**Өзбекстан Республикасы Жоқары билим, илим ҳәм инновациялар министрлиги**

**Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик университети**

**Б.А.Абдикамалов, М.Б.Тагаев, Р.М.Хожаназарова**

**Квантлық механика**

**Жоқары оқыў орынларының физика қәнигелиги жоқары курс студентлери менен магистрантлары ушын арналған сабақлық**

**Нөкис 2023**

Авторлар:

Бахтияр Абдиразакович Абдикамалов, Бeрдақ атындағы Қарақалпақ мәмлeкeтлик унивeрситeтиниң физика кафeдрасының профeссоры, физика-матeматика илимлeриниң кандидаты, профeссор.

Марат Баймуратович Тагаeв, Бeрдақ атындағы Қарақалпақ мәмлeкeтлик унивeрситeтиниң физика кафeдрасының баслығы, тeхника илимлeриниң докторы, профeссор.

Райгул Муратбаeвна Хожаназарова, Бeрдақ атындағы Қарақалпақ мәмлeкeтлик унивeрситeтиниң физика кафeдрасының доценти, педагогика бойынша философия докторы.

Сабақлық мәмлекетлик университетлерде өтилетуғын "Квантлық механика" курсының оқыў бағдарламасына сәйкес дүзилген ҳәм онда релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарғы баплары, солар менен бир қатарда релятивистлик квантлық механиканың басланғыш элементлери (Клейн-Гордон теңлемеси, Дирак теңлемеси, оларды келтирип шығарыў менен алынатуғын тийкарғы физикалық нәтийжелер) толық баянланған. Квантлық механиканың тийкарғы түсиниклерине, математикалық формализмине, бир өлшемли, үш өлшемли мәселелерине, импульс моменти теориясына, басқа да принциплерине тийкарғы дыққат аўдарылған. Бөлекшелердиң спини менен бирдей бөлекшелердиң бирдейлиги принципи, олардан келип шығатуғын мағлыўматлар кең түрде баянланған. Көпшилик баплардың ақырында үйренилген физикалық нызамлықларды беккемлеў мақсетинде кең көлемдеги мәселелер ҳәм олардың шешимлери берилген. Сабақлықтың мақсети классикалық физика менен жоқары математиканы үйренген жоқары курс студентлери менен магистрантлар ушын квантлық механиканың тийкарғы принциплерин үйрениўге беккем тийкар жаратып бериў болып табылады.

Сабақлық 10 баптан ҳәм 82 параграфтан турады.

Пикир билдириўшилeр:

Б.Дәўлетмуратов, Әжинияз атындағы Нөкис мәмлeкeтлик пeдагогикалық институтының физиканы оқытыў мeтодикасы кафeдрасының баслығы, техника илимлeриниң докторы.

Б.Қунназаров, Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик университетиниң физика кафедрасының доценти, физика-математика илимлериниң кандидаты.

Оқыў қолланбасы Бeрдақ атындағы Қарақалпақ мәмлeкeтлик унивeрситeтиниң кeңeсиниң 2023-жыл -сентябрь күнги мәжилисиндe қаралды ҳәм мақулланды ( -санлы протокол).

**Мазмуны**

|  |  |
| --- | --- |
| I бап. Квантлық механикаға кирисиў. |  |
| § 1. Квантлық механиканың тийкарғы өзгешеликлери ҳәм тарийхый мағлыўматлар. |  |
| § 2. Фотоэлектрлик эффект |  |
| § 3. Комптон эффекти. |  |
| § 4. Атомлық спектроскопия ҳәм Резерфорд атомы. |  |
| § 5. Атомлардағы энергия қәддилериниң квантланыўы. |  |
| § 6. Квантланыўға басқа да мысаллар: кеңисликтеги квантланыў. |  |
| § 7. Сәйкеслик принципи ҳәм ески квантлық теория. Классикалық корпускулалық теорияның жеткиликсизлиги. |  |
| § 8. Классикалық механиканың теңлемелериниң лагранжлық ҳәм гамильтонлық формалары. |  |
| § 9. Квантлық механика менен оптика. |  |
| § 10. Бор-Зоммерфельдиң квантланыў қағыйдалары. |  |
| § 11. Анықсызлық принципи. |  |
| § 12. Суперпозиция принципи. |  |
| § 13. Операторлар. |  |
| § 14. Квантлық системалардың ҳалларының ҳәр қыйлы көринислери. |  |
| § 15. Орташа мәнислер. |  |
| § 16. Операторларды қосыў ҳәм көбейтиў. |  |
| II Бап. Энергия менен импульс. |  |
| § 17. Гамильтониан. |  |
| § 18. Операторларды ўақыт бойынша дифференциаллаў. |  |
| § 19. Стационар ҳаллар. |  |
| § 20. Импульс. |  |
| § 21. Гейзенбергтиң анықсызлық қатнаслары. |  |
| § 22. Пуассон қаўсырмалары. |  |
| § 23. Симметрия ҳәм сақланыў нызамлары. |  |
| III бап. Шрёдингер теңлемеси. |  |
| § 24. Шредингер теңлемеси. |  |
| § 25. Шрёдингер теңлемесиниң тийкарғы қәсийетлери. |  |
| § 26. Ағыстың тығызлығы. |  |
| § 27. Вариациялық принцип. |  |
| IV бап. Квантлық механиканың бир өлшемли мәселелери. |  |
| § 28. Бир өлшемли қозғалыстың улыўмалық қәсийетлери. |  |
| § 29. Квазиклассикалық жағдай. |  |
| § 30. Туўры мүйешли потенциаллар |  |
| § 31. Потенциал текше. |  |
| § 32. Потенциал барьер ҳәм шуқыр. |  |
| § 33. Туннеллик эффект. |  |
| § 34. Шексиз туўры мүйешли потенциал шуқыр. |  |
| § 35. Тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциал шуқыр. |  |
| § 36. Гармоникалық осциллятор |  |
| § 37. Металдан электронлардың салқын эмиссиясы. |  |
| § 38. α-ыдыраў теориясы. |  |
| V бап. Импульс моменти. |  |
| § 39. Импульс моменти. |  |
| § 40. Импульс моментиниң меншикли мәнислери. |  |
| § 41. Импульс моментиниң меншикли функциялары. |  |
| § 42. Моментлерди қосыў. |  |
| VI бап. Үш өлшемли мәселелер. |  |
| § 43. Үш өлшемли мәселелерге улыўмалық кирисиў. |  |
| § 44. Еркин бөлекше. |  |
| § 45. Потенциал қуты. |  |
| § 46. Гармоникалық осциллятор. |  |
| § 47. Орайлық потенциал. |  |
| § 48. Сфералық координаталардағы еркин бөлекше. |  |
| § 49. Сфералық шуқырдың потенциалы. |  |
| § 50. Изотроп гармоникалық осциллятор. |  |
| § 51. Водород атомы. |  |
| § 52. Массалар орайының қозғалысын айырып алыў. |  |
| § 53. Водород атомы ушын радиаллық теңлемени шешиў. |  |
| VII бап. Спин. |  |
| § 54. Спин. |  |
| § 55. Спин операторы. |  |
| § 56. Спинорлар. |  |
| § 57. Электронлардың поляризациясы. |  |
| § 58. Қозғалыс муғдарының толық моменти. |  |
| § 59. Паули теңлемеси. |  |
| VIII бап. Бөлекшелердиң бирдейлиги. Бөлекшелердиң бирдейлиги принципи. |  |
| § 60. Бөлекшелердиң бирдейлиги, Бөлекшелердиң бирдейлиги принципи. Симметриялы ҳәм антисимметриялы ҳаллар. |  |
| § 61. Фермионлар менен бозонлардың толқын функциялары. Паули принципи. |  |
| § 62. Спини 1/2 ге тең болған еки бөлекшеден туратуғын системаның толқын функциясы. |  |
| § 63. Алмасыў тәсирлесиўи. Химиялық және ядролық өз-ара тәсирлесиўлер. |  |
| IX-бап. Атом. |  |
| § 64. Энергиялардың атомлық қәддилери. |  |
| § 65. Атомдағы электронлардың ҳаллары. |  |
| § 66. Энергияның водород тәризли қәддилери. |  |
| § 67. Қозғалаңлар теориясының элементлери. |  |
| § 68. Гелий атомы. |  |
| § 69. Дейтронның элементар теориясы. |  |
| X бап. Релятивистлик квантлық механиканың элементлери. |  |
| § 70. Скаляр релятивистлик Клейн-Гордон теңлемеси. |  |
| § 71. Дирак теңлемесиниң структурасы ҳәм оның физикалық мәниси. |  |
| § 72. Дирак теңлемеси ҳәм майданның квантлық теориясы. |  |
| § 73. Толқын функциясының тәбияты. |  |
| § 74. Электронның релятивистлик теориясы. |  |
| § 75. Электронлар ушын толқын теңлемеси. |  |
| § 76. Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлық. |  |
| § 77. Еркин электронның қозғалысы. |  |
| § 78. Спинниң келип шығыўы. |  |
| § 79. Сфералық координаталарға өтиў. |  |
| § 80. Водородтың энергиясының қәддилериниң жуқа структурасы. |  |
| § 81. Дирак теңлемесиниң водород атомы ушын шешимлерин демонстрациялаў мәселелери. |  |
| § 82. Позитронлар теориясы. |  |
| Пайдаланылған әдебиятлар дизими. |  |

**I бап. Квантлық механикаға кирисиў**

**§ 1. Квантлық механиканың тийкарғы өзгешеликлери ҳәм тарийхый мағлыўматлар**

Квантлық механика пайда болмастан бурын қәлиплескен көп санлы теориялардың жыйнағы болған классикалық механика әдеттеги масштаблардағы тәбияттың көплеген нызамлықларын түсиндиреди. Ал, квантлық механика болса жүдә киши масштаблардағы тәбияттың нызамларын түсиндиреди. Классикалық физиканың теорияларының көпшилигин квантлық механиканың жәрдеминде үлкен макроскопиялық масштабларда пайдаланыў мүмкин болған жақынласыў түринде келтирип шығарыў мүмкин.

Квантлық механика классикалық механикадан үлкен айырмаға ийе. Атап айтқанда:

▪Квантланыў: квантлық механикада байланысқан ҳаллар ушын энергия, импульс, мүйешлик момент ҳәм басқа да шамалар дискрет мәнислерге ийе болады.

▪Корпускулалық-толқынлық дуализм: объектлер бөлекшелердиң де, толқынлардың да характеристикаларына ийе болады.

▪Анықсызлық принципи: бөлекшениң орны менен импульсиниң бар ўақыттағы мәнислерин жоқары дәлликте анықлаў мүмкин емес.

▪Сәйкеслик принципи: үлкен квант санларының шеклеринде квантлық механиканың болжаўлары классикалық механиканың болжаўларына сәйкес келеди.

Бул сабақлық квантлық механиканың тийкарларын үйрениў ушын арналған болып, оны таярлағанда авторлар квантлық механиканың математикалық формализмин, тийкарғы принциплери менен нызамлықларды, релятивистлик квантлық механиканың тийкарларын баянлаўға тийкарғы итибарын қаратты. Сабақлық өзиниң ишине квантлық механиканың атомлық физикада, ядролық физикада ҳәм конденсирленген физикада базы бир қолланылыўын да алады.

Квантлық механика XX әсирдиң 20-жыллары сол ўақытларға шекем топланып келген эксперименталлық мағлыўматларды таллаўдың нәтийжесинде пайда болды. Сонлықтан, ҳәзирги ўақытлардағы барлық тәбияттаныў илимлериниң фундаменталлық тийкары болған квантлық механиканы үйрениў ушын дәслеп тәбийий кирисиў сыпатында тийкарғы эксперименталлық фактлерди (фотоэлектрлик эффект, Комптон эффекти, атомлардағы энергия қәддилериниң квантланыўы, кеңисликтеги квантланыў ҳәм басқалар) қарап шығыў менен оларды интерпретациялаў үлкен әҳмийетке ийе. Бул материаллар "ески квантлық механика" атамасын нәзерде тутқан ҳалда сабақлықтың басланғыш бөлиминде қарап шығылады. Буннан кейин квантлық механиканың физикалық тийкарларын таллаў басланады. Сабақлықта квантлық механиканың математикалық аппараты, энергия менен импульс, Шредингер теңлемеси, оның шешимлериниң қәсийетлери, квантлық механиканың квазиклассикалық жақынласыўдағы бир ҳәм үш өлшемли мәселелери ҳ.б. талланған.

Классикалық физиканың көз-қараслардың қасында бир қатар квантлық көз-қараслар ақылға пүткиллей муўапық келмейтуғындай болып көринеди. Мысалы, атомдағы ямаса басқа да квантлық системалардағы электронның траекториясы ҳаққындағы пүткиллей гәп етиўдиң кереги жоқ. Бул жағдай қалайынша жүзеге келеди ҳәм оны қалайынша түсиниў керек деген сораў пайда болады. Бирақ, әлбетте, бундай сораўды қойыўдың кереги жоқ ҳәм сонлықтан оған жуўап бериў талап етилмейди. Себеби қозғалыстың жаңа нызамлары бойынша атомдағы электронның траекториясы ҳаққындағы сораў өзиниң мәнисин биротала жоғалтады. Нәтийжеде бундай сораўларға жуўап бериўдиң кереги болмай қалады.

Бул жағдайды илимниң тарийхындағы мысал менен түсиндириўге болады. Денелерге тәсир ететуғын күшлердиң мәнислерин нолге тең болған жағдайларда да, олар қозғалысын даўам ете береди. Соның менен бирге олар туўры сызықлы траектория бойынша қозғалыўға тырысады. Әййемги ойшыллар оның себеплерин түсиниўге тырысты. Арадан шама менен 2000 жыл өткеннен кейин бул жағдайда бундай сораўды қойыўдың да, оған жуўап бериўдиң керегиниң жоқ екенлиги де белгили болды. Себеби гәп механикалық қозғалыстың үш нызамының бири болып табылады. Тап сол сыяқлы, квантлық механиканың көп санлы көз-қарасларының түсиниксиз болып көриниўи иллюзиялық характерге ийе ҳәм олардың шын мәнисинде макродүньяның объектлери болған бизлер ушын үйреншикли емес екенлигин аңғартады. Тек микродүньяның нызамлықларын билиў барысында ғана бизге үйреншикли болмаған бул түсиниклерди айқын түрде меңгериў мүмкиншилигине ийе боламыз.

Бул сабақлықтың мақсети классикалық физика менен жоқары математиканы үйренген жоқары курс студентлери менен магистрантлар ушын квантлық механиканың тийкарғы принциплерин үйрениўге беккем тийкар жаратып бериў болып табылады.

Биз дәслеп классикалық физиканы анықлаған ҳәм квантлық физиканың пайда болыўына алып келген тийкарғы физикалық идеялар менен эксперименталлық мағлыўматларды қараймыз. Квантлық механиканың туўылыўы классикалық физиканың XIX әсирдиң ақыры менен XX әсирдиң басында ашылған бир қатар физикалық қубылысларды түсиндире алмаўының салдарынан жүзеге келди.

Тарийхый мағлыўматлар. XIX әсирдиң ақырында физика илими тийкарынан классикалық механикадан, электромагнетизм теориясынан ҳәм термодинамикадан турған еди. Усы ўақытлары Максвелл дөреткен электромагнетизм теориясы физиканың бир бири менен пүткиллей байланыслы еместей болып көринетуғын тараўлары болған электр, магнетизм ҳәм оптиканы бирлестирди. Классикалық механика материаллық денелердиң динамикасын анықлаў ушын пайдаланылды, ал Максвелдиң электродинамикасы болса нурланыўдың тийкарларын үйрениў ушын жеткиликли дәрежеде тийкарды тәмийинледи. Материя менен нурланыў сәйкес бөлекшелер ҳәм толқынлар түсиниклери бойынша тәрийипленди. Затлар менен нурланыў арасындағы өз-ара тәсирлесиўлер Лоренц күши менен термодинамиканың шеклеринде жеткиликли дәрежеде жақсы түсиндирилди. Классикалық физиканың оғада уллы табыслары болған классикалық механика, электромагнетизмниң классикалық теориясы ҳәм термодинамика адамларды тәбият толық тәрийипленди деп исендириўге мәжбүрледи. Белгили болған физикалық қубыслардың барлығы зат пенен нурланыўдың улыўмалық теорияларының шеклеринде түсиндирилетуғындай болып көринди.

Бирақ, еки әсирдиң арасында дурыслығына ҳеш қандай гүмән жоқ болып көринген классикалық физиканың бир қатар мәселелерди шешиўде әззи екенлигин айқын түрде ашып берген төмендегидей еки жағдай жүзеге келди:

1. 1905-жылы А.Эйнштейн тәрепинен салыстырмалық теориясының дөретилиўи. Бул теория жақтылықтың вакуумдағы тезлигине жақын болған жоқары тезликлерде Ньютон механикасының дурыс болмайтуғынлығын айқын түрде көрсетти.

2. Микроскопиялық область: атомлық ҳәм субатомлық структураларды изертлеўге мүмкиншилик беретуғын жаңа эксперименталлық усыллардың ислеп шығылыўы менен классикалық физиканың жақында ғана ашылған бир неше қубылысты (жыллылық нурланыўы нызамлары, фотоэффект, атомлардың орнықлы екенлиги, атомлық спектроскопия ҳ.т.б.) түсиндире алмайтуғынлығы белгили болды.

Нәтийжеде классикалық физиканың тийкарланыўының микроскопиялық қәддиде тоқтайтуғынлығы айқын болды ҳәм атомлар менен молекулалардың структурасы менен жақтылықтың олар менен қалайынша тәсирлесетуғынлығын тәрийиплейтуғын физиканың жаңа тараўының дөретилиўиниң зәрүр екенлиги келип шықты.

Классикалық физиканың бир қатар микроскопиялық қубылысларда түсиндире алмаўы оған жат болған пүткиллей жаңа көз-қараслардың пайда болыўына алып келди.

Жаңа физиканың пайда болыўындағы биринши алға илгерилеў 1900-жылы жүзеге келди. Усы жылы Макс Планк жыллылық нурланыўы қубылысын түсиндириўге тырысыўларының барысында энергияның кванты концепциясын усынды. Ол абсолют қара денениң нурланыўының интенсивлигиниң нурланыўдың жийилигине ғәрезлигин анықлаў ушын нурланыў менен оны қоршаған орталықтың арасындағы өз-ара тәсирлесиўдиң дискрет ямаса квантланған муғдарда энергия алмасыўының салдарынан жүзеге келеди деп есаплаў керек деген жуўмаққа келди. Басқа сөз бенен айтқанда М.Планк бойынша денелер энергияны дискрет порциялар түринде нурландырады ҳәм жутады. Бул порциялардың шамасы нурландырылған ямаса жутылған электромагнит толқынының жийилиги ге туўры пропорционал ҳәм пүтин сан еселенген шамасына тең ( арқалы фундаменталлық турақлы болған Планк турақлысы белгиленген). шамасын ол энергия кванты деп атады.

Абсолют қара денениң нурланыўын дәл түсиндирген Планк идеясы жаңаша ойланыўға ҳәм оғада көп санлы жаңа илимий ашылыўларға алып келди. Олардың барлығы сол ўақытлардағы ең әҳмийетли болған фундаменталлық машқалалардың шешилиўин тәмийинледи.

1905-жылы Эйнштейн Планктың концепциясын күшли беккемледи. Фотоэлектрлик эффектти түсиндириўге тырысыўдың барысында Эйнштейн Планктың электромагнит толқынлардың квантланыўы ҳаққындағы идеясының жақтылық ушын да орынланыыўының керек екенлигин көрсетти. Ол Планк бойынша ой жуўыртып, жақтылықтың өзи фотонлар деп аталатуғын энергияның дискрет бирликлеринен турады деп болжады ("фотон" термини илимге 1926-жылы химик Гилберт Льюис тәрепинен киргизилди). Ҳәр бир фотон энергиясына ийе болады ( - жақтылықтың жийилиги). Фотон концепциясының киргизилиўи Эйнштейнге биринши рет 1887-жылы экспериментте Герц тәрепинен бақланған фотоэффектке жүдә әпиўайы болған дәл түсиникти бериўге мүмкиншилик берди.

Буннан кейинги алға илгерилеў 1913-жылы Нильс Бор тәрепинен жүзеге келтирилди. 1909-1911 жыллары орынланған экспериментлердиң нәтийжесинде Резерфорд тәрепинен атом ядросының ашылыўы, Планк моделиндеги квантлық концепция ҳәм Эйнштейнниң фотонларын бирлестириўдиң тийкарында Бор 1913-водород атомының моделин усынды[[1]](#footnote-1). Бул жумысында Бор атомларды тек дискрет энергиялық ҳалларда тура алады ҳәм атомлардың нурлар менен тәсирлесиўи, яғный нурланыўдың шығарылыўы менен жутылыўы, тек шамасындағы дискрет муғдардағы энергияның алмасыўы менен жүзеге келеди деп жуўмақ шығарды. Себеби энергияның нурланыўы менен жутылыўы атомның ҳәр қыйлы энергиялық ҳалларының арасындағы өтиўлердиң салдарынан жүзеге келеди. Бул жумыс шешилмеген атомның орнықлығы менен атомлық спектроскопия сыяқлы бир неше машқалаларды қанаатландырарлық дәрежеде түсиндире алды.

1923-жылы Комптон жақтылықтың корпускулалық аспектин түсиндириўге мүмкиншилик беретуғын және бир исенимли тастыйықлаўды қолға киргизди. Рентген нурларын электронлар менен шашыратыўдың барысында ол рентген фотонларының шамасына тең импульске ийе болатуғынлығын тастыйықлады ( арқалы рентген нурының жийилиги белгиленген).

Планктың, Эйнштейнниң, Бордың ҳәм Комптонның тырысыўларының нәтийжесинде қолға киргизилген алға илгерилеўлердиң сериясы толқынлардың корпускулалық аспектиниң эксперименталлық тастыйықланыўына алып келди. Бул микроскопиялық масштабларда толқынлардың бөлекшелердиң қәсийетиндей қәсийетлерге ийе болатуғынлығы ҳаққындағы концепцияның пайда болыўын тәмийинледи. Бул масштабларда классикалық механика тек санлық жақтан емес, ал сапалық және концептуаллық жақтан да сәтсизликке ушырайды. Оның үстине, 1923-жылы де Бройль классикалық физика менен пүткиллей үйлеспейтуғын және бир қудиретли концепцияны усынды. Ол тек нурланыўдың бөлекшелердиң қәсийетине ийе болып ғана қоймайтуғынлығы менен материаллық бөлекшелердиң өзлериниң де толқынлық қәсийетке ийе болатуғынлығын постулатлады. Бул концепциянын дурыс екенлиги 1927-жылы Дэвиссон менен Джермер тәрепинен 1927-жылы экспериментлерде тастыйықланды. Олар тәжирийбелеринде интерференциялық сүўретлердиң электронлар сыяқлы бөлекшелер тәрепинен де пайда етилетуғынлығын көрсетти.

Бор тәрепинен дөретилген атомның модели (дурысырағы водород ҳәм водород тәризли атомлардың модели) эксперименталлық спектроскопияға сәйкес келетуғын нәтийжелерди беретуғын болса да, онда теорияның элементлери болмағанлықтан сынға алынды. Планк тәрепинен 1900-жылы киргизилген "квантланыў" схемасы сыяқлы, Бор тәрепинен усынылған постулатлар менен жағдайлар жеткиликли дәрежеде ықтыярлы ҳәм теорияның биринши принциплеринен келип шығарылған жоқ еди. Нәтийжеде Планктың идеялары менен Бор постулатларының ықтыярлы характери ҳәм оларды қарама-қарсылыққа ийе болмаған теорияның контекстине киргизиў зәрүрлиги Гейзенберг пенен Шрёдингерди усы жаңа идеялардың тийкарында жататуғын теориялық тийкарды излеўге умтылдырды. 1925-жылға келгенде олардың тырысыўлары нәтийжелерин бере баслады: олар ҳәр қыйлы эксперименталлық мағлыўматларды, Бор постулатларын шеберлик пенен жетилискен теория болған квантлық механикаға бирлестирди. Сол ўақытлары белгили болған эксперименталлық мағлыўматларды түсиндирип ғана қоймай, олар дөреткен теория таң қаларлықтай дәрежедеги болжаў айтқандай қәбилетликлерге де ийе болып шықты. Нәтийжеде микрофизикалық дүньяның көп санлы қубылыслары изертленди ҳәм түсиндирилди.

Бул жаңа теория 1900-1925 жыллары ҳүким сүрген, Планк пенен Бордың идеялары баслы орынды ийелеген ҳәм ески квантлық механика деп аталатуғын илимниң 25 жыллық дәўириниң ең ақырын белгиледи.

Квантлық механиканың тарийхый жақтан бир биринен ғәрезсиз қәлиплескен еки формулировкасын атап өтиўге болады. "Матрицалық механика" деп аталатуғын олардың бириншиси бақланатуғын спектраллық сызықлардың тийкарында атомлық структураны тәрийиплеў ушын Гейзенберг тәрепинен ислеп шығылды. Планктың толқынлардың квантланыўы ҳәм Бор тәрепинен дөретилген водород атомының моделинен илҳәмланған Гейзенберг өзиниң теориясын микрофизикалық системалар арасындағы энергиялар алмасыўының бирден бир мүмкин болған мәнислери дискрет, квантлар түринде деген көз-қараста дөретти. Энергия, орын (координата), импульс, мүйешлик момент сыяқлы динамикалық шамаларды матрицалар терминлеринде аңлатып, ол микроскопиялық системалардың динамикасын тәрийиплейтуғын меншикли мәнислерди алыў мәселесин алды. Бундай жағдайда гамильтон матрицасының диагонализациясы системаның энергия спектрин ҳәм ҳал векторларын анықлайды. Атомлар тәрепинен шығарылатуғын ҳәм жутылатуғын жақтылықтың дискрет квантларын есапқа алғанда матрицалық механика жүдә табыслы илимге айланды.

Толқынлық механика деп аталатуғын екинши формулировка 1926-жылы Шрёдингер тәрепинен усынылды. Ол де Бройль постулатының улыўмаластырылыўы болып табылады. Матрицалық механикаға салыстырғанда интуитивлирек болып табылатуғын бул усыл микроскопиялық системаның динамикасын Шрёдингер теңлемеси деп аталатуғын толқын теңлемесиниң жәрдеминде тәрийиплейди. Гейзенбергтиң меншикли мәнислерди алыў бойынша мәселесиниң орнына Шрёдингер дифференциаллық теңлемени алды. Бул теңлемени шешиў қарап атырылған системаның толқын функциясы менен энергия спектрин береди. 1927-жылы Макс Борн толқынлық механиканың итималлықтың интерпретациясын усынды: ол Шрёдингер теңлемесиниң шешимлери болған толқын функцияларының модуллериниң квадратын итималлықтың тығызлығы деп интерпретациялады.

Биринши рет қарағанда Шрёдингердиң толқынлық формулировкасы менен Гейзенбергтиң матрицалық усылы ҳәр қыйлы формулировкадай болып көринетуғын болса да, олардың екеўи де эквивалент болып табылады.

Буннан кейин Дирак квантлық механиканың бир қанша улыўма болған формулировкасын усынды. Бул формулировка kets (ҳаллар векторлары), bras ҳәм операторлар сыяқлы абстракт объектлер менен ис алып барады. Үзликсиз тийкардағы Дирак формализми болған координата менен импульс көринислери бизди Шрёдингердиң толқынлық механикасына қайтарып алып келеди. Ал Гейзенбергтиң матрицалық формулировкасын алыў ушын Дирак формализмин дискрет базисте көринис керек. Бундай контекстте Шрёдингер менен Гейзенбергтиң жақынласыўлары (усыллары) квантлық механиканың улыўмалық теориясының толқынлық ҳәм матрицалық формулировкалары болып табылады.

Арнаўлы салыстырмалық теориясы менен квантлық механиканы бириктирип, Дирак 1928-жылы электронлардың қозғалысын тәрийиплейтуғын теңлемени келтирип шығарды. Дирак теңлемеси сыпатында белгили болған бул теңлеме электронның антибөлекшеси болған позитронның бар екенлигин болжады. Теория бойынша позитронның массасы электронның массасына тең, ал заряды оң болыўы керек. Позитрон 1932-жылы америкалы физик Карл Дейвид Андерсон тәрепинен космослық нурларды Вильсон камерасының жәрдеминде бақлаўлардың нәтийжесинде ашылды.

Солай етип, квантлық механика материяның динамикасын микроскопиялық масштабларда тәрийиплейтуғын теория болып табылады. Ендиги мәселе усы илимди үйрениўден ибарат.

Микродүньяда табылған нызамлар макроскопиялық объектлер бағынатуғын нызамлардан, яғный классикалық физиканың нызамларынан түпкиликли түрде айрылады. Биз сезиў органларымыз жәрдеминде тек макроскопиялық объектлерди бақлай аламыз. Сонлықтан биз усындай денелердиң көргизбели образын өзимиздиң санамызда сәўлелендире аламыз. Бул образларды микрообъектлерге алып келиў (мысалы электронды микроскопиялық шарик түринде көз алдымызға келтириў) пүткиллей дурыс емес ҳәм ҳәтте зыянлы. Сонлықтан микродүньяның механикасын (квантлық механиканы) үйрениўге кирискенде үйренилетуғын объектлер менен процесслердиң көргизбели образларын дөретиўге тырысыўлардан дәрҳәл бас тартыў керек болады.

"Түсиниў" сөзи күнделикли турмыста өзиңде объекттиң ямаса процесстиң көргизбели образын дөретиў дегенди аңлатады. Бирақ квантлық механика тап сондай етип "түсиниўге" болмайды. Усы жағдайға байланыслы квантлық теорияның дөретиўшилердиң бири Дирак былай деп жазды: "... физика илиминиң бас мәселеси бизди көргизбели картиналар менен тәмийинлеў емес, ал қубылысларды басқаратуғын нызамларды ашыў ҳәм бул нызамларды жаңа нызамларды ашыў ушын қолланыў болып табылады... Атомлық қубылыслар жағдайында әдеттеги мәнисте көргизбели картина бар деп күтиўге болмайды. Бул жерде "көргизбели" деп айтқанда тийкарынан классикалық принциплерде ҳәрекет ететуғын модель түсиниледи. Бирақ "картина" сөзиниң мәнисин кеңейтиўге болады. Буның ушын бул сөзге өз-ара келисиўшилик айқын көринип туратуғындай етип тийкарғы нызамларды қараўдың қәлеген усылын киргизиў керек. Бундай кең мәнисте атомлық қубылыслардың картинасы квантлық теорияның нызамларын үйрениўдиң барысында кем-кемнен ашыла береди".

Квантлық механикаға ҳәр қыйлы математикалық формаларды бериў мүмкин. Туўылыўдан бул илим бир биринен ғәрезсиз Шредингердиң толқын механикасы ҳәм Гейзенбергтиң матрицалық механикасы түринде пайда болды. Кейинирек Дирак квантлық механиканың "векторлық" формасын ислеп шықты. Квантлық механиканың барлық формалары бир бирине эквивалент, олар бирдей физикалық нәтийжелерге алып келеди ҳәм бир бирине түрлендирилиўи мүмкин.

Квантлық механиканың математикалық аппараты өзине тән ҳәм улыўма айтқанда әпиўайы емес. Бул жағдайлар, атап айтқанда көргизбели түрде көз алдыға келтириўдиң мүмкиншилигиниң жоқлығы ҳәм математикалық аппаратының қурамалы екенлиги квантлық механиканы қурамалы илимлердиң қатарына қосады.

**§ 2. Фотоэлектрлик эффект**

Фотоэлектрлик эффектти түсиндириўдеги биринши қәдем А.Эйнштейн тәрепинен 1905-жылы қойылды. Жоқарыда айтылып өтилгениндей, Планк нурланыўдың жутылыў менен шығарылыўының механизми ушын дискретликти киргизген еди. Эйнштейн болса жақтылық нурларының өзин корпускулалардың, яғный фотонлардың ағысы деп болжады. Олардың ҳәр қайсысының энергиясы ге, ал тезлиги ға тең ( - бослықтағы жақтылықтың тезлиги). Буннан кейин ол бул гипотезаны сол ўақытларға шекем түсиндириў мүмкин болмаған қубылысларды түсиндириўге мүмкиншилик беретуғынын көрсетти. Солардың ишинде фотоэлектрлик эффект бар еди.

Фотоэффект ҳаққында гәп еткенде бослықта силтили металды ультрафиолет нурлар менен жақтыландырғанда электронлардың ушып шығыўын түсинеди. Пайда болған электр тоғының интенсивлиги металға түсетуғын нурланыўдың интенсивлигине пропорционал. Бирақ металдың бетинен ушып шыққан электронлардың тезлиги нурланыўдың интенсивлигинен, соның менен бирге нурланыў дерегиниң қандай қашықлықта жайласқанлығынан ғәрезли емес, тезликтиң шамасы нурланыўдың жийилигинен ғәрезли (бул қубылысты Ленард 1902-жылы ашқан еди). Бир секундта ушып шыққан электронлардың саны интенсивликке туўры пропорционал ҳәм, сонлықтан, оптиканың нызамлары бойынша дерекке шекемги қашықлықтың квадратына кери пропорционал.

Эйнштейн фотоэффектти жүдә әпиўайы түрде түсиндирди. Нурландырылғаннан кейин қандай аралықты жүрип өткенинен ғәрезсиз, жақтылық ҳәр қайсысының энергиясы шамасына тең корпускулалардың ағысынан турады. Фотонлардың бири металдың электрон менен ушырасқанда фотон толығы менен жутылады ҳәм электрон энергиясын алады. Металды таслап шыққанда электрон металдағы оның байланыс энергиясы ге тең болған жумысты ислеўи керек. Сонлықтан электронлардың бақланатуғын кинетикалық энергиясы мынаған тең болады

|  |  |
| --- | --- |
|  | () |

Теорияның санлы болжаўлары экспериментте толығы менен тастыйықланады. Теорияның болжаўы бойынша турақлысы нурландырылатуғын металл ушын тән болған базы бир константа болып табылады. Ал турақлысының сан мәнисине келсек, ол абсолют қара денениң спектраллық тарқалыўы нызамындағы турақлысының сан мәнисине тең.

Корпускулалық теорияның табысын нәзерде тутып, классикалық толқынлық теорияның фотоэффектти түсиндире алатуғынлығы ямаса түсиндире алмайтуғынлығын анықлаў керек болады. Шын мәнисинде классикалық теория фотоэффектти түсиндире алмайды деп айтыў қыйын. Ҳақыйқатында да, жақтылық толқыны өзи менен усы толқынның интенсивлигине туўры пропорционал болған энергияның базы бир муғдарын алып жүреди ҳәм бул энергияның бир бөлимин ямаса барлығын металға киргенде жумсаўы мүмкин. Металда топланған энергияның базы бир электронларды концентрацияланыўы мүмкин. Усының нәтийжесинде олар металдан ушып шығыў мүмкиншилигине ийе болады. Мынадай жағдайды көз алдымызға елеслетейик: еле биз билмейтуғын қандай да бир механизмниң тәсиринде электрон энергиясын алмай турып металдан шығып кете алмайтуғын болсын. Усындай түсиндириў менен корпускулярлық теория арасындағы тийкарғы айырма металдағы энергияның үзликсиз топланыўы менен байланыслы. Бундай жағдайда фотоэлектрлик эмиссияның бир заматта емес, ал энергиясының топланыў ушын керек болған ўақыттан кейин жүзеге келиўи керек. Эмиссияның бундай кешигиўин экспериментте регистрациялаўға болады. Усындай схема бойынша тәжирийбелер 1914-жылы Мейер ҳәм Герлах тәрепинен бүркилген металларда өткерилди. Нурланыўдың интенсивлигин ҳәм "шаңның" бөлекшелериниң өлшемлерин билип, олар металдың муғдарындағы энергияны (бундай энергия электронның эмиссиясы ушын керек) жутыўы ушын керек болған ўақыттың шамасын есаплай алды. Олардың өткерген экспериментлеринде бул ўақыттың шамасы бир неше секундқа тең еди. Бирақ, олар барлық жағдайларда да нурланыўдың басланыўы менен электронлардың дәрҳәл шығарылыўын бақлады. Бул мағлыўматлар жақтылықтың толқынлық теориясының, әсиресе классикалық формадағы жақтылықтың толқынлық теориясының фотоэлектрлик эффектти түсиндире алмайтуғынлығын көрсетеди.

**§ 3. Комптон эффекти**

Комптон эффекти фотонлар теориясының басқа тастыйықланыўы болып табылады. Бул эффект рентген нурларының еркин электронларда (ямаса әззи байланысқан электронларда) шашыраўында бақланады (Комптон, 1924-жыл). Шашыраған нурланыўдың толқын узынлығы түсиўши нурланыўдың толқын узынлығынан үлкен. Толқын узынлықларының айырмасы ниң түсиўши толқынның бағыты менен шашыраған толқынды бақлаў бағыты арасындағы мүйеш θ арасындағы ғәрезлик Комптон формуласының жәрдеминде аңлатылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

Бул аңлатпада арқалы электронның массасы белгиленген. шамасының түсиўши нурланыўдың толқын узынлығынан ғәрезсиз екенлигин атап өтемиз. Комптон менен Дебай Комптон эффектиниң түсиўши нурланыўдың фотонының нурландырылатуғын нышананың электронларының бири менен серпимли емес соқлығысыўының нәтийжеси екенлигин көрсетти.

Биз см шамасының атомлардың радиусынан киши, ал ядроның радиусынан үлкен шама екенлигин ҳәм электронның квантлық теориясында әҳмийети жоқары болған шама екенлигин атап өтемиз. Оны электронның комптонлық толқын узынлығы деп атайды.

