l	Орбиталлар	m	g_n	E_n
1	0	s	0	1	$-e^2/(2a_0)$
2	0	s	0	4	$-e^2/(8a_0)$
	1	p	-1, 0, 1		
3	0	s	0	9	$-e^2/(18a_0)$
	1	p	-1, 0, 1		
	2	d	-2, -2, 0, 1, 2		
4	0	s	0	16	$-e^2/(32a_0)$
	1	p	-1, 0, 1		
	2	d	-2, -1, 0, 1, 2		
	3	f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3		
5	0	s	0		$-e^2/(50a_0)$
	1	p	-1, 0, 1		
	2	d	-2, -1, 0, 1, 2		
	3	f	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3		
	4	g	-4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4		

6.3.5.3. Водородтың байланысқан ҳалларының азғыныўы

Энергия ушын жазылған (6.147)-аңлатпаның m нен ғәрезсиз екенлиги орайлық потенциаллардың қәсийети болып табылады [(6.55) ке қараңыз]. Энергияның мәниси l квант санынан да ғәрезсиз. Бул l ге байланыслы қосымша азғыныў орайлық потенциаллардың қәсийети емес, ал кулонлық потенциалдың айрықша өзгешелиги болып табылады. Орайлық потенциаллар болған жағдайда E энергия әдетте еки квант санынан ғәрезли болады: биринշиси радиаллық n ҳәм екиншиси орбиталық l квант саны. Бул E_{nl} ди береди.

Улыўмалық квант саны n тек ноллик емес 1, 2, 3, ... мәнислерин қабыл ете алады. 6.7-кестеде көринип турғанындай берилген n квант санында l квант саны 0 ден баслап $n - 1$ ге шекемги мәнислерди қабыл ете алады; соның менен бирге берилген

l квант саны болған жағдайда m квант саны $(2l+1)$ дана мәниске ийе болады: $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. n ҳалының азғыныўы (бул азғыныў n менен байланыслы болған ҳәр қыйлы ҳаллардың улыўмалық саны бойынша анықланады). Азғыныўдың шамасы

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2. \tag{6.171}$$

Ескертиўлер

Водород атомындағы электронның ҳалы (n, l, m), бул ҳалды бир бөлекшели ҳал ямаса $|n, l, m\rangle$ орбиталь деп атайды. Спектроскопиялық белгилеўлерге сәйкес, $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ ҳалларына сәйкес келетуғын ҳалларды s, p, d, f, g, h ҳаллары деп аталады. s, p, d, f ҳәриплери айқын, тийкарғы, диффузиялық ҳәм фундаменталлық серияларға тийисли. Демек, 6.7-кестеде көрсетилгендей, берилген n деги s-ҳал бир $|n00\rangle$ орбиталға, p-ҳал $m = -1, 0, 1$ ге сәйкес келетуғын 3 дана $|n1m\rangle$ орбиталға, d-ҳал $m = -2, -1, 0, 1, 2$ ге сәйкес келетуғын 5 дана $|n2m\rangle$ орбиталға ийе ҳ.б.

Егер биз электронның спинине итибар беретуғын болсақ, онда ҳәр бир электронның ҳалы төрт квант санының жәрдеминде анықланады (n, l, m_l, m_s), бул квант санларының ишинде $m_s = \pm\frac{1}{2}$. Бул шама электронның спининиң z-қураўшысын анықлайды. Демек, водород атомының толық толқын функциясы болған $\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ толқын функциясын спин менен байланыслы болған бөлим $\left|\frac{1}{2}, m_s\right\rangle$ ке көбейтиў керек:

$$\psi_{nlm_lm_s} = \psi_{nlm_l}\left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \varphi)\left|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{6.172}$$

5-баптағы спинорларды пайдаланып, биз спин жоқары қараған ҳал ушын толқын функциясын былайынша жаза аламыз:

$$\psi_{nlm_l\frac{1}{2}}(\vec{r}) = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \psi_{nlm_l}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_{nlm_l}\\0\end{pmatrix}. \tag{6.173}$$

Спин төменге қарай бағытланған толқын функциясы былайынша жазылады:

$$\psi_{nlm_l-\frac{1}{2}}(\vec{r}) = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi)\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \psi_{nlm_l}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\\psi_{nlm_l}\end{pmatrix}. \tag{6.174}$$

Мысалы, спин жоқарыға ҳәм төменге қарай бағытланған жағдай ушын водородтың тийкарғы ҳалы ушын толқын функциясы былайынша жазылады:

$$\Psi_{100\frac{1}{2}}(\vec{r}) = \begin{pmatrix}\psi_{100}\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)a_0^{-3/2}e^{-r/a_0}\\0\end{pmatrix}, \tag{6.175}$$

$$\Psi_{100-\frac{1}{2}}(\vec{r}) = \begin{pmatrix}0\\\psi_{100}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right)a_0^{-3/2}e^{-r/a_0}\end{pmatrix}. \tag{6.176}$$

Спинди есапқа алған жағдайда энергия қәддилериниң азғыныўы

$$2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2n^2 \tag{6.177}$$

формуласының жәрдеминде анықланады. Спинди есапқа алғанда (6.171)-азғыныўға еки азғыныў қосылады. Мысалы, водородтың тийкарғы ҳалы еки қайтара азғынған $\mathit{\Psi}_{100\frac{1}{2}}(\vec{r})$ ҳәм $\mathit{\Psi}_{100-\frac{1}{2}}(\vec{r})$. Бул еки ҳалға -13,6 эВ энергия сәйкес келеди. Тап усыған сәйкес, биринши қозған ҳал сегиз қайтара азғынған $(2\cdot(2)^2=8)$. Себеби сегиз ҳал $\mathit{\Psi}_{200\pm\frac{1}{2}}$,$\mathit{\Psi}_{211\pm\frac{1}{2}}$, $\mathit{\Psi}_{211\pm\frac{1}{2}}$ ҳәм $\mathit{\Psi}_{20-1\pm\frac{1}{2}}$ ҳалларына -13,6/4 эВ = -3,4 эВ шамасына тең бирдей энергия сәйкес келеди.

6.3.5.4. Итималлықлар ҳәм орташа мәнислер

Водород атомы $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ стационар ҳалында туратуғын болса $|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 d^3r$ шамасы электронды d^3r көлеминде табыўдың итималлығына тең. Бул теңликте $d^3r = r^2\sin\theta\ dr\,d\theta\,d\varphi$. Электронды r менен $r+dr$ диң аралығындағы сфералық қабықтың ишинде табыўдың итималлығы (яғный қалыңлығы dr ге тең болған қабықта) мынадай формуланың жәрдеминде анықланады:

$$\begin{gathered}P_{nl}(r)dr = \left(\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\,|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2\right)r^2dr = \\ = |R_{nl}(r)|^2r^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}Y_{lm}^*(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)d\varphi = \\ = |R_{nl}(r)|^2r^2dr.\end{gathered}\tag{6.178}$$

Егер биз бул шаманы $r=0$ менен $r=a$ шамаларының арасында интегралласақ, онда биз электронды орайы координата басында жайласқан радиусы a ға тең болған сфераның ишинде табыўдың итималлығын табамыз. Демек, $r=0$ менен $r=\infty$ аралығында интеграллаған жағдайда 1 ди алыўымыз керек. Бул электронды кеңисликтеги қандай да бир орында табыўдың итималлығы болып табылады.

Енди r диң ҳәр қыйлы дәрежелериниң орташа мәнисин дәллигин анықлаймыз. $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ теңлиги орынлы болғанлықтан, биз r^k шамасының орташа мәнисиниң азимуталлық квант саны m нен ғәрезсиз екенлигин көремиз:

$$\begin{gathered}\langle nlm|r^k|nlm\rangle = \int r^k\,|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi = \\ = \int_0^{\infty}r^{k+2}|R_{nl}(r)|^2dr\int_0^{\pi}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}Y_{lm}^*(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)d\varphi = \\ = \int_0^{\infty}r^{k+2}|R_{nl}(r)|^2dr = \langle nl|r^k|nl\rangle.\end{gathered}\tag{6.179}$$

Лагерр полиномын пайдаланып, биз мынадай теңликлердиң орын алатуғынлығын көрсете аламыз:

$$\langle nl|r|nl\rangle = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]a_0,\tag{6.180}$$

$$\langle nl|r^2|nl\rangle = \tfrac{1}{2}n^2[5n^2+1-3l(l+1)]a_0^2,\tag{6.181}$$

$$\langle nl|r^{-1}|nl\rangle = \frac{1}{n^2 a_0}, \tag{6.182}$$

$$\langle nl|r^{-2}|nl\rangle = \frac{2}{n^3(2l+1)a_0^2}. \tag{6.183}$$

Бул теңликте a_0 арқалы Бор радиусы белгиленген, $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$. (6.180)-(6.183) аңлатпалардың орташа мәнислерин Крамерстиң рекуррентли қатнасынан аңсат табыўға болады:

$$\frac{k+1}{n^2}\langle nl|r^k|nl\rangle - (2k+1)a_0\langle nl|r^{k-1}|nl\rangle + \\ +\frac{ka_0^2}{4}[(2l+1)^2 - k^2]\langle nl|r^{k-2}|nl\rangle = 0. \tag{6.184}$$

(6.180)- ҳәм (6.182)-теңлемелер $1/\langle r\rangle$ менен $\langle 1/r\rangle$ шамаларының бир бирине тең емес екенлигин, бирақ мәнислериниң тәртибиниң бирдей екенлигин көрсетеди:

$$\langle r\rangle \sim n^2 a_0. \tag{6.185}$$

Бул қатнас водород атомы ушын Бор теориясы бойынша дөңгелек орбиталардың квантланыўы бойынша алынған аңлатпаға сәйкес келеди: $r_n = n^2 a_0$. Биз 6.6-мәселеде дөңгелек орбиталар ушын Бор радиусларының электронды табыўдың итималлығы максималлық мәниске жететуғын орынлар екенлигин көрсетемиз. Буннан кейин $\langle r^{-1}\rangle$ ушын жазылған (6.182)-аңлатпаны пайдаланып, биз кулонлық потенциалдың орташа мәнисин ала аламыз:

$$\langle V(r)\rangle = -e^2\,\langle\frac{1}{r}\rangle = -\frac{e^2}{a_0}\frac{1}{n^2}. \tag{6.186}$$