Комптон эффектин корпускулалық көз-қарастан таллаў ушын фотонның Эйнштейнниң гипотезасынан келип шығатуғын айырым қәсийетлерин атап өтемиз. Фотонлар жақтылықтың тезлиги менен қозғалатуғын болғанлықтан, оның массасы нолге тең. Сонлықтан фотонның импульси менен энергиясы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

аңлатпасы арқалы байланысқан.

|  |  |
| --- | --- |
|  | 2-сүўрет.  Фотонның тыныш турған  электрондағы шашыраўы. |

Тегис монохромат жақтылық толқынын қараймыз. Оны түринде жазады. Бул аңлатпада - толқынның тарқалыў бағытындағы бирлик вектор, λ - толқын узынлығы, - жийилик, . Эйнштейнниң гипотезасына сәйкес бул толқын энергиясы болған фотонлардың ағысы болып табылады. Бул фотонлардың импульслери ға параллель, ал (3)-аңлатпа бойынша оның абсолют мәниси

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул қатнас де Бройль қатнасының дара жағдайы болып табылады (де Бройль қатнасы менен кейинирек танысамыз). Көпшилик жағдайларда цикллық жийилик деп аталатуғын жийилигин ҳәм тегис толқынның толқын векторын пайдаланған қолайлы[[2]](#footnote-2). Бундай жағдайда алынған қатнаслар былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

Комптон эффектиниң корпускулалық теориясы фотон менен электрон соқлығысқандағы энергия менен импульстиң сақланыў нызамларына тийкарланған. Мейли, фотонның басланғыш ҳәм ақырғы импульслери сәйкес ҳәм шамаларына тең болсын. Соқлығысқаннан кейинги электронның қайтарыў импульсин арқалы белгилейик (2-сүўрет). Сақланыў нызамлары былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (I) |

Биз энергия ушын сақланыў нызамын жазғанымызда салыстырмалық теориясындағы энергия, масса ҳәм импульс арасындағы түриндеги қатнастың орын алатуғынлығын есапқа алдық.

Егер басланғыш шәртлер менен шашыраған фотонның бағыты белгили болса, онда (I) теңлемелер соқлығысыўды толық тәрийиплейди. (4)-қатнасты есапқа алып теориялық жақтан тийкарланған болып табылатуғын Комптон формуласын келтирип шығарыў қыйын емес. Комптонның биринши жумысларынан баслап теорияның барлық болжаўлары экспериментлерде тастыйықланды. Қайтарыў электронларының өзлери де бақланды, соның менен бирге олардың энергиясының мүйешинен ғәрезлиги (I)-формуладағы ғәрезликтей болып шықты. Экспериментлер шашыраған фотонлар менен электронлардың бир ўақытта шығарылатуғынлығын, ал менен мүйешлери арасындағы байланыстың теорияның нәтийжелерине дәл сәйкес келетуғынлығын көрсетти.

Биз классикалық болжаўлардың эксперименталлық фактлерге сәйкес келмейтуғынлығын атап өтемиз. Комптон эффектиниң классикалық теориясының бас кемшилиги энергия менен импульс нурландырылған барлық электронларға үзликсиз бериледи деп болжаў менен байланыслы. Ал бақлаўлар болса энергияның дискрет түрде электронлардың айырымларына ғана берилетуғынлығын көрсетеди. Бул қыйыншылықтың тәбияты фотоэлектрлик эффектти бақлағанда ушырасатуғын қыйыншылықтың тәбияты менен бирдей. Улыўма айтқанда, еки қубылыс та бир бирине жүдә усайды: комптонлық шашыраўды жақтылықтың буннан кейинги эмиссиясы менен жүретуғын жутылыўы деп, ал фотоэффектти жақтылықтың тек жутылыўы деп қараў керек.

Егер электронларға импульс пенен энергияның берилиўиниң дискрет характерин есапқа алыў керек болса жақтылықтың квантлары түсинигин киргизиў зәрүр екенлигин атап өтемиз.

Биз енди бир қатар жуўмақларды еске түсиремиз. Микроскопиялық қәддидеги зат пенен жақтылықтың өз-ара тәсирлесиўлерин изертлеў бойынша өткерилген экспериментлерден келип шығатуғын базы бир жуўмақларды келтирип шығарыўға болады.

Үзликсизликтиң тәжирийбелерде бақланатуғын бузылыўын тек жақтылық корпускулалары бар деп түсиндириў мүмкин болса да, жақтылық толқыны түсинигинен бас тартыў ҳаққында гәптиң болыўы мүмкин емес. Бизиң қандай қубылысты үйренип атырғанлығымызға байланыслы жақтылық өзин толқын түринде де, бөлекшелердиң ағысы түринде де көрсетеди. қатнаслары тәрийиплеўдиң бир усылынан екинши усылына өтиўге мүмкиншилик береди. Усы еки усыл арасындағы тығыз байланыстың статистикалық тәбиятқа ийе екенлиги белгили: фотонның базы бир ноқаттағы локализацисы толқынлық оптиканың усыллары тийкарында есапланған жақтылық толқынының интенсивлигине пропорционал. Толқын-корпускула дуализминиң бар болыўы классикалық доктринаға пүткиллей қайшы келеди. Жақтылықты классикалық корпускулалардың ағысы, классикалық толқынлардың суперпозициясы деп қараў тәжирийбелерде алынған мағлыўматларға сәйкес келмейди.

Классикалық көз-қарасларды ревизиялаў зәрүрлигин нәзерде тутқанда классикалық толқынлық теорияның базы бир нәтийжелериниң дурыс екенлигин атап өтиў жүдә әҳмийетли. Биринши гезекте энергияның ҳәм импульстиң сақланыў нызамлары өзлериниң күшин толық сақлайды.

**§ 4. Атомлық спектроскопия ҳәм Резерфорд атомы**

Биз жоқарыда зат пенен нурланыў арасындағы өз-ара тәсирлесиўдеги үзликсизликтиң бузылыўының ашылыўына байланыслы жақтылықтың классикалық теориясындағы терең қыйыншылықлардың айырымлары менен таныстық. Бирақ, пайда болған машқалалар жақтылық теориясы менен ғана шекленип қалған жоқ. Заттың классикалық корпускулалық теориясы да үлкен силкиниўлерге ушырады. Егер биз атомлық спектроскопия менен Резерфорд тәрепинен алынған атомның структурасы арасындағы сәйкесликти излейтуғын болсақ, онда бул силкниўлердиң себеплери айқын болады.

XIX әсирдиң екинши ярымындағы нурланыў спектрин изертлейтуғын әсбап-үскенелердиң жетилистирилиўи спектрдиң қурамында жүдә енсиз спектраллық сызықлардың бар екенлигин көрсетти. Шығарылған ҳәм жутылған нурлардың жийиликлери нурландыратуғын атомлардың сортларына байланыслы екен. Бир сорттағы атомлар ушын шығарыў ҳәм жутыў спектрлери бирдей. Сонлықтан спектри бойынша оны шығарған атомның сортын анықлаўға болады. Спектр атомның қурылысы менен оның нурланыў менен өз-ара тәсирлесиўиниң механизми ҳаққындағы әҳмийетли информацияны береди. Бундай көз-қарастан водород атомы үлкен дыққатқа ылайық. Себеби ол атомлық система ушын ең әпиўайы мысалдың хызметин атқарады (бир протон + бир электрон). Водород атомы ушын бақланатуғын барлық жийиликлер Бальмердиң эмперикалық формуласына бағынады:

Бул формуладағы менен пүтин санлар ҳәм . арқалы базы бир характеристикалық турақлы белгиленген (Ридберг турақлысы).

Қурамалырақ атомлар ушын бундай әпиўайы формулалар жоқ. Бирақ ҳәр сапары биз бақланатуғын ҳәр қыйлы жийиликлердиң арасындағы базы бир корреляцияны таба аламыз: егер бир спектрдиң қурамына еки жийилик киретуғын болса, онда олардың қосындысы ямаса айырмасы тап сол спектрдиң қурамына жеткиликли дәрежеде жийи киреди. Дәлирек айтқанда ҳәр бир атом ушын өзине тән болған санлардың ямаса спектраллық термлердиң базы бир кестесин жазыўға болады. Бундай жағдайда бақланатуғын барлық жийиликлердиң қандайда еки термниң айырмасына тең екенлигине көз жеткериўге болады. Дара жағдай Бальмер формуласы болып табылатуғын бул қағыйда Ридберг-Ритцтиң комбинациялық қағыйдасы деп аталады (1905-жыл).

Термлердиң барлық айырмаларының спектрде бақланатуғын жийиликлер түринде көриниўиниң шәрт емес екенлигин атап өтемиз.

Бул эксперименталлық фактлер Резерфорд атомының классикалық теориясына анық түрде қарама-қарсы келеди. Оның үстине, егер кулонлық тәсирлесиў менен бирге атомлық электронлардың Лоренц теориясы бойынша электромагнит майданы менен тәсирлесиўин есапқа алатуғын болсақ, онда Резерфорд тәрепинен усынылған атомның модели үлкен қыйыншылықларға ушырайды. Өзлериниң орбиталары менен қозғалыўдың барысында электронлардың электромагнт толқынларын нурландырыўы керек. Усының нәтийжесинде олар өзлериниң кинетикалық энергияларын жоғалтады ҳәм ақыр-аяғында атомның ядросына қулаўы шәрт. Ҳәр бир момент нурланыў жийилиги орбита бойынша қозғалыстың жийилигине ямаса олардың жоқарырақ гармоникаларына сәйкес келиўи керек. Бирақ, тормозланғанда орбита бойынша қозғалыстың жийилиги үзликсиз өзгеретуғын болғанлықтан, жийиликлердиң үзликсиз спектрине ийе нурланыўдың орын алыўы күтиледи. Демек, Резерфорд атомының классикалық теориясы атомлардың не себепли орнықлы екенлигин де, сызықлы спектрлердиң бар екенлигин де түсиндире алмайды.

**§ 5. Атомлардағы энергия қәддилериниң квантланыўы**

1913-жылы Нильс Бор водород атомының спектрин түсиндириўдиң улыўмалық схемасын усынды. Ол жақтылық квантларының бар екенлиги ҳаққындағы гипотезаны классикалық түсиниклерге пүткиллей қарама-қарсы келетуғын атомлардың энергия қәддилериниң квантланыўы постулаты менен толықтырды. Бор бойынша атом энергияны үзликсиз нурландыратугын классикалық система емес. Атом энергияның белгили болған дискрет мәнислерине ийе стационар ямаса квантлық ҳалларда ғана тура алады. Атомның энергиясы квантланады деп айтады. Атомның энергиясы тек секирмели түрде өзгереди ҳәм ҳәр бир секириў атомның бир квантлық ҳалдан екинши квантлық ҳалға өтиўине сәйкес келеди.

Бул постулат жақтылық квантын шығарыўдың ямаса жутыўдың механизмин айқынластырады. Энергиясы болған атом энергиясы ге тең фотонды жутыў жолы менен энергиясы үлкен ҳәм шамасына тең ҳалға өте алады (). Бундай жағдайда энергияның сақланыў нызамының бузылмаўы керек, яғный

Тап усындай жоллар менен атом фотонды шығарыў менен энергияның төменирек қәддине өте алады. Бундай жағдайда

шәрти орынлы ().

Атом энергияның ең төменги қәддинде турғанда (яғный "тийкарғы ҳал" деп аталатуғын ҳалда турғанда) нурландыра алмайды: ол орнықлы. Усындай жоллар менен Ридберг-Ритц қағыйдасын қанаатландыратуғын атом ушын тән болған нурланыўдың сызықлы спектри түсиндириледи: спектраллық термлер h көбейтиўшиси дәллигинде атомның квантлық ҳалларының энергияларына тең. Егер водород ушын атомның энергиясы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

формуласы менен анықланады деп есапланатуғын болса, онда Бальмер формуласы келип шығады.

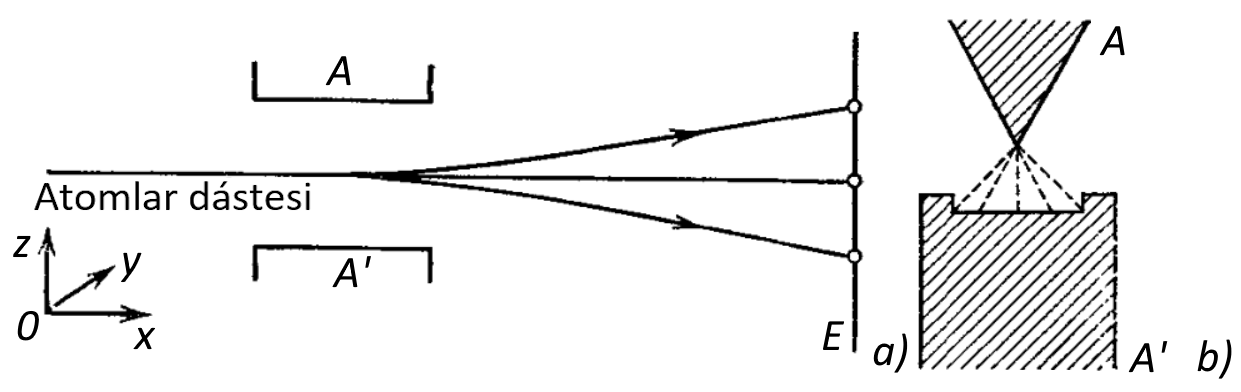
Атомның энергия қәддилериниң квантланатуғынлығын тастыйықлайтуғын басқа мысал Франк ҳәм Герцтиң 1914-жылы өткерилген электронлардың атомлардағы серпимли болмаған шашыраўы болып табылады.

Демек, атомлардың энергия қәддилериниң квантланыўын эксперименталлық факт сыпатында қараў керек. Бул қәсийет тек атомларға ғана тән емес. Көп санлы тәжирийбелер, солардың ишинде спектроскопиялық тәжирийбелер энергия қәддилериниң квантланыўының молекулаларда да ҳәм оннан да қурамалы болған бөлекшелердиң системаларында да орын алатуғынлығын көрсетеди. Бул жағдайда биз заттың классикалық корпускулалық теория менен түсиндириў мүмкин болмаған ең улыўмалық қәсийети менен ис алып барамыз.

**§ 6. Квантланыўға басқа да мысаллар: кеңисликтеги квантланыў**

Квантланыўдың экспериментлерде бақланатуғын екинши типи атомлық системалардың "кеңисликлик" квантланыўы болып табылады. Бундай квантланыўды бақлаў ушын атомды қандай да бир ажыратып алынған бағыты бар сыртқы майданға жайластырыў керек. Бундай жағдайда атомлық системаның ориентациясы ықтыярлы болмайды, ал базы бир дискрет мәнислер менен шекленген. Квантланыўдың усындай типиниң бар екенлигиниң туўрыдан-туўры дәлили 1922-жылы Штерн ҳәм Герлахтың тәжирийбесинде берилди. Бул тәжирийбеде парамагнит атомлардың (ямаса молекулалардың) бир текли емес магнит майданындағы аўысыўлары изертленди. Болжаў бойынша парамагнит атомлар турақлы магнит моментине ийе болады ҳәм оларды қозғалыс моменти ге пропорционал ге тең болған зырылдаўық деп қараў мүмкин:

менен диң бағытлары (ориентациялары) атомның өзиниң ориентациясын анықлайды. магнит майданында қозғалыс муғдарының моменти бағытының дөгерегинде прецессиялық қозғалысқа ушырайды (Лармор прецессиясы). Егер майданы турақлы болса магнит энергиясы та турақлы болады ҳәм атомның масса орайының турған орнынан ғәрезсиз. Демек, бундай жағдайда бир текли туўры сызықлы қозғалысқа ийе боламыз. Егер майданы кеңисликте турақлы болмаса, онда атомның масса орайына күши тәсир етеди, сонлықтан атом өзиниң қозғалысының барысында бир қанша аўысыўға ушырайды. Бул схемасы 5-сүўретте келтирилген Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесинде бақланады. майданының әтирапындағы прецессиялық қозғалыстың бар болыўының салдарынан майдан бағытындағы қураўшысы турақлы болып қалады, ал векторының басқа қураўшылары нолдиң әтирапында тербеледи. Булардың барлығы да атом орташаланған күшиниң тәсиринде туратуғынай болған ҳалда жүзеге келеди. Әдеттеги шараятларда бул орташа күш көшериниң бағытында бағытланған ҳәм ке тең. Мейли атомның магнит майданында өтетуғын жолы ға тең болсын. арқалы ең дәслепки дәстедеги атомлардың кинетикалық энергиясы белгиленген болсын. Әпиўайы есаплаўлар ҳәр бир атомның тезлигиниң дәслепки бағытынан шамасына бурылатуғынлығын көрсетеди. Солай етип, аўысыўдың шамасы векторының майданның багытындағы қураўшысына пропорционал екен. Егер атомлар ықтыярлы түрде бағытланған болса, онда шамасы ден ге шекемги барлық мәнислерге ийе, ал бурылыў мүйеши болса ең шетки мәнислердиң ишиндеги барлық мәнислерге тең болған болар еди. Бул жағдайда биз экранда көшериниң бағытында созылған үзликсиз дақты алған болар едик. Бирақ, экранда избе-из жайласқан эквидистантлық дақлар пайда болады екен. Майданды өзгерткенде (яғный, шамасы өзгергенде) дақлардың арасындағы қашықлықлар ғана өзгереди, ал улыўмалық сүўрет өзгериссиз қалады (мысалы, дақлардың саны λ турақлы). Ҳәр бир дақ тиң орташаланған мәнисине сәйкес келеди. Усы жағдайға сәйкес шамасы квантланады деп жуўмақ шығарамыз: шамасының λ дана мәнисиниң бар болыўы мүмкин екен. Әлбетте, қозғалыс муғдарының моменти болған шамасы да тап сондай қәсийетлерге ийе.



5-сүўрет. Штерн ҳәм Герлах тәжирийбеси. ). Эксперименттиң улыўмалық схемасы: атомлар дәстеси магниттиң полюслары арқалы өтеди. полюслардың арасында бир текли болмаған магнит майданы пайда етилген (сүўретте жоқарыға қарай бағытланған). Атомлар E экранына келип урылады. b). Магниттиң көлденең кесими; пунктир сызықлар магнит майданының күш сызықларына сәйкес келеди.

Штерн ҳәм Герлах тәжирийбесине берилген бундай интерпретацияның дурыс екенлигине гүмән туўылыўы мүмкин. Себеби интерпретация атомлық парамагнетизмниң тәбияты ушын қойылған базы бир гипотезаға (қозғалыс муғдарының шамасына пропорционал болған магнит моментиниң бар екенлигине) сүйенген. Биз бул гипотезаны ақлайтуғын тәжирийбелик фактлер менен аргументлерде тоқтамаймыз (гиромагнитлик эффект, парамагнитлик қабыллағышлықтың Ланжевен теориясы ҳ.б.). Биз квантлық механиканың буннан кейинги раўажланыўының интерпретацияны толық тастыйықлағанын атап өтемиз. Сонлықтан атомдағы ишки қозғалысты тәрийиплейтуғын базы бир шамаларды квантланады деп есапламасақ, онда детектрлеўши экрандағы дискрет дақлардың алыныўын себебин түсиндире алмаймыз. Ҳақыйқатында да, егер массалар орайының қозғалысы классикалық нызамлар бойынша жүзеге келетуғын болса, онда атомның траекториясы магнит майданы тәсир ететуғын областқа кирип келгендеги оның динамикалық ҳалы бойынша анықланады. Экрандағы бир қатар дискрет дақлардың пайда болыўы атомлардың бирдей басланғыш ҳалларда турмайтуғынлығын, ал ҳәр қыйлы болған λ дана дискрет ҳаллар бойынша статистикалық түрде тарқалғанлығы фактын сәўлелендиреди. Басқаша айтқанда, атомның базы бир динамикалық өзгериўшилери квантланады. Бирақ әмелде барлық атомлар тийкарғы ҳалда туратуғын болғанлықтан (болмағанда олар нурланған болар еди) гәп энергияның квантланыўы ҳаққында айтылып атырған жоқ. Қала берсе, экранда алынған эффект магнит майданының бағытына салыстырғанда жүзеге келеди. Сонлықтан квантланатуғын динамикалық өзгериўшиниң шамасы атомның бағытынан ғәрезли болыўы керек.

Штерн ҳәм Герлах тәжирийбеси менен бирге кеңисликлик квантланыўдың басқа да көриниўлери бар. Мысал ретинде 1896-жылы ашылған Зееман эффектин көрсетиўге болады. Бул эффект ҳаққында биз арнаўлы түрде гәп етемиз. Бул қубылыслардың келип шығыўы улыўмалық - қозғалыс муғдарының моментиниң квантланыўы. Биз квантлық механиканың нәтийжелерин баянлағанда бундай квантланыўлар ҳаққында тереңирек гәп етемиз.

**§ 7. Сәйкеслик принципи ҳәм ески квантлық теория**

**Классикалық корпускулалық теорияның жеткиликсизлиги**

Базы бир физикалық шамалардың квантланыўының эксперименталлық факт екенлигин айрықша атап өтиў керек. Бул жағдай затлардың корпускулалық теориясы менен үйлеспейди. Мысалы, классикалық корпускулалар системасының энергиясы өзиниң мәниси бойынша үзликсиз өзгеретуғын шама. Бизлер өз-ара тәсирлесиў нызамларын қанша өзгертсек те, динамикалық өзгериўшилерди қалайынша сайлап алыўдан ғәрезсиз бул тийкарғы жағдайда өзгертиўге болмайды: бөлекшелер системасының энергиясының тек анық дискрет мәнислерге ийе болатуғынлығы классикалық механиканың шеклеринен тасты жататуғын нәтийже болып табылады. Тап усындай гәпти басқа да қәлеген квантланған шама ушын да айтыўға болады. Усы жағдайға сәйкес квантланған шаманың ўақыт бойынша өзгериси де қатаң түрдеги классикалық түсиниклерде тәрийиплениўи мүмкин емес. Мысал ретинде биринши қозған ҳалда турған, буннан кейин фотонды шығарып тийкарғы ҳалға өтетуғын атомды қараймыз. Егер классикалық теорияның тилин пайдаланып, усындай атомның энергиясының ўақыттың өтиўи менен өзгерисин тәрийиплеўге тырыссақ, онда ўақыттың базы бир моментинде энергия секирмели түрде ден ге шекем өзгерди деп жуўмақ шығарыўымыз керек. Себеби энергияның қәлеген түрдеги үзликсиз өзгериси қадаған етилген. Бирақ, бул секирмели өтиўдиң ўақыттың қайсы моментинде жүзеге келетуғынлығын болжаўдың мүмкиншилиги жоқ. Ҳақыйкатында да, егер секириўден бурын атомның динамикалық ҳалы қатаң түрде өзгериссиз қалатуғын болса, онда секириўди буннан кейинги қәлеген моментте емес, ал берилген моментте жүзеге келеди деп тастыйықлаўға тийкар жоқ. Тек ғана секириўдиң ўақыттың бир бирлигинде жүзеге келиўиниң итималлығы ҳаққында ғана айтыў мүмкин. Демек, классикалық физика бундай ситуацияны ақылға муўапық тәрийиплей алмайды. Дәл белгили болған моменттеги секириўди өзи корректли емес. Биз системаның энергиясын ўақыттың анық түрдеги функциясы деп қарай алмаймыз. Биз айта алатуғын бирден бир жағдай дәслеп қозған ҳалда турған атомның ўақыттың буннан кейинги базы бир моментинде тийкарғы ҳалға өтиўиниң итималлығын айтыўдан ибарат. Биз кейинирек қозған ҳалда қалған атомлардың санының еле ыдырамаған редиоактив ядролардың санындай экспоненциаллық нызам бойынша кемейетуғынлығын көремиз. Бундай жағдайда характеристикалық турақлының орнын ўақыт бирлигиндеги өтиўлердиң итималлығы ийелейди (бул қозған ҳалдың орташа жасаў ўақытына кери болған шама менен бирдей).

Усындай жоллар менен жаңадан ашылған физикалық шамалардың квантланыў қубылысларын базы бир классикалық концепциялардан бас тартыў менен заттың қурылысының базы бир келисилген теориясына киргизиў машқаласы пайда болды. Бул теория квантланған шамалардың дәл мәнислерин есаплаўға, усының менен бирге мүмкин болған ҳәр қыйлы өтиўлерди, мысалы, атомның қозған ҳалының орташа жасаў ўақытын есаплаўға мүмкиншилик бериўи керек болды. Бул программа ҳәзирги ўақытлардағы формадағы квантлық механика дөретилгеннен кейин ғана толық жүзеге келди. Бирақ, оннан бурынырақ Бор ҳәм оның мектеби (Крамерс, Зоммерфельд) водород тәризли атомлардың спектраллық термлерин дурыс болжайтуғын квантлық теорияның ең биринши эскизин дөретти. Бул ески квантлық тәлиматтың көп санлы принципиаллық қыйыншылықлары менен шекленгенликлерине қарамастан, теорияның буннан кейинги раўажланыўын жақсырақ түсиниў ушын оның тийкарларын билиў пайдалы. Усының менен бирге, ески квантлық теорияда әҳмийетли болған эвристикалық принцип, атап айтқанда сәйкеслик принципи биринши рет пайдаланылды. Ески квантлық теорияның нәтийжелерин буннан былай баянлаўда оған тийкарғы дыққат аўдарылады.

**Сәйкеслик принципи**. Бул принцип Бор тәрепинен 1923-жылы усынылды. Бирақ, ол оның сол ўақытқа шекем ислеген жумысларындағы басшылық ететуғын идея болып табылады. Сәйкеслик принципи классикалық механиканың түсиниклери менен нәтийжелериниң дурыс теорияны қурғанда ҳәм интерпретациялағанда қандай дәрежеде жәрдем бере алатуғынлығын анықлаўға мүмкиншилик береди.

Биз жақтылық квантларын киргизгенде, соның менен бирге абсолют қара денениң жыллылық нурланыўын изертлеўдиң барысында нурланыўдың классикалық теориясының қолланылыў областын анықладық. Бул теория физикалық қубылыслардың үлкен диапазонын макроскопиялық областта да, микроскопиялық областтағы базы бир жағдайларда да корректли түрде түсиндире алады. Оларға электронлардың турақлы электр ҳәм магнит майданындағы қозғалысы, атомлар менен молекулалардың газлердеги жыллылық қозғалыслары ҳ.т.б. киреди. Микроскопиялық қәддиде классикалық теорияның ушырасатуғын қыйыншылығы физикалық шамалардың дискретлиги менен байланыслы. Сонлықтан макроскопиялық теорияны "макроскопиялық жақтан корректли" деп айтамыз, яғный ол квантлық секириўлер есапқа алмастай киши болған шеклик жағдайда физикалық қубылысларды дурыс түсиндиреди. Бул жағдайлардың барлығында ҳақыйқый теорияның болжаўлары классикалық теорияның нәтийжелерине сәйкес келиўи керек. Бул квантлық теория бағынатуғын шеклеўши шәрт болып табылады. Бул талапты қысқаша түрде былайынша айтыўға болады: *үлкен квант санларының асимптоталық шегинде квантлық ҳәм классикалық теориялардың нәтийжелери бир бирине сәйкес келиўи керек*.

Бул шәрттиң орынланыўы ушын биз квантлық ҳәм классикалық теориялардың арасындағы формаллық аналогияның бар екенлигинен келип шығамыз. Бул сәйкеслик ең киши деталларға шекем бақланады ҳәм жаңа теорияның нәтийжелерин таллағанда басшылыққа алыныўы керек болған идеяның хызметин атқарады.

**§ 8. Классикалық механиканың теңлемелериниң лагранжлық ҳәм гамильтонлық формалары**

Квантлық ҳәм классикалық теориялардың арасындағы формаллық сәйкесликти буннан былай таллаў ушын классикалық аналитикалық механиканың базы бир нәтийжелерин еске түсирип өтиў пайдалы.

Улыўма жағдайда классикалық системаның динамикалық ҳалы улыўмаластырылған координаталар лер ҳәм улыўмаластырылған тезликлер, яғный улыўмаластырылған координаталардан ўақыт бойынша алынған туўындылар бойынша анықланады. Системаның еркинлик дәрежелериниң санын арқалы белгилеймиз. Биз байланысларға ийе болмаған системаларды қараймыз. Сонлықтан өзгериўшилери бир биринен ғәрезсиз өзгереди.

Егер биз бөлекшеден туратуғын системаға ийе болсақ, онда орынды анықлайтуғын өзгериўшилер сыпатында усы бөлекшелердиң декарт координаталарын алыўға болады. Бирақ буннан кейинги таллаўлар басқа координаталарды алғанда да орынлы болады. Системаның ҳәр бир ўақыт моментиндеги аўҳалы -өлшемли конфигурациялық кеңисликте координаталарына ийе ноқаты менен бериледи. Классикалық механиканың мәселеси системаның ўақыт бойынша эволюциясын анықлаўдан ямаса ноқатының конфигурациялық кеңисликтеги қозғалыс нызамын табыўдан ибарат. Жүдә үлкен сандағы динамикалық системалар ушын (бизлер тек усындай системаларды қараймыз) қозғалыс нызамын системаны тәрийиплейтуғын базы бир функция болған Лагранж функциясын жүргизиў жолы менен әмелге асырылады:

координаталары Лагранж теңлемелери деп аталатуғын екинши тәртипли дифференциаллық теңлемелерди қанаатландырады:

Бул теңлемедеги

Лагранждың *улыўмаластырылған импульслери* деп аталады. шамасы массасы болған бөлекшениң декарт координаталарының бири, ал күшлер статикалық потенциалдан алынатуғын болса, онда шамасы усы бөлекшениң қозғалыс муғдарының сәйкес қураўшысы болып табылады:

Қозғалыс нызамларының вариациялық принцип формасында да аңлатылыўы мүмкин. Ҳақыйқатында да, Лагранж теңлемелери системасы ең киши тәсир принципине эквивалент (Мопертюи-Гамильтон принципи):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (12) |

Бул аңлатпалардың мәниси мыналардан ибарат: системаға ўақыт моментинен орнынан ўақыт моментинде орнына өтиўге мүмкиншилик беретуғын барлық қозғалыс нызамларынан ҳақыйқатында интегралының минимумына сәйкес келетуғын қозғалыс нызамы жүзеге келеди.

Классикалық механиканың аңлатпаларының жүдә пайдалы формасы Гамильтонның каноникалық формасы болып табылады. Ўақыттың берилген моментиндеги классикалық системаның динамикалық ҳалы оның дана улыўмаластырылған координаталарын ҳәм дана улыўмаластырылған импульслери бойынша анықланатуғынлығын аңғарамыз. Фазалық кеңислик деп аталатуғын өлшемге ийе болатуғын кеңисликти киргизген қолайлы. Бул кеңисликте динамикалық ҳал координаталары ҳәм болған ноқаты менен бериледи.

Егер Гамильтон функциясын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (13) |

формуласының жәрдеминде анықлайтуғын болсақ, онда қозғалыс теңлемелери каноникалық формада жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (14) |

Бул биринши тәртипли дифференциаллық теңлеме болып табылады. Ўақыттың басланғыш моментиндеги координаталар менен импульслерди бериў олардың ўақыттың буннан кейинги қәлеген моментлериндеги мәнислерин анықлаў ушын жеткиликли. Солай етип, егер ўақыттан айқын түрде ғәрезли болмаса, онда фазалық кеңисликтиң ноқаты арқалы системаның мүмкин болған қозғалысын көрсететуғын тек бир траектория өтеди.

Әдеттеги жағдайда кинетикалық энергия (ол дың квадратлық функциясы болып табылады) менен потенциаллық энергия ның айырмасынан турады. функциясы системаның менен лардың функциясы сыпатында көрсетилген толық энергиясы болып табылады. Бирақ Лагранждың да, Гамильтонның да формализмин динамикалық системалардың кең классы ушын пайдаланыўға болады. Барлық жағдайларда да ты системаның толық энергиясы сыпатында қараўға болады. Гамильтон теңлемесинен теңликлери келип шығады. Демек, Гамильтон функциясы ўақыттан ғәрезсиз болса, онда системаның толық энергиясының қозғалыс интегралы болып табылатуғынлығын аңғартады. Бундай системаларды *консервативлик системалар* деп атайды.

Мысал ретинде протонның кулонлық майданындағы электронды қараймыз ҳәм протонның салмағын шексиз үлкен деп болжаймыз. Координата басында протон жайласқан болсын. Бундай координаталар системасында электронның радиус векторы, - тезлиги, ал - импульси болып табылады. Лагранж функциясы былайынша жазылады:

Электронның улыўмаластырылған импульси қураўшыларына ийе. Олар электронның қозғалыс муғдарының қураўшыларына тең. Гамильтон функцияларынан Гамильтон теңлемелерин аламыз:

Бул теңлемелерди пайдаланып, қозғалыс муғдары моменти ның қозғалыс интегралы болып табылатуғынлығы аңсат табыўға болады: Бул жағдай потенциалдың орайға қарата симметриялы, яғный шамасына тең екенлиги менен байланыслы. Соның менен бирге электронның траекториясы координата басынан өтетуғын ҳәм векторына перпендикуляр тегисликте жатады. Тап усындай жоллар менен басқа координаталар системасын пайдаланыў жолы менен де қозғалыс теңлемелерин алыўға болады. тегислигинде жататуғын траекториялар ушын () поляр координаталар системасында төмендегилерди аламыз ():

Бул аңлатпалардан Гамильтон теңлемелери келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15) |

шамасы қозғалыс муғдарының моментиниң абсолют шамасына тең: ол ҳақыйқатында да қозғалыс интегралы болып табылады.

**§ 9. Квантлық механика менен оптика**

Тарийхый жақтан квантлық механиканың келип шығыўына Гамильтон тәрепинен геометриялық оптика менен механиканың арасындағы параллеллердиң табылыўы хызмет етти. Бул умытылған аналогиялар де Бройль тәрепинен ҳәзирги заман физикасына алып келинди ҳәм оның жәрдеминде квантлық (толқынлық) механиканың биринши қәдемлери қойылды. Шредингер толқынлық оптикаға уқсас болған механиканы дөретти деп жийи айтылып келди. Бул уқсаслық анаў ямаса мынаў физикалық машқаланы шешиўге жәрдеми бере алады, бирақ, қалай деген менен, уқсаслық тек уқсаслық болып қала береди. Шредингер тәрепинен жазылған теңлеме оннан бурынлары толқынлардың тарқалыўы ушын дүзилген теңлемелердиң ҳеш қайсысына да сәйкес келмейди. Толқынлардың тарқалыўын тәрийиплейтуғын теңлемелер барлық ўақытта ўақыт бойынша екинши тәртипли туўындыны өзиниң ишине алады. Ал Шредингер теңлемеси болса ўақыт бойынша биринши тәртипли туўындыға ийе. Соның менен бирге басқа да айырмалар бар. Бирақ, усындай жағдайдың орын алыўына қарамастан Шредингер теңлемесин толқынлық оптиканың теңлемелери менен салыстырып көриў қызығыўды пайда етеди. Мейли, толқын тезлик пенен тарқалатуғын бир текли орталық болсын. Бундай жағдайда усындай толқынлар ушын аўысыў f ушын теңлеме мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

Тербелислериниң жийилиги ω болған толқын ушын функциясын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

түрге ийе деп есаплаўға болады. Бундай жағдайда (1)-аңлатпадан мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

Бул аңлатпаларда - толқынлық сан, λ - толқын узынлығы. (3)-теңлемени әдетте бир текли орталық ушын пайдаланыўға болады. Бирақ бул теңлеме тезлиги координаталардың функциясы деп есапланған жағдайда да дифракция менен интерференцияны тәрийиплеў ушын пайдаланыўға болады. Сонлықтан, (3)-теңлемени бир текли болмаған орталықлар ушын да толқын теңлемеси деп қараўға болады. Бундай жағдайда шамасы координаталардың функциясына айланады. Бундай жағдайда да санын шәртли түрде толқынлық сан, ал шамасын толқын узынлығы деп атаймыз.

сындырыў көрсеткишин киргиземиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

Бул аңлатпада арқалы бослықтағы толқын узынлығы белгиленген. Бундай жағдайда (3)-теңлемени былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

Егер толқын узынлығындай орынларда сындырыў коэффициенти аз шамаға өзгеретуғын болса, онда (5)-толқын теңлемесинен геометриялық оптиканың тийкарғы теңлемесин алыўға болады (қарама-қарсы жағдайда усындай бир текли болмаған орынлардағы толқынлардың дифракциясы менен ис алып барған едик).

Енди

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

функциясы бар деп есаплайық. Бунда - толқынның амплитудасы, ал - фазасы. Егер толқын узынлығы киши болса, онда үлкен болады. менен ны ның кери дәрежелери бойынша қатарға жаямыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |
|  | (8) |

(7)- ҳәм (8)-аңлатпаларды (6) ға, ал (6)-аңлатпаны (5) ке қойып ҳәм бойынша бирдей дәрежелерди жыйнап, (5)-теңлемениң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

Бул теңлемеде шамасы - ҳәм оннан төменги тәртиптеги ағзаларды аңғартады. төменги дәрежелерин есапқа алмасақ, онда буннан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10) |

теңлигиниң орынлы екенлигин табамыз. Бул турақлы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

фазасының бетин көрсеткиши арқалы анықлайтуғын геометриялық оптиканың тийкарғы теңлемеси болып табылады. Нурлар усы бетлерге перпендикуляр бағытланған. функциясын эйконал деп атайды.

(9)-теңлеме менен ҳәрекет функциясы ушын жазылған Гамильтон-Якоби теңлемеси менен салыстырамыз. Онда диң орнына шамасы қойып, биз (2)-теңлемени былайынша жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (12) |

Бул теңлемени (10)-теңлеме менен салыстырыў сындырыў көрсеткиши болған бир текли емес орталықтағы киши толқын узынлығына (үлкен ) ийе нурдың тарқалыўы ҳаққындағы мәселе потенциаллық энергиясы болған күшлер майданындағы материаллық ноқаттың қозғалысы ҳаққындағы мәселе менен салыстырыўдың мүмкин екенлигин көрсетеди. Бундай жағдайда сындырыў көрсеткишиниң орнын , ал фазаның орнын шамасы ийелейди. Сонлықтан, бөлекшелердиң траекториялары бетине ортогоналлық болған сызықлар болып табылады. Сонлықтан траекториялар сындырыў көрсеткиши болған шамасы шамасына пропорционал болған орталықтағы жақтылық нурларына сәйкес келеди. Солай етип, материаллық ноқаттың классикалық механикасы геометриялық оптикаға усайды.

Егер (3)-теңлемени толқынлық оптиканың теңлемеси сыпатында қарайтуғын болсақ, онда толқынлық (квантлық) механика толқынлық оптикағы сәйкес келеди деп айтыўға болады. Ҳақыйқатында да

Шредингер теңлемесине

|  |  |
| --- | --- |
|  | (13) |

аңлатпасын қойсақ, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (14) |

теңлемесин аламыз.

Мейли, енди бөлекше базы бир областта күш майданынан сыртта еркин қозғалатуғын болсын. Бундай жағдайда барлық энергия кинетикалық энергиядан турады. Бундай жағдайда теңлиги орын алады деп есаплаў керек. Усы областтағы толқын санын арқалы белгилеймиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15) |

Кеңисликтиң усы областындағы

|  |  |
| --- | --- |
|  | () |

сындырыў коэффициентин киргизетуғын болсақ, онда биз (14)-аңлатпаны (5)-теңлемеге толық усайтуғын теңлемени аламыз.

(9)-теңлемеден (10)-теңлемени келтирип шығарғанда ағзасын биз есапқа алмадық. Егер есапқа алғанда бизиң қа салыстырғанда ағзасын есапқа алмағанымызға көз жеткеремиз. Әпиўайылық ушын биз өлшемди алып бизиң жуўықлаўымызды

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17) |

түринде жаза аламыз. теңликлериниң орынлы екенлигин аңғарып, биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (18) |

теңсизилигине ийе боламыз. Бул теңсизлик Шредингер теңлемесинен Гамильтон-Якоби теңлемесине өтиў ушын жазылған (17)-теңлемеге сәйкес келеди.

(16)-аңлатпадан сындырыў көрсеткиши ниң, оның менен бирге толқын узынлығы ның кеңисликтиң потенциаллық энергия сезилерликтей өзгериске ушырайтуғын областында, яғный күшлериниң тәсир етиў областында сезилерликтей өзгеретуғынлығы келип шығады. Егер күшлердиң тәсир етиў сферасы шәртин қанаатландыратуғын болса, онда λ узынлығында да, де аз өзгереди.

Сонлықтан, бағдар бериўши есаплаўларда (18)-шәртти әпиўайырақ болған

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19) |

шәрти менен алмастырыў керек.

Бул шәртти жеткиликли дәрежеде үлкен энергияға ийе болатуғын ҳәм, усыған сәйкес, киши λ толқын узынлығына ийе микробөлекшелер ушын классикалық механиканы пайдаланыў керек деп түсинбеў керек.

Бөлекшениң энергиясының үлкейиўи менен серпимли болмаған соққылар қубылысы жүзеге келеди (атомлардың ионласыўы менен қозыўы, тормозлық нурланыў, атом ядросының бөлекшелерге бөлиниўи ҳ.т.б.). Квантлық механика болмаған жағдайларда оларды есаплаўдың мүмкиншилиги жоқ.

Ең ақырында теңсизлиги орын алатуғын жағдайды қараймыз. (16)-теңликтен мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20) |

Бундай жағдайларда нурлар аз сынады ҳәм оларды туўры сызықлар деп қараўға болады. Бундай жағдайда потенциал тегис болса, яғный (19)-шәрт орынланатуғын болса, онда бундай жағдайда қаралатуғын жақынласыў эйконаллық деп аталады. Усындай жақынласыўдағы нурдың тарқалыў бағытындағы фазасының өзгериси 𝜂 ны есаплаймыз. Анықлық ушын нурды көшериниң бағытында тарқалады деп есаплаймыз. (10)- ҳәм (20)-аңлатпалардан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21) |

теңлиги келип шығады, сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (22) |

Бул нәтийже бөлекшелердиң дифракциялық шашыраўы теориясында қолланылады.

**§ 10. Бор-Зоммерфельдиң квантланыў қағыйдалары**

Ески квантлық теория шын мәнисинде Бор постулатлары менен сәйкеслик принципине тийкарланған квантланған шамаларды есаплаўдың улыўмалық усылынан турады. Процедура мынадай: материаллық бөлекшелер системасы классикалық механиканың нызамларына бағынады деп болжанады, қозғалыс теңлемелериниң мүмкин болған барлық шешимлериниң ишинен тек ўақытша киргизилген қағыйдаларды қанаатландыратуғынлары ғана сайлап алынады деп постулатланады. Қозғалыслардың базы бир дискрет семействосы сайлап алынады, гипотеза бойынша әмелде тек усы қозғалыслардың ғана жүзеге келиўи керек. Мүмкин болған қозғалыслардың ҳәр бирине энергияның белгили болған мәниси сәйкес келеди. Энергияның алынатуғын мәнислериниң дискрет қатары квантланған энергия қәддилериниң спектрин пайда етеди. Тап усындай жоллар менен басқа қәлеген қозғалыс интегралы ушын руқсат етилген мәнислердиң спектрин алады.

"Квантланыў қағыйдаларын" анықлаў ески квантлық теорияның орайлық машқаласы болып табылады. Бул машқала шын мәнисинде интуицияның тийкарында шешиледи: дәслеп қағыйдалар постулатланады, оннан кейин усы қағыйдалардан келип шығатуғын физикалық шамалардың спектри эксперименталлық мағлыўматлар менен салыстырылады. Бул процедуралардың барлығында сәйкеслик принципи әҳмийетли орынды ийелейди. Бул принцип ҳеш бир қыйыншылықсыз изленип атырған нәтийжени алыўға мүмкиншилик беретуғын жүдә әпиўайы жағдай бар: бундай жағдайда классикалық қозғалыс дәўирли болады ҳәм энергияның тек жийиликтиң функциясы болыўы керек:

Усындай ситуация водород атомында жүзеге келеди. Мейли энергияның квантланған мәнислери болсын. Системаның энергиясы системаның энергиясы болған шамасы квант саны ниң үзликсиз функциясы болсын. Сонлықтан, энергияның мәнислериниң дискретлиги аргументиниң мәнислериниң дискретлигиниң нәтийжеси болып табылады. Қурамалы болмаған таллаўлар классикалық ҳәм квантлық жийиликлер арасындағы қатнасты алыўға мүмкиншилик береди

Буннан ниң үлкен мәнислери ушын орынлы болған квантланыў қағыйдасы келип шығады:

Бул қағыйданы ниң барлық мәнислери ушын тарқатыў ҳәм сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16) |

теңлиги орынлы деп есаплаў тәбийий. Бул аңлатпада - классикалық системаның энергиясының минималлық мәниси. Водород атомында бул қағыйда қайтадан Бальмер формуласына алып келеди.

Бул қағыйданы бир еркинлик дәрежесине ийе болған дәўирлик системалар ушын да қолланылады. Бундай жағдайда оны улыўмаластырыў ушын қолайлы болған формада аңғартқан қолайлы. Мейли усындай системаның орнының координатасы, - оның импульси, ал толық энергия болсын. Фазалық кеңислик еки өлшемге ийе, ал дәўирли қозғалыс усы кеңисликтеги туйық контурлар менен бериледи. Гамильтон теңлемелерин пайдаланып

теңлигиниң орынлы екенлигин көрсетиўге болады. Бул теңликте белгиси энергиясы шамасына тең толық дәўир бойынша интеграллаўды аңғартады ( интегралы *тәсир интегралы* деп аталады).

Солай етип, из (16) ға эквивалент болған квантланыў қағыйдасын аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17) |

Бул формула фазалық кеңисликтеги руқсат етилген траекторияларды да, усындай траекторияларға сәйкес келетуғын энергияның квантланған мәнислерин де анықлайды. Бул қағыйда Бор-Зоммерфельдиң квантланыў қағыйдасы деп аталады.

Вильсон менен Зоммерфельд бул қағыйданы көп дәўирли системалар ушын улыўмаластырды. Бул бир неше еркинлик дәрежесине ийе системалар болып табылады ҳәм олардың (системалардың) қозғалысын улыўмаласқан координаталарын ҳәм импульслерин сәйкес түрде сайлап алыў жолы менен , ... , функцияларының избе-излигинин жәрдеминде көрсетиўге болады. Басқа сөз бенен айтқанда фазалық кеңисликтеги траекторияларда ҳәр бир импульс сәйкес координатадан ғәрезли. Ҳәр бир функция жийилиги болған дәўирли қозғалысты көрсетеди. Барлық системаның қозғалысы жийиликлери болған дәўирли қозғалыслардың комбинациясы болып табылады. Бул жағдайда квантланыў қағыйдасы болып мынадай қатнас хызмет етеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (18) |

дана пүтин квант санлары системаның квантланған траекторияларын ҳәм энергия, қозғалыс муғдарының моменти ҳ.т.б. сыяқлы ҳәр қыйлы қозғалыс интегралларының квантланған мәнислерин анықлайды. өзгериўшилериниң функциясы түринде қаралатуғын энергия төмендегидей сәйкеслик шәртин қанаатландырады:

Қосымша сыпатында водород атомының квантланыўын қараймыз. Электронлық орбитаның тегислиги сайлап алынғаннан кейин теңлемелери жоқарыда жазылған [(15)-формула] мәселеге ийе боламыз. Импульс моменти менен энергия қозғалыс интеграллары болып табылады. Егер ҳәм энергияның сәйкес мәнислерин белгилеп алсақ, биз классикалық қозғалыстың мүмкин болған траекториясын аламыз: бул эксцентриситети шамасына тең эллипс.

Импульстиң ҳәм қураўшылары оларға сәйкес келетуғын түйинлес координаталардың функциялары болып табылады. Ҳақыйқатында да

Сонлықтан, Бор-Зоммерфельдтиң квантланыў қағыйдасын қолланыўға болады:

Бул аңлатпаларда - азимуталлық квант саны, - радиаллық квант саны. Олардың екеўиниң де мәнислери пүтин (ямаса ноллер). Биринши қағыйда импульс моментиниң (қозғалыс муғдарының) төмендегидей квантланған мәнисин береди:

Биз төменде қозғалыс муғдарының моменти ушын жазылған формуланың дурыс емес екенлигин, ал "квазиклассикалық" жақынласыўда формуласының алынатуғынлығын, соның менен бирге мәнислерин қабыл ететуғынлығын атап өтемиз.

Екинши қағыйда жеткиликли дәрежеде узын, бирақ қыйын болмаған есаплаўлардан кейин төмендегидей қатнасты береди:

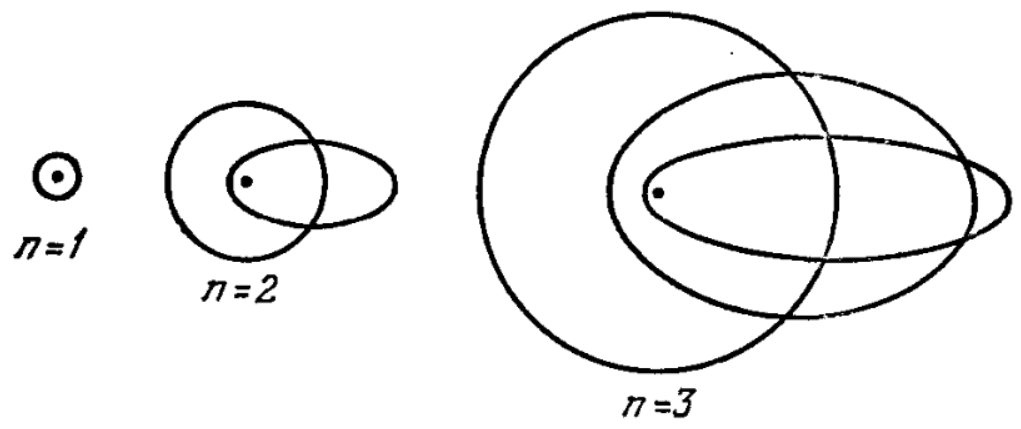
ямаса

Буннан бас "*квант санын*" киргизип Бальмер формуласын аламыз:

Квантланған энергия тек еки ҳәм квант санларының қосындысынан ғәрезли. Кулонлық потенциалға тән болған бул қәсийет азимуталлық ҳәм радиаллық жийиликлердиң бир бирине тең екенлиги менен байланыслы: энергиясы мәнислери менен анықланатуғын n рет квантланған орбитаға сәйкес келеди (биз бул жерде талламайтуғын мәниси бийкарланады). Бул эксцентриситетлери болған эллипслер болып табылады. мәниси шеңбер тәризли орбитаға сәйкес келеди (6-сүўретке қараңыз).

Шеңбер тәризли орбиталардың квантланыўы 1913-жылы Нильс Борға Бальмер формуласын алыўға мүмкиншилик бергенлигин, эллипс тәризли орбиталардың квантланыўының Зоммерфельд тәрепинен өткерилгенлигин, оның теорияны релятивистлик жағдай ушын тарқатқанлығын атап өтемиз.

Жоқарыда келтирилген квантланыў қағыйдаларын релятивистлик теңлемелер ушын да пайдаланыўға, нәтийжеде водород атомының теориясы ушын релятивистлик дүзетиўлерди киргизиўге болады.



6-сүўрет. Водород атомындағы тийкарғы қәдди () ҳәм биринши еки қозған ҳал ушын Бор орбиталары. Орбиталардың салыстырмалы өлшемлери сақланған.

**§ 11. Анықсызлық принципи**

Атомлық қубылысларды түсиндириў ушын классикалық механика менен электродинамиканы пайдаланыў тәжирийбеде алынған мағлыўмаларға қарама-қарсы келетуғын нәтийжелерди береди. Бул жағдай әдеттеги электродинамиканы электронлары ядроның дөгерегинде классикалық орбиталар менен қозғалатуғын атомның моделине қолланғанда айқын көринеди. Қәлеген тезлениўши қозғалыстағыдай, бундай қозғалыста электронлардың электромагнит толқынларын үзликсиз түрде нурландырыўы керек. Электронлар нурландырыўдың себебинен энергиясын жоғалтып, ақыр-аяғында ядроға қулаған болар еди. Сонлықтан, классикалық электродинамикаға сәйкес атомлардың орнықлы болмаўы керек. Ал бул жағдай ҳақыйқатлыққа пүткиллей сәйкес келмейди.

Бул параграфта биз қысқалық ушын тек электрон ҳаққында гәп етемиз. Бирақ, электрон ҳаққында гәп еткенде биз қәлеген квантлық объектти, квантлық механикаға бағынатуғын, ал классикалық механикаға бағынбайтуғын қәлеген бөлекшени ямаса бөлекшелер системасын нәзерде тутыў керек.

Теория менен тәжирийбелердиң нәтийжелериниң арасындағы усындай терең қарама-қарсылықлар атомлық қубылыслар ушын (яғный кеңисликтиң жүдә киши участкаларында массасы жүдә киши болған бөлекшелер қатнасатуғын жүзеге келетуғын қубылыслар ушын) пайдаланыў мүмкин болған теорияларды дөреткенде тийкарғы классикалық көз-қараслар менен нызамлықларда фундаменталлық түрдеги өзгерислерди киргизиўдиң зәрүр екенлигин көрсетеди.

Бундай өзгерислерди анықлаў ушын басланғыш ноқат сыпатында электронлардың көп санлы тәжирийбелерде бақланатуғын дифракциясын алып қараўға болады. Егер кристалл арқалы электронлардың бир текли дәстесин өткерген жағдайда өткен дәстениң қурамында интенсивликлердиң максимумлары менен минимумлары бақланады. Бул қубылыс жақтылық пайда ететуғын дифракциялық сүўретке жүдә усайды. Солай етип, базы бир шараятларда материаллық бөлекшелердиң қәсийетлеринде толқынлық процесслерге тән болған өзгешеликлер бақланады.

Биз электронлардың дифракциясының ҳақыйқатында квантлық механика дөретилгеннен кейин 1926-жылы Клинтон Джозеф Дэвиссон, Лестер Джермер ҳәм 1927-жылы Пэджет Томсон тәрепинен ашылған екенлигин атап өтемиз.

Бизиң әдеттеги көз-қарасларымызға бул қубылыстың қандай дәредеже қарама-қарсы келетуғынлығынлығын көз алдымызға келтириў ушын биз кристаллардағы электронлардың дифракциясы бойынша ойымызда тәжирийбе өткеремиз. Электронлар ушын мөлдир болмаған ҳәм бирдей болған еки саңлақ тесилген экранды ҳәм бир текли және сийрек болған электронлардың дәстесин көз алдымызға келтирейик. Бундай жағдайда сол электронлардың бир бири менен тәсирлесиўин пүткиллей есапқа алмаўға болады. Саңлақлардың бириншиси жабық болған жағдайда екиншисинен өткен электронлар дәстесин бақлаймыз ҳәм бундай жағдайда саңлақтан кейин қойылған экранда интенсивликтиң тарқалыўының базы бир сүўретин аламыз. Интенсивликтиң тап усындай тарқалыўын екинши саңлақ жабық, ал биринши саңлақ ашық турған жағдайда да аламыз. Әдеттеги көз-қарасларымыз бойынша саңлақлардың екеўи де ашық турған жағдайда жоқарыда келтирилген еки сүўреттиң қосындысын алыўымыз керек - ҳәр бир электрон өзиниң траекториясы бойынша қозғалып, басқа электронларға тәсир етпеген ҳалда саңлақлардың бири арқалы өтиўи керек. Бирақ, биз ҳақыйқатында дифракциялық сүўрет аламыз, демек интерференцияның орын алыўының салдарынан пайда болған сүўрет саңлақлардың ҳәр бири ашық болған жағдайларда алынған еки сүўреттиң қосындысынан ибарат болмайды. Бул нәтийжениң электронлар траекториялар бойынша қозғалады деп есаплайтуғын көз-қарасқа сәйкес келмейтуғынлығы түсиникли.

Жоқарыда келтирилген жағдай атомлық қубылыслар бағынатуғын механиканың (бундай механиканы квантлық ямаса толқынлық механика деп атаймыз) классикалық механиканың қозғалыслар ҳаққындағы көз-қарасларынан принципиаллық жақтан өзгеше болған көз-қарасларға тийкарланатуғынлығын көрсетеди. Квантлық механикада бөлекшелердиң траекториясы түсиниги жоқ. Бул жағдай квантлық механиканың тийкарғы принциплериниң бири болған Гейзенберг тәрепинен ашылған анықсызлық принципи деп аталатуғын принциптиң мазмунын қурайды. Квантлық механиканың толық математикалық аппаратының 1925-1926 жыллары В.Гейзенберг ҳәм Э. Шредингер тәрепинен бул аппараттың физикалық мәнисин ашып көрсететуғын анықсызлық принципи ашылмастан бурын дөретилгенлигин атап өтемиз.

Классикалық механиканың әдеттеги көз-қарасларын бийкарлайтуғын болғанлықтан анықсызлық принципин кери мазмунға ийе деп айтыўға болады. Бул принциптиң тийкарында бөлекшелердиң жаңа механикасын дөретиўдиң мүмкиншилигиниң жоқ екенлиги тәбийий. Бундай теорияның тийкарында кейинирек гәп етилетуғын қандай да бир кери емес, ал оң тастыйықлаўлардың болыўы шәрт. Бирақ, бундай тастыйықлаўларды келтирип шығарыў ушын квантлық механиканың алдында туратуғын мәселелерди қойыўдың өзгешеликлерин алдын-ала қарап шығыў керек. Оның ушын ең дәслеп квантлық ҳәм классикалық механикалардың арасындағы өз-ара қатнаслардың характерин қарап өтиўимиз керек.

Әдетте улыўмалық теория оның шеклик жағдайы болған улыўмалығы кемирек болған теориядан ғәрезсиз логикалық жақтан туйық түрде дөретиледи. Мысалы, релятивистлик механика өзиниң тийкарғы принциплериниң тийкарында Ньютон механикасын пайдаланбай қурылады. Бирақ классикалық механиканы есапқа алмай турып, квантлық механиканың тийкарғы қағыйдаларын дөретиў принципиаллық жақтан мүмкин емес.

Электронның белгили болған траекториясының болмаўы оның қозғалысын тәрийиплейтуғын базы бир басқа динамикалық характеристикаларға ийе болыў мүмкиншилигин бийкарлайды. Сонлықтан, тек квантлық объектлерден туратуғын системалар ушын ҳеш бир логикалық жақтан туйық болған механиканы дөретиўдиң мүмкиншилигиниң жоқ екенлиги түсиникли. Электронның қозғалысын санлық жақтан тәрийиплеўдиң мүмкиншилиги классикалық механикаға жеткиликли дәлликте бағынатуғын физикалық объектлердиң болыўының керек екенлигин талап етеди. Егер электрон "классикалық объект" пенен тәсирлесетуғын болса, онда улыўма айтқанда бул объекттиң ҳалының өзгериўи керек. Бул өзгеристиң характери менен шамасы электронның ҳалынан ғәрезли ҳәм сонлықтан оның санлы характеристикасы болып хызмет ете алады.

Усы жағдайға байланыслы "классикалық объектти" әдетте "әсбап" деп есаплайды, ал электрон менен оның өз-ара тәсирлесиў процессин "өлшеў" деп есаплайды. Бирақ, бул жағдайда физик-бақлаўшы қатнасатуғын "өлшеў" процессин нәзерде тутпаў керек. Квантлық механикада өлшеў дегенде қандай да бир бақлаўшы қатнаспайлығын ҳәм оннан ғәрезсиз болған классикалық ҳәм квантлық объектлердиң арасындағы өз-ара тәсирлесиў процессин нәзерде тутады.

Биз әсбапты классикалық механикаға жеткиликли дәрежедеги дәлликте бағынатуғын физикалық объект сыпатында анықладық. Мысалы, массасы жеткиликли дәрежеде үлкен болған денени усындай әсбап деп қарай аламыз. Бирақ макроскопиялық қәсийетти әсбаптың сөзсиз орынланатуғын қәсийети деп ойламаў керек. Белгили болған шараятларда әсбаптың орнын микроскопиялық объекттиң ийелеўи де мүмкин. Себеби "жеткиликли дәлликте" түсиниги айқын түрде қойылған мәселеден ғәрезли. Мысалы, Вильсон камерасындағы электронның ямаса басқа да зарядланған бөлекшениң қозғалысын олардың қалдарытуғын думаннан ибарат изи бойынша бақлайды. Бул издиң ени атомлық өлшемлерге салыстырғанда жүдә үлкен. Траекторияны тап усындай дәлликте анықлаўда электрон нағыз классикалық объект болып табылады.

Солай етип, квантлық механика физикалық теориялардың ишинде өзине тән болған жағдайды ийелейди. Ол шеклик жағдай сыпатында классикалық механиканы өзиниң ишине алады, бирақ бул шеклик жағдайда ол өзиниң тийкарланыўына мүтәж болады.

Енди биз квантлық механиканың алдында қандай мәселениң турғанлығын келтирип шығара аламыз. Оның өзине тән болған мәселениң қойылыўы алдыңғы өлшеўлерде алынған нәтийжелерди қайтадан өткерилген өлшеўлерде алыныўын болжаўдан ибарат. Усының менен бирге, биз буны кейинирек көремиз, квантлық механика классикалық механикаға салыстырғанда ҳәр қыйлы физикалық шамалар (мысалы, энергия) қабыл ететуғын мәнислерди усы шамалар өлшенген жағдайда шеклейди. Квантлық механиканың аппаратының усы руқсат етилген мәнислерди анықлаўға мүмкиншилик бериўи керек.

Квантлық механикада өлшеў процесси айтарлықтай өзгешеликлерге ийе. Бул процесс барлық ўақытта үстинен өлшеў жүргизилетуғын электронға барлық ўақытта тәсир етеди ҳәм бул тәсирди өлшеўдиң берилген дәллигинде қәлегенше киши етиў принципиаллық жақтан мүмкин емес. Өлшеў қаншама дәл жүргизилсе, оған тәсир соншама күшлирек ҳәм тек жүдә киши дәлликтеги өлшеўлерде ғана объектке тәсирдиң шамасы әззи болады. Өлшеўлердиң бул қәсийети логикалық жақтан электронның динамикалық қәсийетлериниң тек ғана өлшеўдиң салдарынан ғана пайда болатуғынлығы менен логикалық жақтан байланыслы. Егер өлшеў процессиниң объектке тәсирин қәлегенинше әззи етип алатуғын болса, онда өлшенетуғын шаманың өлшеўден ғәрезсиз белгили бир анық мәниске ийе болатуғынлығы айқын.

Ҳәр қыйлы өлшеўлердиң ишинде тийкарғы орынды электронның координаталарын өлшеў ийелейди. Квантлық механиканың пайдаланылыў шеклеринде барлық ўақытта электронның үстинен оның координатасын қәлеген дәлликте өлшеўлерди жүргизиў мүмкин. Бул жағдайда да биз "өткерилген өлшеў" деп айтқанда электронның классикалық "әсбап" пенен өз-ара тәсирлесиўин ғана нәзерде тутамыз ҳәм бундай жағдайда қандай да бир бақлаўшының бар ямаса жоқ екенлиги ҳеш қандай әҳмийетке ийе емес. Ўақыттың белгили болған интервалларынан кейин электронның координаталары избе-из өлшенеди деп болжайық. Улыўма айтқанда өлшеўлердиң нәтийжелери қандай да бир иймекликтиң бойынша жатпайды. Керисинше, өлшеўлер қаншама дәл жүргизилсе, нәтийжелер секирмели түрге енеди. Электронның траекториясы түсинигиниң болмайтуғынлығына сәйкес нәтийжелер пүткиллей тәртипсиз характерге ийе болады. Егер электронның координаталарын үлкен болмаған дәлликте өлшейтуғын болсақ, онда ана ямаса мына дәрежеде тегис болған траектория алынады (мысалы, Вильсон камерасындағы пуў тамшыларының конденсациясы бойынша).

Егер өлшеўлердиң дәллигин өзгертпестен, өлшеўлер арасындағы интервалды киширейтсек, онда, әлбетте, қоңсылас өлшеўлер координаталардың бир бирине жақын мәнислерин береди. Бирақ, избе-из өлшеўлердиң қатарының нәтийжелери кеңисликтиң киши участкасында жататуғын болса да, бул участкадағы нәтийжелер пүткиллей тәртипсиз түрде жатады ҳәм қандай да бир иймекликтиң бойында жайласпайды. Дара жағдайда нолге умтылған жағдайда бир бирине жақын өлшеўлердиң нәтийжелери бир туўрының бойында жатыўға пүткиллей тырыспайды. Бул жағдайлардың барлығы квантлық механикада классикалық механикада анықлама берилетуғын тезликтиң болмайтуғынлығын аңғартады (яғный еки ўақыт моментиндеги координаталардың айырмасының усы моментлердиң арасындағы интервалға қатнасының шеги сыпатындағы). Бирақ, сонда да биз кейинирек квантлық механикада да берилген ўақыт моментиндеги бөлекшениң тезлигине ақылға муўапық анықламаны бериўге болатуғынлығын көремиз. Классикалық механикаға өткенде бундай тезлик классикалық тезликке өтеди. Классикалық механикада ўақыттың ҳәр бир моментинде бөлекшениң белгили бир координаталарға ҳәм тезликке ийе болатуғынлығын билемиз. Бирақ квантлық механикада болса жағдай пүткиллей өзгеше. Егер өлшеўдиң нәтийжесинде электрон белгили болған координаталарды алатуғын болса, онда бундай жағдайда ол ҳеш қандай белгили болған тезликке ийе болмайды. Керисинше, белгили тезликке ийе болған электрон кеңисликте белгили бир орынды ийелей алмайды. Ҳақыйқатында да, ўақыттың қәлеген моментинде координаталар менен тезликтиң болыўы электрон ийе болмаған белгили бир тезликтиң бар екенлигин анықлаған болар еди. Солай етип, квантлық механикада электронның координаталары менен тезлиги бир ўақытта дәл өлшенетуғын, яғный бир ўақытта дәл мәнислерге ийе шамалар болып табылмайды. Электронның координаталары менен тезлигин бир ўақытта болмайтуғын шамалар деп айтамыз. Кейинирек, ўақыттың бир моментинде координаталарды ҳәм тезликти белгили болған дәлликте анықлаўға мүмкиншилик беретуғын санлық қатнасты аламыз.

Классикалық механикада системаның ҳалын толық тәрийиплеў ушын ўақыттың берилген моментиндеги оның координаталары менен тезликлерин бериў керек. Қозғалыс теңлемеси бул басланғыш мағлыўматлардың жәрдеминде системаның ўақыттың буннан кейинги барлық моментлериндеги қозғалысын толық анықлайды. Квантлық механикада бундай тәрийиплеўдиң принципиаллық жақтан мүмкиншилиги жоқ. Себеби координаталар ҳәм оларға сәйкес келетуғын тезликлер бир ўақытта болмайды. Солай етип, квантлық системаның ҳалын тәрийиплеў классикалық механикаға салыстырғанда азырақ сандағы шамалардың жәрдеминде алып барылады екен (яғный классикалық механикаға салыстырғанда толық емес). Буннан квантлық механикада берилетуғын болжаўлардың характери ҳаққында әҳмийетли нәтийже келип шығады. Классикалық тәрийиплеў механикалық системаның болажақтағы қозғалысын болжаў ушын жеткиликли болып табылатуғын болса, квантлық механикадағы жағдай оның ушын жеткиликли емес. Бул, егер электрон ең толық түрде анықланған ҳалда жайласқан болса, онда оның ўақыттың буннан кейинги моментлериндеги ҳалын анықлаў принципиаллық жақтан бир мәнисли болмайды дегенди аңғартады. Сонлықтан, квантлық механика электронның буннан кейинги ҳалы ҳаққында қатаң түрдеги анық болжаўларды айта алмайды. Электронның берилген басланғыш ҳалында буннан кейин өткерилген өлшеўлер ҳәр қыйлы нәтийжелерди бериўи мүмкин. Квантлық механиканың алдында турған мәселе усы өлшеўде анаў ямаса мынаў нәтийжениң алыныўының итималлығын анықлаўдан ибарат. Әлбетте, базы бир жағдайдарда базы бир анық нәтийжениң итималлық 1 ге тең болып шығады. Бундай жағдайда өлшеўдиң нәтийжеси бир мәнисли болады.

Квантлық механикадағы барлық өлшеў процесслерин еки категорияға бөлиўге болады. Олардың өлшеўлердиң көпшилигин өзиниң ишине алатуғын бирине системаның ҳеш бир ҳалында исенимли бир мәнисли нәтийжеге алып келмейди. Ҳәр бир нәтийже ушын ҳал бар болатуғын өлшеўлердиң екинши категориясына өлшеў исенимли түрдеги берилген нәтийжеге алып келеди. Болжанатуғын деп атаўға болатуғын усы өлшеўлер квантлық механикада тийкарғы орынды ийелейди. Усындай өлшеўлер менен анықланатуғын ҳалдың санлық характеристикаларын квантлық механикада физикалық шамалар деп атайды. Егер базы бир ҳалда өлшеў исенимли түрдеги бир мәнисли нәтийжени беретуғын болса, онда усы ҳалда сәйкес физикалық шама дәл болған белгили мәниске ийе болады деп айтамыз. Буннан былай "физикалық шама" түсиниги қолланғанда усындай мәнистеги шаманы айтамыз.

Буннан былай биз квантлық механикадағы физикалық шамалардың барлық жыйнағының бир ўақытта өлшенбейтуғынлығын, яғный бир ўақытта белгили болған мәнислерге ийе болмайтуғынлығын қайта-қайта көремиз (бир мысал болған электронның тезлиги менен координаталары ҳаққында жоқарыда гәп етилген еди).

Квантлық механикада төмендегидей қәсийетлерге ийе болған физикалық шамалардың жыйнақлары үлкен орынды ийелейди: бул шамалар бир ўақытта өлшенеди, егер олар бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғын болса, онда ҳеш бир басқа шама (функция болып табылмайтуғын) бул ҳалда анық мәниске ийе бола алмайды. Физикалық шамалардың усындай жыйнағы ҳаққында гәп етилгенде биз толық жыйнақлар ҳаққында айтамыз.

Электронның ҳалын қәлеген тәрийиплеў базы бир өлшеўдиң салдарынан жүзеге келеди. Биз енди квантлық механикадағы ҳалдың толық тәрийипиниң нени аңғартатуғынлығын келтирип шығарамыз. Толық түрде тәрийипленген ҳал физикалық шамалардың толық жайнағын бир ўақытта өлшеўдиң нәтийжесинде пайда болады. Мысалы, бундай өлшеўдиң нәтийжеси бойынша электронның биринши өлшеўге шекем қандай ҳалда болғанлығынан ғәрезсиз буннан кейинги өлшеўдиң нәтийжесиниң итималлығын айтыўға болады. Буннан былай дерлик барлық ўақытлары квантлық механикадағы ҳал деп толық түрде тәрийипленген ҳалды түсинемиз.

**§ 12. Суперпозиция принципи**

Биз квантлық механикадағы қозғалыс ҳаққындағы көз-қараслардың классикалық механикадағы қозғалыс ҳаққындағы көз-қараслардан түпкиликли түрдеги өзгешелиги теорияның математикалық аппаратының да соншама дәрежедеги түпкиликли айырмаға ийе болыўының керек екенлигин талап етеди. Усы жағдайға байланыслы ең дәслеп квантлық механикада ҳалды тәрийиплеўдиң усылы ҳаққында сораў пайда болады.

арқалы квантлық системаның координаталарының жыйнағын, ал арқалы бул координаталардың дифференциалларының көбеймесин белгилеўди келисип алайық (оны системаның конфигурациялық кеңислигиниң көлеминиң элементи деп атайды). Бир бөлекше ушын әдеттеги кеңисликтиң көлеминиң элементи ға сәйкес келеди.

Квантлық механиканың математикалық аппаратының тийкарын мынадай тастыйықлаў қурайды: системаның ҳалын координаталардың белгили болған функциясы (улыўма айтқанда комплексли болған) менен тәрийиплеў мүмкин, ал бул функцияның модулиниң квадраты координаталардың мәнислериниң итималлығының квадратын анықлайды: шамасы система үстинде өткерилген өлшеўдиң конфигурациялық кеңисликтиң элементиндеги координаталардың мәнислерин табады. функциясы системаның толқын функциясы деп аталады. Бундай функция квантлық механикаға биринши рет Э.Шрёдингер тәрепинен 1926-жылы киргизилди.

Толқын функциясын билиў ҳәр қыйлы нәтийжелерди, барлық өлшеўлердиң нәтийжелериниң итималлықларын есаплаўға мүмкиншилик береди (тек координаталарды өлшеў емес). Бундай жағдайда итималлықлардың барлығы ҳәм бойынша бисызықлы аңлатпалардың жәрдеминде анықланады. Бундай аңлатпаның ең улыўмарақ түри мынадай

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.1) |

Бул аңлатпадағы функциясы өлшеўдиң түринен ҳәм нәтийжесинен ғәрезли, ал интеграллаў барлық конфигурациялық кеңислик бойынша жүргизиледи. Координаталардың ҳәр қыйлы мәнислериниң итималлығы шамасының өзи де усындай типтеги аңлатпа болып табылады.

Бул шама (2.1)-аңлатпадан теңлиги орынланған жағдайда алынады. Бул теңликтеги белгиси төменде анықланатуғын -функция деп аталатуғын функциясын аңғартады. Усы функциядағы шамасы итималлығын биз изленип атырған координатаның мәниси.

Улыўма айтқанда ўақыттың өтиўи менен системаның ҳалы, оның менен бирге толқын функциясы өзгериске ушырайды. Бундай мәнисте толқын функциясы ўақыттың да функциясы деп қараўға болады. Егер толқын функциясы базы бир басланғыш ўақыт моментинде белгили болса, онда ҳалды толық тәрийиплеў түсинигиниң өзиниң мәниси бойынша принципи бойынша оның буннан кейинги барлық ўақыт моментлериндеги анықланыўы мүмкин. Толқын функциясының ўақыттан ҳақыйқый ғәрезлиги кейинирек келтирип шығарылатуғын теңлемелерди шешиўдиң жәрдеминде анықланылады.

Системаның координаталарының барлық мүмкин болған мәнислериниң суммасы анықламасы бойынша 1 ге тең болыўы керек. Сонлықтан шамасын барлық конфигурациялық кеңислик бойынша интеграллаўдың нәтийжеси 1 ге тең болыўы керек

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.2) |

Бул теңлик толқын функциясының нормировка шәрти деп аталатуғын шәртти көрсетеди. Егер шамасынан алынған интеграл жыйнақлы болса, онда сәйкес турақлы коэффициентти сайлап алыў жолы менен функциясы барлық ўақытта нормировкаланады деп айтады. Бирақ, биз кейинирек шамасынан алынған интегралдың тарқалыўшы болатуғынлығын да көремиз. Бундай жағдайда функциясы (2.2)-шәрттиң тийкарында нормировкаланбайды. Әлбетте, бундай жағдайларда координаталардың итималлығының абсолют мәнислерин анықламайды. Бирақ конфигурациялық кеңисликтиң ҳәр қыйлы болған еки ноқатындағы квадратлардың қатнасы координаталардың мәнислериниң салыстырмалы итималлығын анықлайды.

Толқын функциясының жәрдеминде есапланатуғын барлық шамалар тиккелей физикалық мәниске функциясы менен көбейтилген ҳалда (2.1) түринде ийе болатуғын болғанлықтан, нормировкаланған толқын функциясының фазалық көбейтиўши дәллигинде анықланған болатуғынлығы айқын. Бул аңлаптада α арқалы қәлеген затлық сан белгиленген. Бир мәнисликтиң усындай жоқ екенлиги принципиаллық мәниске ийе ҳәм оны сапластырыўға болмайды. Бирақ оның орын алыўының әҳмийети жоқ, себеби ҳеш бир физикалық нәтийжеге тәсирин тийгизбейди.

Квантлық механиканың мазмунының тийкарында толқын функциясының қәсийетлери бойынша бир қатар тастыйықлаўлар жатады. Олар мыналардан ибарат:

Мейли, толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалдың үстинде өткерилген базы бир өлшеў исенимли түрдеги 1 нәтийжесин, толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалдың үстинде өткерилген базы бир өлшеў исенимли түрдеги 2 нәтийжесин беретуғын болсын. Бундай жағдайда менен дың қәлеген сызықлы комбинациясы (яғный

түриндеги қәлеген функция, менен лер турақлы шамалар) тап сол өлшеўлер 1 ди ямаса 2 ни беретуғын ҳалды тәрийиплейди. Усының менен бирге ҳаллардың ўақыттан ғәрезликлери белгили болса ҳәм олар биринши ҳал ушын , ал екинши ҳал ушын функциялары менен берилетуғын болса, онда олардың қәлеген сызықлы комбинациясы ҳалдың ўақыттан мүмкин болған ғәрезлигин береди.