(6.147)-теңликте бул шаманың улыўмалық энергияның екилетилген мәнисине тең екенлиги көрсетилген еди:

$$E_n = \frac{1}{2}\langle V(r)\rangle = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}. \tag{6.187}$$

Бул Вириал теоремасы атамасы менен белгили болып, бул теорема $V(\alpha r) = \alpha^n V(r)$ теңлиги орынланатуғын жағдайларда кинетикалық ҳәм потенциаллық энергиялардың орташа мәнислериниң

$$\langle T\rangle = \frac{n}{2}\langle V(r)\rangle \tag{6.187}$$

теңлигиниң жәрдеминде байланысқанлығын екенлигин дәлиллейди. Мысалы, кулонлық потенциал орын алған жағдайда $V(\alpha r) = \alpha^{-1}V(r)$ ҳәм биз мынаған ийе боламыз: $\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle$. Демек, $E = -\frac{1}{2}\langle V\rangle + \langle V\rangle = \frac{1}{2}\langle V\rangle$.

6.4 Жуўмақлар

Бул бапта қарап өтилген ең әҳмийетли жағдай водород атомы ушын Шредингер теңлемесиниң шешилиўи болып табылады. Ҳәр қыйлы постулатларға тийкарланған ярымклассикалық Бор моделинен парқы соннан ибарат, Шредингер теңлемеси арнаўлы аргументлерди пайдаланбай-ақ системалы түрде энергияның қәддилерин анықлайды, энергия қәддилериниң квантланыўы формализмниң қосымша нәтийжеси сыпатында тәбийий түрде алынады. Бул $r \to \infty$ шегинде толқын функциясының шекли болатуғынлығын талап ететуғын шегаралық шәртлердиң нәтийжеси болып табылады [қараңыз: (6.144)- ҳәм (6.147)-аңлатпалар]. Солай етип, бирден-бир болған дифференциаллық теңлеме болған Шредингер теңлемесинен биз водород атомы ушын билиў керек болған билимлердиң барлығын аламыз. Солай етип, Шредингер теңлемеси Бор модели ийе болған кемшиликлерге ийе болмаған, бирақ оның унамлы тәреплерин сақлап қалатуғын теорияны дөретиўге мүмкиншилик берди (яғный энергия қәддилери, атомның радиусы ҳәм ҳәр қыйлы ҳаллардың арасындағы өтиўлер ушын аңлатпалар).

6.1-мәселе. Массасы m ге ийе ҳәм

$$V(x,y,z)=\begin{cases}\frac{1}{2}m\omega^2 z^2, 0<x<a, 0<y<a,\\ \qquad\infty, \text{басқа орынларда.}\end{cases}$$

үш өлшемли потенциалында қозғалатуғын бөлекшени қараймыз.

(a) бул бөлекше ушын толық энергиясын ҳәм толық толқын функциясын жазыңыз.

(b) $\hbar\omega>3\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$ теңсизлиги орынлы деп болжап, тийкарғы ҳәм биринши қозған ҳалларға сәйкес келетуғын энергияларды ҳәм сәйкес азғыныўларды табыңыз.

(c) $V(x,y,z)$ потенциалына қосымша бул бөлекше терис q зарядына ийе ҳәм бул бөлекше z көшериниң бағытындағы турақлы ϵ электр майданының тәсиринде жайласқан деп болжаймыз. Бундай жағдайда гамильтониан

$$\widehat{H}_z=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{1}{2}m\omega^2 z^2-q\epsilon z.$$

Усы бөлекше ушын E_{n_z} энергиялық аңлатпаны ҳәм оның $E_{n_x n_y n_z}$ толық энергиясы ушын аңлатпаны келтирип шығарыңыз. Буннан кейин тийкарғы ҳәм биринши қозған ҳал ушын энергиялар менен сәйкес азғыныўды табыңыз.

Шешими:

(a) Бул үш өлшемли потенциал бир биринен ғәрезсиз болған үш бир өлшемли потенциаллардан турады: (i) x көшериниң бағытындағы потенциаллық шуқырдан, (ii) y көшериниң бағытындағы потенциаллық шуқырдан ҳәм (iii) z көшериниң бағытындағы гармоникалық осциллятордан. Энергияның мәниси

$$E_{n_x n_y n_z}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2+n_y^2\right)+\hbar\omega\left(n_z+\frac{1}{2}\right). \tag{6.207}$$

Сәйкес толқын функциялары былайынша жазылады:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z)=X_{n_x}(x)Y_{n_y}(y)Z_{n_z}(z)= \tag{6.208}$$
$$=\frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi n_x}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi n_y}{a}z\right)Z_{n_z}(z).$$

Бул аңлатпада $Z_{n_z}(z)$ арқалы гармоникалық осциллятордың толқын функциясы белгиленген. Жоқарыда көрсетилип өтилгениндей, ол Эрмит полиномлары $H_{n_z}\left(\frac{z}{z_0}\right)$ арқалы былайынша анықланады:

$$Z_{n_z}(z)=\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^{n_z}n_z!\,z_0}}e^{-z^2/2z_0^2}H_{n_z}\left(\frac{z}{z_0}\right) \tag{6.209}$$

Бул аңлатпада $z_0=\sqrt{\pi\hbar/(m\omega)}$.

(b) Тийкарғы ҳалдың энергиясы мынадай формуланың жәрдеминде анықланады:

$$E_{110} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{6.210}$$

Биринши қозған ҳалдың энергиясын мынадай формуланың жәрдеминде анықлаймыз:

$$E_{120} = E_{210} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{6.211}$$

Тийкарғы ҳал азғынған болмаса да, биринши қозған ҳалдың еки қайтара азғынған екенлигине итибар бериў керек. Усының менен бирге, $\hbar\omega > 3\pi^2\hbar^2$ шамасынан баслап $E_{210} < E_{111}$ теңсизлигиниң орын алатуғынлығын ямаса

$$E_{111} = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{3\hbar\omega}{2} = E_{120} + \hbar\omega - \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{6.212}$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын еслетип өтиўимиз керек. Демек, биринши қозған ҳал E_{111} менен емес, ал E_{120} менен бериледи.

(c)

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 - q\epsilon z \tag{6.213}$$

ушын энергияларды алыў ушын $\lambda = z - q\epsilon/(m\omega^2)$ белгилеўин қабыл етиў керек. Бундай жағдайда $dz = d\lambda$ теңлиги орынлы болады. Нәтийжеде гамильтониан

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\lambda^2 - \frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2} \tag{6.214}$$

түрине енеди. Гамильтонианның адамды ойландыратуғын бул формасы $\hat{H}_z$ операторының меншикли мәнислериниң $\frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2}$ шамасына төменге қарай жылыстырылған гармоникалық осциллятордың гамильтонианы болып табылады:

$$E_{n_z} = \langle n_z|\hat{H}_z|n_z\rangle = \hbar\omega\left(n_z + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2}. \tag{6.215}$$

Нәтийжеде улыўмалық энергия ушын

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right) + \hbar\omega\left(n_z + \frac{1}{2}\right) - \frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2} \tag{6.216}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Тийкарғы ҳәм биринши қозған ҳалдың энергиялары мыналарға тең:

$$\begin{aligned} E_{111} &= \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2}, \\ E_{120} = E_{210} &= \frac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{q^2\epsilon^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \tag{6.217}$$

6.2-мәселе.

(a) $\langle nl|r^{-2}|nl\rangle$ ҳәм (b) $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle$ аңлатпаларының қалай алынатуғынлығын көрсетиңиз, яғный (6.183)- ҳәм (6.182)-теңликлерди дәлиллеңиз.

Шешими:

Мәселени шешиў ушын ең биринши ноқат (6.127)-теңлеме болып табылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right]U_{nl}(r) = EU_{nl}(r). \tag{6.218}$$

Бул теңлемени былайынша көширип жазыўға болады:

$$\frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)}=\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu e^2}{\hbar^2}\frac{1}{r}+\frac{\mu^2e^4}{\hbar^4n^2}. \qquad (6.219)$$

Бул теңлемеде $U_{nl}(r)=r\,R_{nl}(r)$, $U''_{nl}(r)=d^2U_{nl}(r)/d\,r^2$ ҳәм $E_n=-\,\mu e^4/(2\hbar^2n^2)$.