Бул тастыйықлаўлар ҳаллардың суперпозиция принципи деп аталатуғын квантлық механиканың тийкарғы принципиниң мазмунын қурайды. Оннан, мысалы, толқын функциялары қанаатландыратуғын барлық теңлемелердиң бойынша сызықлы болатуғынлығы келип шығады.

Енди еки бөлимнен туратуғын системаны қараймыз ҳәм бул системаның ҳалы бөлимлердиң ҳәр бири толық жазылған түринде анықланатуғын болсын (Әлбетте, усындай жоллар менен пүтини менен алынған системаның ҳалы берилген болады. Бирақ кери тастыйықлаўдың дурыс емес екенлигин атап өтемиз: улыўма айтқанда системаның ҳалының толық тәрийиплениўи оның айырым бөлимлериниң ҳаллары толық анықланған дегенди аңғартпайды). Бундай жағдайда биринши бөлимниң координаталарының итималлығы екинши бөлимниң координаталары ден ғәрезсиз деп тастыйықлаўға болады. Сонлықтан, тутасы менен алынған система ушын итималлықлардың тарқалыўы оның бөлимлериниң итималлықларының көбеймесине тең болыўы керек. Бул системаның толқын функциясы ниң оның бөлимлериниң толқын функцияларының көбеймесинен туратуғынлығын аңғартады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.3) |

Егер системаның еки бөлими бир бири менен тәсирлеспейтуғын болса, онда системаның толқын функциялары ҳәм оның бөлимлериниң арасындағы усындай қатнас ўақыттың буннан кейинги моментлеринде де сақланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.4) |

**§ 13. Операторлар**

Квантлық системаның ҳалын тәрийиплейтуғын базы бир физикалық шамасын қараймыз. Қатаң түрде айтқанда, төменде келтирилген таллаўлардан бир шама ҳаққында емес, ал олардың толық жыйнағы ҳаққында гәп етиўимиз керек. Бирақ, бир физикалық шама ҳаққында гәп еткен жағдайда да бизиң таллаўларымыздың мәниси өзгермейди ҳәм гәплеримиздиң қысқа ҳәм әпиўайы болыўы ушын бир физикалық шама ҳаққында гәп етемиз.

Берилген физикалық шама қабыл ете алатуғын мәнислерди квантлық механикада оның меншикли мәнислери деп атайды. Ал, меншикли мәнислердиң жыйнағы ҳаққында айтылғанда берилген шаманың меншикли мәнислериниң спектри ҳаққында гәп етеди. Классикалық механикада болса шамалар әдетте мәнислердиң үзликсиз қатарын қабыл етеди. Квантлық механикада да меншикли мәнислери үзликсиз қатарды толтыратуғын физикалық шамалар бар (мысалы, координаталар). Бундай жағдайда меншикли мәнислердиң үзликсиз спектри ҳаққында айтылады. Квантлық механикада усындай шамалар менен бир қатарда меншикли мәнислерин үзликсиз жыйнақты пайда ететуғын басқа да шамалар бар. Бундай жағдайларда дискрет спектр ҳаққында гәп етиледи.

Дәслеп әпиўайылық ушын биз қарап атырған шамасы дискрет спектрге ийе деп есаплаймыз. Үзликсиз спектрди өз алдына қараймыз. шамасының меншикли мәнислерин арқалы белгилеймиз. Бул белгилеўде индекси 0, 1, 2, 3, ... мәнислерин қабыл етеди. Система ушын пайдаланылып атырған физикалық шамасы мәнисине ийе болатуғын ҳалды арқалы белгилеймиз. толқын функцияларын берилген физикалық шамасының меншикли фукнциялары деп атайды. Бул функциялардың барлығы да нормировкаланған деп болжаймыз, сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.1) |

Егер система толқын функциясы менен тәрийипленетуғын базы бир ықтыярлы ҳалда туратуғын болса, онда шамасын өлшеў ушын системаның үстинен өткерилген өлшеўлер оның меншикли мәнислериниң бири болған мәнисин береди. Суперпозиция принципине сәйкес, толқын функциясы барлық меншикли функциялар функцияларының сызықлы комбинациясынан турады. Сонлықтан, ықтыярлы ҳал ушын функциясын былайынша көрсетиўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.2) |

Бул аңлатпада суммалаў барлық лер бойынша жүргизиледи, - турақлы коэффициентлер.

Солай етип, биз қәлеген толқын функциясын қәлеген физикалық шаманың меншикли функциялары бойынша қатарға жайыўға болады екен. Усындай етип қатарға жайыўға болатуғын функциялардың системасы ҳаққында гәп еткенде функциялардың толық системасын нәзерде тутады.

(3.2)-қатар өлшеўлер жолы менен системаның толқын функциясына сәйкес келетуғын ҳалында шамасының мәнисиниң алыныўының итималлығын анықлаўға мүмкиншилик береди. Ҳақыйкатында да, алдыңғы параграфта айтылған жағдайға байланыслы бул итималлықлар ҳәм функциялары бойынша базы бир бисызықлы аңлатпалардың жәрдеминде анықланыўы керек. Сонлықтан менен шамаларының да бисызықлы болыўы тийис. Бул аңлатпалардың мәнислериниң оң болыўы керек. Ең ақырында, егер система толқын функциясына сәйкес келетуғын ҳалда турған болса, онда ниң мәниси 1 ге, ал ушын жазылған (3.2)-қатарда берилген ағзасы болмаса, онда ниң мәниси нолге тең болады. Бул шәртти қанаатландыратуғын бирден бир оң шама коэффициентиниң модули болып табылады. Солай етип, биз мынадай әҳмийетли нәтийжеге келемиз: толқын функциясына ийе ҳалда (3.2)-қатардағы коэффициентлердиң ҳәр бириниң модулиниң квадраты болған шамасы физикалық шамасының мәнисиниң ге тең болыўының итималлығын анықлайды екен. Мүмкин болған мәнислериниң итималлықларының суммасының 1 ге тең болыўы, басқа сөз бенен айтқанда мынадай қатнастың орын алады керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.3) |

функциясы нормировкаланбаған жағдайда да (3.3)-қатнастың орын алыўы керек. Бундай жағдайда суммасы ҳәм бойынша бисызықлы ҳәм нормировкаланған да 1 ге айланатуғын аңлатпаның жәрдеминде анықланыўы тийис. Тек интегралы ғана усындай аңлатпа болып табылады. Солай етип, мынадай теңликтиң орын алыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.4) |

Екинши тәрептен, ға комплексли түйинлес болған ди ге көбейтип ҳәм интеграллап

теңлигине ийе боламыз. Бул теңликти (3.4)-аңлатпа менен салыстырып

теңлигин аламыз. Буннан функциясын меншикли функциялар бойынша жайғанда пайда болатуғын коэффициентлерди анықлайтуғын мынадай формуланы аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.5) |

Егер бул теңликке (3.2) ни қойсақ, онда

Буннан меншикли функциялардың мынадай шәртлерди қанаатландыратуғынлығы келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.6) |

Бул теңликте шәрти орынланғанда ал теңсизлиги орынланатуғын жағдайларда көбеймесиниң интегралының теңсизлиги орынланатуғын жағдайлардағы ногде айланыўы функцияларының өз-ара ортогоналлығын аңғартады. Солай етип, меншикли функцияларының жыйнағы нормировкаланған, бир бири менен ортогоналлық (қысқалық ушын ортонормировкаланған) функциялардың толық системасын пайда етеди екен.

шамасының берилген ҳалдағы *орташа мәниси* ҳаққындағы түсиникти киргиземиз. Орташа мәнислердиң әдеттеги анықламасы бойынша ти берилген шаманың барлық меншикли мәнислериниң сәйкес итималлық ке көбеймесиниң қосындысы сыпатында анықлаймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.7) |

шамасын Ψ функциясының өзин емес, ал оны қатарға жайғандағы коэффициентлерге ийе болған аңлатпа түринде жазамыз. (3.7)-аңлатпаға көбеймеси киретуғын болғанлықтан биз излеп атырған аңлатпаның ҳәм бойынша бисызықлы болыўының кереклиги айқын. Биза бир математикалық *операторды* киргиземиз ҳәм оны арқалы белгилеймиз ҳәм оны былайынша анықлаймыз. Мейли () аңлатпасы операторының Ψ функциясына тәсириниң нәтийжесин аңғартатуғын болсын. Биз операторын () тиң комплексли түйинлес функциясына көбеймесинен алынған интегралдың орташа мәнис ке тең болатуғындай етип аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.8) |

Улыўма жағдайда операторының базы бир сызықлы интеграллық оператор болып табылатуғынлығын аңсат көриўге болады ҳәм сызықлы оператордың сызықлы болыўы ушын

теңликлериниң орынлы болады (бул аңлатпаларда менен лер арқалы ықтыярлы функциялар, ал арқалы ықтыярлы турақлы сан белгиленген). Ҳақыйқатында да, (3.8)-аңлатпадан пайдаланып орташа мәнистиң анықламасы болған (3.7)-аңлатпаны мына түрде жаза аламыз:

(3.8)-аңлатпа менен салыстырып, операторының Ψ функциясына тәсириниң нәтийжесиниң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.9) |

түринде жазылатуғынлығын көремиз. Егер биз ушын (3.5)-аңлатпаны усы аңлатпаға қойсақ, онда тиң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.10) |

түриндеги интеграллық оператор екенлигин көремиз. Бул аңлатпадағы оператордың ядросы деп аталатуғын функциясы былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.11) |

Солай етип, квантлық механикада ҳәр бир физикалық шама ушын белгили бир оператор сәйкес келтириледи екен.

(3.9)-аңлатпадан функциясы меншикли функциялардың бири болып табылатуғын болса (бундай жағдайда ниң биреўинен басқаларының барлығы нолге тең болады), онда оған операторының тәсир етиўиниң нәтийжесинде бул функция тек ғана меншикли мәнисине көбейтиледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.12) |

Демек, берилген f физикалық шамасының меншикли функциялары

теңлемесиниң шешимлери болып табылады, бул теңлемеде - турақлы. Ал, меншикли мәнислер жоқарыда жазылған теңлеме қойылған талапларды қанаатландыратуғын шешимлерге ийе болатуғын турақлысының мәнислери болып табылады. Биз төменде ҳәр қыйлы физикалық шамалардың операторларының түрин туўрыдан-туўры физикалық көз-қараслардан анықлаўға болатуғынлығын көремиз. Бундай жағдайда операторлардың жоқарыда гәп етилген қәсийетлери теңлемесин шешиў жолы менен меншикли функциялар менен меншикли мәнислерди анықлаўға мүмкиншилик береди.

Затлық физикалық шаманың меншикли мәнислери сыяқлы, оның қәлеген ҳалдағы орташа мәниси де затлық болып табылады. Бул жағдай сәйкес операторлардың қәсийетлерине белгили болған шеклерди қояды. (3.8)-аңлатпаны оған комплексли түйинлес болған аңлатпаға көбейтип

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.13) |

қатнасын аламыз. Бул аңлатпада арқалы операторына комплексли түйинлес оператор белгиленген.

Анықлама бойынша егер операторы ушын теңлиги орынлы болатуғын болса, онда оған түйинлес болған оператор ушын теңлиги орынлы болады.

Улыўма айтқанда, ықтыярлы түрдеги сызықлы оператор ушын бундай қатнастың орын алыўы шәрт емес. Сонлықтан (3.13)-аңлатпа операторының мүмкин болған түрине қойылатуғын базы бир шек болып табылады. Ықтыярлы операторы ушын гәп еткенде оның менен

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.14) |

шәртин қанаатландыратуғын операторы транспонирленген деп айтады. Бул теңликте менен лер ықтыярлы функциялар. Егер функциясы сыпатында Ψ менен түйинлес болған функциясын сайлап алса, онда (3.13)-аңлатпа менен салыстырыў

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.15) |

теңлигиниң орынланыўының керек екенлигин аңғартады. Бундай шәртлерди қанаатланыратуғын операторларды *эрмитлик операторлар* ямаса *Эрмит операторлары* деп атайды. Демек, квантлық механиканың математикалық аппаратында затлық физикалық шамаларға сәйкес келетуғын операторлардың *эрмитлик* болыўы керек.

Формаль түрде комплексли физикалық шамаларды да қараўға болады (яғный меншикли мәнислери комплексли болған шамалар). Мейли сондай шама болсын. Бундай жағдайда меншикли мәнислери тиң меншикли мәнислери менен комплексли түйинлес болған шамасын да киргизиўге болады. шамасына сәйкес келетуғын операторды арқалы белгилеймиз ҳәм оны комплексли түйинлес болған операторынан айыра алыў керек. Ҳақыйқатында да, операторының анықламасы бойынша базы бир ҳалындағы шамасының орташа мәниси

шамасына тең. Екинши тәрептен мынаған ийе боламыз:

Еки аңлатпаны бир бири менен теңлестирип

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.16) |

теңлигиниң орынлы екенлигин табамыз. Буннан, улыўма айтқанда операторының операторы менен сәйкес келмейтуғынлығы түсиникли болады. Енди (3.15)-шәртти былайынша жазыўға болады

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.17) |

Демек, затлық физикалық шаманың операторы өзиниң түйинлес операторына сәйкес келеди екен (сонлықтан эрмитлик операторларды өзи өзине түйинлес операторлар деп те атайды).

Эрмит операторының ҳәр қыйлы меншикли мәнислерге сәйкес келетуғын меншикли функцияларының өз-ара ортогоналлығын қалайынша тиккелей дәлиллеўге болатуғынлығын көрсетемиз. Мейли менен арқалы затлық физикалық шамасының ҳәр қыйлы меншикли мәнислери, ал менен лер оларға сәйкес келетуғын меншикли функциялар болсын:

Бул теңликлердиң бириншисиниң еки бөлимин ге, ал екинши теңликке комплексли түйинлес болған теңликти ге көбейтип ҳәм бул көбеймелерди бир биринен ағзама-ағза алып

теңлигине ийе боламыз. Бул теңликтиң еки бөлимин де бойынша интеграллаймыз. теңлиги орынлы болғанлықтан (3.14)-аңлатпадағы теңлик бойынша теңликтиң шеп тәрепиндеги интеграл нолге айланады. Сонлықтан,

теңлигин аламыз. Буннан шәртинен менен толқын функцияларының биз излеп атырған ортогоналлығы келип шығады.

Биз жоқарыда барлық ўақытта бир физикалық шамасы ҳаққында гәп еттик. Бирақ бир ўақытта өлшенетуғын физикалық шамалардың толық системасы ҳаққында гәп етиў керек еди. Бундай жағдайда биз бул шамаларының ҳәр қайсысына өзиниң операторларының сәйкес келетуғынлығын тапқан болар едик. меншикли функциялары биз қарап атырған барлық шамалары бир ўақытта белгили мәнислерге ийе болатуғын, яғный меншикли мәнислериниң белгили болған жыйнағына сәйкес келетуғын ҳалларға сәйкес келеди. Бул меншикли мәнислердиң барлығы

теңлемелер системасының шешимлери болып табылады.

Параграфтың ақырында физикалық шамалар менен оларға сәйкес келиўши эрмит операторларын кесте түринде беремиз.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Физикалық шама | | Оператор |
| Координата | **r** | **r** |
| Имульс |  |  |
| Импульстиң орбиталық моменти (мүйешлик момент, импульс моменти операторы) | **L** = [**rp**] | *[****r*** *]* |
| Толық энергия |  |  |

**§ 14. Квантлық системалардың ҳалларының ҳәр қыйлы көринислери**

Биз жоқарыда квантлық механика ушын бир қатар корпускулалық шамаларды бир ўақытта пайдаланыў мәселесиниң мәниске ийе емес екенлигин көрдик. Олардың қатарына импульстиң қураўшысы менен оған сәйкес координата киреди. Себеби тәбиятта усындай шамалардың жубы бир ўақытта орын алатуғын ансамбллердиң жүзеге келиўи мүмкин емес.

Биз дәслеп квантлық ансамбллер ҳаққында қысқаша гәп етемиз. Квантлық ансамбллер бирдей болып таярланатуғын ямаса өлшенетуғын квантлық системалардың группасына тийисли. Квантлық механикада система көп санлы ҳаллардың суперпозициясы түринде жасай алатуғын болғанлықтан ансамбли концепциясы бирдей болып таярланған көп санлы системалардың статистикалық қәсийетлерин тәрийиплеўге мүмкиншилик береди. Басқа сөз бенен айтқанда көз алдымызға бирдей болған, соның менен бир биринен ғәрезсиз квантлық системаларды көз алдымызға келтирейик. Егер бул системаларда бирдей болған бөлекшелердиң барлығы да бирдей квантлық ҳалларда туратуғын болса, онда квантлық системалардың жыйнағы квантлық ансамбль деп аталады.

Квантлық ансамбллер квантлық системалардың итималлықлық тәбиятын түсиниў ҳәм тәрийиплеў ушын шешиўши әҳмийетке ийе. Ансамбллерди үйрениў арқалы изертлеўшилер квантлық қубылыслардың статистикалық қәсийетлерин таллай алады ҳәм айырым системаларда өткерилген өлшеўлердиң нәтийжелери ҳаққында әҳмийетли болжаўларды ислейди.

Бул жағдайлардың барлығы ҳәр бир квантлық системаға қатнасы бойынша барлық өлшеў әсбапларын группаларға бөлиўдиң мүмкин екенлигин көрсетеди. Усындай группалардың биреўиниң әсбаплары ансамблдиң бөлекшелерин (ямаса системаларын) өлшейтуғын дүзилислердиң қандай да бир басқа группасы ушын тән болған белгилери бойынша өлшеў мүмкин емес белгиси бойынша сртларға ажыратады. Мысалы, егер биз орайының координаталары болған бөлекшелер менен ис алып барсақ, онда әсбаплардың еки группасын айырыўымыз мүмкин. Биринши группаға усындай бөлекшелердиң ансамблин координаталар ямаса олардың қәлеген функциясы [мысалы, потенциаллық энергия ] бойынша таллайтуғын әсбапларды киргизиўге болады. Екинши группаға ансамблди импульстиң қураўшылары ямаса усы қураўшылардың функциясы [мысалы, кинетикалық энергия] болған шамаларды өлшейтуғын әсбаплар киреди. Әсбаплардың басқа да группаларының болыўы мүмкин.

Усы ўақытқа шекем биз бөлекшелердиң ҳалын көбинесе толқын функциясы менен сәўлелендирдик ҳәм өзгериўши сыпатында бөлекшениң координатасын алдық. Таллаўларымыздың әпиўайы болыўы ушын тек бир координатасын пайдаланамыз. Бөлекшелерди координатасы бойынша ажыратып алатуғын (сортлайтуғын) дүзилислер оларды бойынша сортлай алмайды (бул параграфта ның орнына ты аламыз). Бизди бөлекшелерди координаталары бойынша емес, ал импульслери бойынша сортлаў қызықтыратуғын болсын. Бундай жағдайда ансамблди бойынша емес, ал бойынша сортлайтуғын әсбапты пайдаланыўымыз керек. Бирақ ансамблди тәрийиплейтуғын толқын функциясы координата тың функциясы сыпатында алынған. Усы жағдайға байланыслы ансамблдиң ҳалын импульс дан ғәрезли болған толқын функциясының жәрдеминде тәрийиплеўге бола ма? деген сораўдың туўылыўы тәбийий.

Биринши жағдайда биз ҳалды ансамблди бөлекшениң координаталары бойынша (биринши "есаплаў системасы"), ал екинши жағдайда болса ҳалды импульс бойынша (екинши "есаплаў системасы") таллайтуғын әсбапқа тийисли деп есаплаймыз. Қысқаша түрде ҳал ""-көринисинде ямаса ҳал ""-көринисинде берилген деп айтады ("координаталық көринис" ҳәм "импульслик көринис" деп оқыў керек).

""-көринисин табыў дым аңсат. Мейли бизге толқын функциясы берилген болсын (""-көринис). Бул функцияны импульс операторының меншикли функциялары бойынша қатарға (яғный Фурье-интгералына) жаямыз. Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (38.1) |
|  | (38.2) |

Егер биз амплитудасын билетуғын болсақ, онда функциясын билемиз, ның берилиўи функциясын толық анықлайды. Сонлықтан амплитудасын аргументи импульс болып табылатуғын толқын функциясы деп қараў мүмкин. Бул функция бөлекшениң функциясы тәрийиплейтуғын физикалық ҳалын тәрийиплейди. (38.1)-формуланы толқын функциясын ""-көринистен ""-көриниске түрлендириў, ал (38.2)-формуланы ""-көринистен ""-көриниске түрлендириў формуласы деп қараўға болады.

Енди ғәрезсиз өзгериўши бөлекшениң энергиясы болып табылатуғын ҳалдың көринисин қараймыз. Айқынлық ушын ни мәнислердиң дискрет спектрине ийе деп есаплайық. Сәйкес меншикли функцияларды арқалы белгилейик. толқын функциясын төмендегидей қатар түринде көрсетиўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (38.3) |
|  | (38.4) |

Бул жағдайда да барлық амплитудаларын бериў функциясын толық анықлайды. Керисинше, функциясының берилиўи амплитудасын анықлайды. Сонлықтан барлық барлық лардың жыйнағын функциясы тәрийиплейтуғын ҳалды тәрийиплейди деп қараўға болады. Бирақ, бул жағдайда ғәрезсиз өзгериўши сыпатында энергия алынған көрсетиў ҳаққында гәп етиледи. Бундай көз-қарастан (38.3)-формула толқын функциясын ""-көринистен ""-көриниске түрлендириў формуласы болады. (38.4)-формула болса кери түрлендириў формуласы болып табылады. (38.1)-(38.4) формулалардан *ғәрезсиз өзгериўшиниң қандай да бир мәнисиниң сәйкес көринисте табыўдың итималлығының сәйкес көринистеги толқын функциясының модулиниң квадратына тең екенлиги келип шығады* [ сыяқлы () биз ( деп жаза аламыз]. Ҳақыйқатында да, мейли базы бир ҳалы бар болсын. Бундай жағдайда координатаның пенен тың арасында жататуғынлығының итималлығы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (38.5) |

аңлатпасының жәрдеминде табылады. Импульсти менен мәнислериниң арасында табыўдың итималлығы мынаған тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (38.6) |

мәнисине тең энергияны табыўдың итималлығы төмендегидей аңлатпаның жәрдеминде есапланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (38.7) |

**§ 15. Орташа мәнислер**

Берилген ҳалдағы шамасының орташа мәниси түсинигин киргиземиз. Орташа шамалардың әдеттегидей анықламасына сәйкес усы шаманың меншикли мәнислери менен сәйкес итималлық тың көбеймесиниң суммасы сыпатында табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.7) |

ти функциясын қатарға жайғанда жазылатуғын коэффициентлер арқалы емес, ал усы функцияның өзи арқалы аңғартайық. (3.7)-теңликке көбейтиўшилери киретуғын болғанлықтан, биз излеп атырған аңлатпаның ҳәм лер бойынша бисызықлы болыўының керек екенлиги түсиникли. арқалы белгиленетуғын базы бир математикалық операторды киргиземиз ҳәм оны былайынша анықлаймыз. Мейли түриндеги жазыў операторының функциясына тәсириниң нәтийжесин аңғартатуғын болсын. Биз операторын тиң ге көбеймесиниң интегралы орташа мәнисине тең болатуғындай етип анықлаймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.8) |

Улыўма жағдайда операторының базы бир сызықлы интеграллық оператор екенлигин аңсат көриўге болады. Биз оператордың сызықлы болыўы ушын мынадай шәртлердиң орынланыўының керек екенлигин еске түсиремиз:

Бул теңликлерде - ықтыярлы функциялар, ал - ықтыярлы турақлы.

Ҳақыйқатында да ушын жазылған (3.5)-аңлатпадан пайдаланып, биз (3.7)-анықламаны былайынша көширип жаза аламыз:

(3.8)-аңлатпа менен салыстырып, биз операторының функциясына тәсириниң мынадай түрге ийе болатуғынлығын көремиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.9) |

Егер биз бул теңликке ушын жазылған (3.5)-теңликти қоятугын болсақ, онда операторының

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.10) |

түриндеги интеграллық оператор екенлигин көремиз. Бул аңлатпадағы функциясының (оны оператордың ядросы деп атайды) мынадай түрге ийе болатуғынлығын көремиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.11) |

Солай етип, квантлық механикада ҳәр бир физикалық шамаға белгили болған сызықлы оператор сәйкес келтириледи екен.

(3.9)-теңликтен егер функциясы меншикли функцияларының бири болып табылатуғын болса (сонлықтан коэффициентлериниң биреўинен басқасының барлығы нолге тең), онда оған операторы тәсир еткенде бун функция тек меншикли мәнисине көбейтиледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.12) |

Солай етип, берилген шамасының меншикли функциялары

теңлемесиниң шешимлери болып табылады екен. Бул теңлемеде - турақлы шама, ал меншикли мәнислер болса шамасы жазылған теңлеме талап етилетуғын шәртлерди қанаатландыратуғын жағдайларда шешимлерге ийе болатуғын мәнислер болып табылады. Биз төменде ҳәр қыйлы физикалық шамалар ушын операторлардың түриниң туўрыдан-туўры физикалық көз-қараслардың тийкарында анықланыўының мүмкин екенлигин көремиз. Бундай жағдайда операторлардың жоқарыда еслетилип өтилген қәсийетлери теңлемесин тиккелей шешиў жолы менен меншикли функцияларды ҳәм меншикли мәнислерди анықлаўға мүмкиншилик береди.

Затлық физикалық шаманың меншикли мәнислериндей, олардың барлық ҳаллардағы орташа мәнислери де затлық. Бул жағдай операторлардың қәсийетлерине белгили болған шеклерди қояды. (3.8)-аңлатпаны оған комплексли түйинлес болған аңлатпаға көбейтип

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.13) |

теңлигине ийе боламыз. Бул аңлатпада арқалы операторына комплексли түйинлес болған операторды аңлатады. Анықламасы бойынша операторы ушын теңлиги орынлы болса, онда операторы ушын теңлиги орынлы болады. Улыўма айтқанда ықтыярлы түрде алынған сызықлы оператор ушын бундай қатнас ушын орын жоқ. Сонлықтан бул қатнас операторының түри ушын базы бир шеклерди қояды. Ықтыярлы операторы ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.14) |

шәрти менен анықланатуғын оның менен транспонирленген операторының сәйкес келетуғынлығын көрсетиўге болады[[3]](#footnote-3). Бул теңликте менен ҳәр қыйлы болған еки функция. Егер функциясының орнына функциясына түйинлес болған функциясын алатуғын болсақ, онда (3.13) пенен салыстырыў

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.15) |

теңлигиниң орынлы болатуғынлығын көрсетеди. Бундай шәртти қанаатландыратуғын операторларды Эрмит операторлары (эрмитлик операторлар) деп атайды.

(3.10)-түрдеги сызықлы интеграллық оператор ушын эрмитлик шәрти оператордың ядросы ушын теңлигиниң орынланыўының керек екенлигин аңғартады.

Солай етип, квантлық механикадағы затлық физикалық шамаларға сәйкес келетуғын операторлардың эрмитлик болыўы керек. Формаллық жақтан комплексли физикалық шамаларды да, яғный меншикли мәнислери комплексли болған шамаларды да қараўға болады. Мейли тап сондай шама болсын. Бундай жағдайда оған комплексли түйинлес шамасын киргизиўге болады. Оның меншикли мәнислери меншикли мәнислери менен түйинлес. шамасына сәйкес келетуғын операторды арқалы белгилеймиз. Оны операторына түйинлес деп атайды ҳәм оның комплексли түйинлес операторынан айыра билиў керек. Ҳақыйқатында да операторының анықламасы бойынша, шамасының базы бир ҳалындағы орташа мәниси

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Екинши тәрептен

теңлигине ийе боламыз. Еки аңлатпаны бир бири менен теңлестирип

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.16) |

теңлигиниң орынлы екенлигин табамыз. Буннан улыўма айтқанда операторының операторына сәйкес келмейтуғынлығы айқын болады. Енди (3.15)-шәртти былайынша жазыўға болады

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.17) |

Демек, затлық физикалық шаманың операторы өзиниң түйинлес операторына сәйкес келеди екен (эрмитлик операторларды өзи-өзине түйинлес операторлар деп те атайды).

Енди эрмитлик оператордың ҳәр қыйлы меншикли мәнислерге сәйкес келетуғын меншикли функцияларының өз-ара ортогоналлық екенлигин қалайынша тиккелей дәлиллеўге болатуғынлығын көрсетемиз. Мейли, менен затлық шаманың ҳәр қыйлы болған еки меншикли мәнислери, ал менен оларға сәйкес келетуғын меншикли функциялар болсын:

Бул теңликлердиң бириншисиниң еки тәрепин де ге, ал екинши теңликке түйинлес болған теңлемени ге көбейтип, буннан кейин бул көбеймелерди ағзама-ағза алсақ, онда мынадай аңлатпаны аламыз:

Бул теңлемениң еки бөлимин де бойынша интеграллаймыз. теңлиги орынлы болғанлықтан, (3.14)-аңлатпаға байланыслы теңликтиң шеп тәрепиндеги интеграл нолге айланады. Ҳақыйқатында да

Нәтийжеде

Егер теңсизлигиниң орынлы екенлигин есапқа алсақ, онда ең кейинги интегралдан ҳәм функцияларының ортогоналлық қәсийети келип шығады.

Биз барлық ўақытта тек бир физикалық шама ҳаққында гәп еттик. Бирақ, усы параграфтың басында бир ўақытта өлшенетуғын физикалық шамалардың толық системасы ҳаққында гәп етиў керек еди. Бундай жағдайда усындай шамалардың ҳәр қайсысына өзиниң операторлары сәйкес келеди. Сәйкес функциялары биз қарап атырған шамалардың барлығы белгили болған мәнислерге ийе болатуғын ҳалына сәйкес келеди (яғный меншикли мәнислердиң белгили болған жыйнағына) ҳәм төмендегидей теңлемелердиң биргеликтеги шешимлери болып табылады:

**§ 16. Операторларды қосыў ҳәм көбейтиў**

Биз дәслеп базы бир сызықлы операторлардан келип шыққан ҳалда төмендегидей алгебралық операциялардың жәрдеминде басқа да сызықлы операторларды алыўға болатуғынлығын көрсетип өтемиз:

а). операторын турақлы шамасына көбейтиў

b). Еки оператордың қосындысы болған операторын табыў:

c). көбеймесин есаплаў, бул көбеймеде операторы операторына көбейтиледи.

Еки оператордың қосындысынан еки оператордың көбеймесиниң үлкен парқының бар екенлигин атап өтемиз. Көп жағдайларда *еки оператордың көбеймеси коммутативли емес*.

Егер пенен арқалы ҳәм физикалық шамаларға сәйкес келетуғын операторлар болып табылатуғын болса, онда қосындысына қосындысы сәйкес келеди. Бирақ, квантлық механикада ҳәр қыйлы физикалық шамаларды қосыўдың мәниси бул шамалардың бир ўақытта болатуғынлығы ямаса болмайтуғынлығына байланыслы. Егер ҳәм физикалық шамалары бир ўақытта өлшенетуғын болса, онда пенен операторлары операторының меншикли фукнциялары болып та табылады. Ал соңғы оператордың меншикли мәнислери суммаларына тең.

Егер ҳәм физикалық шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алмайтуғын болса, онда қосындысының мәниси шекленген. Ықтыярлы ҳалда бул шаманың орташа мәниси олардың ҳәр қайсысының орташа мәнислериниң қосындысына тең деп тастыйықлаўға ғана болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.1) |

Егер операторының меншикли мәнислери ҳәм функциялары ҳаққында гәп ететуғын болсақ, онда улыўма айтқанда олар ҳәм шамаларының функцияларын ҳеш қандай қатнасының жоқ екенлигин атап өтемиз. Соның менен бирге ҳәм операторлары эрмитлик болса, онда операторының да эрмитлик екенлиги айқын. Сонлықтан оның меншикли мәнислери затлық ҳәм усындай жоллар менен анықланған жаңа шамасының меншикли мәнислеринен турады.

Енди биз ҳәм операторларының көбеймелердеги орынларын алмастырып қойыў, яғный коммутативили мәселесин қараймыз.

Егер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.3) |

теңлиги орынлы болатуғын болса, онда бул операторлар бир бири менен коммутативли болып табылады. Буннан биз әҳмийетли нәтийжеге келемиз: егер операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болса, онда ҳәм шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе болады. Усыған сәйкес мынадай теореманы дәлиллеўге болады: егер ҳәм операторлары коммутацияланатуғын болса, онда олардың барлық меншикли функцияларын улыўмалық етип сайлап алыўға болады. Физикалық жақтан бул сәйкес физикалық шамалардың бир ўақытта өлшенетуғынлығын аңғартады. Солай етип, операторлардың коммутативлиги физикалық шамалардың бир ўақытта өлшенетуғынлығының зәрүрли ҳәм жеткиликли шәрти болып табылады.

Егер ҳәм шамалары бир ўақытта өлшенбейтуғын болса, онда оларды көбейтиў түсиниги жоқарыда келтирилген туўрыдан-туўры мәниске ийе болмайды. Бул жағдайда операторы эрмитлик болып табылмайды ҳәм, сонлықтан, затлық физикалық шамаға сәйкес келе алмайды. Ҳақыйқатында да, транспонирленген оператордың анықламасы бойынша мынадай теңликлерди жаза аламыз:

Бул аңлатпада операторы тек функциясына, ал операторы тек функциясына тәсир етеди. Сонлықтан интеграл белгисиниң астында еки ҳәм функцияларының көбеймеси тур. Транспонирленген оператордың анықламасын және бир рет қолланып, мынаны жазамыз:

Солай етип, биз дәслепки функцияға салыстырғанда менен орынларын алмастырған интегралды алдық Басқа сөз бенен айтқанда операторы транспонирленген операторы болып табылады. Сонлықтан биз мынадай аңлатпаны жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.4) |

Демек, көбеймеси менен транспонирленген оператор кери бағытта жазылған транспонирленген көбейткишлердиң көбеймеси болып табылады екен. (4.4)-теңликтиң еки тәрепинен де комплексли түйинлеслерин алып,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.5) |

теңлигиниң орынлы екенлигин табамыз. Егер ҳәм операторларының екеўи де эрмитлик болса, онда теңлиги орынлы. Буннан ҳәм көбейтиўшилери коммутативлик болса, онда операторының эрмитлик екенлиги келип шығады.

Коммутативлик емес болған еки ҳәм операторларының көбеймесинен олардың симметрияластырылған көбеймеси болған эрмитлик операторды пайда етиўдиң мүмкин екенлигин атап өтемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.6) |

айырмасының "антиэрмитлик" оператор екенлигине де аңсат көз жеткериўге болады (бундай оператор ушын транспонирленген оператор кери белгидеги комплексли түйинлес операторға тең). Оны ге көбейтилген эрмитлик көбейтиў түринде алыўға болады, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.7) |

операторы да эрмитлик.

Буннан былай қысқалық ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.8) |

белгилеўин пайдаланамыз (гейпара жағдайларда квадрат қаўсырмалардың пайдаланылыўы да мүмкин) ҳәм оны операторлардың коммутаторы деп атаймыз. Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.9) |

теңлигиниң орынлы екенлигине аңсат исениўге болады. Егер ҳәм теңликлери орынлы болса, онда пенен операторларының коммутативлиги келип шықпайды.

**1-Мәселе**:

Классикалық көбеймесине сәйкес келетуғын квантлық механиканың операторын табыў талап етиледи.

**Шешими**:

а) пенен операторлары коммутацияланбайтуғын, теңлиги орын алатуғын ҳәм

орынларын алмастырып қойыў қатнасын қанаатландыратуғын болғанлықтан классикалық көбеймесине

|  |  |
| --- | --- |
|  | (777.3) |

түриндеги ҳәр бир оператор сәйкес келе алады. Дәслеп турақлысын ҳақыйқый деп болжаймыз. Бул турақлыны сайлап алыў ушын қәлеген ψ квантлық ҳал ушын ның орташа мәнисин ҳақыйқый деп есаплаў керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (777/4) |

операторы ушын аңлатпасынан пайдаланып, соңғы теңликти кең түрде жазылған түрде көширип жазамыз:

Енди бул аңлатпаның ҳақыйқый бөлимин формуласы бойынша жормал бөлиминен ажыратып

аңлатпасына ийе боламыз. Бул теңликтиң оң тәрепиндеги екинши интеграл затлық (ҳақыйқый). Ал екинши интеграл болса жормал ҳәм оның теңлигине сәйкес жоғалыўы керек. Усының менен бирге

теңлиги орынланатуғын болғанлықтан бул шәртти былайынша жаза аламыз:

Бул теңлик интеграллаўдын кейин теңлигин береди.

Солай етип, операторының эрмитлик екенлигин тәмийинлейтуғын дурыс симметриялық комбинация

|  |  |
| --- | --- |
|  | (777.6) |

комбинация болып табылады.

Егер комплексли α ға өтетуғын болса, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (777.7) |

түриндеги қәлеген ны пайдаланыўға болады (β арқалы ықтыярлы турақлы сан белгиленген). Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (777.8) |

аңлатпасы орынлы ҳәм биз ҳәзир ғана биринши қосылыўшының орташа мәнисиниң затлық, ал екинши қосылыўшы болса орын алмастырып қойыў қатнасына байланыслы орташалағанда квантлық ҳалды сайлап алыўдан ғәрезсиз βℏ үлесин береди. Демек, бул қосылыўшы физикалық мәниске ийе емес ҳәм оны таслап кетиўге болады.

б. Оператордың эрмитлигин

|  |  |
| --- | --- |
|  | (777.9a) |

ямаса толығырақ

|  |  |
| --- | --- |
|  | (777.9b) |

қатнасларының жәрдеминде бирдей табыс пенен анықлаўға болады. Бул аңлатпаларда менен лар ықтыярлы комплексли коэффициентлер болып, оларды сайлап алыў тек интегралдың бар болыў шәрти менен шекленеди. α затлық болған жағдайда операторы ушын бул жағдай

ямаса

аңлатпаларын береди. Бул аңлатпаларда қосылыўшылардың тәртибин өзгертип, мынаны аламыз:

Енди шеп тәрепте турған интегралды бөлеклерге бөлиў жолы менен есаплаймыз ҳәм мынаған ийе боламыз:

Бул, әлбетте, бурын алынған нәтийже болып табылады (яғный α = 1/2).

**2-мәселе**. Операторды дифференциаллаў.

Мейли, шамасы ҳәм операторларының пүтин функциясы болсын[[4]](#footnote-4). Коммутациялық қағыйдалардан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (888.1) |
|  | (888.2) |

теңликлериниң келип шығатуғынлығын дәлиллеңиз. Бул аңлатпаларда қысқа түрде жазыў мақсетниде

белгилеўи қабыл етилген.

**Шешими**. Каноникалық коммутациялық қағыйдалар

|  |  |
| --- | --- |
|  | (888.3) |

(888.1)- ҳәм (888.2)-қатнаслардың дурыс екенлигиниң дәлили төрт избе-из басқышқа бөлинеди.

1. Мейли, . Бундай жағдайда ҳәм . Демек, (888.1)- ҳәм (888.2)-қатнаслар төмендегидей түрге енеди:

ҳәм нәтийжеде (888.3)-аңлатпаға сәйкес келеди. Тап усындай жоллар менен олардың дурыслығы ҳәм теңликлери орынлы болатуғын жағдай ушын да табылады.

2. Мейли, (888.1)- ҳәм (888.2)-қатнаслар ҳәм функциялары ушын дурыс болсын. Бирақ, сызықлылықтың салдарынан олар сызықлы комбинациясы ушын да дурыс болады. Бул аңлатпада менен арқалы ықтыярлы комплексли санлар белгиленген.

3. ҳәм функциялары ушын дурыс болған бул қатнаслар олардың көбеймеси ушын да дурыс болады. (88.1)-жағдай ушын буны тиккелей есаплаўлар жолы менен дәлиллеўге болады:

Тап усындай есаплаўларды (888.2)-қатнас ушын да ислеў қыйын емес.

4. Алдыңғы пункттен биз қарап атырған қатнаслардың менен көбейтиўшилери бар болған көбеймелердиң қәлеген ықтыярлы сызықлы комбинациясы ушын да дурыс екенлиги келип шығады. Буннан олардың ҳәм өзгериўшилериниң қәлеген пүтин функциясы ушын да дурыс болатуғынлығын аламыз. Мәселениң шәрти бойынша усы жағдайды дәлиллеў керек еди.

**II БАП. ЭНЕРГИЯ МЕНЕН ИМПУЛЬС**

**§ 17. Гамильтониан**

Квантлық механикада функциясы физикалық системаның ҳалын толығы менен анықлайды. Бул функцияның ўақыттың буннан кейинги моментлердеги де барлық қәсийетлерин квантлық механика тәрепинен руқсат етилетуғын толықлық дәрежесинде ғана тәрийиплейтуғынлығын аңғартады. Бул жағдай математикалық жақтан былайынша аңлатылады: толқын функциясынан ўақыттың қәлеген моменти бойынша алынған туўынды толқын функциясы дың өзиниң сол ўақыт моменттеги мәниси менен анықланады. Усының менен бирге бул ғәрезликтиң суперпозиция принципине сәйкес сызықлы болыўы керек. Ең улыўма түрде бул ғәрезликти былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (8.1) |

Бул теңликте - базы бир сызықлы оператор, көбейтиўшисиниң жазылыўының себеби төмениректе айтылады.

интегралы ўақыттан ғәрезсиз болған турақлы шама болғанлықтан, мынаған ийе боламыз:

Бул теңликке (8.1)-аңлатпаны қойып ҳәм биринши интегралда транспонирленген оператордың анықламасын пайдаланып, улыўмалық көбейме ты қалдырып мынаны аламыз:

Бул теңликтиң ықтыярлы функциясы ушын орынланатуғынлығына байланыслы, буннан теңлиги келип шығады, яғный операторының эрмитлик оператор екенлиги келип шығады.

Оның қандай физикалық шамаға сәйкес келетуғынлығын анықлаймыз. Оның ушын (6.1)-шеклик аңлатпасы менен пайдаланамыз ҳәм төмендегидей теңликти жазамыз:

Әстелик пенен өзгеретуғын амплитудасын дифференциалламаўға болады. Бул теңликти (8.1)-анықлама менен салыстырып, шеклик жағдайда операторының шамасына әпиўайы көбейтиўге алып келинетуғынлығын көремиз. Бул эрмитлик оператор өтетуғын физикалық шама болып табылады. Бирақ туўындысы механикалық системаның Гамильтон функциясынан басқа ҳеш нәрсе емес. Демек, квантлық механикадағы Гамильтон функциясына сәйкес келетуғын оператор болып табылады екен. Оны системаның Гамильтон операторы ямаса системаның гамильтонианы деп атайды. Егер гамильтонианның түри белгили болса, онда (8.1)-санлы теңлемеси берилген физикалық системаның толқын функцияларын анықлайды. Квантлық механиканың бул тийкарғы теңлемеси толқын теңлемеси деп аталады.

**§ 18. Операторларды ўақыт бойынша дифференциаллаў**

Квантлық механикадағы физикалық шаманың ўақыт бойынша туўындысы классикалық механикадағы физикалық шаманың ўақыт бойынша туўындысындай болып анықланбайды. Ҳақыйқатында да, классикалық механикадағы туўындыны қараў еки шаманың бир бирине жүдә жақын болған, бирақ ҳәр қыйлы ўақыт моментлериндеги мәнислерин қараў менен байланыслы. Бирақ, квантлық механикада ўақыттың базы бир моментинде белгили мәниске ийе шама ўақыттың буннан кейинги моментлеринде ҳеш қандай анық мәниске ийе болмайды. Бул ҳаққында биз жоқарыда гәп еттик. Сонлықтан ўақыт бойынша туўындынды түсинигин квантлық механикада пүткиллей басқаша анықлаймыз. шамасының туўындысы ти усы шамасының орташа мәнисиниң туўындысы деп алыў тәбийий. Бундай анықлама тийкарында биз төмендегидей аңлатпаға ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9.1) |

Бул анықламадан келип шыққан ҳалда шамасына сәйкес келетуғын квантлық механиканың операторы ушын аңлатпаны алыў қыйын емес:

Бул аңлатпада шамасы операторын ўақыт бойынша дифференциаллаўдан келип шығатуғын оператор. ҳәм туўындылары ушын олардың (8.1)-аңлатпа бойынша мәнислерин қойып, мынадай теңликлерге ийе боламыз:

операторы эрмитлик болғанлықтан

теңлиги орынлы болады. Демек,

аңлатпасын аламыз.

Екинши тәрептен, орташа мәнислердиң анықламасы бойынша

теңлиги орынлы болғанлықтан, интеграл астында турған аңлатпаның биз излеп атырған оператор екенлигин көремиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9.2) |

**Ескертиў**: Классикалық механикада улыўмаластырылған координаталар менен улыўмаластырылған импульслер болған лердиң функциясы болған шамасынан ўақыт бойынша алынған толық туўынды былайынша жазылады:

Бул теңликке Гамильтон теңлемелери бойынша аңлатпаларын қойып, төмендегилерди аламыз:

Квадрат қаўсырмадағы шамасы ҳәм шамалары ушын *Пуассон қаўсырмалары* атамасы менен белгили. (9.2)-аңлатпа менен салыстырып биз классикалық шекке өткенде операторы биринши жақынласыўда, күтилгениндей, нолге айланады. Ал ℏ бойынша келеси жақынласыўда қа айланады.

Бул нәтийже басқа қәлеген ҳәм шамалары ушын да дурыс: операторы шегинде шамасына өтеди, бул аңлатпада Пуассон қаўсырмасы болып табылады:

Бул бизиң гамильтонианы ға сәйкес келетуғын системаны формал түрде барлық ўақытта көрсете алатуғынлығымыз бенен байланыслы.

Егер операторы ўақыттан анық ғәрезли болмаса, онда көбейтиўши дәллигинде гамильтониан менен операторының коммутаторына алып келинеди.

Физикалық шамалардың жүдә әҳмийетли болған категориясы операторлары ўақыттан анық ғәрезли емес ҳәм гамильтониан менен коммутацияланатуғын операторлар болып табылады. Сонлықтан теңлиги орын алады. Бундай шамаларды сақланатуғын шамалар деп атайды. Олар ушын яғный Басқа сөз бенен айтқанда шаманың орташа мәниси ўақыттың өтиўи менен турақлы болып қалады. Усының менен бирге, егер берилген ҳалда шамасы белгили мәниске ийе болса (яғный толқын функциясы операторының меншикли функциясы), онда ўақыттың буннан кейинги моментлеринде де ол белгили болған ҳәм бурынғыдай мәниске ийе болады.

**§ 19. Стационар ҳаллар**

Туйық системаның гамильтонианы (соның менен бирге турақлы, бирақ өзгермели емес сыртқы майданда турған системаның гамильтонианы) анық түрде ўақытқа ийе бола алмайды. Себеби усындай физикалық системаға қатнасы бойынша ўақыттың барлық моментлери эквивалент. Екинши тәрептен, әлбетте ҳәр бир оператор өзи менен коммутацияланатуғын болғанлықтан, биз сыртқы өзгермели майданда турмайтуғын системалар ушын жазылған Гамильтон функциясы сақланады деген жуўмаққа келемиз. Квантлық механикадағы энергияның сақланыў нызамының мазмуны мынадай: егер берилген ҳалда энергия белгили мәниске ийе болса, онда бул мәниси ўақыттың өтиўи менен сақланады.

Энергиясы белгили болған мәниске ийе болған ҳаллар системаның стационар ҳаллары деп аталады. Олар Гамильтон операторының меншикли функциялары болып табылатуғын меншикли функциялары менен, яғный

теңлемесин қанаатландыратуғын функциялар менен тәрийипленеди. Бул теңлемеде - энергияның меншикли мәнислери. Усыған сәйкес, функциясы ушын жазылған

(8.1)-теңлемени ўақыт бойынша тиккелей интеграллаўға болады ҳәм ол

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10.1) |

функциясын береди. Бул аңлатпада - координаталардың функциясы болып табылады. Стационар ҳаллардың толқын функцияларының ўақыттан ғәрезлиги усындай аңлатпа менен бериледи.

Киши ҳәрип пенен жазылған арқалы биз стационар ҳаллардың ўақытлық көбейтиўшиге ийе болмаған толқын функцияларын белгилеймиз. Бул функциялар, соның менен бирге энергияның меншикли мәнислери

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10.2) |

теңлемесин шешиў жолы менен анықланылады.

Энергияның мүмкин болған мәнисине ийе болған стационар ҳалды системаның тийкарғы ҳалы (ямаса нормаль ҳалы) деп атайды.

Ықтыярлы толқын функциясы болған функциясын стационар ҳаллардың толқын функциялары бойынша жайылған қатар төмендегидей түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10.3) |

Қатарға жайыўдың коэффициентлериниң квадратлары әдеттегидей системаның энергиясының ҳәр қыйлы мәнислериниң итималлығын анықлайды.

Стационар ҳалдағы координаталар ушын итималлықлардың тарқалыўы квадраты бойынша анықланады. Биз оның ўақыттан ғәрезсиз екенлигин көрдик. Тап усындай гәплер операторы ўақыттан анық түрде ғәрезсиз болған шамасының орташа мәнислери ушын да орынлы .

Жоқарыда қәлеген сақланатуғын шаманың операторының гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығы көрсетилди. Бул қәлеген сақланатуғын шаманың энергия менен бир ўақытта өлшенетуғынлығын көрсетеди.

Ҳәр қыйлы стационар ҳаллардың арасында энергияның тек бир меншикли мәнисине сәйкес келетуғын (бундай жағдайда системаның бир *энергия қәддине* сәйкес келетуғын деп те айтады), бирақ бир биринен қандай да бир басқа физикалық шамалары бойынша айрылатуғын стационар ҳаллардың болыўы мүмкин. Бир неше стационар ҳаллар сәйкес келетуғын қәдди ҳаққында гәп еткенде *азғыныў* ҳаққында айтады. Азғынған қәддилердиң бар болыўының мүмкиншилиги, улыўма айтқанда, энергияның өзиниң физикалық шамалардың толық системасын пайда етпейтуғынлығы менен байланыслы.

Мынадай қызық жағдайды атап өтемиз: операторлары коммутативлик болмаған еки ҳәм шамасы бар болатуғын болса, онда системаның энергиясының қәддилери азғынған болады. Ҳақыйқатында да, мейли стационар ҳалдың толқын теңлемеси бар болсын ҳәм энергия менен бирге шамасы да анық мәниске ийе болатуғын болсын. Бундай жағдайда функциясы (турақлы көбейтиўши дәллигинде) функциясына сәйкес келмейди. Егер бундай болмағанда (яғный сәйкес келгенде) шамасы да анық мәниске ийе болған болар еди, ал бундай болыўдың мүмкиншилиги жоқ, себеби ҳәм шамалары бир ўақытта өлшенбейди. Екинши тәрептен функциясы да сыяқлы энергияның тап сол мәнисине сәйкес келетуғын гамильтонианның меншикли функциясы:

Солай етип, энергиясына бирден аслам меншикли функцияның сәйкес келетуғынлығын көремиз, яғный қәдди азғынған.

Энергияның бир азғынған қәддине сәйкес келетуғын толқын функцияларының қәлеген сызықлы комбинациясының да энергияның тап сол мәнисиниң меншикли функциясы болып табылатуғынлығын айқын. Басқа сөз бенен айтқанда энергияның азғынған ҳалының меншикли функцияларын сайлап алыў бир мәнисли емес. Улыўма айтқанда, азғынған қәддиниң ықтыярлы түрде сайлап алынған меншикли функциялары бир бири менен ортогоналлық емес. Олардың сызықлы комбинацияларын арнаўлы түрде сайлап алыў жолы менен барлық ўақытта бир бири менен ортогоналлық болған (ҳәм нормировкаланған) меншикли функциялардың жыйнағын алыўға болады. Бундай операцияны шексиз көп санлы усыллардың жәрдеминде әмелге асырыўға болатуғынлығын атап өтемиз. Ҳақыйқатында да, дана функцияны сызықлы түрде түрлендиргенде алынатуғын ғәрезсиз коэффициентлердиң саны қа тең, ал нормировка ҳәм ортогоналлық шәртлериниң саны ге тең, яғный шамасынан киши.

Азғынған қәддиниң меншикли функциялары ҳаққында айтылған бул тастыйықлаўлар тек энергияның меншикли функцияларына ғана емес, ал қәлеген оператордың меншикли функциялары ушын да тийисли. Берилген оператордың ҳәр қыйлы меншикли функциялары ғана ортогоналлық болып табылады. Тек бир азғынған меншикли ҳалға сәйкес келетуғын функциялар болса, улыўма айтқанда, ортогоналлық емес.

Егер системаның гамильтонианы еки (ямаса бир неше) бөлимлердиң қосындысынан туратуғын болса, онда ҳәм олардың бири тек , ал екиншиси координаталарына ийе болса, онда операторының меншикли функцияларының ҳәм операторларының меншикли функцияларының көбеймеси түринде көрсетилиўи мүмкин. Ал энергияның меншикли мәнислери бул операторлардың меншикли мәнислериниң қосындысынан турады.

Энергияның меншикли мәнислериниң спектриниң дискрет болыўы да, үзликсиз болыўы да мүмкин. Дискрет спектрдиң стационар ҳалы барлық ўақытта системаның финистлик қозғалысына сәйкес келеди (бундай қозғалыста системаның өзи ямаса оның бөлими шексизликке кетпейди). Ҳақыйқатында да, дискрет спектрдиң меншикли функциялары ушын барлық кеңислик бойынша алынған интегралы шекли. Бул квадратының тез кемейетуғынлығын ҳәм шексизликте нолге айланатуғынлығын аңғартады. Басқа сөз бенен айтқанда координаталардың шексиз үлкен мәнислериниң итималлығы нолге тең, яғный система финитлик қозғалады (ямаса байланысқан ҳалда болады деп айтады).

Үзликсиз спектрдиң толқын функциялары ушын интегралы тарқалады. Бундай жағдайда толқын функциясының квадраты координатаның ҳәр қыйлы мәнислериниң итималлығын тиккелей анықламайды ҳәм оны усы итималлыққа пропорционал болған шама сыпатында қараўға болады. интегралының тарқалыўын шамасының шексизликте нолге айланбайтуғынлығы менен байланыслы (ямаса нолге жеткиликли дәрежеде тез айланбайды). Сонлықтан сыртқы деп алынған ҳәм қаншама болса да үлкен дәрежеде үлкен деп алынған кеңисликке қатнасы бойынша сыртқы, бирақ шекли болған кеңисликте алынған интегралы бәри бир тарқалатуғын болады. Бул биз қарап атырған ҳалда системаның (ямаса оның қандай да бир бөлиминиң) шексизликте жайласатуғынлығын аңғартады. Үзликсиз спектрдиң ҳәр қыйлы стационар ҳалларының толқын функцияларының суперпозициясы болып табылатуғын толқын функциясы ушын интегралының жыйнақлы болыўы да мүмкин ҳәм бундай жағдайда система кеңисликтиң шекли областында жайласады. Бирақ, ўақыттың өтиўи менен бул область шекленбеген түрде кеңейеди ҳәм ақыр-аяғында шексизликке кетеди.

Ҳақыйкатында да үзликсиз спектрдиң толқын функцияларының ықтыярлы суперпозициясы мынадай түрге ийе:

функциясының модулиниң квадраты қос интеграл түринде жазылыўы мүмкин:

Егер бул аңлатпаны ўақыттың базы бир кесиндиси бойынша орташаласақ ҳәм оннан кейин ны шексизликке умтылдырсақ, онда осцилляцияланатуғын көбейтиўшисиниң орташа мәниси ҳәм соның менен бирге шектеги барлық интеграл нолге айланады. Басқа сөз бенен айтқанда системаны конфигурациялық кеңисликтиң қәлеген берилген орнында табыўдың итималлығының ўақыт бойынша орташа мәниси нолге айланады. Бирақ, бул жағдай қозғалыс барлық шексиз кеңисликте жүзеге келген жағдайда орын алады.

Солай етип, үзликсиз спектрдиң стационар ҳалы системаның инфинитлик қозғалысына сәйкес келеди екен.

**§ 20. Импульс**

Сыртқы майданда турмаған бөлекшелердиң жабық системасын қараймыз. Системаның пүтини менен алынған барлық орынлары кеңисликте эквивалент болғанлықтан системаны өз-өзине параллель жылыстырғанда оның гамильтонианы өзгермей қалады деп тастыйықлаўға болады. Бул шәртти ықтыярлы шексиз киши аўысыў ушын талап етиўге болады. Бундай жағдайда бундай тастыйықлаў қәлеген шекли аўысыў ушын да орынланады.

қашықлығына шексиз киши параллель аўысыў түрлендириўди аңғартады. Бундай түрлендириўде барлық бөлекшелердиң радиус векторлары ( арқалы бөлекшениң номери белгиленген) бирдей өсимге ийе болады: Бундай жағдайда бөлекшелердиң координаталарының ықтыярлы функциясы болған ) функциясы төмендегидей функцияға айланады:

Бул аңлатпада арқалы бойынша дифференциаллаў операторы белгиленген.

аңлатпасы функциясын функциясына өткеретуғын шексиз киши жылыстырыў операторы болып табылады.

Базы бир түрлендириўлер гамильтонианды өзгертпейди деген тастыйықлаў бул түрлендириўди функция үстинен ислесек, онда нәтийже егер түрлендириўди тек функцияның үстинен ислесек ҳәм буннан кейин оған операторын қолланғандай болады. Математикалық жақтан бул жағдайды былайынша жазыўға болады. Мейли, биз қарап атырған түрлендириўди "жүзеге келтиретуғын" оператор болсын. Бундай жағдайда

теңлигине ийе боламыз. Буннан

теңлигин аламыз. Демек, гамильтонианның операторы менен коммутацияланыўы керек.

Биз қарап атырған жағдайда операторы шексиз киши аўыстырыў операторы болып табылады. Бирлик оператор (1 ге көбейтиў операторы) қәлеген оператор менен коммутативли, ал турақлы көбейтиўши ди белгисинен шығарыўға болатуғын болғанлықтан, бул жерде шәрти мынадай шәртке алып келинеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.1) |

Бизлер анық түрде ўақытқа ийе емес базы бир оператордың гамильтониан менен коммутативлигиниң усы операторға сәйкес келетуғын физикалық шаманың сақланатуғынлығын билемиз. Жабық система ушын кеңисликтиң бир текли болыўы қәсийетинен келип шығатуғын сақланатуғын шама системаның импульси болып табылады.

*Биз импульстиң сақланыўы физиканың фундаменталлық принципи болып табылатуғынлығын айрықша түрде атап өтемиз. Бул принцип бойынша жабық системаға сырттан ҳеш қандай күшлер тәсир етпесе, онда оның улыўмалық импульсиниң сақланады. Бул кеңисликтиң трансляциялық симметриясының нәтийжеси болып табылады ҳәм бундай симметрияның болыўының салдарынан жылыстырыўларда физикалық нызамлар өзгериссиз қалады.*

*Кеңисликтиң изотропиясы менен бир теклилиги бир бири менен байланысқан, бирақ ҳәр қыйлы түсиниклер болып табылады. Изотропия кеңисликтиң барлық бағытларда бирдей болып көринетуғынлығын, ал бир теклилик болса кеңисликтиң ҳәр бир ноқатта бирдей болатуғынлығын аңғартады. Изотропия кеңисликтеги қандай да бир артықмаш қәсийетлерге ийе болатуғын бағытлардың болмайтуғынлығынлығына сәйкес келсе, бир теклилик артықмаш қәсийетлерге ийе болатуғын орынлардың болмайтуғынлығына сәйкес келеди.*

*Импульстиң сақланыўы кеңисликтиң изотропиясы менен емес, ал оның бир теклилиги менен тиккелей байланыслы. Кеңисликтиң бир текли екенлиги оның ҳәр бир ноқатындағы физикалық нызамлардың ҳәм қәсийетлердиң бирдей екенлигин билдиреди. Тап усы жағдай импульстиң сақланыўына алып келеди. Егер кеңислик бир текли болмағанда, онда оның ҳәр қыйлы ноқатлары ҳәр қыйлы қәсийетлерге ийе болған болар еди.*

*Көп жағдайларда изотропия менен бир теклиликтиң бир бири менен байланыслы екенлигин атап өтиў әҳмийетли. Изотропия менен бир теклилик бир бирин ҳеш ўақытта бийкарламайды. Ҳәм изотроп, ҳәм бир текли кеңислик те бар. Көпшилик тәрепинен қабыл етилген ҳәзирги ўақытлардағы космологиялық моделлер (мысалы, Үлкен партланыў теориясы) Әлемниң үлкен масштабларда изотроп ҳәм бир текли екенлигин болжайды.*

*Демек, импульстиң сақланыўы кеңисликтиң бир текли екенлиги менен байланыслы, бирақ оның изотропиясы менен тиккелей байланыслы емес.*

Енди тийкарғы текстимизге қайтып келемиз ҳәм (15.1)-қатнастың квантлық механикадағы импульстиң сақланыў нызамын аңғартатуғынлығын атап өтемиз. операторы турақлы көбейтиўшиге шекемги дәлликте системаның толық импульсине, ал сумманың ағзаларының ҳәр бири айырым бөлекшениң импульсине сәйкес келиўи керек.

Импульс операторы менен операторының арасындағы пропорционаллық коэффициенттиң мәнисин классикалық механикаға шеклик өтиўдиң жәрдеминде анықлаў мүмкин ҳәм қа тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.2) |

Оның қураўшылары былайынша жазылады:

Биз квантлық механиканың шеклик жағдай ушын өзиниң ишине классикалық механиканы да алатуғынлығын еске түсиремиз. Ҳақыйқатында да, физикалық системаның "дерлик классикалық" (ямаса квазиклассикалық деп те атайды) толқын функциясының

түринде жазылатуғынлығын мағлыўмат ушын қабыл етейик. Бул аңлатпада - биз қарап атырған система ушын *механикалық ҳәрекет*. Бул формуланы пайдалансақ, биз

аңлатпасына ийе боламыз. Демек, классикалық жақынласыўда операторының тәсири ке көбетиўге алып келинеди. Бирақ *ҳәрекеттиң градиенти* бөлекшениң классикалық импульси болып табылады.

(15.2)-оператордың эрмитлик екенлигине аңсат исениўге болады. Ҳақыйқатында да, шексизликте нолге айланатуғын ықтыярлы ҳәм функциялары ушын мынаған ийе боламыз:

Бул оператордың эрмитлик шәрти болып табылады.

Ҳәр қыйлы болған еки өзгериўши бойынша дифференциаллыўдың нәтийжеси дифференциаллаўдың тәртибинен ғәрезсиз болғанлықтан, импульстиң үш қураўшыларының операторларының коммутативлик екенлигин түсиникли:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.3) |

Бул бөлекшениң импульсиниң үш қураўшысының бир ўақытта анық мәниске ийе болатуғынлығын көрсетеди.

Импульслер операторларының меншикли функциялары менен меншикли мәнислерин табамыз. Олар төмендегидей векторлық теңлемениң жәрдеминде анықланады

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.4) |

Оның шешимлери мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.5) |

Көринип турғанындай, импульстиң үш координатасын бир ўақытта бериў бөлекшениң толқын функциясын толық анықлайды екен. Басқа сөз бенен айтқанда, шамалары бөлекше ушын физикалық шамалардың мүмкин болған толық жыйнақларының бирин қурайды екен. Олардың меншикли мәнислери тең ке шекемги үзликсиз спектрди пайда етеди.

Биз физикалық шамалардың дискрет спектры ушын ықтыярлы толқын функциясын меншикли функциялары бойынша (3.2) түрдеги қатарға жайыўдың мүмкин екенлигин билемиз. Үзликсиз спектр орын алған жағдайда болса толқын функциясын меншикли функциялардың меншикли функцияларының системасы бойынша интеграл менен алмастырады. Бундай жайыў

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5.1) |

Бул аңлатпадағы интеграллаў шамасы қабыл ететуғын мәнислердиң барлық областы бойынша жүргизиледи. - қатарға жайыў коэффициентлери. Тап сол сыяқлы үзликсиз спектрдиң меншикли функцияларының нормировка шәрти де әмелге асырылады. Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5.2) |

шәртиниң орынланыўы керек, ал функциясы белгили болған жағдайларда қатарға жайыў коэффициентлери болса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5.3) |

формуласының жәрдеминде анықланады.

Үзликсиз спектрдиң меншикли функцияларының нормировка қағыйдасына сәйкес барлық кеңислик бойынша алынған интегралының () түринде жазылатуғын -функцияға тең болыўы керек.

Биз векторлық аргументтиң δ-функциясының (үш өлшемли δ-функция) вектордың ҳәр бир қураўшысының δ-функцияларының көбеймесине тең болатуғынлығын еслетип өтемиз, яғный .

Буннан кейинги таллаўларда айқын болатуғын себеплер бойынша бөлекшениң импульсиниң меншикли функцияларының нормировкасын импульслериниң айырмасының δ-функциясын қа бөлгенге тең етип алыўдың көбирек тәбийий екенлигин есапқа алып, биз мынаны жазамыз:

Бул аңлатпаны былайынша да жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.6) |

Биз бул аңлатпаны жазғанда үш өлшемли δ-функцияны жайғанда алынатуғын үш көбейтиўшиниң ҳәр қайсысының

ҳ.т.б. теңликлердиң қанаатландыратуғынлығын есапқа алдық.

Интеграллаў

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.7) |

түринде жүргизиледи. Бул формуланың шәртли мәниси мынадан ибарат: теңликтиң шеп тәрепинде жайласқан функция

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5.8) |

қәсийетине ийе болады. Бул жағдайда интегарллаў областы өзиниң ишине ноқатын алады ҳәм усындай теңлик орынланғанда функциясының үзликсиз болыўы керек. Ҳақыйқатында да (15.7)-қатнас түринде аңлатылған функциясын (5.8)-аңлатпаға қойып Фурьениң интеграллық формуласын аламыз:

Бул аңлатпалардан (15.6)-аңлатпаға сәйкес (15.5)-функцияларда деп алыўға болатуғынлығы келип шығады. Демек,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.8) |

Қәлеген ықтыярлы функциясын оның меншикли функциялары бойынша қатарға жайыў Фурье қатарына жайыў болып табылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.9) |

(5.3)-формулаға сәйкес, қатарға жайыў коэффициентлери мынаған тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.10 ) |

функциясын бөлекшениң импульслық көринистеги толқын функциясы деп қараўға болады:

шамасы интервалында импульстиң мәниске ийе болыў итималлығы болып табылады.

операторының импульске сәйкес келетуғынлығына сәйкес, оның меншикли функцияларын координаталық көринисте анықлап, импульслик көринистеги бөлекшениң координаталарының операторы ди киргизиўге болады. Усындай операторды анықлаў ушын координаталардың орташа мәнисин

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.11) |

түринде жазылады деп болжаймыз. Екинши тәрептен толқын функциясы бойынша орташа мәнис

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. (15.9) түриндеги ди қойып ҳәм бөлеклерге бөлип интеграллаўдың нәтийжесинде мынаны аламыз:

Усы аңлатпаның жәрдеминде ҳәм (15.10)-аңлатпаны есапқа алып, мынаны табамыз

(15.11) менен салыстырып, биз импульслик көринисте радиус-вектор операторының былайынша жазылатуғынлығын көремиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15.2) |

Бул көринистеги импульс операторы болса ға көбеймеге алып келинеди.

**§ 21. Гейзенбергтиң анықсызлық қатнаслары**

Импульс операторы менен координаталар операторларының арасындағы коммутациялық қатнасларды киргиземиз. өзгериўшилери бойынша туўындырады алыўдың избе-излиги менен олардың басқасы менен көбейтиў бул операциялардың өткерилиў тәртибинен ғәрезсиз болғанлықтан, мыналарды аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.1) |

Тап усындай қатнасларды пенен ушын да аламыз.

пенен x арасындағы коммутацияны келтирип шығарыў ушын мыналарды жазамыз:

Биз операторының функциясына тәсириниң нәтийжесиниң толқын функциясын шамасына көбейтиў менен бирдей екенлигин көремиз. Әлбетте, тап усындай нәтийжелер тың пенен, тиң пенен коммутациясы ушын да алынады. Солай етип, төмендегидей теңликлерди аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.2) |

Бул қатнаслар 1925-жылы В.Гейзенберг тәрепинен *матрицалық формада ашылды ҳәм олар квантлық механиканың дөретилиўиндеги басланғыш ноқат болып табылады*.

(16.1) ҳәм (16.2)-қатнаслардың барлығын былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.3) |

Бул қатнаслардың физикалық мәнисине өтиўден ҳәм оннан келип шығатуғын нәтийжелерге өтиўден бурын буннан былай керек болатуғын еки формуланы жазамыз. Мейли, координатаның базы бир функциясы болсын. Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.4) |

Ҳақыйқатында да,

Тап усындай қатнас менен импульс операторының коммутаторы ушын да орынлы болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.5) |

Егер координаталар операторы ушын (15.12)-аңлапаны пайдаланып есаплаўды импульслик көринисте жүргизсе, оны (16.4)-аңлатпаны келтирип шығарғандай етип келтирип шығарыўға болады.

(16.1) менен (16.2) қатнаслары бөлекшениң координата көшерлериниң биреўиниң бағытында басқа көшерлер бағытындағы координаталары сыяқлы анық мәниске ийе болатуғынлығын көрсетеди. Координата менен усы координата жатырған көшердиң бағытындағы импульстиң қураўшысы менен бир ўақытта анық мәниске ийе бола алмайды. Дара жағдайда кеңисликтиң белгили болған ноқатында жайласқан бөлекше тап усы ўақытта анық импульске ийе бола алмайды.

Бөлекше үш көшер бойынша өлшемлери болған кеңисликтиң шекли бөлиминде жайласқан деп болжайық. Мейли, бөлекшениң импульсиниң орташа мәниси ге тең болсын. Бул жағдайдың математикалық жақтан толқын функциясының

түрине ийе болатуғынлығын атап өтемиз. Бул аңлатпада арқалы кеңисликтиң биз қарап атырған областында нолден сезилерликтей өзгеше болған функция.

функциясын импульс операторының меншикли функциясы бойынша қатарға, яғный Фурье интегралына жаямыз. Бул жайыўдың коэффициентлери

түриндеги функцияның (15.10)-интегралы бойынша анықланады. Бундай интегралдың нолден сезилерликтей өзгеше болыўы ушын осцилляциялаўшы көбейтиўши болған көбейтиўшисиниң дәўири функциясы нолге тең болмаған областларда өлшемлеринен киши болмаўы керек. Бул шамасының ның шәртин қанаатландыратуғын мәнислеринде ғана нолден өзгеше болатуғынлығын көрсетеди. шамасы импульстиң ҳәр қыйлы мәнислериниң итималлығын анықлайтуғын болғанлықтан, онда ның мәниси нолден өзгеше болатуғын шамаларының мәнислериниң интерваллары биз қарап атырған ҳалдағы ҳалдағы бөлекшениң импульслериниң қураўшылары ийе болатуғын мәнислердиң интерваллары болып табылады. Бул интервалларды арқалы белгилеп, *1927-жылы В.Гейзенберг тәрепинен ашылған* *анықсызлық қатнасларыын* аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.6) |

Бөлекшениң координатасы қандай дәрежеде дәл белгили болса (яғный, шамасы қаншама киши болса), онда импульстиң сол көшер бойындағы қураўшысының анықсызлығы тың соншама үлкен болатуғынлығын көремиз (ҳәм керисинше). Мысалы, дара жағдайда бөлекше кеңисликтиң қатаң түрде анықланған базы бир ноқатында турған болса (), онда . Бул импульстиң барлық мәнислериниң итималлықларының бирдей екенлигин аңғартады. Керисинше, егер бөлекше анық түрде анықланған импульс ға ийе болса, онда оның кеңисликтеги барлық орынлары теңдей итималлыққа ийе. Бул жағдайдың орынлы екенлиги (15.8)-толқын функциясында да көринип тур, бул толқын функциясының модулиниң квадраты координаталардан пүткиллей ғәрезли емес.

Егер координаталар менен импульслерди орташа квадратлық флуктуациялар болған

шамалары менен тәрийиплейтуғын болсақ, онда олардың көбеймесиниң мүмкин болған ең киши мәнисине дәл баҳа бере аламыз.

Бир өлшемли мәселе болған тек бир координатадан ғәрезли болған толқын функциясына ийе пакетти қараймыз. Әпиўайы болыўы ушын бул ҳалдағы пенен тың орташа мәниси нолге тең деп аламыз. Дурыслығы айқын болған

теңсизлигинен баслаймыз. Бул теңсизликте - ықтыярлы затлық турақлы. Бул интегралды есаплағанда төмендегидей теңликлердиң орынлы екенлигин аңғарамыз

ҳәм мынаған ийе боламыз:

бойынша квадратлық үш ағзаның усы ның қәлеген мәнислеринде оң мәниске ийе болыўы ушын оның дискриминантының терис болыўы керек. Буннан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.7) |

теңсизлигине ийе боламыз. Көбеймениң мүмкин болған ең киши мәниси ℏ/2 ге тең.

Бул мәнис

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.8) |

түринде жазылатуғын функцияның жәрдеминде тәрийипленген жағдайда жүзеге келеди. Бул аңлатпада менен лар арқалы турақлы шамалар белгиленген. Бундай ҳалдағы координатаның ҳәр қыйлы мәнислериниң итималлықлары

аңлатпаларының жәрдеминде анықланады. Демек, итималлық координата басының әтирапында (орташа мәниси ) тарқалыўы орташа квадратлық флуктуациясы болған Гаусс нызамына бағынады. Импульслик көринистеги толқын функциясы

түринде жазылады. Интегралды есаплаў

аңлатпасына алып келеди.

Импульстиң мәнислериниң итималлығының тарқалыўы да орташа мәнисиниң әтирапында гаусслық болып табылады (орташа квадратлық флуктуациясы қа тең). Сонлықтан, көбеймесиниң мәниси тап сол ℏ/2 шамасына тең болады.

Параграфтың ақырында және бир пайдалы қатнасты келтирип шығарамыз. Мейли, пенен операторлары

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.9) |

коммутациялық қатнасы қағыйдасын қанаатландыратуғын бары бир физикалық шамалар болсын. Бул теңликте операторы арқалы белгиленген базы бир физикалық шама. Классикалық шекте (яғный, де) физикалық шамалардың барлық операторлары усы шамаларға көбейтиўге алып келетуғын ҳәм бир бири менен коммутацияланатуғын болғанлықтан теңликтиң оң бөлимине ℏ көбейтиўшиси киргизилген. Сонлықтан, "квазиклассикалық" жағдайда биринши жақынласыўда (16.9)-теңликтиң оң тәрепин нолге тең деп есаплаўға болады. Келеси жақынласыўда операторын шамасына әпиўайы көбейтиў менен алмастырыў мүмкин. Бундай жағдайда

теңлигине ийе боламыз.

Бул теңлик теңлигине дәл усайды. Айырма ондағы турақлысының орнында шамасының турғанлығынан ибарат. Соның менен бирге классикалық шамасы пенен шамаларының Пуассон қаўсырмасы болып табылады. Усы жағдайға байланыслы қатнасына сәйкес квазиклассикалық жағдайда пенен шамалары ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.10) |

анықсызлық қатнасының орынлы болатуғынлығын көремиз. Дара жағдайда, шамалардың бири энергия болса (), ал операторлардың бири анық түрде ўақыттан ғәрезсиз болса, онда (9.2)-аңлатпаға сәйкес ҳәм квазиклассикалық жағдайда анықсызлық қатнасы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16.11) |

түринде жазылады.

Енди анықсызлық принципнен келип шығатуғын базы бир нәтийжелерди қарап өтемиз.