(а) $\langle r^{-2}\rangle_{nl}$ шамасын табыў ушын l орбиталық квант санын үзликсиз өзгеретуғын шама түринде қабыл етемиз ҳәм (6.219) дан l бойынша биринши туўындыны аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial l}\left[\frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)}\right]=\frac{2l+1}{r^2}-\frac{2\mu^2e^4}{\hbar^4n^3}. \qquad (6.220)$$

Бул аңлатпада n ниң l ден ғәрезли екенлиги көринип тур, себеби, (6.145) те көрсетилгендей $n=N+l+1$; солай етип $\partial n/\partial l=1$. Енди

$$\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)dr=\int\limits_0^\infty r^2R_{nl}^2(r)dr=1$$

теңлиги орынлы болғанлықтан, (6.220) ның еки бөлимин де $U_{nl}^2(r)$ қа көбейтемиз ҳәм r бойынша интеграллаймыз:

$$\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\frac{\partial}{\partial l}\left[\frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)}\right]dr=$$
$$=(2l+1)\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\frac{1}{r^2}\,dr-\frac{2\mu^2e^4}{\hbar^4n^3}\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\,dr, \qquad (6.221)$$

ямаса

$$\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\frac{\partial}{\partial l}\left[\frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)}\right]dr=$$
$$=2(l+1)\left\langle nl\left|\frac{1}{r^2}\right|nl\right\rangle-\frac{2\mu^2e^4}{\hbar^4n^3}. \qquad (6.222)$$

Биз

$$\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\frac{\partial}{\partial l}\left[\frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)}\right]dr= \qquad (6.233)$$
$$=\int\limits_0^\infty U_{nl}(r)\frac{\partial U''_{nl}(r)}{\partial l}\,dr-\int\limits_0^\infty U''_{nl}(r)\frac{\partial U_{nl}(r)}{\partial l}\,dr=0$$

теңлигиниң орынлы екенлигин есапқа алсақ, онда (6.232)-теңликтиң шеп тәрепиниң нолге тең екенлигине көз жеткеремиз.

$$2(l+1)\left\langle nl\left|\frac{1}{r^2}\right|nl\right\rangle=\frac{2\mu^2e^4}{\hbar^4n^3}. \qquad (6.224)$$

Демек,

$$\left\langle nl\left|\frac{1}{r^2}\right|nl\right\rangle=\frac{2\mu^2e^4}{n^3 2(l+1)a_0^2}. \qquad (6.225)$$

Бул теңликте $a_0=\hbar^2/(\mu e^2)$.

(b) $\langle r^{-1}\rangle_{nl}$ ди табыў ушын (6.219)-аңлатпадағы электронның заряды e ни үзликсиз өзгеретуғын өзгериўши сыпатында қараў керек. (6.219) дан алынған биринши электронлық туўынды мынаны береди:

$$\frac{\partial}{\partial e}\left[\frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)}\right]=\frac{4\mu e}{\hbar^2}\frac{1}{r}-\frac{4\mu^2e^3}{\hbar^4n^2}. \qquad (6.226)$$

Бул жағдайда да, $\int_0^\infty U_{nl}^2(r)dr=1$ теңлиги орынлы болғанлықтан, (6.226) ның еки бөлимин де $U_{nl}^2(r)$ ге көбейтип ҳәм r бойынша интеграллап, биз мынаны аламыз:

$$\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\frac{\partial}{\partial e}\left[\frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)}\right]dr=$$
$$=-\frac{4\mu e}{\hbar^2}\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\frac{\partial}{\partial r}\,dr+\frac{4\mu^2e^3}{\hbar^4n^2}\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\,dr=0 \qquad (6.227)$$

ямаса

$$\int\limits_0^\infty U_{nl}^2(r)\frac{\partial}{\partial e}\left[\frac{U''_{nl}(r)}{U_{nl}(r)}\right]dr=$$
$$=-\frac{4\mu e}{\hbar^2}\left\langle nl\left|\frac{1}{r}\right|nl\right\rangle+\frac{4\mu^2e^3}{\hbar^4n^2}. \qquad (6.228)$$

(6.223)-аңлатпада көрсетилип өтилгениндей, бул теңликтиң шеп тәрепи нолге тең. Солай етип, биз мынаған ийе боламыз:

$$\frac{4\mu e}{\hbar^2}\left\langle nl\left|\frac{1}{r}\right|nl\right\rangle=\frac{4\mu^2e^3}{\hbar^4n^2}\Longrightarrow\left\langle nl\left|\frac{1}{r}\right|nl\right\rangle=\frac{1}{a_0n^2}. \qquad (6.229)$$

Бул теңликте $a_0=\hbar^2/(\mu e^2)$.

6.3-мәселе.

(a) $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle$, $\langle nl|r|nl\rangle$ ҳәм $\langle nl|r^2|nl\rangle$ ушын (6.180)-(6.182) аңлатпаларды алыў мақсетинде Крамерстиң рекуррентлик қағыйдасын пайдаланыңыз.

(b) $\langle nl|r^{-2}|nl\rangle$ ушын (6.225)-аңлатпаны пайдаланып ҳәм оны Крамерстиң рекуррентлик қағыйдасы менен комбинациялап $\langle nl|r^{-3}|nl\rangle$ ушын аңлатпаны алыңыз.

(c) $\langle nl|r^{-3}|nl\rangle$ ушын аңлатпаны алыў ушын (b) ны қайталаңыз.

Шешими:

(a) Биринширден, $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle$ ны алыў ушын Крамерстиң (6.184)-рекуррентлик қағыйдасына $k=0$ мәнисин қойыў керек:

$$\frac{1}{n^2}\langle nl|r^0|nl\rangle-a_0\langle nl|r^{-1}|nl\rangle=0. \qquad (6.230)$$

Демек,

$$\left\langle nl\left|\frac{1}{r}\right|nl\right\rangle=\frac{1}{n^2}a_0. \qquad (6.231)$$

Екиншиден (6.181)-аңлатпаға $k=1$ теңлигин қойыў $\langle nl|r|nl\rangle$ ушын аңлатпаға алып келеди:

$$\frac{3}{n^2}\langle nl|r|nl\rangle - 3a_0\langle nl|r^0|nl\rangle + \frac{a_0^2}{4}[(2l+1)^2-1]\langle nl|r^{-1}|nl\rangle = 0. \tag{6.232}$$

Усының менен бирге $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle = 1/(a_0n^2)$ теңлиги орынлы болғанлықтан, биз мынаған ийе боламыз:

$$\langle nl|r|nl\rangle = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]a_0. \tag{6.233}$$

Үшиншиден, $k = 2$ теңлигин (6.184)-аңлатпаға қойып, биз мынаны аламыз:

$$\begin{gathered}\frac{3}{n^2}\langle nl|r^2|nl\rangle - 5a_0\langle nl|r|nl\rangle + \\ +\frac{a_0^2}{4}[(2l+1)^2-4]\langle nl|r^0|nl\rangle = 0.\end{gathered} \tag{6.234}$$

Бул аңлатпа $\langle nl|r|nl\rangle = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]a_0$ теңлиги менен бирге мынаны береди:

$$\frac{3}{n^2}\langle nl|r^2|nl\rangle = \frac{1}{2}n^2[5n^2 + 1 - 3l(l+1)]a_0^2. \tag{6.235}$$

Биз r диң оң дәрежесине сәйкес келетуғын $\langle nl|r^k|nl\rangle$ аңлатпасын алыў ушын есаплаўларымызды тап усындай жол менен даўам етиўимиз керек.

(b) $k = -1$ ди Крамерс қағыйдасына киргизсек, онда

$$0 + a_0\langle nl|r^{-2}|nl\rangle - \frac{1}{4}[(2l+1)^2-1]a_0^2\langle nl|r^{-3}|nl\rangle \tag{6.236}$$

аңлатпасына ийе боламыз ҳәм буннан мынаны аламыз:

$$\left\langle nl\left|\frac{1}{r^3}\right|nl\right\rangle = \frac{1}{l(l+1)a_0}\left\langle nl\left|\frac{1}{r^2}\right|nl\right\rangle. \tag{6.237}$$

Бул аңлатпада $\left\langle nl\left|\frac{1}{r^2}\right|nl\right\rangle$ шамасы (6.225) арқалы бериледи, солай етип биз мынаған ийе боламыз:

$$\left\langle nl\left|\frac{1}{r^3}\right|nl\right\rangle = \frac{2}{n^3l(l+1)(2l+1)a_0^3}. \tag{6.238}$$

(c) $\langle nl|r^{-4}|nl\rangle$ ушын аңлатпаны алыў ушын Крамерс қағыйдасына $k = 2$ ни қойыў керек:

$$\begin{gathered}-\frac{1}{n^2}\ \langle nl|r^{-2}|nl\rangle + 3a_0\langle nl|r^{-3}|nl\rangle - \\ -\frac{a_0^2}{2}[(2l+1)^2-4]\langle nl|r^{-4}|nl\rangle = 0.\end{gathered} \tag{6.239}$$

$\langle nl|r^{-2}|nl\rangle$ ҳәм $\langle nl|r^{-3}|nl\rangle$ ушын жазылған (6.225)- ҳәм (6.238)-аңлатпаларды қойып, биз мынаны аламыз:

$$\left\langle nl\left|\frac{1}{r^4}\right|nl\right\rangle = \frac{4[3n^2 - l(l+1)]}{n^5l(l+1)(2l+1)[(2l+1)^2-4]a_0^4}. \tag{6.240}$$

Усындай жоллар менен биз k ның қәлеген терис мәниси ушын $\langle nl|r^{-k}|nl\rangle$ шамаларын анықлай аламыз.

6.4-мәселе.

Электрон $V(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ +\infty, & r > a \end{cases}$ шексиз терең сфералық шуқырдың ишинде жайласқан.

(a) Шредингердиң радиаллық теңлемесин пайдаланып энергияның байланысқан меншикли мәнислерин ҳәм электронның импульсиниң орбиталық моменти нолге тең болған жағдай ушын оларға сәйкес келетуғын нормировкаланған радиаллық толқын функцияларды табыңыз (яғный, $l = 0$ болған жағдайдағы).

(b) $l = 7$ ушын ең киши энергияға ийе болған ҳалдың $l = 0$ болған ең киши болған екинши ҳалдан жоқарыда жайласатуғынлығын көрсетиңиз.

(c) Радиусы $a/2$ шамасына тең болған сферада электронды табыўдың итималлығын, буннан кейин $r = a$ менен $r = 3a/2$ шамаларының аралығындағы радиусы $a/2$ шамасына тең болған сферада электронды табыўдың итималлығын есаплаңыз.