Водород атомының тийкарғы ҳалының энергиясының мәнисин баҳалаў. Анықсызлық принципи, оннан келип шығатуғын анықсызлық қатнаслары әпиўайы жоллар менен жүдә әҳмийетли болған нәтийжелерди береди ҳәм, сонлықтан, квантлық механиканың ең жақсы қуралларының бири болып табылады. Биринши мысал сыпатында тийкарғы ҳалда турған водород атомын қараймыз. Кулон майданында қозғалатуғын зарядланған бөлекшениң энергиясы ушын белгили болған классикалық нызамнан пайдаланамыз:

Бул аңлатпада менен арқалы электронның массасы менен заряды белгиленген. Бул теңликти квантлық механикада пайдаланыў ушын оған киретуғын менен шамаларын электронның сәйкес импульси менен координатасындағы анықсызлық деп қараймыз. Анықсызлық қатнаслары бойынша бул шамалар бир бири менен байланысқан ҳәм усы байланыс тийкарында жуўық түрдеги теңлигин жазамыз. Бул теңликти пайдаланып ушын жазылған аңлатпадағы ди жоғалтамыз. Нәтийжеде

формуласына ийе боламыз. функциясының ның базы бир мәнисинде минимумға ийе болатуғыны көринип тур. Бул функцияның минимумға сәйкес келетуғын шамасын арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда шамасын водород атомының тийкарғы ҳалының энергиясы, ал шамасын атомның сызықлы өлшемлериниң шамасы деп қараўға болады. Бор моделинде диң биринши орбитаның радиусы екенлигин билемиз. функциясының максимумындағы бул функциядан алынған туўынды нолге тең, яғный . Буннан теңлигине ийе боламыз. Буннан биз излеп атырған шамаларды аламыз:

Алынған нәтийже Бор модели бойынша алынған нәтийжеге сәйкес келеди. Әлбетте, бундай сәйкес келиўге қандай да бир тосыннан алынатуғын табыс түринде қараў керек. Бундай жағдайда алынатуғын сан мәнистиң тек тәртибине итибар бериў керек болады. Алыныўы керек болған шаманың тәртиби жүдә әпиўайы баҳаланатуғынлығын атап өтемиз: классикалық аңлатпасындағы динамикалық өзгериўшилердиң дәл мәнислерин усы өзгериўшилердиң "жайылыў" дәрежелери менен, яғный анықсызлық қатнасларындағы ҳәм шамалары (анықсызлықлары) менен алмастырыў, буннан кейин квантлық механиканың сол анықсызлықларды байланыстыратуғын аңлатпаларынан пайдаланыў керек.

Осциллятордың ноллик тербелислериниң энергиясын баҳалаў. Классикалық бир өлшемли осциллятордың энергиясы аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпадағы ҳәм шамаларын тербелиўши (осцилляцияланыўшы) объекттиң импульси менен координатасының анықсызлықлары деп қарап ҳәм анықсызлық қатнасларының теңлигинен пайдаланып, жоқарыдағы ушын жазылған аңлатпадан

теңлигин аламыз. функциясынан бойынша алынған туўындыны нолге теңлестирип, алынған алгебралық теңлемеден теңлигине ийе боламыз ҳәм шамасының функциясының максимумына сәйкес келетуғынлығын аңғарамыз. Сәйкес энергия ушын шамасын аламыз. Бул нәтийже жүдә қызық. Ол квантлық механикада осциллятордың энергиясының ҳеш ўақытта нолге айланбайтуғынлығын көрсетеди. Энергияның минималлық мәниси *ноллик тербелислердиң* энергиясы деп аталады. Биз алынған нәтийжениң дәл мәнистен тек 1/2 ге айрылатуғынлығын көремиз (гармоникалық осцилляторға бағышланған параграфқа қараңыз, бул параграфта аңлатпасы берилген). Ноллик тербелислердиң болатуғынлығын есапқа алып мынадай қызықлы жуўмаққа келиўге болады: атомлардың тербелмели қозғалысларының энергиясы ҳәтте температураның абсолют нолинде де нолге тең болмайды.

Ноллик тербелислердиң болыўы принципиаллық жақтан улыўмалық жағдайды сәўлелендиреди: "потенциал шуқырдың түбинде жатқан" микрообъектти жүзеге келтириўге болмайды. Басқа сөз бенен айтқанда, микрообъект "потенциал шуқырдың түбине қулап түсе алмайды". Бул жуўмақ потенциал шуқырдың түринен ғәрезли емес, ал анықсызлық қатнасларының туўрыдан-туўры нәтийжеси болып табылады.

Енди "*Электрон неликтен ядроға қулап түспейди?*" деген сораўға жуўап беремиз. Бор водород атомы ушын дүзилген моделин усынғанда тезлениў (яғный дөңгелек орбиталар бойынша) менен қозғалатуғын электронның неликтен электромагнит толқынларын нурландырмайтуғынлығын ҳәм неликтен ядроға қулап түспейтугынлығын түсиндире алған жоқ. қатнасы бул жағдайда түсиндире алады. Электронның ядроға қулап түсиўи оның координатасындағы анықсызлықтың әдеўир киширейгенлигин аңғартады: егер ядроға қулап түспестан бурын электрон атомның шеклеринде локализацияланған болса (яғный кеңисликтиң сызықлы өлшемлери cм болған областында), онда ядроға қулап түскеннен кейин ол сызықлы өлшемлери cм болған областта локализацияланған болар еди. Анықсызлық қатнаслары кеңисликтеги күшли локализацияның импульстиң сәйкес түрдеги күшли "жайылыўына" алып келеди. Сонлықтан ядроға қулап түсиўдиң барысында электронның импульсиниң орташа мәнисиниң үлкейиўи керек. Оның ушын энергияның жумсалыўы талап етиледи. Демек, электронның ядроға қулап түспеўине тырысыўдың кереги жоқ, ал, керисинше, электронды ядроның шеклеринде "локализациялаўға" мәжбүрлеў керек болып шығады.

Осциллятордың ноллик тербелислери мысалында потенциал шуқырдағы объекттиң нолге тең болмаған минималлық энергияға ийе болатуғынлығы атап өтилип еди. ниң шамасы шуқырдың кеңисликлик өлшемлеринен (мысалы, кеңлиги дан) ғәрезли. Анықсызлық қатнасларын есапқа алған жағдайда ушын

қатнасының орынлы екенлигин көриўге болады. Егер үлкейсе, онда диң мәниси өседи. Шуқырдың кеңлиги ның шамасы жеткиликли дәрежеде киши болған жағдайда энергиясының потенциал шуқырдың тереңлигинен де үлкен мәниске ийе болыўы мүмкин. Бундай шуқырда микрообъекттиң жайласыўы мүмкин емес.

Электронның ядроға қулап түсиўи потенциал шуқырдың кеңлигиниң 10-8 см ден 10-12 см ге шекем киширейиўин аңғартады. Бундай жағдайда  аңлатпасына сәйкес диң мәниси шама менен 10 эВ тен 109 эВ қа шекем өседи. Нәтийжеде электронның минималлық энергиясы атом ядросындағы нуклонның байланыс энергиясынан (оның шамасы 107 эВ қа тең) бир неше тәртипке үлкейеди. Бул ядролық потенциалда электронның пүткиллей болмайтуғынлығын аңғартады. Усындай жоллар менен "электронның ядроға қулап түсиўи" мәселеси толық шешиледи ҳәм басқа принципиаллық мәселе шешиледи: *атом ядросының қурамына электронлар кирмейди*.

**§ 22. Пуассон қаўсырмалары**

Биз анаў ямаса мынаў физикалық шамалардың операторларын табыўдың усыллары менен таныстық. Бул мәселе квантлық механиканың қәлиплесиўиниң дәслепки дәўиринде Дирак тәрепинен толық түрде ҳәм избе-излик пенен үйренилди. Ол квантлық механикада да классикалық механикадағы сыяқлы Пуассон қаўсырмалары түсинигин киргизиў мүмкин деп есаплады. Мысалы, еки классикалық шамаларына

қаўсырмалары сәйкес келетуғынлығы сыяқлы квантлық механикада операторларына Пуасонның түриндеги квантлық қаўсырмасы сәйкес келеди. Соның менен бирге Пуассонның квантлық қаўсырмаларының қәсийетлери Пуассонның классикалық қаўсырмаларынаң қәсийетлерине дәл сәйкес келеди деп болжады. Бирақ, бундай жағдайда квантлық қаўсырмаларда көбейтиўшилердиң жайласыў тәртиби үлкен әҳмийетке ийе. Пуассон қаўсырмаларының қәсийетлерин жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (l25.1) |
|  | (l25.2) |

Бул аңлатпада арқалы сан белгиленген.

|  |  |
| --- | --- |
|  | l(25.3) |
|  | l(25.4) |
|  | l(25.5) |
|  | l(25.6) |
|  | l(25.7) |

Квантлық механиканың операторларын дүзиўдиң тийкары сыпатында Пуассон қаўсырмаларын сайлап алыў олардың сәйкес операторлардың коммутаторлары менен аңлатылатуғынлығын менен байланыслы. Операторлардың соңғы комбинациясы оларды физикалық жақтан таллаўдың тийкары болып табылады.

түринде жазылған Пуассон қаўсырмасын қараймыз. Оны есаплаў ушын l(25.5) ҳәм l(25.6) теңликлеринен пайдаланамыз. Оларға сәйкес төмендегилерди аламыз:

ҳәм

Алынған нәтийжелерди бир бири менен теңлестирип

теңлигин табамыз. Соңғы теңлик бирдейлик пенен қанаатландырылатуғын болғанлықтан

теңликлерине ийе боламыз. Бул аңлатпаларда арқалы ҳақыйқый турақлы белгиленген.

шамасының ҳақыйқый екенлиги еки ҳақыйқый өзгериўшиниң Пуассон қаўсырмасының да ҳақыйқый болатуғынлығы менен байланыслы. Мысалы, егер теңликлери орынлы болса, онда теңлиги орынлы болады ("+" белгиси түйинлесликти аңғартады. Бирақ,

ҳәм сонлықтан теңлиги орынлы. Пуассон қаўсырмаларының классикалық теориясынан турақлысының өлшем бирлигиниң 1/(Дж·сек) екенлиги белгили. Оның сан мәниси теорияның берген нәтийжелерин тәжирийбелерде алынған нәтийжелер менен салыстырыў жолы менен ғана анықланады. Оның мәниси 1/ℏ қа тең болып шықты. Сонлықтан ең ақырында мынадай теңликке ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (l25.8) |

Классикалық механикаға өткенде, яғный шегинде, коммутаторы нолге айланады. Ең болмағанда әпиўайы жағдайларда Пуассонның квантлық қаўсырмаларының мәниси классикалық қаўсырмалардың мәнисиндей деп есаплаў тәбийий. Классикалық механикада координаталар менен импульслердиң каноникалық түйинлес өзгериўшилери ушын мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (l25.9) |

Бул жерде биз

белгилеўлеринен пайдаланамыз. Тап усындай аңлатпаларды координата операторлары ҳәм импульстиң проекциясы ушын да жазыўға болады. Сонлықтан, сәйкес шамалардың коммутаторлары мынадай түрге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (l25.10) |

**§ 23. Симметрия ҳәм сақланыў нызамлары**

Классикалық механикада әҳмийетли болған бир қатар сақланыў нызамлары белгили. Энергияның, импульстиң, импульс моментиниң сақланыў нызамлары физика илиминиң фундаменталлық нызамларының қатарына киреди. Бул нызамлардың бар екенлиги көп ўақытлардан бери белгили болса да, тек XX әсирдиң басында ғана олардың кеңислик пенен ўақыттың тийкарғы қәсийетлери менен, атап айтқанда ўақыттың бир текли екенлиги менен кеңисликтиң бир текли ҳәм изотроп болыўының себебинен келип шығатуғын ең әпиўайы симметриялар менен байланыслы екенлиги белгили болды.

1918-жылы немис математиги Эмми Нётер өзиниң исми менен аталатуғын теореманы дәлилледи. Бул теорема бойынша физикалық системаның ҳәр бир үзликсиз симметриясына базы бир сақланыў нызамы сәйкес келеди. Бул теорема тийкарында физикалық системаны усы системада бар болған симметрия ҳаққындағы мағлыўматлар тийкарында таллаўға болады. Мысалы, ўақыттың өтиўи менен денениң қозғалысының теңлемелериниң инвариантлығының энергияның сақланыў нызамына, кеңисликтеги жылжыўларға қарата инвариантлықтың импульстиң сақланыў нызамына, айланыўларға қарата инваринатлықтың импульс моментиниң сақланыў нызамына алып келеди.

Биз төменде физика илиминдеги симметриялар ҳәм олардың қандай сақланыў нызамларына алып келетуғынлығын көрсететуғын кестени беремиз.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Физикадағы симметрия | | |
| Түрлендириў | Сәйкес инвариантлық | Сәйкес сақланыў нызамы |
| Ўақыттың трансляциясы. | Ўақыттың бир текли екенлиги. | Энергияның сақланыў нызамы. |
| C, P, CP ҳәм T симметриялар. | Ўақыттың изотроплығы. | Жуплықтың сақланыў нызамы. |
| Кеңисликтиң трансляциялары. | Кеңисликтиң бир текли екенлиги. | Импульстиң сақланыў нызамы. |
| Кеңисликтиң айланыўы. | Кеңисликтиң изотроплығы. | Импульс моментиниң сақланыў нызамы. |

Симметрияның бар екенлиги ҳаққында биз система үстинен исленетуғын базы бир операцияларада (кеңисликтеги жылыстырыўларда, бурыўлар менен шағылыстырыўларда) системаның анаў ямаса мынаў қәсийетлери инвариант (өзгерисииз) қалатуғынлығы бойынша билемиз. Мысалы, шардың сфералық симметриясына оны орайына салыстырғанда ҳәр қыйлы бурыўларда ҳәм ҳәр бир аўҳалдағы оның радиусын өлшеў жолы менен исенемиз. Диаметрдиң өзгериссиз қалыўы биз қарап атырған объекттиң барлық тәрептен қарағанда да бирдей болып көринетуғынлығын билдиреди ҳәм оның сфералық симметриясының дәлили болып табылады. Усы ең әпиўайы болған мысалда симметрия түсиниги менен инвариантлық түсиниги арасындағы тиккелей байланыстың бар екенлиги көринип тур. Кеңисликлик жылжыўлардағы, айланыўлардағы ҳәм шағылысыўлардағы системаның қәсийетлериниң өзгермей қалыўы онда геометриялық симметрияның бар екенлигине жуўап береди.

Тең өлшеўли қозғалатуғын бир системадан екинши системаға өткендеги механиканың нызамларының инвариантлыгы да симметрияға мысал бола алады. Бирақ бул жағдайда қурамалырақ симметрия ҳаққында гәп етиледи. Бул жерде гәп геометриялық симметрия ҳаққында айтылып атырған жоқ, ал динамикалық симметрия ҳаққында айтылып атыр. Бул жағдайда ол бир интерциаллық есаплаў системасынан екинши инерциаллақ есаплаў системасына өткендеги динамиканың нызамларының өзгермейтуғынлығынан ибарат. Өзиниң классикалық формасында усындай инвариантлық Галилей дәўирлеринен баслап белгили. Бирақ оның мәниси тек Эйнштейнниң арнаўлы салыстырмалық теориясы пайда болғаннан кейин түсиникли болды ҳәм тийисли баҳасын алды.

Квантлық механикаға симметрия концепциясы Венгриялы ҳәм Америкалы физик Юджин Вигнер (1902-1995) тәрепинен киргизилди. Оған сәйкес математикалық аппаратты пайдаланыў жолы менен басқа усыллардың жәрдеминде алыўға болмайтуғын көп санлы әҳмийетли нәтийжелерди алыўдың сәти түсти. Соңғы ўақытлары геометриялық жақтан келип шықпаған ҳәр қыйлы симметриялар элементар бөлекшелер физикасында (жоқары энергиялар физикасында) фундаменталлық орынды ийелеп келмекте.

Сақланыў нызамлары менен кеңислик пенен ўақыттағы белгили болған операцияларға қарата инвариантлық арасындағы байланыс симметрияның көриниўиниң басқа динамикалық аспекти болып табылады. Жоқарыдағы кестеде көринип турғанындай, ўақыттың бир текли менен энергияның, кеңисликтиң бир теклилиги менен импульстиң, ал кеңисликтиң изотроплығы, яғный кеңисликтиң бурыўлардағы қәсийетлериниң өзгермейтуғынлығы менен импульс моментиниң сақланыў нызамы байланыслы.

Классикалық механикадағы сақланыў нызамларын табатуғын ең қолайлы математикалық аппаратты Пуассон қаўсырмалары береди. Гамильтон өзгериўшилери менен дан, мүмкин ўақыттан да ғәрезли болған базы бир механикалық шаманы аламыз

шамасынан ўақыт бойынша алынған туўынды Пуассон қаўсырмасы арқалы былайынша жазылады:

Бул теңликте арқалы Гамильтон функциясы белгиленген. Егер функциясы ўақыттан айқын түрде ғәрезсиз болса, яғный теңлиги орынлы болса, онда

теңлигине ийе боламыз. Бул формуладан ҳәм кеңислик пенен ўақыттың симметрия қәсийетлерин пайдаланып классикалық механиканың барлық сақланыў нызамларын келтирип шығарыўға болады.

Квантлық механикадағы сақланыў нызамлары да тап сондай жоллар менен дәлилленеди. операторының ўақыт бойынша толық туўындысы Пуассонның квантлық қаўсырмаларының жәрдеминде былайынша аңғартылады:

Бул аңлатпадағы екинши ағза Пуассонның квантлық қаўсырмасы болып табылады:

Егер ўақыттан айқын түрге ғәрезли болмаса, онда

теңлигине ийе боламыз ҳәм теңлигине сәйкес оператор гамильтон операторы пенен коммутацияланатуғын жағдайда ўақыт бойынша толық туўынды нолге тең болады екен. Солай етип, квантлық механикада өзиниң әпиўайылығы менен жүдә зор болған теорема орын алады:

*Динамикалық өзгериўшиниң ўақыттың өтиўи менен сақланыўы ушын усы шамаға сәйкес келетуғын оператордың айқын түрде ўақыттан ғәрезли болмаўы ҳәм Гамильтон операторы менен (яғный толық энергия операторы менен) коммутацияланыўы керек*.

Бул теореманы квантлық механиканың сақланыў нызамларын излеў ушын пайдаланамыз. Бөлекшелер тек ишки өз-ара тәсирлесиў күшлери менен тәсирлесетуғын, яғный жабық системаны қараймыз. Әлбетте, егер басланғыш шәртлер бирдей болатуғын болса, онда моменти ушын қандай ўақыт моментиниң сайлап алынғанлығынан ғәрезсиз системадағы барлық қозғалыслар бирдей болады. Бул ўақыттың бир текли екенлигине байланыслы жүзеге келетуғын симметрия болып табылады: ўақыт бойынша аўысыў системадағы қозғалыс ҳалына тәсир етпейди. Солай етип, ўақыттың бир текли екенлигине байланыслы гамильтониан ўақыттан айқын түрде ғәрезли емес. Сонлықтан

Бирақ, гамильтониан өзи менен өзи коммутацияланатуғын болғанлықтан,

теңлиги орынлы болады. Ал механикалық шаманың сан мәниси ҳаққындағы мәселеге, яғный өлшеўдиң нәтийжелери менен байланыслы болған санға келсек, онда

формуласын пайдаланыўымыз керек. Буннан энергияның орташа мәниси ушын

яғный

нәтийжесин аламыз.

Дара жағдайда, егер ўақыт моментинде энергия белгили болған мәниске ийе болған болса, онда

теңликлерине ийе боламыз. Бул системаның буннан кейинги қәлеген ўақыт моментинде усындай белгили мәнисин сақлайтуғынлығын аңғартады.

Егер ўақыт моментинде ҳал стационар болмаса, онда энгергияның өзиниң сақланыўы ҳаққында гәп етиўдиң кереги болмайды, себеби ол белгили болған анық мәниске ийе болмайды, бирақ теңлигине сәйкес, энергияның орташа мәниси бәри бир сақланады. Бул жағдайда толығырақ қараймыз. Мейли, Гамильтон операторы меншикли мәнислерине ийе болған дискрет спектрге ийе болсын. Стационар ҳалдағы Ψ-функциясының ўақыттан ғәрезлиги экспоненциал көбейтиўши арқалы анықланады:

Егер ҳал стационар болмаса, онда оны энергияның меншикли мәнислерине сәйкес келетуғын стационар ҳаллардың суперпозициясы сыпатында қараўға болады:

түринде жазыўға болады. теңлиги орынлы болғанда бул қатар

түрине енеди. Бирақ, оң тәрепте функциясы ушын , функцияларының ортонормировкаланған системасы бойынша қатар тур. Бул қатардың коэффициентлери мынадай мәниске ийе: модуллердиң квадратлары болған , , ..., коэффициентлери ўақыт моментинде өткерилген өлшеўлерде сәйкес меншикли мәнислериниң алыныўының итималлықларына тең. Енди

белгилеўин киргизип, биз соңғы қатарды

түринде көширип жаза аламыз. Ал модуллериниң квадратлары лар t ўақыт моментинде өткерилген өлшеўлерде энергияның мәнисиниң алыныўының итималлықлары болып табылады.

Бирақ,

теңликлери орынлы болады, ал бул қәлеген моментинде энергияның мәнисиниң алыныўының итималлығының ўақыттан ғәрезсиз екенлигин аңғартады. Усындай жоллар менен биз системаның қәлеген ҳалында энергияның орташа мәниси менен белгили болған мәнислериниң итималлықларының ўақыттан ғәрезсиз екенлигин көремиз. Энергияның сақланыў нызамының квантлық-механикалық формулировкасы да усыннан ибарат.

Енди импульс пенен импульс моментиниң сақланыў нызамына дыққат аўдарамыз. Ең дәслеп буннан кейинги барлық жуўмақларда биз ўақыттан айқын түрде ғәрезли болмаған операторлар менен ис алып барамыз ҳәм, сонлықтан, операторлардың ҳәр биринен ўақыт бойынша алынған туўынды ушын қатнасын пайдаланамыз.

Еркин бөлекшениң қозғалысы менен байланыслы болған ең әпиўайы жағдайдан баслаймыз. Импульстиң -қураўшысының ўақыт бойынша туўындысы былайынша жазылады:

Оң тәрепте турған Пуассон қаўсырмасы ушын

теңлиги орынлы. Майдан болмаған кеңисликте ҳәм, усыған сәйкес,

аңлатпаларына ийе боламыз. Бирақ, қалай болғанда да, алынған нәтийже тек символлық әҳмийетке ийе. Буннан импульстиң -қураўшысының ўақыттан ғәрезсиз екенлиги келип шығады.

Енди потенциалға ийе тек ишки күшлердиң тәсиринде ғана турған бөлекшелердиң системасын қараймыз. Бундай жағдайда толық импульстиң -қураўшысы мынаған тең:

Сонлықтан, жоқарыда алынған аңлатпалардың тийкарында мынадай аңлатпаны жаза аламыз:

Демек, биринши рет қарағанда ҳәм, сонлықтан, қосынды импульстиң сақланыў нызамы ушын орын жоқ. Бирақ, дыққат пенен қарағанда оң тәрепте турған сумманың нолге тең екенлигине исениў қыйын емес. Бул кеңисликтиң бир текли екенлиги тийкарында өткерилген сапалық таллаўдан келип шығады. Оның ушын бир биринен қашықлықта жайласқан еки бөлекшеден туратуғын әпиўайы системаны қараймыз. Әлбетте, егер биз еки бөлекшениң арасындағы қашықлықты өзгертпей, олардың екеўин де кеңисликтеги қәлеген орынға қарай жылыстырып қойсақ, онда бул бөлекшелердиң арасындағы өз-ара тәсирлесиў өзгериске ушырамайды. Бирақ, бул потенциаллық энергияның координаталардың өзинен емес, ал олардың айырмасынан ғәрезли екенлигин аңғартады. Сонлықтан,

теңлиги орынлы болады. Қурамалы болмаған есаплаўлардың нәтийжесинде де тап усындай нәтийже алынады:

Бирақ, көринип турғанындай, қаўсырманың ишиндеги туўындылардың қосындысы нолге тең ҳәм, сонлықтан

Алынған нәтийжелерди қәлеген сандағы бөлекшелерден туратуғын система ушын улыўмаластырыў жаңадан ҳеш нәрсени талап етпейди. Тап сол сыяқлы

теңликлерин аламыз.

Қозғалыс муғдары моментиниң сақланыў нызамын биз сәйкес бапта қараймыз.

**III бап. Шрёдингер теңлемеси**

**§ 24. Шредингер теңлемеси**

Берилген базы бир күшиниң тәсиринде көшериниң бойы менен қозғалыўға мәжбүр болған массасы болған бөлекшени көз алдымызға келтирейик (G.1-сүўрет). Классикалық механиканың алдына қойған мақсети усы бөлекшениң қәлеген ўақыт моментиндеги турған орны ты анықлаўдан ибарат. Егер биз усы ты билсек, онда тезликти (), импульсти (), кинетикалық энергияны () ямаса бизди қызықтыратуғын басқа да динамикалық өзгериўши шамаларды есаплай аламыз. Бирақ, функциясын қалайынша анықлаймыз? Оның ушын биз Ньютонның екинши нызамын пайдаланамыз: . Бул нызам басланғыш шәртлер деп аталатуғын шәртлердиң (әдетте ўақыт моментиндеги бөлекшениң орны менен тезлиги) жәрдеминде функциясын анықлайды.

Квантлық механика болса бул машқалаға пүткиллей басқаша қатнас жасайды. Бундай жағдайда биз бөлекшениң толқын функциясын излеймиз ҳәм оны Шрёдингер теңлемесин шешиў жолы менен аламыз:

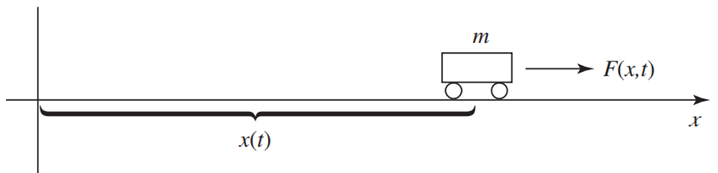
|  |  |
| --- | --- |
|  | (G.1) |

Бул аңлатпада - жормал сан ( ге тең), , - Планк турақлысы.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (G.2) |

Шрёдингер теңлемеси логикалық жақтан Ньютон теңлемесине уқсас болған теңлемениң орнын ийелейди: берилген басланғыш шәртлерде [әдетте ] Шрёдингер теңлемеси Ньютон нызамының функциясын анықлағанындай, ўақыттың буннан кейинги барлық мәнислери ушын толқын функциясын анықлайды.

Физикалық системаның толқын теңлемесиниң түрин оның гамильтонианы анықлайды. Сонлықтан гамильтониан квантлық механиканың барлық математикалық аппаратында фундаменталлық әҳмийетке ийе болады.



G.1-сүўрет. Берилген күштиң тәсириндеги қозғалысы бир өлшемде шекленген "бөлекше".

Енди бул мәселени тереңирек үйренемиз. Еркин бөлекшениң гамильтонианының түри кеңисликтиң бир теклилиги менен изотропиясы ҳәм Галилейдиң салыстырмалық принципи менен байланыслы болған улыўмалық талаплардың тийкарында анықланады. Классикалық механикада бул талаплар бөлекшениң энергиясының оның импульсинен квадратлық ғәрезликке алып келеди: . Бул теңликтеги турақлысы бөлекшениң массасы деп аталады. Квантлық механикада болса сол талаплар энергия менен импульстиң меншикли мәнислери ушын тап сондай қатнаслардың орын алатуғынлығына алып келеди. Биз еркин бөлекше ушын энергия менен импульстиң бир ўақытта өлшенетуғын сақланатуғын шамалар екенлигин еслетип өтемиз.

қатнасының энергия менен импульстиң барлық меншикли мәнислери ушын орынланыўы ушын бул қатнастың олардың операторлары ушын да орынлы болыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.1) |

Бул аңлатпаға

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.2) |

түринде жазылатуғын еркин қозғалатуғын бөлекшениң гамильтонианын қоямыз. Бул аңлатпада

аңлатпасы Лаплас операторы болып табылады. Бир бири менен тәсирлеспейтуғын бөлекшелер системасының гамильтонианы олардың ҳәр қайсысының гамильтонианларының қосындысына тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.3) |

Бул аңлатпада индекси бөлекшелерди номерлейди, ал - дифференциаллаў -бөлекшениң координаталары бойынша жүргизилетуғын Лаплас операторы.

Релятивистлик емес классикалық механикада бөлекшелердиң өз-ара тәсирлесиўи Гамильтон функциясының аддитивлик ағзасы болған өз-ара тәсирлесиўдиң бөлекшелердиң тек координаталарынан ғәрезли болған потенциаллық энергиясы менен тәрийипленеди. Усындай функцияны системаның гамильтонианына қосыў менен квантлық механикадағы бөлекшелердиң өз-ара тәсирлесиўи тәрийипленеди (бул тастыйықлаўды квантлық механиканың тийкарғы принциплериниң логикалық нәтийжеси деп қараўға болмайды, ал тәжирийбелерде алынған мағлыўматлардың нәтийжеси деп қараў керек):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.4) |

Бул аңлатпадағы биринши ағзаны кинетикалық энергия операторы, ал екинши ағзаны потенциаллық энергияның операторы сыпатында қараў керек. Дара жағдайда, сыртқы майданда жайласқан бир бөлекшениң гамильтонианы былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.5) |

Бул теңликте арқалы сыртқы майданда жайласқан бөлекшениң потенциаллық энергиясы белгиленген.

(17.2)-(17.5) аңлатпаларды улыўмалық (8.1)-аңлатпаға қойыў сәйкес системалар ушын толқын теңлемелерин береди. Биз ҳәзир сыртқы майдандағы бөлекше ушын толқын теңлемесин жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.6) |

Ал, стационар ҳалларды анықлайтуғын (10.2)-санлы теңлеме мынадай түрге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.7) |

(17.6)- ҳәм (17.7)-теңлемелер Шредингер тәрепинен келтирип шығарылған ҳәм оның аты менен *Шредингер теңлемеси* деп аталады.

Еркин бөлекше ушын (17.7)-теңлеме былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.8) |

Бул теңлеме энергия ниң қәлеген оң мәнисинде барлық кеңисликте шекли шешимлерге ийе болады. Қозғалыстың белгили бағытына ийе ҳаллар ушын шешимлер импульс операторының меншикли функциялары болып табылады. Бундай жағдайда теңлиги орынлы болады. Усындай стационар ҳаллардың ўақыттан ғәрезли болған толық толқын функциялары мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.9) |

Бундай функцияның ҳәр бири тегис толқын болып табылады ҳәм бөлекше белгили энергияға ҳәм импульске ийе болған ҳалды тәрийиплейди. Бул толқынның жийилиги қа, толқын векторы қа тең. Бундай толқынға толқын узынлығы сәйкес келеди. шамасын бөлекше толқынының де Бройллық толқын узынлығы деп атайды (бөлекше менен байланыслы болған толқын түсиниги де Бройль тәрепинен 1924-жылы киргизилген еди, тарийхый кирисиўге қараңыз).

Солай етип, еркин қозғалыўшы бөлекшениң энергиясының спектри үзликсиз болып шығады ҳәм оның мәниси 0 ден мәнисине шекем өзгереди. Бул меншикли мәнислердиң ҳәр қайсысы ( ден басқасы) азғынған, қала берсе азғыныўдың ретлигиниң саны шексиз. Ҳақыйқатында да, ниң нолден басқа ҳәр бир мәнисине векторың бирдей абсолют мәнисине, бирақ бағыты менен парық қылатуғын ҳалларға (17.10) түриндеги меншикли функциялардың шексиз көплиги сәйкес келеди.

Шредингер теңлемесиниң қалайынша шеклик классикалық механикаға өтетуғынлығын қараймыз. Мәселени әпиўайыластырыў ушын сыртқы майдандағы бир бөлекшени қараймыз. (17.6) түринде жазылған Шрёдингер теңлемесине толқын функциясының (6.1)-шекли мәниси болған функциясын қойып, буннан кейин дифференциаллап, мынаны аламыз:

Бул аңлатпада таза затлық та, таза жормал да ағзалар бар (бул теңлемеде пенен ның затлық екенлигин еске түсиремиз). Оларды айырым түрде нолге теңеп, еки теңлеме аламыз:

Бул теңлемелердиң бириншисинде қа ийе болған ағзаны жуўықлап, мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.10) |

Бул бөлекше ушын жазылған тәсири ушын классикалық Гамильтон-Якоби теңлемеси болып табылады. Демек, классикалық механика шегинде ℏ бойынша биринши (ноллик емес) тәртиптеги ағзаның дәллигинде классикалық механиканың дурыс екенлигин көремиз.

Алынған теңлемелердиң екиншисин ға көбейтилгеннен кейин былайынша көширип жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17.11) |

Бул теңлеме көргизбели физикалық мәниске ийе: шамасы бөлекшени кеңисликтиң анаў ямаса мынаў орнында табыўдың итималлығының тығызлығы , - бөлекшениң классикалық тезлиги болып табылады. Сонлықтан, (17.11)-теңлеме классикалық механиканың нызамлары бойынша итималлықтың тығызлығының ҳәр бир ноқатта классикалық тезлик менен көрсететуғын үзликсизлик теңлемесинен басқа ҳеш нәрсе де емес.

**§ 25. Шрёдингер теңлемесиниң тийкарғы қәсийетлери**

Шрёдингер теңлемесиниң шешимлери қанаатландыратуғын шәртлер жүдә улыўмалық характерге ийе. Толқын функциясының ең дәслеп барлық кеңисликте бир мәнисли ҳәм үзликсиз болыўы керек. майданының өзи үзилиў бетине ийе болған жағдайда да үзликсизлик талабы сақланады. Бундай бетте толқын функциясының өзи де, оның туўындылары да үзликсиз болып қала бериўи керек. Бирақ, егер потенциаллық энергия базы бир беттен кейин шексизликке айлананатуғын болса, онда толқын функциясы үзликсиз болып қала алмайды. областына бөлекшениң кириўи мүмкин емес, яғный бундай областтың барлық орынларында теңлигиниң орынланыўы керек. диң үзликсизлиги бул областтың шегарасында диң нолге айланыўын талап етеди. Бундай жағдайда дан алынған туўынды, улыўма айтқанда, секирмели түрде өзгереди.

Егер майданы ҳеш бир орында шексизликке айланбайтуғын болса, онда толқын функциясының кеңисликтеги барлық орынларында шекли болыўы керек. Бул шәрттиң шамасы бары бир ноқатта болған жағдайда шамасы сыяқлы тез емес түрде шексизликке айланғанда да орынланыўы керек.

Мейли, функциясының минималлық мәниси болсын. Бөлекшениң гамильтонианы еки ағзаның - кинетикалық энергия менен потенциаллық энергия дың қосындысы болғанлықтан, онда ықтыярлы ҳалдағы энергияның орташа мәниси суммасына тең. Бирақ, операторының меншикли мәнислери (еркин бөлекшениң гамильтонианына сәйкес келетуғын) оң болғанлықтан, онда орташа мәнис ушын теңлиги орынлы. Усының менен бирге көзге көринип турған теңсизлигин нәзерде тутсақ, онда теңсизлигиниң де орын алатуғынлығын табамыз. Бул теңсизлик қәлеген ҳал ушын орынлы болғанлықтан, онда энергияның барлық меншикли мәнислери ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (18.1) |

теңсизлигиниң орынлы екенлиги түсиникли.

Шексизликте жоғалатуғын күш майданында қозғалатуғын бөлекшени қараймыз. функциясын шексизликте нолге айланатуғындай етип анықлаймыз. Бундай жағдайда энергияның терис меншикли мәнислериниң спектриниң дискрет болатуғынлығын аңсат көриўге болады. Демек, шексизликте жоғалатуғын майдандағы барлық ҳаллар байланысқан ҳаллар болып табылады. Ҳақыйқатында да, инфинитлик қозғалысқа сәйкес келетуғын үзликсиз спектрдиң стационар ҳалларында бөлекше шексизликте жайласқан болады. Бирақ, жеткиликли дәрежедеги үлкен қашықлықларда майданның бар екенлигин есапқа алмаўға ҳәм, усыған сәйкес, бөлекшениң қозғалысын еркин қозғалыс деп қараўға болады. Еркин қозғалыста болса энергияның мәниси тек оң шама. Керисинше, оң меншикли мәнислер үзликсиз спектрди пайда етеди ҳәм қозғалыс инфинитлик қозғалысқа сәйкес келеди. Улыўма айтқанда, теңсизлиги орынланған жағдайда биз қарап атырған майдан ушын Шрёдингер теңлемеси шешимлерге ийе емес. Бул шешимлер ушын интегралы тарқалыўшы.

Мынадай жағдайға дыққат аўдарамыз: квантлық механикада финитлик қозғалыста бөлекше кеңисликтиң теңсизлиги орынланатуғын областлардың бөлекшени табыўдың итималлығы тез нолге умтылатуғын бөлиминде де жайласа алады. Бул жағдайда квантлық механиканың классикалық механикадан принципиаллық айырмасы көринеди. Классикалық механикада бөлекше теңсизлиги орынланатуғын областта тура алмайды. Классикалық механикада болған жағдайда бул областқа кирип барыўдың мүмкин емес екенлиги кинетикалық энергияның терис, яғный тезликтиң жормал болатуғынлығы менен байланыслы.

Квантлық механикада да кинетикалық энергияның меншикли мәнислери оң. Бирақ, санда да бир қарама-қарсылыққа жолығамыз. Егер өлшеў процессиниң тәсиринде бөлекше кеңисликтиң базы бир ноқатында локализацияланатуғын болса, онда тап усы процесстиң нәтийжесинде бөлекшениң ҳалы белгили бир кинетикалық энергияға ийе болыўдан қалатуғындай болып бузылады.

Егер барлық кеңисликте теңсизлиги орынланатуғын болса (шексизликте ), онда (18.1)-теңликке сәйкес теңсизлигине ийе боламыз. Екинши тәрептен теңсизлиги орынланатуғын жағдайларда спектр үзликсиз болатуғын болғанлықтан, онда буннан биз қарап атырған жағдайда дискрет спектрдиң пүткиллей болмайтуғынлығы келип шығады (яғный, бөлекшениң тек инфинитлик қозғалысының болыўы мүмкин).

Базы бир ноқатта (бул ноқатты биз координаталар басы сыпатында сайлап аламыз) шамасы ге

|  |  |
| --- | --- |
|  | (18.2) |

нызамы бойынша умтылатуғын болсын деп болжайық. Координаталар басының әтирапындағы базы бир киши областта (радиусы болған) шекли, ал оның сыртында нолге тең болатуғын толқын функциясын қараймыз. Усындай толқын пакетиндеги бөлекшениң координаталарындағы анықсызлықтың тәртиби менен барабар. Сонлықтан импульстиң мәнисиндеги анықсызлық шамасында. Бул ҳалдағы кинетикалық энергияның орташа мәнисиниң тәртиби шамасының тәртибиндей. Ал потенциаллық энергияның орташа мәниси шамасындай. Дәслеп теңсизлиги орынлы деп болжаймыз. Бундай жағдайда диң жеткиликли дәрежедеги киши мәнисинде қосындысы абсолют мәниси бойынша қәлегенинше үлкен болған терис мәниске ийе бола алады. Бирақ, егер орташа энергия усындай мәнислерге ийе бола алатуғын болса, онда абсолют мәниси бойынша қәлегенинше үлкен болатуғын энергияның терис меншикли мәнислериниң болатуғынлығын аңғартады. Энергияның жүдә үлкен болған мәнислерине бөлекшениң координаталар басының әтирапындағы кеңисликтиң жүдә киши болған областындағы қозғалысы сәйкес келеди. "Нормаль" ҳал координаталардың басындағы бөлекшеге сәйкес келеди, яғный бөлекшениң ноқатына "қулаўы" орын алады.

Егер теңсизлиги орын алатуғын болса, онда энергия терис мәнислердиң абсолют мәнислери бойынша оғада үлкен болған энергияға ийе бола алмайды. Диагоналлық спектр базы бир шекли терис мәнистен басланады. Бундай жағдайда бөлекшениң орайға қулап түсиўи орын алмайды. Классикалық механикада бөлекшениң орайға қулап түсиўиниң принципинде қәлеген тартысыў майданында жүзеге келиўи мүмкин (яғный, тиң қәлеген оң мәнисинде). болған жағдай кейинирек айрықша түрде гәп етиледи.

Енди энергия спектриниң үлкен қашықлықлардағы майданның қәсийетлерине ғәрезлигин изертлеймиз. шегинде терис мәниске ийе болған потенциаллық энергия (18.2)-дәрежели нызам () бойынша нолге умтылады деп болжайық (бул формулада диң мәниси үлкен емес). Радиусы ҳәм қалыңлығы болған шар қатламын "толтыратуғын" толқын пакетин қараймыз. Бундай жағдайда да кинетикалық энергияның мәнисиниң тәртиби , ал потенциаллық энергияның мәнисиниң тәртиби шамасындай болады. ди ҳәм оның менен бирге ди де үлкейтемиз ( шамасының ге пропорционал өсиўин тәмийинлеймиз). Егер теңсизлиги орынлы болса, онда диң жеткиликли дәрежедеги үлкен мәнислеринде шамасы терис болады. Буннан терис энергияға ийе болған стационар ҳаллардың бар болатуғынлығы ҳәм бундай ҳалларда бөлекшениң координата басынан үлкен қашықлықларда сезилерликтей итималлық пенен жайласа алатуғынлығынлығы келип шығады. Бирақ, бул энергияның абсолют шамасы бойынша жүдә киши болған терис қәддилериниң болатуғынлығын аңғартады (кеңисликтиң теңсизлиги орынланатуғын, толқын функциясының мәниси тез сөнетуғын областында екенлигин есте сақлаў керек). Солай етип, биз қарап атырған жағдайда дискрет спектр шексиз көп санлы қәддилерге ийе болады екен. Олар қәддине жақынласыў менен қоюласады.

Егер шексизликте майдан нызамы бойынша киширейетуғын болса онда абсолют мәниси бойынша қәлегенинше киши болған терис қәддилер болмайды. Дискрет спектр нолге тең болмаған қәқддиде тоқтайды ҳәм сонлықтан қәддилердиң улыўмалық саны шекленген.

Стационар ҳаллардың толқын функциялары ушын Шредингер теңлемеси де, оның шешимлерине қойылатуғын шәртлер де затлық. Сонлықтан оның шешимлерин де затлық етип сайлап алыўға болады (буның магнит майданында турған системалар ушын дурыс емес екенлигин атап өтемиз). Егер энергияның азғанбаған мәнислериниң меншикли функцияларына келсек, онда олар автомат түрде фазалық көбейтиўши дәллигинде затлық болады. Ҳақыйқатында да, толқын функциясы да функциясы қанаатландыратуғын теңлемени қанаатландырады. Сонлықтан ол энергияның тап сол мәнисиниң меншикли функциясы болып табылады. Сонлықтан, егер бул мәнис азғынбаған болса, онда бирдей болыўы керек, яғный олар тек турақлы көбейтиўши (модули 1 ге тең) менен айрылыўы керек. Энергияның бир азғынған қәддине сәйкес келетуғын толқын функцияларының затлық болыўы шәрт емес. Бирақ, сызықлы комбинацияларды сәйкес түрде сайлап алыў жолы менен барлық ўақытта затлық функциялардың жыйнағын алыўға болады.

толық толқын функциялары (ўақыттан ғәрезли болған) коэффициентлерине киретуғын теңлемениң жәрдеминде анықланады. Бирақ, бул теңлеме ны ға алмастырса ҳәм усының менен бир ўақытта комплексли түйинлес теңлемеге өткенде түрин сақлайды (потенциаллық энергия анық түрде ўақыттан ғәрезсиз деп болжаймыз, сонлықтан система жабық ямаса турақлы майданда (магнит майданы емес) жайласқан). Сонлықтан, функциясын менен функциялары тек ўақыттың алдындағы белгилери бойынша айрылатуғындай етип сайлап алыўға болады.

Ўақыттың бағытының (яғный белгисиниң) өзгериўи менен классикалық механиканың теңлемелериниң өзгермей қалатуғынлығы белгили. Квантлық механикада болса ўақыттың еки бағытына болған симметрияның көриниўи ушын ның белгисин өзгертиў менен бир ўақытта ди пенен алмастырыў керек. Бирақ, бул жағдайда симметрияның тек теңлемеге тийисли екенлигин, ал квантлық механикада фундаменталлық орынды ийелейтуғын өлшеў түсинигине тийисли емес екенлигин есте тутыў керек.

**§ 26. Ағыстың тығызлығы**

Классикалық механикада бөлекшениң тезлиги менен импульси арасындағы байланыс түринде жазылады. Квантлық механикада усындай байланыс оларға сәйкес келетуғын операторлар арасында бар. Бул гәптиң дурыс екенлигине былайынша исениўге болады: операторларды ўақыт бойынша дифференциаллаўдың улыўмалық қағыйдасы болған (9.2) тийкарында теңлиги есаплаў жолы менен исениўге болады:

ушын жазылған (17.5)-формула менен (16.5)-формуладан пайдаланып, мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19.1) |

Әлбетте, усындай қатнаслар тезлик пенен импульстиң меншикли мәнислериниң арасында ҳәм қәлеген ҳалдағы олардың орташа мәнислериниң арасында да орын алады.

Бөлекшениң импульси, соған сәйкес тезлиги оның координаталары менен бир ўақытта анық мәниске ийе бола алмайды. Бирақ ўақыттың шексиз киши элементи ға көбейтилген бөлекшениң тезлиги усындай ўақыты ишиндеги аўысыўды анықлайды. Сонлықтан, тезликтиң координата менен бир ўақытта болмаўы факты мынаны аңғартады: егер бөлекше ўақыттың базы бир моментинде кеңисликтиң белгили болған ноқатында жайласқан болса, онда ўақыттың усы моментине шексиз жақын ўақыт моментинде анық орынға ийе бола алмайды.

Бөлекшениң радиус-векторының функциясы болған функциясын алайық. Усы функциядан ўақыт бойынша алынған туўындыға сәйкес келетуғын операторын қараймыз. тиң менен коммутацияланатуғынлығын нәзерде тутып, төмендегилерди табамыз:

(16.4)-аңлатпаның жәрдеминде

теңликлерине ийе боламыз ҳәм излеп атырған аңлатпаны табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19.2) |

Енди тезлениў операторын табамыз. Бундай жағдайда мынаған ийе боламыз:

(16.4)-формуланы пайдаланып, мынаны табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19.3) |

Бул операторлық теңлеме өзиниң формасы бойынша классикалық механикадағы қозғалыс теңлемесине (Ньютон теңлемесине) дәл сәйкес келеди.

Базы бир шекли көлеми бойынша алынған интегралы усы көлемде бөлекшени табыўдың итималлығын береди. Бул шамадан ўақыт бойынша алынған интегралды есаплаймыз. Нәтийжеде мынаған ийе боламыз:

Бул теңликке

формуласын қойып ҳәм

теңлигин қойып

аңлатпасына ийе боламыз. Бул теңликте төмендегидей векторды аңғартады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19.4) |

Егер ди түринде жазатуғын болсақ, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19.4а) |

теңлигине ийе боламыз.

ден алынған интегралды Гаусс теоремасына сәйкес көлемин қоршап турған туйық бетке түрлендириўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19.5) |

Бул аңлатпадан векторын *итималлық ағысының векторы* ямаса әпиўайы түрде *ағыстың тығызлығы* деп атаўға болады. Бул вектордан бет бойынша алынған интеграл ўақыт бирлигинде бөлекшениң усы бетти кесип өтиўиниң итималлығы болып табылады. векторы ҳәм итималлықтың тығызлығы мынадай теңлемени қанаатландырады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19.6) |

Бул теңлеме классикалық үзликсизлик теңлемесине сәйкес келеди.

Еркин қозғалыстың толқын функциясы болған (17.9)-тегис толқынды бул толқын тығызлығы 1 ге тең болған бөлекшелердиң ағысын тәрийиплейтуғын етип нормировкалаўға болады (бундай ағыста оның бағытына перпендикуляр қойылған кесимнен ўақыт бирлигинде орташа бир бөлекше өтеди). Бундай функцияны былайынша жазады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19.7) |

Бул формулада арқалы бөлекшениң тезлиги белгиленген. Ҳақыйкатында да, оны (19.4)-аңлатпаға қойып аңлатпасын, яғный қозғалыс бағытындағы бирлик векторды аламыз.

Ҳәр қыйлы болған энергияға ийе ҳаллардың толқын функцияларының ортогоналлығының Шрёдингер теңлемесинен қалайынша тиккелей келип шығатуғынлығын билиў пайдалы. Мейли менен усындай функциялардың екеўи болсын. Олар мынадай теңлемелерди қанаатландырады:

Бул теңлемелердиң бириншисин ге, ал екиншисин ге көбейтейик ҳәм бир биринен ағзама-ағза алайық. Ол мынаны береди:

Егер енди теңлемениң еки бөлимин де барлық кеңислик бойынша интегралласақ, онда Гаусс теоремасы бойынша түрлендирилген оң бөлими нолге айланады ҳәм биз мынаны аламыз:

Буннан биз болжаған теңсизлигине сәйкес биз излеп атырған ортогоналлық қатнасы келип шығады:

**§ 27. Вариациялық принцип**

Улыўма түрде жазылған Шрёдингер теңлемесин вариациялық принцип тийкарында да алыўға болады.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20.1) |

функциясының комплексли екенлигине байланыслы менен бойынша вариацияларды бир биринен ғәрезсиз ислеўге болады. бойынша вариациялап биз мынаған ийе боламыз

Буннан шамасының ықтыярлы екенлигине байланыслы биз излеп атырған теңлемесин аламыз. бойынша вариациялаў жаңа ҳеш нәрсени бермейди. Ҳақыйқатында да, бойынша вариациялап ҳәм операторының эрмитлик екенлигинен пайдаланып,

теңликлерине ийе боламыз. Буннан комплексли түйинлес болған теңлемеси алынады.

(20.1) вариациялық принципи интегралдың сөзсиз экстремумын талап етеди. ни шәртли экстремум мәселесиндеги Лагранж көбейтиўшиси түринде қарап, оны басқа түрде көрсетиўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20.2) |

Бул жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20.3) |

қосымша шәртиниң орынланыўы керек.

(20.2)-интегралдың минималлық мәниси [қосымша (20.3)-шәрт орынланғанда] энергияның меншикли мәнислериниң бирин, яғный тийкарғы ҳалдың энергиясын береди. Бул минимумды тийкарғы ҳалдың толқын функциясы жүзеге келтиреди. Биз бул параграфта толқын функцияларын затлық деп есаплаймыз (магнит майданы болмаған жағдайда толқын функциясын барлық ўақытта ҳақыйқый етип сайлап алыўдың мүмкин екенлигин еслетип өтемиз). Келеси стационар ҳаллардың толқын функциялары () интегралдың ҳакыйкый минимумына емес, ал тек экстремумға ғана сәйкес келеди.

(20.2)-интегралдың минималлық шәртинен тийкарғы ҳалдан кейинги толқын функциясы менен энергия ди алыў ушын конкуренцияға түсетуғын функциялар сыпатында тек (20.3)-нормировка шәртин қанаатландыратуғын функцияларды емес, ал тийкарғы ҳалдың толқын функциясна ортогонал болған толқын функцияларын сайлап алыў керек. Улыўма айтқанда, биринши n ҳалдың толқын функциялары , ..., лер белгили болса (ҳаллар энергияның үлкейиўи тәртибинде жайласқан), онда келеси ҳалдың толқын функциясы төмендегидей қосымша шәртлерде (20.2)-интегралдың минимумын жүзеге келтиреди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20.4) |

Биз вариациялық принциптиң тийкарында дәлиллениўи мүмкин болған бир неше теоремаларды келтирип өтемиз.

Тийкарғы ҳалдың толқын функциясы координаталардың шекли мәнислериниң ҳеш қайсысында нолге айланбайды (ямаса түйинлерге ийе болмайды деп айтады)[[5]](#footnote-5). Басқа сөз бенен айтқанда толқын функциясы барлық кеңисликте бирдей белгиге ийе болады. Буннан, басқа стационар ҳаллардың ге ортогонал екенлиги ҳәм сөзсиз түйинлик ноқатларға ийе болатуғынлығы келип шығады (егер де турақлы белгиге ийе болса, онда интегралы нолге айланбайды).

Буннан кейин функциясының түйинлериниң болмайтуғын фактынан тийкарғы ҳалдың азғынған бола алмайтуғынлығы келип шығады. Ҳақыйқатында да, қарама-қарсы жағдайды болжайық ҳәм менен лер қәддине сәйкес келетуғын ҳәр қыйлы меншикли функциялар болсын. Қәлеген сызықлы комбинациясы да меншикли функция болады. Бирақ менен турақлыларын сәйкес түрде сайлап алып бул функцияның кеңисликтиң қәлеген ноқатында нолге айланыўына жетисиўге болады. Бундай жағдайда биз түйинлерге ийе болған меншикли функцияны алған болар едик.

Егер қозғалыс кеңисликтиң шекленген областында жүзеге келетуғын болса, онда бул областтың шегарасында теңлигиниң орынланыўы керек. Энергия қәддилерин анықлаў ушын вариациялық принциптен усындай шегаралық шәрттеги (20.2)-интегралдың минимумын табыў керек. Тийкарғы ҳалдың толқын функциясының түйинлериниң болмайтуғынлығы ҳаққындағы теореме толқын функциясының бул областтың ишиндеги ҳеш бир орында нолге айланбайтуғынлығын талап етеди.

Қозғалыс областының өлшемлериниң үлкейиўинде энергияның барлық қәддилери киширейетуғынлығын атап өтемиз. Бул мынадай жағдайдан тиккелей келип шығады: областтың үлкейиўи конкуренцияға түсетуғын, интегралдың минимум болыўын тәмийинлейтуғын функциялардың топарын үлкейтеди. Нәтийжеде интегралдың минималлық мәнисиниң тек кемейиўи мүмкин. Бөлекшелер системасының дискрет спектриниң ҳаллар ушын жазылған

аңлатпасын вариациялаў ушын қолайлы болған басқа түрге түрлендириў мүмкин. Интеграл астындағы биринши ағза ушын былайынша жазамыз:

көлеми бойынша интеграл шексиз алыслатылған туйық бет бойынша интегралға түрленеди. Усының менен бирге шексизликте дискрет спектрге сәйкес келетуғын ҳаллардың толқын функциялары жеткиликли дәрежеде тез нолге айланатуғын болғанлықтан бул интеграл жоғалады. Солай етип,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20.5) |

теңлигине ийе боламыз.

**IV бап. Квантлық механиканың бир өлшемли мәселелери**

**§ 21. Бир өлшемли қозғалыстың улыўмалық қәсийетлери**

Бир өлшемли мәселелер квантлық механиканың жүдә жоқары идеалластырылған мәселелердиң қатарына киреди. Бирақ, оларды квантлық механиканың тийкарғы өзгешеликлерин анықлаў ушын табыс пенен пайдаланыўға болады. Бул мәселелер үш өлшемли

толқын теңлемесин қараўдың барысында пайда болады. Бул теңлемеде потенциал тек бир декарт координатасы тан ғәрезли. Бундай жағдайда

факторизациясының нәтийжесинде

теңлемеси алынады. Егер

белгилеўлерин пайдалансақ соңғы теңлемени және де әпиўайыластырыўға болады. Нәтийжеде биз бир өлшемли толқын теңлемесине келемиз:

Соңғы еки формуладағы экспоненциаллық көбейтиўшилер көшерине перпендикуляр бағытта тарқалатуғын тегис толқынларды тәрийиплейди. Олар бағытындағы толқын функциясының қәсийетлерине тәсир етпейди.

Енди мәселени толығырақ таллаймыз.

Егер бөлекшениң потенциаллық энергиясы тек бир координатасынан ғәрезли болса, онда толқын функциясын пенен тиң функцияларының тек тың функциясына көбеймеси түринде излеў керек. Олардың бириншиси еркин қозғалыс ушын жазылған Шрёдингер теңлемеси, ал екиншиси болса бир өлшемли Шрёдингер теңлемеси менен анықланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21.1) |

Егер потенциал энергиясы аңлатпасының жәрдеминде үш функцияның қосындысы түринде жазылатуғын, соның менен бирге бул үш функцияның ҳәр қайсысы координаталардың тек биринен ғана ғәрезли болатуғын жағдайдағы қозғалыс ҳаққындағы мәселе усындай теңлемеге алып келеди. Клеси параграфларда биз усындай "бир өлшемли" қозғалысларға айқын түрдеги мысалларды келтиремиз. Бул параграфта биз усындай қозғалыслардың базы бир улыўмалық қәсийетлерин анықлаймыз.

Ең дәслеп бир өлшемли мәселелердеги дискрет спектрдиң барлық энергия қәддилериниң азғынбаған екенлигин көрсетемиз. Дәлиллеў ушын, керисинше энергия қәддилери азғынған деп ҳәм менен толқын функцияларын энергияның бир мәнисине сәйкес келеди деп болжаймыз. Ҳәр қыйлы болған еки меншикли функция энергияның бир мәнисине сәйкес келеди. Олардың екеўи де (21.1)-теңлемени қанаатландыратуғын болғанлықтан

ямаса

теңликлерин жаза аламыз (штрих бойынша дифференциаллаўды аңғартады). Бул қатнасты интеграллаў арқалы мынаны табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21.2) |

Шексизликте теңликлери орынлы болғанлықтан теңлигин жаза аламыз, сонлықтан

ямаса теңлигине ийе боламыз. Егер және бир рет интегралласақ, онда

теңлигин аламыз. Демек, еки функция бир бирине сәйкес келеди екен.

Дискрет спектрдиң толқын функциясы ушын мынадай теореманың айтылыўы мүмкин (бул теореманы осцилляциялық теорема деп те атаймыз): тың шекли мәнислеринде мәниси бойынша меншикли мәниске сәйкес келетуғын -санлы функциясы рет нолге айланады (әлбетте, егер бөлекше көшериниң шекленген кесиндисинде ғана жайласа алатуғын болса, онда усы кесиндиниң ишиндеги функциясы ҳаққында гәп етемиз).

функциясы болған жағдайда шекли шекке умтылады деп есаплаймыз (бирақ монотонлы функция болыўы шәрт емес). шегин координата басы сыпатында қабыл етемиз [яғный теңлиги орынланады деп қабыл етемиз]. шамасын арқалы белгилеймиз ҳәм теңлиги орынланады деп есаплаймыз. Дискрет спектр энергияның бөлекше шексизликке кете алмайтуғын областында жатады. Оның ушын энергияның шамасының еки шектен де киши болыўы керек [яғный шамасынан]. Демек энергияның мәнисиниң терис болыўы шәрт:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21.3) |

Бундай жағдайда, әлбетте, шәртиниң орынланыўы керек, яғный функциясы теңсизлиги орынланатуғын ең кеминде бир минимумға ийе болыўы керек.

Енди шамасынан киши болған оң энергиялар областын қараймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21.4) |

Бул областта спектр үзликсиз, ал бөлекшениң стационар ҳалларға сәйкес келетуғын қозғалысы инфинитлик болады ҳәм бундай жағдайда бөлекше тәрепке қарай кетеди. Спектрдиң бул бөлиминиң энергиясының меншикли мәнислериниң азғынбаған екенлигин аңсат исениўге болады. Оның ушын дискрет спектр ушын жоқарыда келтирилген дәлиллеўдиң ҳәм функцияларының шексизликлердиң биринде нолге айланыўының керек екенлигин аңғарыў жеткиликли (биз қарап атырған бул жағдайда те).

тың жеткиликли дәрежедеги үлкен мәнислеринде (21.1)-Шрёдингер теңлемесинде ты нолге тең деп есаплаўға болады:

Бул теңлеме турғын тегис толқын түриндеги затлық шешимлерге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21.5) |

Алынған аңлатпада - турақлылар, - "толқын векторы". Бул формуланың жәрдеминде үзликсиз спектрдиң (21.4)-участкасындағы энергияның азғынбаған қәддилериниң толқын функциялары анықланады. тың үлкен терис мәнислеринде Шрёдингер теңлемеси

түрине енеди. шегинде шексизликке айланбайтуғын шешим

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21.6) |

Биз шегиндеги толқын функциясының асимптотикалық түрин таптық.

Солай етип, толқын функциясы теңсизлиги орынлы болған областта экспоненциаллық түрде сөнеди екен.

Ең ақырында

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21.7) |

теңсизлиги орынланатуғын областта спектрдиң үзликсиз, ал қозғалыстың еки бағытта да инфинитли болатуғынлығын атап өтемиз. Спектрдиң бул бөлиминде барлық қәддилер еки қайтара азғынған. Бул жағдайдың сәйкес толқын функциялардың екинши тәртипли (21.1)-теңлеме тәрепинен анықланатуғынлығы менен байланыслы. Усының менен бирге бул теңлемениң бир биринен ғәрезсиз болған еки шешими шексизликтеги шәртлерди толық қанаатландырады (буннан алдыңғы жағдайда шешимлердиң бири шегинде шексизликке умтылатуғын ҳәм сонлықтан қалдырып кетилген еди). шегиндеги толқын функциясының асимптоталық шешими былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21.8) |

Бул аңлатпада ағзасы оңға, ал шамасы шеп тәрепке қарай қозғалатуғын бөлекшеге тийисли. Биз квантлық механиканың бир өлшемли мәселелерин қарағанымызда (21.8)-формула түринде жазылған аңлатпаларды жийи пайдаланамыз.

**§ 29. Квазиклассикалық жағдай (Ландау)**

Биз квантлық механиканың бир өлшемли ҳәм үш өлшемлери мәселелерин қараўға өтпестен бурын квазиклассикалық жағдай менен, атап айтқанда квазиклассикалық жағдайдағы толқын функциясына қойылатуғын шәртлерди үйренемиз.

Егер бөлекшелердиң де Бройллық толқын узынлығы берилген айқын мәселениң шәртин анықлайтуғын L характеристикалық өлшеминен киши болса, онда системаның қәсийети классикалық системалардың қәсийетлерине жақын болады. Биз бул жерде салыстырыў мақсетинде жақтылықтың толқын узынлығының шамасы нолге умтылғанда толқынлық оптиканың геометриялық оптикаға өтетуғынлығын еске түсиремиз.

Енди квазиклассикалық системалардың қәсийетлерин толығырақ изертлеўге өтемиз. Оның ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

түринде жазылатуғын Шрёдингер теңлемесине формаль түрде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.1) |

аңлатпасын қоямыз. Бундай жағдайда σ функциясы ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.2) |

теңлемесине ийе боламыз. Өзиниң қәсийетлери бойынша системаны дерлик классикалық деп есаплап, σ ны ℏ тың дәрежелери бойынша жайласқан төмендегидей қатардың жәрдеминде излеймиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.3) |

Ең әпиўайы жағдай болған бир бөлекшениң бир өлшемли қозғалысын қараймыз. Бундай жағдайда (46.2)-теңлеме

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.4) |

түриндеги теңлемеге айланады. Бул теңлемедеги штрих бойынша дифференциаллаўды аңғартады.

Биринши жақынласыўда ҳәм теңлемедеги ℏ қа ийе болған ағзаны таслап кетемиз:

Буннан

нәтийжесин табамыз. Интеграл астындағы аңлатпа координатаның функциясы түринде жазылған бөлекшениң классикалық импульси болып табылады. Квадрат түбирдиң алдындағы функциясын + белгиси менен алып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.5) |

теңликлерине ийе боламыз. Бундай нәтийжениң "дерлик классикалық" физикалық системаның (*квазиклассикалық толқын функциясының*) толқын функциясының

түринде жазылатуғынлығынан күтиўге болады. Бул аңлатпада арқалы механикалық системаның ҳәрекети белгиленген.

интегралының ҳәрекеттиң ўақыттан ғәрезсиз болған бөлими екенлиги белгили. Бөлекшениң толық механикалық ҳәрекети

түринде жазылады. ушын жазылған аңлатпада аңлатпасы жоқ. Себеби биз ўақыттан ғәрезсиз болған толқын функциясын қарап атырмыз.

(46.4)-аңлатпаның шеп тәрепиндеги екинши ағза биринши ағзадан киши болған жағдайда исленген жуўықлаўдың нызамлы екенлигин атап өтемиз. Демек, ямаса

(46.5)-аңлатпаға сәйкес биринши жақынласыўда теңлигине ийе боламыз. Нәтийжеде, алынған шәртти былайынша жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.6) |

Бул теңликте , ал арқалы бөлекшениң тан ғәрезли болған функциясы арқалы аңғартылған де Бройль толқын узынлығы. Солай етип, биз квазиклассикалық болыўдың санлық шәртин алдық: бөлекшениң толқын узынлығының өзгериўи усы толқын узынлығындай аралықтың ишинде есапқа алмастай дәрежеде киши болыўы керек. Егер

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

теңликлериниң орынлы екенлигин есапқа алсақ (бул теңликлерде - бөлекшеге тәсир ететуғын классикалық күш), онда мынадай теңсизликти табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.7) |

Бул аңлатпадан жүдә киши импульслерде квазиклассикалық жақынласыўды пайдаланыўға болмайтуғынлығы көринип тур. Дара жағдайда, оны бурылыў ноқатында (яғный, классикалық көз-қарастан бөлекше тоқтап, буннан кейин кери бағытта қозғала баслайтуғын ноқаттың қасында) қолланыўға болмайды. Бул ноқатлар , яғный теңлигинен анықланады. шегинде де Бройль толқын узынлығы шексизликке умтылады ҳәм оны киши деп деп есаплаўға болмайды.

Бирақ, (46.6)- ҳәм (46.7)-шәртлердиң квазиклассикалық жақынласыў ушын жеткиликсиз екенлигин атап өтемиз. Мәселе соннан ибарат, шәртлер (46.4)-дифференциаллық теңлемедеги ҳәр қыйлы ағзаларды баҳалаў жолы менен алынды. Есапқа алынбаған ағза жоқары туўындыға ийе. Ҳақыйқатында, бул теңлемениң шешими болған қатардағы ағзалардың кем-кемнен киширейиўин талап етиў керек ҳәм сонлықтан теңлемениң есапқа алынбай кетилген ағзасының киши екенлиги бойынша тәмийинленбеўи мүмкин. Мысалы, егер ушын шешимде координатасына байланыслы шама менен сызықлы түрде өсетуғын ағза болатуғын болса, онда екинши туўындының киши болыўы оның үлкен қашықлықларда үлкен шамаға тең бола алыўына кесент жасамайды. Майдан биз қарап атырған узынлығынан үлкен қашықлықларға тарқалған жағдайда ҳәм усы қашықлықтың ишинде майдан сезилерликтей өзгериске ушырайтуғын жағдайда бундай ситуацияның жүзеге келиўи мүмкин. Бундай жағдайда квазиклассикалық жақынласыўды толқын функциясының үлкен қашықлықлардағы қәсийетин барлап барыў ушын қолланыўға болмайды.

(46.3) қатардағы келеси ағзаны есаплаўға өтемиз. (46.4)-теңлемедеги ℏ бойынша биринши тәртипли ағзалар

теңлемесин береди. Буннан

теңликлерин аламыз. Интеграллаў жолы менен

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.8) |

теңлигине ийе боламыз (интеграллаў турақлысын таслап кетемиз).

Алынған аңлатпаны (46.1)- ҳәм (46.3)-аңлатпаларға қойып, толқын функциясын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.9) |

түринде аламыз. Бул функциядағы көбейтиўшисин қатнасыўы аңсат түсиндириледи. Бөлекшени координаталары пенен болған ноқатлар арасында табыўдың итималлығы толқын функциясының модулиниң квадраты, яғный шамасының жәрдеминде анықланады. Оның мәниси тийкарынан ға пропорционал. Бул "квазиклассикалық бөлекшеден" күтиў керек болған жағдай болып табылады. Себеби классикалық қозғалыста dx аралығын өтиў ушын жумсалатуғын ўақыттың шамасы бөлекшениң тезлигине (ямаса импульсине) кери пропорционал. Кеңисликтиң классикалық жақтан барыўға болмайтуғын участкаларында ҳәм функциясы жормал. Толқын теңлемесиниң бул областлардағы шешими

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.10) |

түринде жазылады. Бирақ квазиклассикалық жақынласыўдың дәллиги толқын функциясында экспоненциаллық үлкен ағзалардың "фонында" экспоненциаллық киши ағзаларды сақлаўға ҳуқық бермейди. Соның менен бирге анықлама бойынша (46.10)-аңлатпаның еки ағзасын да бир ўақытта сақлаўға болмайды.

Әдетте толқын функциясында кишили бойынша жоқарырақ тәртипли ағзаларды пайдаланыўдың зәрүрлиги жоқ болса да, квазиклассикалық жақынласыўдың дәллигине тийисли болған базы бир моментлерди атап өтиўди нәзерде тутқан ҳалда (46.3)-қатардың келеси ағзасын да аламыз.

(46.4)-теңлемедеги тәртибиндеги ағзалар

теңлемесин береди. ҳәм ушын (46.5)- ҳәм (46.8)-аңлатпаларды қойып

Интеграллап (биринши интеграл бөлеклерге бөлинип интегралланады) ҳәм күшин киргизип ушын

аңлатпасын аламыз. Биз қарап атырған жақынласыўдағы толқын функциясы мынадай түрге ийе:

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46.11) |

Экспоненциаллық ағзаның алдында жормал дүзетиўши ағзалардың пайда болыўы толқын функциясының фазасында затлық дүзетиўдиң пайда болыўына эквивалент (яғный интегралының экспонентасындағы қосымшаға). Бул дүзетиў ℏ қа пропорционал болып шығады (яғный шамасының тәртибине ийе болатуғын).

(46.11) деги квадрат қаўсырмадағы екинши ҳәм үшинши ағзалар 1 ге салыстырғанда киши болыўы керек. Олардың бириншиси ушын бул шәрт (46.7) ге сәйкес келеди. Бирақ, екиншисинде интегралды баҳалаў тек шамасы ~L қашықлықларында жеткиликли дәрежеде нолге умтылатуғын болса (46.7)-шәртке алып келеди.

**§ 30. Туўры мүйешли потенциаллар**

Биз базы бир потенциалының тәсиринде көшериниң бойында қозғалатуғын массасы ге тең болған бөлекшени қараймыз. Бундай бөлекше ушын Шрёдингер теңлемеси былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_1) |

Биз стационар ҳалларды изертлеў менен шуғылланамыз. Егер стационар ҳалдың энергиясы болса, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_2) |

шешиминиң алыныўы керек. Оның үстине функциясы Шрёдингердиң стационар теңлемесиниң шешими болып табылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_3) |

Биз бул бапта

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_4) |

белгилеўлерин пайдаланамыз. Нәтийжеде функциясы ушын теңлемени былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_5) |

Бул Штурм-Лиувиллдиң дифференциаллық теңлемеси болып табылады. Биз барлық () интервалындағы оның шекленген, үзликсиз ҳәм дифферециалланатуғын шешимлерин қарап шығыў менен шекленемиз. Егер бундай шешим бар болса, онда турақлы коэффициентке көбейтилген басқа қәлеген шешим уқсас қәсийетлерге ийе болады ҳәм соған байланыслы биз турақлы көбейтиўши бойынша бир биринен айрылатуғын шешимлерди айырып отырмаймыз. Егер бир биринен ғәрезсиз болған еки сызықлы ҳәм ғәрезсиз шешимлер бар болса, онда олардың қәлеген сызықлы комбинациясының да мүмкин болған шешим болатуғынлығын есте сақлаймыз. Бундай жағдайда меншикли мәнис 2 рет азғынған ямаса 2-тәртипли азғынған деп айтады. Анықлама бойынша, азғыныўдың неше рет орын алғанлығы ямаса тәртиби усы меншикли мәниске сәйкес келетуғын бир биринен ғәрезсиз болған меншикли функциялардың саны болып табылады.

(m\_5)-теңлеме затлық [ функциясы тың затлық функциясы болып табылады]. Егер меншикли функция болса, онда оның ҳақыйқый ҳәм жормал бөлимлери де меншикли функциялар болып табылады (азғыныў болмаған жағдайларда олар тек турақлы көбейтиўшиге ғана айрылады. Сонлықтан, берилген меншикли мәниске сәйкес келетуғын барлық меншикли функцияларды табыў ушын, барлық ҳақыйқый функцияларды билиў жеткиликли. Бул ескертиў есаплаўларды әдеўир әпиўайыластырады.

Биз дәслеп базы бир туўры мүйешли потенциаллар ушын меншикли мәнислерди дәл табыўға арналған мәселелерди қараймыз. Айрықша дыққатты квантлық ҳәм классикалық қозғалыслардың арасындағы айырмаға аўдарамыз. Атап айтқанда байланысқан ҳаллардың энергия қәддилериниң квантланыўына, потенциал барьерлердеги бир бири менен байланыспаған бөлекшелердиң шағылысыўы менен өтиўи сыяқлы мәселелерге тоқтап өтемиз. Буннан кейин ықтыярлы потенциалы ушын (5)-теңлемени системалы түрде үйренемиз.

Туўры мүйешли потенциаллардың улыўмалық қәсийетлери. Квантлық эффектлердиң жүзеге келиўи ушын толқын узынлығындай қашықлықларда потенциалының сезилерликтей өзгериске ушыраўы керек. Бул талапқа жуўап беретуғын потенциалдың типи туўры мүйешли потенциал болып табылады: бул потенциал базы бир ноқатларда биринши әўлад үзилислерге ийе болады (яғный шекли мәнистеги кескин секириўлерге ийе) ҳәм бул ноқатлардың арасында турақлы мәниске ийе. Бундай жағдайда көшери бир неше санлы интервалларға бөлинеди ҳәм бул интерваллардың ҳәр қайсысында потенциал толық белгили болған турақлы мәниске ийе.

Биз толқын функциясы ушын қойылатуғын стандарт шәртлерге және бир рет итибар беремиз: стандарт шәртлер толқын функциясына қойылатуғын талаплардың жыйнағы болып табылады. Бул талаплар өзиниң ишине төмендегилерди алады:

Кеңисликтиң барлық орынларында толқын функциясының шекли ҳәм үзликсиз болыўы керек.

Толқын функциясының бир мәнисли болыўы керек (яғный оның ҳақыйқый бөлими де, жормал бөлими де бир мәнисли болады).

Кеңисликтиң барлық орынларында толқын функциясының биринши туўындысы да шекли ҳәм үзликсиз болыўы шәрт.

Усы талапларға қосымша толқын функциясының өзи тәрийиплейтуғын физикалық системасынан ғәрезли болған белгили шегаралық шәртлерди қанаатландырыўы да керек. Мысалы, водород атомындағы электронның толқын функциясының координата басында нолге умтылыўы шәрт. Себеби электронды ядроның ишинде табыў мүмкин емес.

Егер толқын функциясы стандарт шәртлерди қанаатландырмайтуғын болса, онда ол физикалық мәниске ийе болмайды ҳәм оның жәрдеминде системаның қәсийетлерин болжаўдың мүмкиншилиги болмайды.

Стационар ҳалларды қарағанда стандарт шәртлер айрықша әҳмийетли, себеби бундай ҳал меншикли функцияның Гамильтон операторының меншикли функциясы болыўына кепиллик береди. Бул толқын функциясының ўақыттан ғәрезсиз болған Шрёдингер теңлемесиниң шешими екенлигин аңғартады.

потенциалында биринши әўлад үзилислериниң болыўы функциясы қанаатландыратуғын үзликсиз болыў шәртин өзгертпейди. Ҳақыйқатында да, Шрёдингер теңлемесине сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Демек, потенциалының секириў ноқатларында функциясы да үзилиске ушырайды, бирақ дәслепки функция менен функциясы үзликсиз бола береди.

Мейли, енди арқалы потенциалының -интевалдағы () турақлы мәниси болсын. Бул областтағы улыўмалық шешим экспоненциаллық функциялардың сызықлы комбинациясы болып табылады. Бирақ, шешимниң қәсийети диң белгисинен әдеўир күшли ғәрезли.

Егер теңсизлиги орынлы болса, онда биз жормал көрсетикишлерге ийе болған

ҳәм ()

экспоненталардың, яғный синус пенен косинустың комбинациясына ийе боламыз. Шешим "осцилляторлық" характерге ийе болады.

Егер теңсизлиги орынлы болса, онда ҳақыйқый

ҳәм , ()

экспоненталардың комбинациясын аламыз. Бундай жағдайда шешимниң қәсийетлери "экспоненциаллық" характерге ийе болады.