Шешими:

(a) $r \leq a$ областында $V(r) = 0$ теңлиги орынланған жағдайда Шредингердиң радиаллық теңлемеси (6.57) былайынша жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}U_{nl}(r)\right] = EU_{nl}(r). \tag{6.241}$$

Бул теңлемеде $U_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$. $l = 0$ болған жағдайда бул теңлеме мынадай теңлемеге айланады:

$$\frac{d^2U_{n0}(r)}{dr^2} = -k_n^2U_{n0}(r). \tag{6.242}$$

$k_n^2 = 2mE_n/\hbar^2$. Бул дифференциаллық теңлемениң улыўмалық шешими былайынша жазылады:

$$U_{n0}(r) = A\cos(k_nr) + B\sin(k_nr) \tag{6.243}$$

ямаса

$$R_{n0}(r) = \frac{1}{r}[A\cos(k_nr) + B\sin(k_nr)]. \tag{6.244}$$

Координата басында $R_{n0}(r)$ шамасы шекли ҳәм $U_{n0}(r) = 0$ теңлиги орынлы болғанлықтан, A коэффициентиниң мәниси нолге тең болыўы керек. Усының менен бирге $r = a$ теңлиги орынланғанда потенциалдың мәниси шексиз үлкен болғанлықтан (өткермейтуғын диййўал) $R_{n0}(a)$ радиаллық толқын функциясының нолге тең болыўы керек:

$$R_{n0}(a) = B\frac{\sin(k_na)}{a} = 0. \tag{6.245}$$

Бул аңлатпада $ka = \pi n, n = 1, 2, 3, \ldots$ Бул қатнас мынаған алып келеди:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2. \tag{6.246}$$

$R_n(x)$ толқын функциясының нормировкасы $\int_0^\infty |R_{n0}(x)|^2x^2dr = 1$ мынаған алып келеди:

$$\begin{gathered}1 = |B|^2\int\limits_0^a \frac{1}{r^2}\sin^2(k_nr)r^2\,dr = \frac{|B|^2}{k_n}\int\limits_0^{k_na}\sin^2(\rho)\,d\rho = \\ = \frac{|B|^2}{k_n}\left(\frac{\rho}{2} - \frac{\sin 2\rho}{4}\right)\Bigg|_{\rho=0}^{k_na} = \frac{1}{2}|B|^2a.\end{gathered} \tag{6.247}$$

Бул теңликте $B = \sqrt{2/a}$. Радиаллық толқын функциясын нормировкалаў мынаны береди:

$$R_{n0}(r) = \sqrt{\frac{2}{a}\frac{1}{r}}\sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}}\right). \tag{2.248}$$

(b) $l = 7$ ушын биз мынаған ийе боламыз:

$$E_1(l = 7) > V_{eff}(l = 7) = \frac{56\hbar^2}{2ma^2} = \frac{28\hbar^2}{ma^2}. \tag{6.249}$$

$l = 0$ ниң шамасы бойынша екинши ҳал $3s$ ҳалы болып табылады; $n = 2$ болған жағдайда оның энергиясы мынаған тең:

$$E_2(l = 0) = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}. \tag{6.250}$$

Буннан

$$E_1(l = 7) > E_2(l = 0) \tag{6.251}$$

теңсизлигиниң орын алатуғынлығын көремиз.

(c) Электронды радиусы a ға тең болған сферада табыўдың итималлығы 1 ге тең болғанлықтан, радиусы $a/2$ ге тең болған сферада электронды табыўдың итималлығы ½ ге тең.

Ал электронды радиуслары $r = a$ ҳәм $r = 3a/2$ шамаларына тең болған сфералық қабықта табыўдың итималлығы нолге тең. Себеби электрон $r < a$ ҳәм $r > a$ аралығындағы шексиз потенциал арқалы өте алмайды.

6.5-мәселе.

Потенциалы $V(r) = \begin{cases} 0, \ a < r < b, \\ +\infty, \ \text{,басқа барлық орынларда} \end{cases}$ шәртин қанаатландыратуғын массасы m ге тең болған бөлекшениң $l = 0$ болған жағдайдағы энергиясы менен толқын функциясын табыңыз.

Шешими:

Бул бөлекше радиуслары $r = a$ ҳәм $r = b$ болған еки концентрлик қатты сфералардың арасында қозғалады. $l = 0$ теңлиги орынланған жағдайда a<r<b аралығындағы бөлекше ушын радиаллық толқын функциясы (6.57)-аңлатпаның тийкарында былайынша жазылады:

$$\frac{d^2U_{n0}(r)}{dr^2} + k^2U_{n0}(r) = 0. \tag{6.252}$$

Бул теңлемеде $U_{n0}(r) = rR_{n0}(r)$ ҳәм $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Бул теңлемениң шешимлери $U_{n0}(a) = 0$ шәртин қанаатландыратуғын болғанлықтан, биз мынаны жаза аламыз:

$$U_{n0}(r) = A\sin[k(r - a)]. \tag{6.253}$$

Радиаллық толқын функциясы басқа орынларда да нолге тең, яғный $a < r < b$ областынла $U_{n0}(r) = 0$.

Оның үстине, $r = b$ теңлиги орынланғанда да радиаллық функция нолге тең болатуғын болғанлықтан, биз мынаған ийе боламыз:

$$A\sin[k(b - a)] = 0 \implies k(b - a) = \pi a, n = 1, 2, 3, \ldots \tag{6.254}$$

Бул шәрт $k^2 = 2mE/\hbar^2$ теңлиги менен биргеликте энергия ушын мынадай аңлатпаға алып келеди:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(a-b)^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots \tag{6.255}$$

A константасын анықлаў ушын биз (6.253)-радиаллық функцияны нормировкалай аламыз:

$$\begin{gathered} 1 = \int_a^b r^2 R_{n0}^2(r)dr = \int_a^b U_{n0}^2(r)dr = A^2 \int_a^b \sin^2[k(r-a)]\,dr = \\ = \frac{A^2}{2}\int_a^b \{1 - \cos[2k(r-a)]\}dr = \frac{b-a}{2}A^2. \end{gathered} \tag{6.256}$$

Бул теңликлерде $A = \sqrt{2/(b-a)}$. $k_n = n\pi/(b-a)$ теңлиги орынлы болғанлықтан, радиаллық толқын функциясын нормировкалаў мынаны береди:

$$R_{n0}(r) = \frac{1}{r}U_{n0}(r) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{b-a}}\dfrac{1}{r}\sin\left[\dfrac{n\pi(r-a)}{b-a}\right], a < r < b, \\ \qquad 0, \quad \text{басқа орынларда.} \end{cases} \tag{6.257}$$

$\psi_{nlm}(\vec{r})$ толық толқын функциясын алыў ушын радиаллық толқын функциясын $1/\sqrt{4\pi}$ коэффициентине бөлиў керек. Себеби $l = 0$ теңлиги орынланатуғын бундай жағдайда $\psi_{n00}(r)$ толқын функциясы ҳеш бир мүйешлик еркинлик дәрежелеринен ғәрезли емес, ол тек радиустан ғәрезли:

$$\psi_{n00}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{n0}(r) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{4\pi(b-a)}}\dfrac{1}{r}\sin\left[\dfrac{n\pi(r-a)}{b-a}\right], a < r < b, \\ \qquad 0, \quad \text{басқа орынларда.} \end{cases} \tag{6.258}$$

6.6-мәселе.

(а) Водород атомы ушын итималлық тығызлығы өзиниң максималлық мәнисине жететуғын r диң мәнисин есаплаңыз: (i) $n = 1, l = 0, m = 0$; (ii) $n = 2, l = 1, m = 0$; (iii) $l = n - 1, m = 0$.

(б) Алынған мәнислерди дөңгелек орбиталардың Бор радиусы менен салыстырыңыз.

Шешими:

(а) $n = 1, l = 0$ ушын радиаллық толқын функциясы $R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2}e^{-r/a_0}$ түринде жазылатуғын болғанлықтан, итималлық тығызлығы былайынша анықланады:

$$P_{10}(r) = r^2|R_{10}(r)|^2 = \frac{4}{a_0^3}r^2 e^{-2r/a_0}. \tag{6.259}$$

(i) $P_{10}(r)$ диң максимумы r_1 ге сәйкес келеди:

$$\left.\frac{dP_{10}(r)}{dx}\right|_{r=r_1} = 0 \implies 2r_1 - \frac{2r_1^2}{a_0} = 0 \implies r_1 = a_0. \tag{6.260}$$

(ii) $R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{-\frac{3}{2}}} e^{-r/2a_0}$ теңлиги орынлы болғанлықтан, жоқарыда орынланған есаплаўларға сәйкес, мыналарға ийе боламыз:

$$P_{21}(r) = r^2 |R_{21}(r)|^2 = \frac{1}{24a_0^3} r^4 e^{-r/a_0}. \tag{6.261}$$

Итималлық тығызлығының максимумы мынадай формуланың жәрдеминде бериледи:

$$\left.\frac{dP_{21}(r)}{dx}\right|_{r=r_2} = 0 \implies 4r_2^3 - \frac{r_2^4}{a_0} = 0 \implies r_2 = 4a_0. \tag{6.262}$$

(iii) $l = n - 1$ ушын радиаллық толқын функциясының (6.170) тен алыў мүмкин:

$$R_{n(n-1)}(r) =$$

$$= -\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{2n[(2n-1)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}} L_{2n-1}^{2n-1}\left(\frac{2r}{na_0}\right). \tag{6.263}$$

(6.159)- ҳәм (6.160)-аңлатпалардан Лагердиң сәйкес көп ағзалысы $L_{2n-1}^{2n-1}(y)$ тиң константа ҳәм оның $L_{2n-1}^{2n-1}(y) = -(2n-1)!$ шамасына тең екенлигин тексерип көриўге болады. Солай етип, биз $R_{n(n-1)}(r)$ ди

$$R_{n(n-1)}(r) = A_n r^{n-1} e^{-\frac{2r}{na_0}}$$

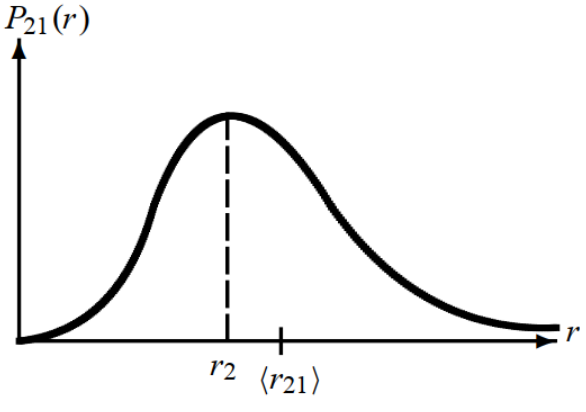
түринде жаза аламыз (A_n арқалы константа белгиленген). Демек, итималлықтың тығызлығы былайынша жазылады:

$$P_{n(n-1)}(r) = r^2 \left|R_{n(n-1)}(r)\right|^2 = A_n^2 r^{2n} e^{-\frac{2r}{na_0}}. \tag{6.264}$$

Итималлық тығызлығының максимумы

$$\left.\frac{dP_{n(n-1)}(r)}{dx}\right|_{r=r_n} = 0 \implies 2nr_n^{2n-1} - \frac{2r_n^{2n}}{na_0} = 0 \implies r_n = n^2 a_0. \tag{6.265}$$

(b) (6.260)-, (6.262)- ҳәм (6.265)-аңлатпаларда берилетуғын r_n ниң мәнислери Бор радиуслары бойынша анықланатуғын $r_n = n^2 a_0$ шамалары болып табылады. Бор радиусы болған $r_n = n^2 a_0$ шамасы водород атомындағы электрон ушын итималлықтың максималлық тығызлығын береди.



6.5-сүўрет. $P_{21}(r) = \frac{1}{24a_0^3} r^4 e^{-r/a_0}$ итималлығының тығызлығы өзиниң максимумы $r_2 = 4a_0$ ге қарата асимметриялы; r диң орташа мәниси $\langle r_{21}\rangle = 5a_0$, ал, итималлықтың тығызлығының кеңлиги $\Delta r_{21} = \sqrt{5}a_0$ шамасына тең.

6.7-мәселе.

((a) Водород атомы ушын математикалық күтиў $\langle r\rangle_{21}$ ди есаплаңыз ҳәм $n = 2, l = 1$ ҳалы ушын итималлықтың радиаллық тығызлығы өзиниң максимумына жететуғын r менен салыстырыңыз

(b) r шамасы ушын итималлықтың тығызлығының тарқалыўының кеңлигин есаплаңыз.

Шешими:

(a) $R_{21}(r) = re^{-r/2a_0}/\sqrt{24a_0^5}$ теңлиги орынлы болғанлықтан $R_{21}(r)$ ҳалындағы r диң орташа мәниси мынаған тең:

$$\langle r\rangle_{21} = \frac{1}{\sqrt{24a_0^5}} \int\limits_0^\infty r^5 e^{-r/a_0} dr = \frac{a_0}{24} \int\limits_0^\infty u^5 e^{-u} du = \frac{120a_0}{24} = 5a_0. \tag{6.266}$$

Бул қатнасты келтирип шығарғанымызда, биз $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$ теңлигиниң орын алатуғынлығын пайдаландық.

$n = 2, l = 1$ ҳалы ушын итималлықтың радиаллық тығызлық өзиниң максимум шамасына жететуғын r диң мәниси, (6.262) де көрсетилгендей, $r_2 = 4a_0$ теңлиги бойынша бериледи.

$r_2 = 4a_0$ ҳәм $\langle r\rangle_{21} = 5a_0$ нәтийжелери не менен айрылады? $\langle r\rangle_{21}$ ниң r_2 ден айырмаға ийе болыўының себеби 6.5-сүўретте көрсетилгендей, $\langle r\rangle_{21}$ ниң өзиниң максимумына қарата асимметриялы екенлиги менен түсиндириледи. Электронның ең итимал болған орны $r_2 = 4a_0$ теңлиги менен анықланатуғын болса да, оның орнын өлшеўде алынатуғын шаманың орташа мәниси $\langle r\rangle_{21} = 5a_0$ ге тең.

(b) Итималлықлардың тарқалыўының кеңлиги $\Delta r = \sqrt{\langle r^2\rangle_{21} - \langle r\rangle_{21}^2}$ аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул теңликтеги математикалық күтиў болған $\langle r^2\rangle_{21}$ шамасы мынаған тең:

$$\begin{aligned} \langle r^2\rangle_{21} &= \int\limits_0^\infty r^4 R_{21}^2(r) dr = \frac{1}{24a_0^5} \int\limits_0^\infty r^6 \exp\left(-\frac{1}{a_0} r\right) dr = \\ &= \frac{6!\, a_0^7}{24a_0^5} = 30a_0^2. \end{aligned} \tag{6.267}$$

Солай етип, 6.5-сүўретте көрсетилген итималлықтың тарқалыўының кеңлиги былайынша анықланады екен:

$$\Delta r_{21} = \sqrt{\langle r^2\rangle_0 - \langle r\rangle_0^2} = \sqrt{30a_0^2 - (5a_0)^2} = \sqrt{5}a_0. \tag{6.268}$$

6.8-мәселе.

Импульстиң радиаллық қураўшысы p_r ҳәм радиаллық координата r менен байланыслы болған операторлар сәйкес $\hat{P}_r$ ҳәм $\hat{R}$ арқалы белгиленеди. Олардың радиаллық толқын функциясына тәсирлери

$$\hat{P}_r\psi(\vec{r}) = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial\big(r\psi(\vec{r})\big)}{\partial r}$$

ҳәм

$$\hat{R}\psi(\vec{r}) = r\psi(\vec{r})$$

формулалары менен бериледи.

(a) $[\hat{P}_r, \hat{R}]$ ҳәм $\Delta\hat{P}_r\Delta r$ коммутаторларын табыңыз, бул теңликте $\Delta r = \sqrt{\langle\hat{R}^2\rangle - \langle\hat{R}\rangle^2}$.

(b) $\hat{P}_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r$ екенлигин көрсетиңиз.

Шешими:

(a) $\hat{R}\psi(\vec{r}) = r\psi(\vec{r})$ ҳәм

$$\hat{P}_r\psi(\vec{r}) = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\psi(\vec{r}) = -i\hbar\frac{1}{r}\psi(\vec{r}) - i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial r} \tag{6.269}$$

ҳәм

$$\hat{P}_r\left(\hat{R}\psi(\vec{r})\right) = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\big(r^2\psi(\vec{r})\big) = -2i\hbar\psi(\vec{r}) - i\hbar r\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial r} \tag{6.270}$$

теңлиги орынлы болғанлықтан $[\hat{P}_r, \hat{R}]$ коммутаторының $\psi(\vec{r})$ функциясына тәсири

$$\begin{gathered}\big[\hat{P}_r, \hat{R}\big]\psi(\vec{r}) = i\hbar\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r, \hat{R}\right]\psi(\vec{r}) = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\big(r^2\psi(\vec{r})\big) + \\ +i\hbar\frac{\partial}{\partial r}\big(r\psi(\vec{r})\big) = -2i\hbar\psi(\vec{r}) - i\hbar r\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial r} + \\ +i\hbar\psi(\vec{r}) + i\hbar r\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial r} = i\hbar\psi(\vec{r})\end{gathered} \tag{6.271}$$

аңлатпасына алып келеди. Бул жағдайда биз

$$\big[\hat{P}_r, \hat{R}\big] = i\hbar \tag{6.272}$$

теңлигине ийе боламыз. $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларына $\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|$ анықсызлық қатнасларын пайдаланып

$$\Delta\hat{P}_r\Delta\hat{R} \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\Delta\hat{P}_r, \Delta\hat{R}]\rangle\right| \tag{6.273}$$

ямаса

$$\Delta\hat{P}_r\Delta\hat{R} \geq \frac{\hbar}{2} \tag{6.274}$$

аңлатпасын жаза аламыз.

(b) $\hat{P}_r^2$ операторының $\psi(\vec{r})$ функциясына тәсири мынаны береди:

$$\hat{P}_r^2\,\psi(\vec{r}) = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\big(r\psi(\vec{r})\big)\right] = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\big(r\psi(\vec{r})\big). \tag{6.275}$$

Демек,

$$\hat{P}_r^2 = -\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r) \tag{6.276}$$

қатнасы орынлы болады екен.

6.9-мәселе.

$V(r) = -V_0\delta(r-a), V_0 > 0$ дельта-потенциалында қозғалатуғын массасы m ге тең болған бөлекше ушын байланысқан ҳаллардың саны s ти табыңыз. a өлшеми көз-қарасында турып байланысқан ҳаллардың болатуғынлығын таллаңыз. Байланысқан ҳал (ҳаллар) ушын нормировкаланған толқын функциясын табыңыз.

Шешими:

$l = 0$ болған жағдай ушын радиаллық теңлемениң (6.57) ден алыныўы мүмкин:

$$\frac{d^2U_{n0}(r)}{dr^2} + \left[\frac{2mV_0}{\hbar^2}\delta(r-a) - k^2\right]U_{n0}(r) = 0. \tag{6.277}$$

Бул теңлемеде $U_{nl}(r) = U_{n0}(r) = r\,R_{n0}(r)$ ҳәм $k^2 = -2mE/\hbar^2$. Биз тек байланысқан ҳалларды қараймыз, сонлықтан $E < 0$ теңсизлиги орынлы. Бул теңлемениң шешимлери былайынша жазылады:

$$U_{n0}(r) = \begin{cases} U_{n0_1}(r) = Ae^{kr} + Be^{-kr}, & 0 < x < a, \\ U_{n0_2}(r) = Ce^{-kr}, & r > a. \end{cases} \tag{6.278}$$

Энергияның меншикли мәнислери шегаралық шәртлерден алыныўы мүмкин. $r = 0$ теңлиги орынланғанда толқын функциясы нолге тең болады, яғный $U_{n0}(0) = 0$. Буннан $A + B = 0$ ямаса $A = -B$ теңлигине ийе боламыз. Демек, $U_{n0_1}(r) = D\sinh kr$:

$$U_{n0}(r) = D\sinh kr\,, \qquad 0 < r < a. \tag{6.279}$$

Буннан $D = 2A$ теңлигин аламыз. $r = a$ теңлиги орынланған жағдайдағы $U_{n0}(0)$ функциясының үзликсизлик шәрти $U_{n0_1}(a) = U_{n0_2}(a)$ мынаған алып келеди:

$$D\sinh ka = Ce^{-ka}. \tag{6.280}$$

$r = a$ теңлиги орынланғанда $U_{n0}(r)$ функциясының биринши туўындысы ушын үзилиў усылын алыў ушын (6.277)-аңлатпаны интеграллаў керек:

$$\lim_{\varepsilon\to a}\left[U'_{n0_2}(a+\varepsilon) - U'_{n0_1}(a-\varepsilon)\right] + \frac{2mV_0}{\hbar^2}U_{n0_2}(a) = 0 \tag{6.281}$$

ямаса

$$-kCe^{-ka} - kD\cosh ka + \frac{2mV_0}{\hbar^2}Ce^{-ka} = 0. \tag{6.282}$$

(6.280)-аңлатпада көрсетилгендей, $Ce^{-ka} = kD\cosh ka$ теңлигин қабыл етип ҳәм оны (6.282)-теңлемеге қойып, төмендегини аламыз:

$$-k\sinh ka - k\cosh ka + \frac{2mV_0}{\hbar^2}\sinh ka = 0. \tag{6.283}$$

Демек,

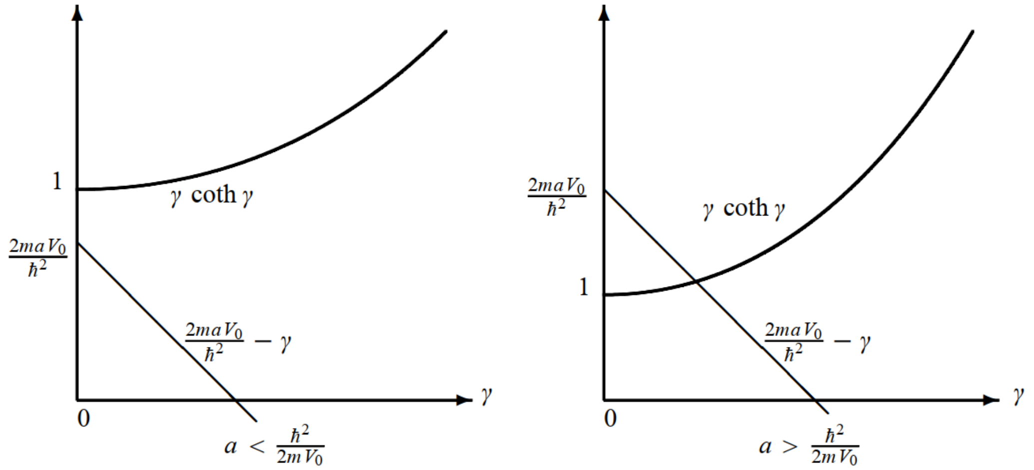
$$\gamma\coth\gamma = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a - \gamma. \tag{6.284}$$

Бул теңлемеде $\gamma = ka$.

Энергияның меншикли мәнислери $f(\gamma) = \gamma\coth\gamma$ ҳәм $g(\gamma) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a - \gamma$ иймекликлериниң кесилисиў ноқатлары бойынша анықланады. 6.6-сүўретте көринип турғанындай, егер $a < \hbar^2/(2mV_0)$ теңсизлиги орынланатуғын болса, байланысқан ҳал ушын ҳеш қандай шешим болмайды, себеби $f(\gamma)$ ҳәм $g(\gamma)$ иймекликлери кесилиспейди. Бирақ, егер $a > \hbar^2/(2mV_0)$ теңсизлиги орынлы болса, онда иймекликлер тек бир рет кесилиседи. Демек, бир байланысқан ҳал болады деген сөз. Бизлер бул нәтийжелерди былайынша көрсете аламыз:

$$a < \hbar^2/(2mV_0) \implies \text{байланысқан ҳал жоқ}, \tag{6.285}$$

$$a > \hbar^2/(2mV_0) \implies \text{байланысқан ҳал биреў}. \tag{6.286}$$



6.6-сүўрет. $f(\gamma) = g(\gamma)$ ушын графикалық шешимлер. Бул теңликте $\gamma = ka, f(\gamma) = \gamma \coth\gamma\,, g(\gamma) = 2mV_0a/\hbar^2 - \gamma$. Егер $a < \hbar^2/(2mV_0)$ теңсизлиги орынланатуғын болса, онда байланысқан ҳал болмайды, ал $a > \hbar^2/(2mV_0)$ теңсизлиги орынлы болса, онда бир байланысқан ҳал жүзеге келеди.

Радиаллық толқын функциясы мынадай формула менен бериледи:

$$R_{n0}(r) = \frac{1}{r}U_{n0}(r) = \begin{cases}(D/r)\sinh kr, & 0 < r < a, \\ \quad (C/r)e^{-kr}, & r > a.\end{cases} \qquad (6.287)$$

Бул функцияны нормировкалаў мынаған алып келеди:

$$\begin{aligned}1 &= \int_0^\infty r^2R_{n0}^2(r)dr = \int_0^\infty U_{n0}^2(r)dr = \\ &= D^2\int_0^a \sinh^2 kr + C^2\int_0^\infty e^{-2kr}dr = \\ &= \frac{D^2}{2}\int_0^a [\cosh 2kr - 1] + \frac{C^2}{2k}e^{-2kr} = \\ &= D^2\left[\frac{1}{4k}\sinh 2ka - \frac{a}{2}\right] + \frac{C^2}{2k}e^{-2kr}.\end{aligned} \qquad (6.288)$$

(6.280)-теңликтен биз $Ce^{-kr} = D\sinh ka$ теңлигине ийе боламыз. Сонлықтан биз жоқарыдағы теңликлерди былайынша жаза аламыз:

$$\begin{aligned}1 + D^2\left[\frac{1}{4k}\sinh 2ka - \frac{a}{2}\right] + \frac{D^2}{2k}\sinh^2 ka = \\ = D^2\left[\frac{\sinh 2ka + 2\sinh^2 ka}{4k} - \frac{a}{2}\right].\end{aligned} \qquad (6.289)$$

Демек,

$$D = \frac{2\sqrt{k}}{\sqrt{\sinh 2ka + 2\sinh^2 ka - 2ak}}. \qquad (6.290)$$

Солай етип, нормировкаланған толқын функциясы $\psi_{nlm}(r) = \psi_{n00}(r) = (1/\sqrt{4\pi})R_{n0}(r)$ арқалы ямаса

$$\psi_{n00}(r) = \qquad (6.291)$$

$$= \frac{\sqrt{k}}{\sqrt{\pi \sinh 2ka + 2\pi \sinh^2 ka - 2\pi\, ak}} \begin{cases} (1/r)\sinh(kr)\,, 0 < r < a, \\ (1/r)\sinh(kr)\, e^{-k(r-a)}, x > a. \end{cases}$$

6.10-мәселе.

Массалары бирдей ҳәм m ге тең, $V(r) = kr$ потенциалы арқалы тәсирлесетуғын еки кварктан туратуғын байланысқан системаның $l = 0$ ҳалын қараймыз.

(а) Бор моделин пайдаланып, дөңгелек орбиталар болған жағдайдағы тезликти, орбитаның радиусын ҳәм системаның энергиясын табыңыз. Системада n ҳалынан m ҳалына өткенде қоздырылатуғын (генерацияланатуғын) нурланыўдың мүйешлик жийилигин де табыңыз.

(б) Орайлық $V(r) = kr$ потенциалы орын алған жағдайда еки кварктан туратуғын система ушын Шредингер теңлемесин шешиңиз ҳәм энергия менен $R_{nl}(r)$ радиаллық бөлим ушын аңлатпаларды алыңыз. Энергияны (а) бөлимде алынған энергия менен салыстырыңыз.

(с) (а) менен (b) ларда алынған аңлатпаларды k =15 GeV·fm^{-1} болған bottom (b) (қарақалпақ тилинде "гөззал" кварк) ҳәм antibotton ($\tilde{b}$) кварклардан туратуғын системадағы төменги төрт энергия қәддилерин табыў ушын пайдаланыңыз. Bottom (b) кварктың массасы mc^2 = 4,4 ГэВ.

Шешими:

(а) Еки кварк дөңгелек орбита бойынша қозғалатуғын жағдайды қараймыз ҳәм ол водород атомындағы протон менен электронға усайды. Олардың арасындағы күшти былайынша жаза аламыз:

$$\mu \frac{v^2}{r} = \frac{dV(r)}{dr} = k. \tag{6.292}$$

Бул аңлатпада $\mu = m/2$ - келтирилген масса. Бор тәрепинен усынылған орбиталық мүйешлик моменттиң квантланыў шәртинен мынаған ийе боламыз:

$$L = mvr = n\hbar. \tag{6.293}$$

(6.292)-аңлатпаны (6.293)-аңлатпаға көбейтип, биз $\mu^2 v^3 = n\hbar k$ теңлигин аламыз, ал бул теңлик еки кварклық системаның салыстырмалы қозғалысының тезлигин береди:

$$v_n = \left(\frac{n\hbar k}{\mu^2}\right)^{1/3}. \tag{6.294}$$

Радиусты (6.293)-аңлатпадан аламыз, бул теңлик бойынша $r_n = n\hbar/(\mu v_n)$. Егер (6.294)-аңлатпаны пайдалансақ, мынаны аламыз:

$$r_n = \left(\frac{n^2\hbar^2}{\mu k}\right)^{1/3}. \tag{6.295}$$

Кинетикалық ҳәм потенциаллық энергияларды қосып, биз салыстырмалы қозғалыстың толық энергиясын ала аламыз:

$$E_n = \frac{1}{2}\mu v_n^2 + kr_n = \frac{3}{2}\left(\frac{n^2\hbar^2 k^2}{\mu}\right)^{1/3}. \tag{6.296}$$

Бул аңлатпаны келтирип шығарғанда биз (6.294)- ҳәм (6.295)-аңлатпаларда келтирип шығарылған v_n ҳәм r_n шамаларынан пайдаландық. n ҳалынан m ҳалына өткендеги қоздырылатуғын нурланыўдың мүйешлик жийилиги

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = \frac{3}{2\hbar}\left(\frac{k^2}{\mu\hbar}\right)^{1/3}\left(n^{2/3} - m^{2/3}\right) \tag{6.297}$$

шамасына тең болады.

(b) Радиаллық теңлеме (6.57)-теңлеме тәрепинен бериледи:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[kr + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}\right]U_{nl}(r) = E_nU_{nl}(r). \tag{6.298}$$

Бул теңликте $U_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$. Биз $l = 0$ теңлиги менен ис алып барамыз, бундай жағдайда

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} + krU_{nl}(r) = E_nU_{nl}(r) \tag{6.299}$$

теңлемесине ийе боламыз ҳәм ол мынадай теңлемеге алып келеди:

$$\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} - \frac{2\mu k}{\hbar^2}\left(r - \frac{E}{k}\right)U_{nl}(r) = 0. \tag{6.300}$$

$x = \frac{2\mu k}{\hbar^2}\left(r - \frac{E}{k}\right)$ өзгериўшисин өзгертип, биз (6.300)-аңлатпаны былайынша көширип жаза аламыз:

$$\frac{d^2\phi_n(x)}{dx^2} - x\phi_n(x) = 0. \tag{6.301}$$

биз бул теңлемениң шешимин 4-бапта үйрендик, шешимлер Эйри функциялары $Ai(x)$ пенен бериледи: $\phi(x) = B\ Ai(x)$. Байланысқан ҳаллардың энергиялары $Ai(x)$ тың ноллериниң нәтийжеси болып табылады. U_{nl} ушын шегаралық шәртлер (6.301)-теңлемеде $U_{nl}(r = 0) = 0$ ҳәм $U_{nl}(r = +\infty) = 0$ түринде алынады. Екинши шәртти Эйри функциясы қанаатландырады, себеби $Ai(x \longrightarrow \infty) = 0$. Биринши шәрт $\phi\left[-(2\mu k/\hbar^2)^{1/3}\,E/k\right] = 0$ ямаса $Ai\left[-(2\mu k/\hbar^2)^{1/3}\,E/k\right] = Ai(R_n) = 0$. Бул аңлатпада R_n шамалары Эйри функцияларының ноллери болып табылады.

Буннан кейин $U_{nl}(r = 0) = 0$ шегаралық шәрти энергия қәддилериниң дискрет жыйнағын береди. Энергия қәддилериниң Эйри түбирлериниң терминлеринде былайынша аңлатылады:

$$Ai\left[-\left(\frac{2\mu k}{\hbar^2}\right)^{1/3}\frac{E}{k}\right] = 0 \Longrightarrow -\left(\frac{2\mu k}{\hbar^2}\right)^{1/3}\frac{E_n}{k} = R_n. \tag{6.302}$$

Демек,

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\right)^{1/3}R_n. \tag{6.303}$$

Системаның радиаллық функциясы $R_{n0} = (1/r)U_{n0}(r) = (B_n/r)Ai(x)$ ямаса

$$R_{n0}(r) = \frac{B_n}{r}Ai(x) = \frac{B_n}{r}Ai\left[\left(\frac{2\mu k}{\hbar^2}\right)^{1/3}r + R_n\right] \tag{6.304}$$

түринде жазылады.

Энергия ушын жазылған (6.303)-аңлатпа Бор модели бойынша алынған (6.296)-аңлатпа менен бирдей структураға ийе: $E_n^B = \frac{3}{2}(n^2\hbar^2k^2/\mu)^{1/3}$; еки аңлатпаның қатнасы мынаған тең:

$$\frac{E_n}{E_n^B} = -\frac{2}{3}\frac{R_n}{(2n^2)^{1/3}}. \qquad (6.305)$$

(c) Ендиги есаплаўларда биз k =15 GeV·fm^{-1}, $\mu c^2 = \frac{mc^2}{2} =$ 2,2 ГэВ ҳәм $\hbar c = 197{,}3$ МэВ·фм шамаларын пайдаланамыз. Бор модели бойынша алынған $E_n^B = \frac{3}{2}(n^2\hbar^2k^2/\mu)^{1/3}$ формуласына сәйкес келетуғын ең төменги төрт энергия қәддилериниң шамасы мыналарға тең:

$$E_1^B = \frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2k^2}{\mu}\right)^{1/3} = 2{,}38\ \text{ГэВ}, E_2^B = 2^{2/3}E_1^B = 3{,}77\ \text{ГэВ}. \qquad (6.306)$$

$$E_3^B = 3^{2/3}E_1^B = 4{,}95\ \text{ГэВ}, E_4^B = 4^{2/3}E_1^B = 5{,}99\ \text{ГэВ}. \qquad (6.307)$$

Енди энергияның дәл қәддилерин есаплайық. 4-бапта Эйри функциясының бир неше түбирлериниң былайынша берилетуғынлығы еслетилип өтилди:

$$R_1 = -2{,}338, R_2 = -4{,}088, R_3 = -5{,}521, R_4 = -6{,}787.$$

Сонлықтан, бизлер биринши бир неше энергия қәддилерин дәрҳәл ала аламыз:

$$E_1 = \left(\frac{\hbar^2k^2}{\mu}\right)^{1/3} R_1 = 2{,}94\ \text{ГэВ},$$
$$E_2 = \left(\frac{\hbar^2k^2}{\mu}\right)^{1/3} R_2 = 5{,}14\ \text{ГэВ}, \qquad (6.308)$$

$$E_3 = \left(\frac{\hbar^2k^2}{\mu}\right)^{1/3} R_3 = 6{,}95\ \text{ГэВ},$$
$$E_4 = \left(\frac{\hbar^2k^2}{\mu}\right)^{1/3} R_4 = 8{,}54\ \text{ГэВ}. \qquad (6.309)$$

6.11-мәселе.

Спини жоқ еки бөлекшеден туратуғын системаны қараймыз. Ол

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & 0 \le r \le a, \\ 0, & r > 0 \end{cases}$$

шекли орайлық майданның тәсиринде турыпты, V_0 оң шама. Бул мәселениң мақсети шуқырдың $l = 0$ байланысқан бир ҳалға ийе болыўы ушын V_0 диң қандай минималлық мәнислерге тең болатуғынлығын көрсетиў.

(a) Бөлекше ноллик мүйешлик моментке ийе ҳәм оның энергиясы $-V_0 < E < 0$ диапазонында болған жағдайдағы $0 \le r \le a$ ҳәм $r > 0$ областларындағы Шредингер теңлемесиниң шешимин табыңыз.

(b) Радиаллық функцияның $r = a$ ноқатындағы үзликсизлик шәртиниң E ни анықлаў ушын трансцендент теңлемеге алып келетуғынлығын көрсетиңиз.

(c) Системаның бир, еки ҳәм үш байланысқан ҳалларына ийе болыўы ушын V_0 диң минималлық мәнисин табыў ушын усы үзликсизлик шәртин пайдаланыңыз.

(d) (c) нәтийжелерин (b) да алынған трансцендент теңлемени графикалық шешиў ушын пайдаланыңыз.

(e) (c) да алынған аңлатпаны толқын узынлығы $a = 2 \cdot 10^{-15}$ м болған дейтронның ядросы ушын V_0 диң сан мәнисин баҳалаў мақсетинде пайдаланыңыз. Дейтрон ядросының протон менен нейтроннан туратуғынлығын еслетип өтемиз.

Шешими:

(a) $l = 0$ ҳәм $-V_0 < E < 0$ ушын (6.56)-радиаллық теңлеме былайынша жазылады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U_{nl}(r)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]U_{nl}(r) = E_n U_{nl}(r). \tag{6.310}$$

Бул теңлемени шуқырдың иши ушын жазыўға болады, оны (1)-область деп атаймыз. Нәтийжеде мынадай теңлемени жазамыз:

$$U_n''(r)_1 + k_1^2 U_n(r)_1 = 0, \qquad 0 \le r \le a, \tag{6.311}$$

(2)-область ушын мынадай теңлемени жазамыз:

$$U_n''(r)_2 + k_2^2 U_n(r)_2 = 0, \qquad r < a. \tag{6.312}$$

Бул теңлемелерде

$$U_n''(r) = \frac{d^2U_n(r)}{dr^2}, U_n(r)_1 = rR_n(r)_1, U_n(r)_2 = rR_n(r)_2,$$

$$k_1 = \sqrt{2\mu(V_0+E)/\hbar^2} \text{ ҳәм } k_2 = \sqrt{-\mu E/\hbar^2}.$$

$U_n(r)_1$ функциясы $r = 0$ теңлиги орынланғанда нолге айланатуғын болғанлықтан $U_n(r)_2$ функциясы $r \longrightarrow \infty$ шегинде шекли болыўы керек, усыған сәйкес келетуғын (6.311)- ҳәм (6.312)-теңлемелердиң шешимлери мынадай формулалар менен бериледи:

$$U_n(r)_1 = A\sin(k_1 r),\ 0 \le r \le a, \tag{6.313}$$

$$U_n(r)_2 = Be^{-k_2 r}, \qquad r > a. \tag{6.314}$$

Сәйкес радиаллық функциялар төмендегилер болып табылады:

$$R_n(r)_1 = A\frac{\sin(k_1 r)}{r}, R_n(r)_2 = B\frac{e^{-k_2 r}}{r}. \tag{6.315}$$

(b) $r = a$ теңлиги ушын радиаллық функцияның логарифмлик туўынды үзликсиз болғанлықтан, биз мынаны жаза аламыз:

$$\frac{R_n'(a)_1}{R_n(a)_1} = \frac{R_n'(a)_2}{R_n(a)_2}. \tag{6.316}$$

(6.315) тен мынаған ийе боламыз:

$$\frac{R_n'(a)_1}{R_n(a)_1} = k_1\cot(k_1 a) - \frac{1}{a}, \qquad \frac{R_n'(a)_2}{R_n(a)_2} = -k_2 - \frac{1}{a}. \tag{6.317}$$

(6.317)-теңликти (6.316)-теңликке қойып, төмендегидей теңлемени аламыз:

$$-k_1\cot(k_1 a) = k_2 \tag{6.318}$$

ямаса

$$\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0+E)}\cot\left[\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0+E)}a\right] = -\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}. \tag{6.319}$$

Бул теңликлерде $k_1 = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0+E)}$ ҳәм $k_2 = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$.

(c) $E \longrightarrow 0$ шегинде система жүдә аз байланысқан ҳалларға ийе болады; бул шекте (6.319)-теңлеме мынадай теңлемеге айланады:

$$\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}\cot\left(\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}a\right)=0. \tag{6.320}$$

Бул теңликтиң орынланыўы ушын $\sqrt{2\mu V_0/\hbar^2}=(2n+1)\pi/2$ теңлигиниң орынланыўы керек. Буннан мынадай аңлатпа алынады:

$$V_{0n}=\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}(2n+1)^2, \qquad n=0,1,2,\ldots \tag{6.321}$$

Солай етип, V_0 диң бир, еки ҳәм үш байланысқан ҳалға сәйкес келетуғын минималлық мәниси сәйкес төмендегилерге тең болады:

$$V_{00}=\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}, V_{01}=\frac{9\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}, V_{02}=\frac{25\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}. \tag{6.322}$$

(d) $\alpha=ak_1$, $\beta=ak_2$ белгилеўлерин пайдаланып, биз, бир тәрептен, мынаны жаза аламыз:

$$\alpha^2+\beta^2=\frac{2\mu a^2V_0}{\hbar^2}. \tag{6.323}$$

Буннан кейин, екинши тәрептен, (6.318)-трансцендент теңлемени

$$-\alpha\cot\alpha=\beta \tag{6.324}$$

түрине алып келемиз. Бул теңлемелерде $k_1=\sqrt{\frac{2\mu(V_0+E)}{\hbar^2}}$ ҳәм $k_2=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$.

6.7-сүўретте көринип турғанындай, $\frac{\pi}{2}<\alpha<\frac{3\pi}{2}$ областында $E\longrightarrow 0$ шегинде мынадай жағдайлардың орын алатуғынлығын көриўге болады:

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}<V_0<\frac{9\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2} \tag{6.325}$$

теңсизлиги орын алған жағдайда тек бир байланысқан ҳал орын алады, себеби шеңбер $-\alpha\cot\alpha$ менен тек бир орында кесилиседи.

Тап сол сыяқлы, $3\pi/2<\alpha<5\pi/2$ ямаса

$$\frac{9\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}<V_0<\frac{25\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2} \tag{6.326}$$

теңсизлиги орын алғанда еки байланысқан ҳал жүзеге келеди.

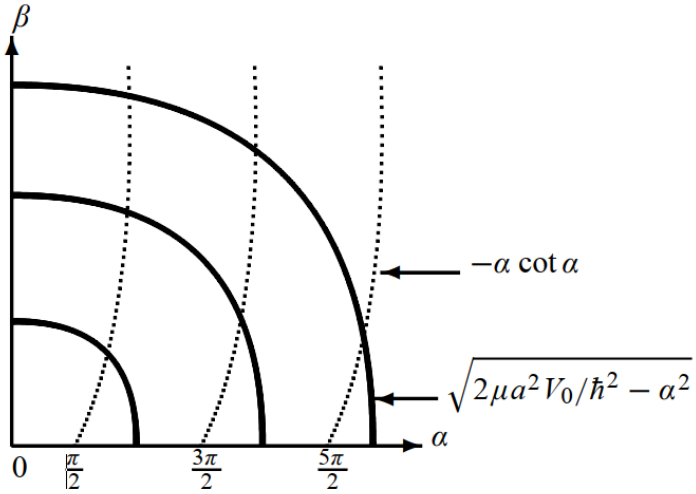
$5\pi/2<\alpha<7\pi/2$ ямаса

$$\frac{25\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}<V_0<\frac{49\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2} \tag{6.327}$$

теңсизлиги орын алғанда үш байланысқан ҳал жүзеге келеди.

(e) $m_pc^2\simeq 938$ МэВ ҳәм $m_nc^2\simeq 940$ МэВ болғанлықтан, дейтронның келтирилген массасы $\mu c^2=\frac{(m_pc^2)(m_nc^2)}{m_pc^2+m_nc^2}\simeq 469{,}5$ МэВ шамасына тең. $a=2\cdot 10^{-5}$ м болғанлықтан, бир байланысқан ҳалға сәйкес келетуғын V_0 диң минималлық мәниси

$$V_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}=\frac{\pi^2(\hbar c)^2}{8(\mu c)^2a^2}=\frac{\pi^2(197\ \text{MeВ фм})^2}{8(469{,}5\ \text{МэВ})(2\cdot 10^{-15}\ \text{м})^2}\simeq 25{,}5\ \text{МэВ}. \tag{6.328}$$



6.7-сүўрет. Сфералық туўры мүйешли шуқырдың шекли потенциалы ушын графикалық шешимлер: шешимлер $\alpha^2+\beta^2=\frac{2\mu a^2V_0}{\hbar^2}$ иймеклиги менен $-\alpha\cot\alpha$ иймеклигиниң кесилисиў ноқатлары бойынша бериледи: бул аңлатпаларда $\alpha^2 = 2\mu a^2(V_0+E)/\hbar^2$ ҳәм $\beta^2=-2\mu a^2E/\hbar^2$, $-V_0<E<0$.

6.12-мәселе.

Водород атомындағы $|nl\rangle$ стационар ҳал ушын $\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle$ аңлатпасын есаплаңыз.

Шешими:

$\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle$ аңлатпасын есаплаў ушын биз водородтың гамильтонианы терминлериндеги $\hat{P}^4$ шамасының аңлатпасын қараўымыз керек. $\hat{H}=\frac{\hat{P}^2}{2m_e}-\frac{e^2}{r}$ теңлиги орынлы болғанлықтан, биз $\hat{P}^2=2m_e(\hat{H}+e^2/r)$ теңлигине ийе боламыз. Демек

$$\begin{aligned}\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle &= (2m_e)^2\left\langle nl\middle|\left(\hat{H}+\frac{e^2}{r}\right)^2\middle|nl\right\rangle = \\ &= (2m_e)^2\left\langle nl\middle|\hat{H}^2+\hat{H}\frac{e^2}{r}+\frac{e^2}{r}\hat{H}+\frac{e^4}{r^2}\middle|nl\right\rangle = \\ &= (2m_e)^2\left[E_n^2+E_n\left\langle nl\middle|\frac{e^2}{r}\middle|nl\right\rangle+\left\langle nl\middle|\frac{e^2}{r}\middle|nl\right\rangle E_n+\left\langle nl\middle|\frac{e^4}{r^2}\middle|nl\right\rangle\right].\end{aligned} \tag{6.329}$$

Биз бул теңликти жазғанымызда $|nl\rangle$ диң $\hat{H}$ тың меншикли мәниси екенлигин пайдаландық: $\hat{H}|nl\rangle=E_n|nl\rangle$. $E_n=-e^2/(2a_0n^2)=-13{,}6$ эВ$/n^2$. $1/r$ ҳәм $1/r^2$ математикалық күтиўлер (6.182) ҳәм (6.183) арқалы бериледи. $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle = 1/(n^2a_0)$, $\langle nl|r^{-1}|nl\rangle=2/[n^3(2l+1)a_0^3]$. Усының салдарынан биз (6.329)-аңлатпаны былайынша көширип жаза аламыз:

$$\begin{aligned}\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle &= (2m_e)^2\left[E_n^2+2E_n\left\langle nl\middle|\frac{e^2}{r}\middle|nl\right\rangle+\left\langle nl\middle|\frac{e^4}{r^2}\middle|nl\right\rangle\right] = \\ &= (2m_eE_n)^2\left[1+\frac{2e^2}{E_n}\frac{1}{n^2a_0}+\frac{e^4}{E_n^2}\frac{1}{n^3(2l+1)a_0^2}\right] = \\ &= (2m_eE_n)^2\left[1-4+\frac{8n}{2l+1}\right].\end{aligned} \tag{6.330}$$

Соңғы қатнасты келтирип шығарғанымызда биз $E_n = -e^2/(2a_0n^2)$ формуласын пайдаландық. Енди $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2)$ ден баслап E_n энергиясы $E_n = -e^2/(2a_0n^2) = -m_e e^4/(2\hbar^2 n^2)$ шамасына тең болады, оны (6.330)-аңлатпаға қойсақ мынаған алып келеди:

$$\langle nl|\hat{P}^4|nl\rangle = \frac{m_e^4 e^8}{\hbar^4 n^4}\left[\frac{8n}{2l+1} - 3\right]. \tag{6.331}$$