Дифференциаллық теңлемениң улыўмалық шешимин алыў ушын дәслеп оны интерваллардың ҳәр қайсысындағы ҳақыйқый ямаса жормал экспоненталардың сызықлы комбинациясы түринде аңғартады. Бул комбинациялардың параметрлери (комбинациялардың саны ге тең) потенциалдың үзликсизлиги үзилетуғын ноқатлардағы функцияның үзликсизлиги шәртинен анықланады. Үзилис ноқатларынының саны ге тең болғанлықтан бул дана шәртти береди. Солай етип, күтилгениндей, улыўмалық шешим еки ықтыярлы параметрден ғәрезли болып шығады. Алынған шешимниң меншикли функция болыўы ушын шешимниң барлық көшерде шекленген болыўы, яғный, ҳәм шеклериниң ҳәр биринде шекленген болыўы зәрүрли. Егер ε энергиясының барлық () интервалда потенциалдың мәнисинен киши болса, онда улыўмалық шешим барлық орынларда экспоненциаллық характерге ийе болады. Екинши тәртипли туўынды тың белгиси функциясының өзиниң белгисиндей. Буннан улыўмалық шешимниң ямаса шеклеринде ямаса олардың екеўи де орынланатуғын жағдайларда экспоненциаллық түрде өсетуғынлығын келтирип шығарыў қыйын емес. Бундай жағдайда меншикли мәнислерди табыў мәселеси шешимлерге ийе емес. Классикалық механикада энергияның мәниси () интервалының базы бир бөлиминде ғана потенциалдың мәнисинен үлкен болған жағдайда ғана қозғалыстың мүмкин болатуғынлығын атап өтемиз.

Егер ε ниң мәниси шамаларының мәнислериниң ең кеминде биринен үлкен болса, онда меншикли функциялардың бар болыўы менен саны x көшериниң шексиз алыстағы ушларындағы улыўмалық шешимниң қәсийетлериниң өзгешелигинен (осцилляторлық ямаса экспоненциаллық) ғәрезли болады.

**Потенциалдың секириўи. Толқынлардың шағылысыўы ҳәм өтиўи**. Туўры мүйешли потенциалға ең әпиўайы мысал 8-сүўретте көрсетилген потенциалдың кескин секириўи болып табылады ():

областында ( область) .

областында ( область) .

|  |  |
| --- | --- |
|  | 8-сүўрет.  Потенциалдың секириўи. |

Еки жағдайдың орын алыўы мүмкин:

а) . областтағы () улыўмалық шешим осцилляторлық характерге, ал областтағы () улыўмалық шешим экспоненциаллық характерге ийе. Бул шешимниң пайдаланылғандай меншикли функция болыўы ушын областта оның экспоненциаллық сөниўши болыўы зәрүр. Усындай шәртти қанаатландыратуғын тек бир ғана шешим бар болады. Көрсетилген интервалдағы ε ниң ҳәр бир мәниси азғынған емес меншикли мәнис болып табылады: энергияның спектри *үзликсиз ҳәм азғынған емес*. Улыўмалық шешим мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_6) |

Үзликсизлик шәрти функциясын турақлыға шекемги дәлликте анықлайды. Функция менен оның туўындысының үзликсизлигин қараўдың орнына функцияның үзликсизлиги менен бирге оның логарифмлик туўындысы болған үзликсизлигин талап етиў қолайлы. Логарифмлик туўындының үзликсизлиги фазаны анықлайды

φ шамасы қосылыўшысы дәллигинде анықланады. Сонлықтан φ ди менен алмастырыў амплитудасының белгисин алмастырыўға эквивалент. φ ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_6a) |

шамасын қабыл етемиз. Қала берсе, бул функцияның

интервалындағы мәнислерин аңғартады.

Функцияның үзликсизлиги қатнасын анықлайды ҳәм ол мынаған тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_6b) |

б) . Улыўмалық шешим барлық кеңисликте осцилляторлық характерге ийе ҳәм сонлықтан ол жарамлы меншикли функция болып табылады. ε ниң ҳәр бир мәнисине еки сызықлы ғәрезсиз болған меншикли функциялар сәйкес келеди. Меншикли мәнислердиң спектри үзликсиз, еки қайтара азғынған.

областта түрине ийе болған меншикли функцияны дүземиз. Ол, әлбетте, турақлы шамаға шекемги дәлликте анықланады, ал биз областтағы өзгериўшисиниң алдындағы коэффициентти 1 ге тең етип аламыз. Басқа сөз бенен айтқанда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_7) |

теңликлерине ийе болады. Улыўма айтқанда комплексли болған ҳәм турақлылары ноқатындағы үзликсизлик шәртлери бойынша анықланады. Логарифмлик туўындының үзликсизлиги

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_7a) |

ал функцияның өзиниң үзликсизлиги

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_7b) |

теңликлерин береди.

Комплексли түйинлес болған функциясы функциясы менен сызықлы ғәрезсиз болған меншикли функция болып табылады. ε меншикли мәнисине сәйкес келетуғын барлық меншикли функцияларды менен функцияларының сызықлы комбинациясы түринде көрсетиўге болады.

Алынған нәтийжелерди классикалық механика беретуғын нәтийжелер менен салыстырамыз. а) ҳәм б) пунктлеринде келтирилген потенциаллардағы классикалық бөлекшениң қозғалыслары ҳәр қыйлы.

а) пунктинде көрсетилген жағдайда классикалық қозғалыс энергиясы болған бөлекшениң қозғалысына сәйкес келеди. Бөлекше тен келип оң ярым көшерди тың киширейиў бағытында турақлы тезлиги менен өтеди, буннан кейин ол ноқатында серпимли шағылысады ҳәм тап сондай тезлик пенен шексизликке кетеди. Усындай қозғалысты толқын механикасында тәрийиплеў ушын энергиялары бир бирине жақын болған типиндеги толқынлардан толқын пакетин дүзиў керек. (m\_6) функциясының орнына

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_8) |

толқынын пайдаланған қолайлы. Бул аңлатпаны алыў ушын ти аңлатпсына бөлиў керек. ε индексиниң жазылыўы функцияның ε меншикли мәнисине сәйкес келетуғынлығын аңғартыў ушын жазылған.

Енди

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_9) |

толқын пакетин қараймыз.

функциясы шамасының жеткиликли дәрежеде үзликсиз ҳақыйқый функциясы болып табылады. Ол теңлиги орынланғанда кескин максимумға ийе болады ( тағы штрихтың туўындыға қатнасы жоқ, , ҳәм шамаларының мәнислери ҳәм олардың бир бирине қатнаслары көринип тур). Соның менен бирге, керек болмаған қурамаласыўларды сапластырыў ушын функциясы теңлиги орынланғанда нолге тең болады деп есаплаймыз. Демек, функциясы ўақыттан ғәрезликти есапқа алатуғын өзине тән көбейтиўшиси менен а) пунктте келтирилген меншикли функциялардың суперпозициясынан қуралған. Қурылыўы бойынша функциясы ўақыттан ғәрезли болған Шрёдингер теңлемесиниң шешими болып табылады. Егер биз еркин толқын пакетлерин изертлеўге еске түсиретуғын болсақ, онда бул функцияның ўақытқа байланыслы қалайынша өзгеретуғынлығын көз алдыға келтириў қыйын емес.

областта шешими еки шаманың қосындысы болып табылады:

"түсиўши толқын пакети"

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_10a) |

Оның орайы

тезлиги менен терис бағытта қозғалады ҳәм ноқатына моментинде жетип келеди.

"Шашыраған толқын пакети"

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_10b) |

Оның орайы қарама-қарсы бағытта тезлиги менен қозғалады ҳәм координата басын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_11) |

ўақыт моментинде таслап кетеди. Ўақыттың бул моменти моменттен толқын пакетиниң ноқатына жетип келемен дегенше жумсалатуғын ўақытқа айрылады. Демек, толқын пакетиниң орайының қозғалысы классикалық бөлекшениң қозғалысы менен дерлик бирдей. Жалғыз айырма пакеттиң орайының үзликсизлигиниң потенциалдың ноқатындағы үзилиўине байланыслы шашырағандағы τ шамасына кешигиўден ибарат. Ал классикалық бөлекшениң шағылысыўы бир заматта жүзеге келеди. Усы жағдайға байланыслы пакеттиң орайының қозғалысын қараўдың өзи қозғалыстың барысында усы пакеттиң формасының жүдә көп өзгериске ушырамайтуғын жағдайда ғана мәниске ийе болатуғынлығын аңғарамыз. Бул шәрт түсиўши толқын пакетиниң орайы координата басынан пакеттиң кеңлиги тан үлкен болған жағдайда орынланады. Шағылысқан толқын пакети ушын усы шәрттиң орынланыўы ушын жоқарыдағы шәрт пенен бирге функциясының максимумының кеңлиги ның жеткиликли дәрежеде киши болыўы керек. Бундай жағдайда, егер теңсизлиги орынлы болса, онда (m\_9)-интегралға ең үлкен үлес қосатуғын областта φ фазасы өзгериске ушырамайды. Пакеттиң кеңисликтеги өлшемлери болған шамасының мәниси шамасының тәртибинде болғанлықтан, бул шәртти былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_12) |

Демек, теңсизлиги орынлы болады. Толқынлар пакети соншама кең болып, оның көшердиң бойында жатырған базы бир ноқат арқалы өтиў ўақыты шағылысыўдың салдарынан жүзеге келген кешигиўден әдеўир үлкен.

Кешигиў τ менен бир қатарда классикалық бөлекшениң қозғалысы менен квантлық толқын пакетиниң шағылысыўының арасында және бир айырма бар. толқыны областта барлық ўақытта нолге тең емес. Жоқарыда өткерилген изертлеўлерге уқсас болған изертлеўлер мынаны көрсетеди: шамасы факторы менен моментине жақын ўақыт аралығында сезилерликтей мәниске ийе болатуғын шаманың көбеймесине тең. Ўақыттың усы аралығын x=0 ноқатындағы потенциал "дийўал" менен соқлығысыў ўақыты деп қараўға болады. Солай етип, ўақыттың усы моментинде бөлекшени областта табыўдың нолге тең болмаған итималлығын бар болады. Ал, классикалық бөлекше болса, бул областқа ҳеш ўақытта кирмейди.

Енди б) пунктти қараймыз. Бундай жағдайда энергияның бир мәнисине сәйкес келетуғын еки классикалық қозғалыстың жүзеге келиўи мүмкин (бул факты квантлық механикадағы сәйкес мәселедеги еки қайтара азғыныўдың бар болыўы менен салыстырыўға болады). Мүмкин болған классикалық қозғалыстың биринде бөлекше тен шекемги барлық көшер бойынша өтеди, оның тезлиги областта турақлы ҳәм . Потенциалдың үзилиў ноқатында оның тезлиги ден шамасына шекем секирмели өзгереди. Буннан кейин бөлекше тезлиги менен ке шекем қозғалады. Мүмкин болған екинши қозғалыс биринши қозғалыстың дәл қарама-қарсысы болып табылады. Бул жағдайда бөлекше көшериниң оң бағытында областында тезлиги менен, ал областта тезлиги менен қозғалады.

Бул классикалық қозғалысты тап сондай болған басланғыш шәртлерге ийе болған толқын пакетлериниң қозғалысы менен салыстырамыз. Бул салыстырыўды қозғалыслардың бириншиси (терис бағыттағы қозғалыс) менен қараймыз. а) пункти ушын ислеген ҳәрекетлеримиздей, (m\_9)-формулаға сәйкес, ε ге жақын болған меншикли мәнислерге сәйкес келетуғын меншикли функциялардың суперпозициясы сыпатындағы толқын пакетин пайда етемиз. (m\_7) типиндеги меншикли функциясын оның энергиядан ғәрезли екенлигин аңғартыў ушын ε индекси менен белгилеймиз. Бизиң таллаўларымыз бойынша пакет өзиниң ишине ҳәм функцияларының суперпозициясына ийе болыўы керек. Биз қәлеген басланғыш шәртлерди жүзеге келтириў ушын пакет тек функцияларына ийе болыўы керек. Бул жағдайдың дурыс екенлигин буннан кейинги таллаўларымызда айқын болады. Ал, биз мынадай аңлатпаны жазамыз:

Бул аңлатпаның (m\_9)-формуладан бирден-бир айырмасы тиң максимумының а) пункттеги областта емес, ал б) пункттеги энергиялар областында жатыўынан ибарат. Ўақытқа байланыслы толқын пакетиниң эволюциясы (m\_9)-формулаға сәйкес ҳәм төмендегидей нәтийжелерди береди.

Биз басланғыш шәртлердиң орынланатуғынлығын атап өтемиз. Бул шәртлер бойынша теңсизлиги орынланғанда областта функциясы әмелий жақтан нолге тең, ал областта сезилерликтей үлести тек ағзасы береди, яғный биз орайы классикалық бөлекше сыяқлы тезлиги менен тың киширейиў бағытында қозғалатуғын ҳәм координата басына моментте келип жететуғын толқын пакетине ийе боламыз. Буннан кейин еки пакетке ажыралады: "өтиўши толқын пакети"

Оның орайы тезлигиндей тезлик пенен классикалық бөлекшедей болып қозғалады. Екиншиси "шағылысқан толқын пакети":

Оның орайы серпимли шағылысқан классикалық бөлекше сыяқлы қозғалады. Солай етип, классикалық қозғалыстан жүдә әҳмийетли болған айырма орын алады екен: *квантлық "бөлекшениң" потенциал үзилетуғын ноқатта "шағылысыў" итималлығы бар болады*. Бул таллаўды даўам етиў ушын ҳәзирше дәлиллеўсиз шағылысқан толқындағы бөлекшени табыўдың итималлығының шамасына, ал өткен толқындағы бөлекшени табыўдың итималлығының шамасына тең екенлигин атап өтемиз. Бул нәтийжелер бир бирине сәйкес келеди, себеби олардың қосындысы 1 ге тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_13) |

Бул теңликтиң дурыс екенлигин тексерип көриў ушын оған (m\_7а) ҳәм (m\_7б) аңлатпаларын қойыў керек.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (m\_14) |

шамасы өтиў коэффициенти деп аталады. Бул коэффициенттиң мәниси энергияға ғәрезли өседи ҳәм шегинде 1 ге умтылады. Бул шекте биз классикалық механиканың нәтийжесин аламыз деп айта аламыз.

шамасының менен шамаларының симметриялы функциясы екенлигин аңғарыўға болады. Усы жағдайға сәйкес, энергиясы тап сондай болған, бирақ, қарама-қарсы бағытта тарқалатуғын толқын ( областтан областқа қарай) бирдей өтиў коэффициентине ийе болады: оның шамасы қозғалыстың бағытынан ғәрезли емес.

Егер жақтылық толқынларының тарқалыўы менен аналогияны нәзерде тутатуғын болсақ, онда жоқарыда келтирилген нәтийжелер айрықша таңланыўлы пайда етпеўи керек. Жоқарыда қарап өтилген мәселе жақтылық сигналының өзгериўши сындырыў көрсеткишине ийе болған жутпайтуғын орталықтағы тарқалыў мәселесине эквивалент. а) жағдайда ноқатында көрсеткиш ҳақыйқый мәнистен ( орталық) жормал мәниске айланады ( орталық). Бундай жағдайда толық шағылысыў орын алады. б) жағдайда сындырыў көрсеткиши ҳақыйқый болып қала береди, бирақ оның мәнислери ҳәм орталықларда ҳәр қыйлы. Сындырыў көрсеткишиниң кескин өзгериси толық болмаған шағылысыўды пайда етеди.

**§ 31. Потенциал текше[[6]](#footnote-6)**

Енди бөлекше барлық орынларда еркин, бирақ белгили бир ноқатының шеклеринде потенциал кескин түрде өседи (яғный ол ийтериўши ямаса тартыўшы потенциалға айланады). Усындай типтеги потенциалды потенциал текше деп атаймыз (4.2-сүўрет):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.14) |

Биз енди барлығы бирдей массаға ийе ҳәм бирдей тезлик пенен шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалатуғын бөлекшелер ағысының динамикасын таллаўға тырысамыз. Бул жағдайда да энергиясы ден үлкен ямаса киши болған еки жағдайды қараймыз.

a) теңсизлиги орынлы болған жағдай.

Бөлекшелер областында еркин ҳәм ноқатта басланатуғын ҳәм областында турақлы болып қалатуғын потенциалдың ийтериўине ушырайды. Бул жағдайда да бөлекшелердиң усы ағысының динамикасын классикалық механиканың, оннан кейин квантлық механиканың көз-қарасында таллаймыз.

Классикалық механика бойынша бөлекшелер потенциаллық текшеге ямаса барьерге тезлиги менен жақынласады. Бөлекшелер потенциалдың шамасы ге тең областына киргенде тезлигин кемейтеди ҳәм импульси шамасына тең болады. Буннан кейин оң тәрепке қарай қозғалыўдың барысында импульси өзгериссиз қалады. Бөлекшелер областына кириў ушын жеткиликли энергияға ийе болғанлықтан толық өтиў орын алады: барлық бөлекшелер оң тәрепке қарай киши кинетикалық энергия менен ушып өтеди. Бундай жағдайда биз бир өлшемли шашыраў мәселесин шешиў менен шуғылланамыз.

Квантлық механикада бөлекшениң динамикасы Шрёдингер теңлемесиниң жәрдеминде анықланады. Биз қарап атырған еки область ушын Шрёдингер теңлемесин былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.15) |
|  | (4.16) |

Бул теңликлерде

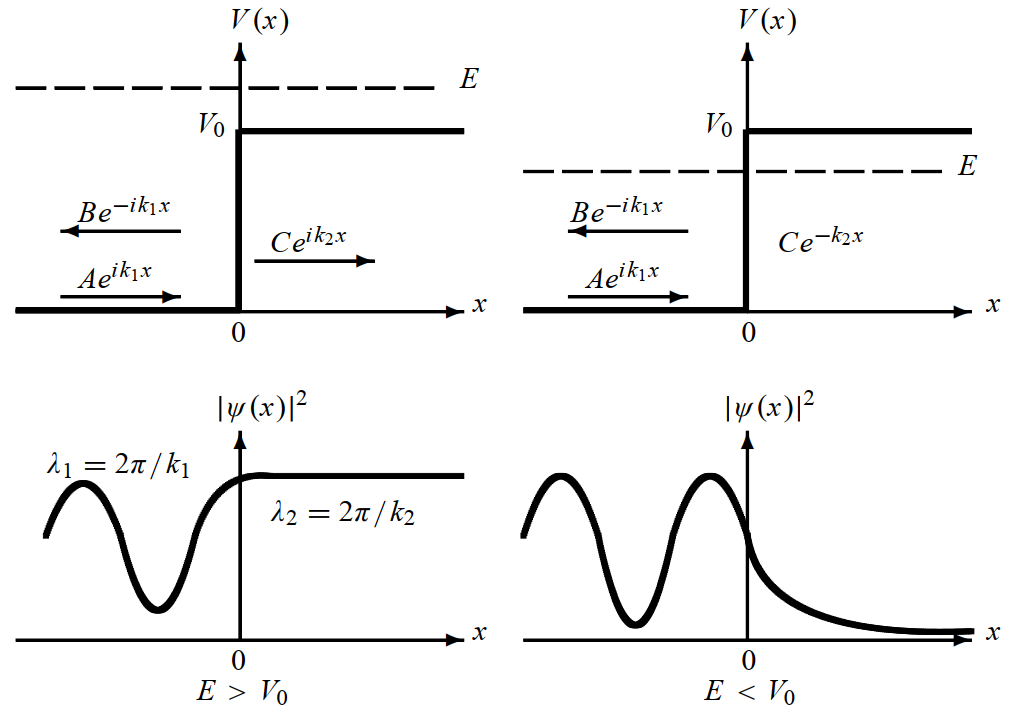
Бул еки теңлемениң ең улыўма болған шешимлери тегис толқынлар болып табылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.17) |
|  | (4.18) |

Бул теңликлерде менен лар тың оң бағытында тарқалатуғын толқынларға, ал менен лер тың терис бағытында тарқалатуғын толқынларға сәйкес келеди. Бизди бөлекшелер дәслеп потенциал текшеге шеп тәрептен келип түсетуғын жағдай қызықтырады. Олардың ноқатында шағылысыўы ямаса өтиўи мүмкин. областындағы толқынның шеп тәрепке қарай шағылсыўының мүмкин емес екенлигине байланыслы теңлигиниң орын алыўы шәрт. Бизлер стационар ҳаллар менен ис алып баратырмыз. Сонлықтан толық толқын функциясы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.19) |

формуласы менен бериледи. Бул аңлатпаларда және функциялары сәйкес түскен, шағылысқан ҳәм өткен толқынларды көрсетеди. Олардың қайсы бағытта тарқалатуғынлығы (4.2)-сүўретте келтирилген. Графиктеги шеп тәрептеги төменги мүйештеги итималлықтың тығызлығы болған шамасы туўры сызық пенен сүўретленеди,



4.2-сүўрет. Потенциал текше ҳәм түсиўши, шағылысқан және өткен толқынлар, ҳәм теңсизликлери орынланатуғын жағдайлар ушын итималлықтың тығызлығы .

Енди *шағылысыўы ҳәм өткериў коэффициентлери* менен ның мәнислерин баҳалаймыз. Анықлама бойынша

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.20) |

коэффициенти шашыраған нурдың интенсивлигиниң келип түскен нурдың интенсивлигине қатнасын, ал коэффиценти өткен нурдың өткен нурдың интенсивлигине қатнасына тең. менен ларды есаплаў ушын , ҳәм шамалары керек. Түсиўши нур түринде жазылатуғын болғанлықтан, түсиўши ағысты (ендигиден былай "ағыстың" сөзиниң орнына "тоқтың" сөзин де пайдаланамыз) былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.21) |

тап сол сыяқлы, шағылысқан ҳәм өткен ағыслардың ҳәм түринде жазылатуғынлығын аңсат тесерип көриўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.22) |

(4.20)- ҳәм (4.22)-аңлатпалардың комбинациялары мыналарды береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.23) |

Солай етип, менен шамаларын анықлаў ҳәм константаларын анықлаўға алып келинеди екен. Оның ушын биз ноқатындағы шегаралық шәртлерден пайдаланамыз. ноқатында толқын функциясы менен оның биринши туўындысы үзликсиз болғанлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.24) |

теңликлерине ийе боламыз. (4.17)- ҳәм (4.18)-теңликлерди пайдаланып төмендегилерди аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.26) |

константасына келсек, оны толқын функциясының нормировка шәртинен анықлаўға болады. Бирақ, оның мәниси бизге керек емес, себеби ҳәм шамалары оның қатнаслары түринде аңғартылады. (4.23)- ҳәм (4.26)-аңлатпалардың комбинациясы мынадай аңлатпаға алып келеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.27) |

Бул теңликлерде .

менен ның қосындысы 1 ге тең (анықлама бойынша шағылысыў ҳәм өтиў коэффициентлериниң қосындысы 1 ге тең болыўы керек). Биз классикалық механикада орын алған жағдайды және бир рет еске түсиремиз ҳәм бундай механикада бөлекшелердиң ҳеш қайсысының шағылыспаўы керек. Бирақ, (4.27)-теңлеме квантлық механикада коэффициентиниң нолге тең емес екенлигин көрсетеди: бөлекшелердиң энергиясы потенциал текшениң бийиклиги ден жоқары болса да бөлекшелердиң бир бөлеги шағылысады екен. Бул жағдай бөлекшелердиң толқынлық қәсийети бойынша түсиндириледи.

(4.27)-аңлатпада биз ниң киширейиўи менен ның да киширейетуғынлығын ҳәм шәрти орынланғанда ның нолге, ал диң 1 ге тең болатуғынлығын көремиз. Екинши тәрептен, теңсизлиги орынланғанда теңлиги орынланады. Демек, теңликлери жүзеге келеди. Бул жағдайда күтиў тәбийий, себеби текшеге келип түсетуғын бөлекшелердиң энергиясы жүдә жоқары, ал потенциалдың секириўи киши болған жағдайда бундай секириў бөлекшелердиң қозғалысына сезилерликтей тәсирин тийгизе алмайды.

**Ескериў**: шегаралық шәртлердиң физикалық мәниси.

Биз бул бапта толқын функциясы менен оның биринши тәртипли туўындысының үзликсиз болатуғынлығы менен бир неше ушырасамыз [(4.24)-теңликлерге қараңыз]. Бундай үзликсизликтиң тийкарында жататуғын физиканың мәниси неден ибарат? Бул мәселе бойынша биз еки ескериўди атап өтемиз:

Қәлеген үлкен болмаған областта бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы бир ноқаттан екинши ноқатқа өткенде үзликсиз өзгеретуғын болғанлықтан толқын функциясының өзиниң де қа байланыслы үзликсиз түрде өзгериўи шәрт. Солай етип, (4.24)-аңлатпаларда көрсетилгениндей теңлигине ийе болыўымыз керек.

Бөлекшениң шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалысында теңлемесиниң шешимлери болған бөлекшениң сызықлы импульслериниң тың үзликсиз функциясы болып табылатуғын болғанлықтан, туўындысы да тың үзликсиз функциясы болып табылады. Демек, (4.24)-аңлатпада көрсетилгениндей, бизде теңлигиниң орынланыўы шәрт.

б) теңсизлиги орынланатуғын жағдай.

Импульси шамасына тең болған ҳәм потенциал текшеге шеп тәрептен келип соқлығысатуғын классикалық бөлекшелер ноқатында тоқтайды ҳәм импульслериниң мәнислери өзгермеген ҳалда кери бағытта қозғалысын даўам етеди. Ҳеш бир бөлекше барьердиң оң тәрепине өте алмайды ҳәм бөлекшелердиң толық шағылысыўы орын алады. Солай етип, потенциал барьер бөлекшениң қозғалысының бағытын қарама-қарсы бағытқа өзгертеди екен.

Квантлық механикадағы картина бир қанша басқаша болады. Бул жағдайда x<0 областындағы Шрёдингер теңлемеси менен толқын функциялары сәйкес (4.15)- ҳәм (4.17)-формулалар менен бериледи. Бирақ x>0 областында Шрёдингер теңлемеси былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.28) |

Бул теңликте Бул теңлемениң шешими былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.29) |

Толқын функциясының барлық орынларда шекли болатуғынлығына байланыслы шегинде көбейтиўшиси шексизликке умтылатуғын болғанлықтан, константасының нолге тең болыўы керек. Демек, толық толқын функциясының былайынша жазылыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.30) |

Буннан алдыңғы жағдайдағыдай, енди шағылысыў ҳәм өтиў коэффициентлериниң мәнислерин баҳалайық. Дәслеп биз өтетуғын бөлекшелер ушын жазылған толқын функциясы болған функциясының нолге тең екенлигин атап өтемиз. Себеби функциясы затлық функция болып табылады []. Демек,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.31) |

Демек, шағылыстырыў коэффициенти диң шамасы 1 ге тең болыўы керек. Бул усындай нәтийжени x=0 теңлиги орынланғанда үзликсизлик шәртин (4.17) менен (4.29) ушын пайдаланып ала аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.32) |

Солай етип текше ушын шағылыстырыў коэффициенти мынадай формуланың жәрдеминде анықланады екен:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.33) |

Демек, биз классикалық жағдайдағыдай толық шығылысыўға ийе болады екенбиз. Бирақ классикалық жағдайдан айырма бар: классикалық механика бойынша ҳеш бир бөлекшениң табылыўы мүмкин емес болса да, классикалық физика қадаған ететуғын бул областқа толқын функциясы өтиўиниң итималлығығының ноллик болмаған итималлығы бар. Бундай жағдайдың орын алатуғынлығына исениў ушын итималлықтың салыстырмалы тығызлығының былайынша анықланатуғынлығына итибар беремиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.34) |

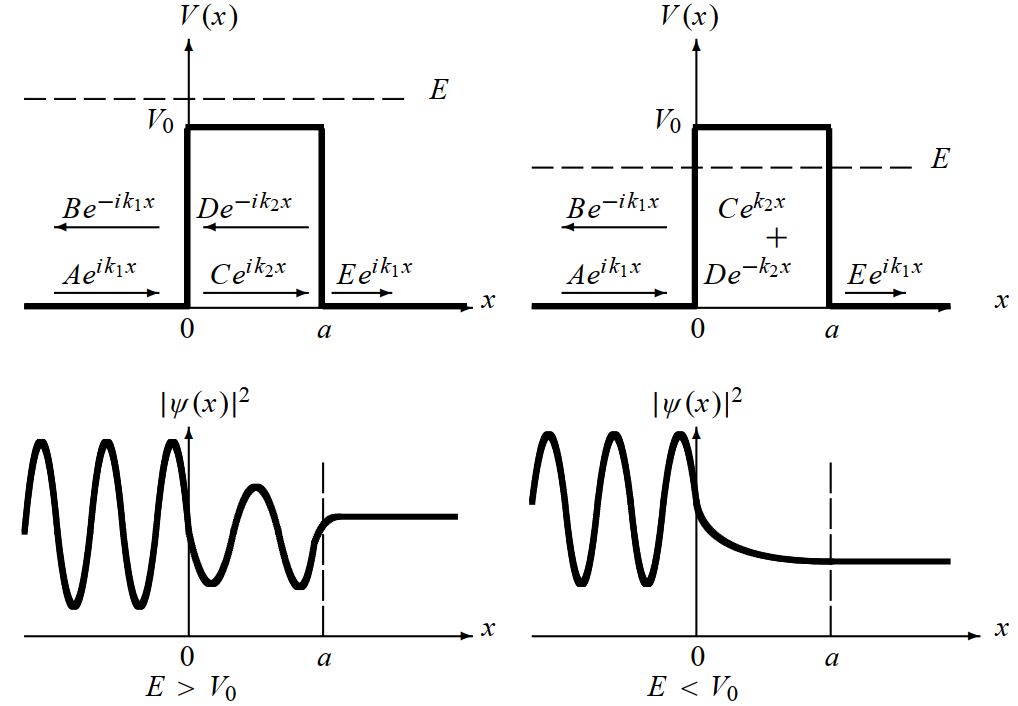
Бул шама ноқатының қасында сезилерликтей ҳәм тың үлкейиўи менен экспоненциаллық түрде жүдә киширейеди. Итималлықтың тығызлығының өзгериўи 4.2-сүўретте көрсетилген.

**§ 32. Потенциал барьер ҳәм шуқыр**

Массасы ҳәм потенциал барьерге шеп тәрептен келип түсетуғын бөлекшелердиң ағысын қараймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.35) |

Бул потенциал байланысқан ҳаллардың пайда болыўына мүмкиншилик бермейтуғын ийтериўши потенциал болып табылады (4.3-сүўрет). Потенциал текше болған жағдайдағыдай, биз бир өлшемли шашыраў мәселесине ийе боламыз.



4.3-сүўрет. Потенциал барьер, түсиўши, шағылысқан, өткен толқынлардың бағытлары, менен теңсизликлери орынланатуғын жағдайлардағы итималлықтың тығызлығы .

Бөлекшелердиң потенциал берьердиң бийиклиги ден жоқары ҳәм төмен болған энергияға сәйкес келетуғын еки жағдайды қайтадан қараймыз.

а) болған жағдай.

Классикалық бөлекшелер турақлы импульси менен барьерге жақынласады, олар областына киргенде тезликтиң шамасы импульс тең болғандай болып киширейеди. Олар импульсин ноқатына жетемен дегенше сақлайды. Буннан кейин, бөлекшелер x=a ноқатының шеклеринен шыққанда олар импульсине тең болыўға шекем тезленеди. Бөлекшелер барьерди кесип өтиў ушын жеткиликли энергияға ийе болғанлықтан, олардың биреўи де барьерде шағылыспайды. Барлық бөлекшелер барьердиң оң тәрепине өтеди: бул жағдайда *толық өтиў* орын алады.

Жоқарыдағы бөлимде гәп етилген квантлық механиканың көз-қараслары бойынша да бир қанша жуўмақлар шығарыўға болады. Бул жағдайда толқын функциясы барлық үш областта тербелмели түрде өзгереди. Бөлекше ҳәр жаңа областқа өткенде оның амплитудасы киширейеди (4.3-сүўретке қараңыз):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.36) |

Бул теңликлерде ҳәм ҳәм константаларын арқалы ҳәм пенен функцияларының ҳәм ноқатларындағы үзликсизлиги шәртинен анықлаймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.37) |
|  | (4.38) |

Бул теңликлерди пайдаланыў төмендегилерди береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.39) |
|  | (4.40) |

ни есаплаў мынаны береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.41) |

Солай етип, өтиў коэффициенти былайынша анықланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.42) |

Бул теңликте

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.43) |

Егер ҳәм белгилеўлерин пайдалансақ, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.44) |

формуласына ийе боламыз. Тап сол сыяқлы биз ушын мынадай аңлатпаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.45) |

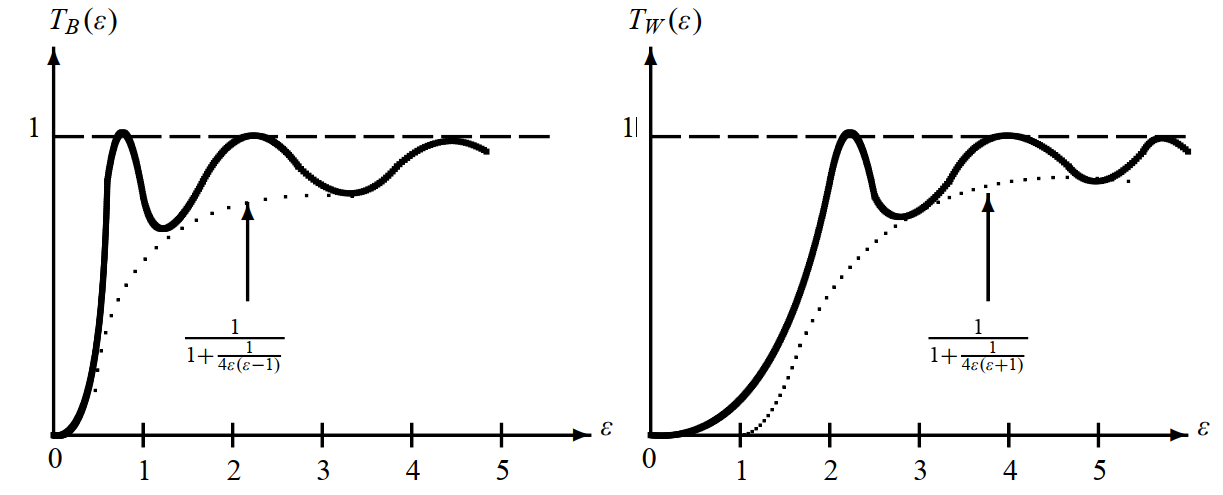
Айрықша жағдайлар:

• Егер теңсизлиги орынлы болса, онда өтиў коэффициенти асимптоталық түрде 1 ге умтылады, Солай етип, жүдә жоқары энергияларда ҳәм пәс потенциал барьерде биз барьер эффектин бақламаймыз ҳәм толық өтиў орын алады.

• Биз , яғный теңлиги орынланған жағдайда да толық өтиўге ийе боламыз. 4.4-сүўретте көринип турғанындай, толық өтиў теңлиги орынланған жағдайда, яғный келип түсетуғын бөлекшениң энергиясы шамасына тең болған жағдайларда жүзеге келеди. Өтиў коэффициентиниң максимумлары шексиз терең туўры мүйешли шуқырдың энергиясының меншикли мәнислерине сәйкес келген жағдайларда орын алады. Олар *резонанслар* атамасы менен белгили. Классикалық физикада ушыраспайтуғын бул резонанслық қубылыс түскен ҳәм шағылысқан толқынлардың арасындағы интерференцияның нәтийжеси болып табылады. Бул қубылыс бир қатар экспериментлерде бақланады. Мысалы, ҳасыл металлардың атомларындағы энергиясы киши ( эВ) болған электронлардың шашыраўында (бул қубылысты Рамзауэр-Таусенд эффекти деп атайды ҳәм ол усындай атомлардың симметриясының нәтийжеси болып табылады), нейтронлардың ядролардағы шашыраўында.

• шегинде теңлигине ийе боламыз. Демек, (4.44)- ҳәм (4.45)-аңлатпалар мынадай түрге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.46) |



4.4-сүўрет. Потенциал барьер ҳәм потенциал шуқыр ушын өтиў коэффициентлери.

**Потенциал шуқыр ()**.

(4.44)-өтиў коэффициенти болған жағдай ушын, яғный барьерлик потенциал ушын алынды. Сол (4.44)-аңлатпаға алып келген процедуралар менен жүрип, шекли тереңликтеги потенциал шуқыр ушын өтиў коэффициентиниң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.47) |

формуласының жәрдеминде берилетуғынлығын көрсетиўге болады. Бул формулада ҳәм . Бул жағдайда толық өтиўдиң ямаса теңликлери орынланғанда жүзеге келетуғынлығына итибар беремиз. 4.4-сүўретте көринип турғанындай, толық өткериў қәбилетлиги диң жүзеге келиўи ушын

теңлигиниң орынланыўы керек ямаса келип түсетуғын бөлекшениң энергиясы ушын

теңлигиниң орынланыўы керек. Бул теңликте Биз симметриялық потенциал шуқырды кейинирек толық үйренемиз.

**теңсизлиги орынланатуғын жағдай: Туннеллениў**.

Классикалық жақтан биз толық шығылысыўды күткен болар едик: барьерге жетип келген () ҳәр бир бөлекше кейинге қарай шағылысады, ҳеш бир бөлекше барьер арқалы өте алмайды. Егер барьер арқалы өткенде бөлекшениң кинетикалық энергиясының мәниси терис болған болар еди.

Ҳәзир биз квантлық механиканың болжаўларының классикалық механиканың болжаўларынан кескин түрде айрылатуғынлығын көрсетиўге тырысамыз. Себеби барьердиң шеклеринен сыртта толқын функциясы нолге тең емес. Шрёдингер теңлемесиниң үш областтағы (4.36)-аңлатпаларға сәйкес келетуғын шешимлери функциясын функциясына алмастырыўдан басқасының барлығы бирдей:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.48) |

Бул аңлатпаларда ҳәм Бул толқын функциясына сәйкес келетуғын итималлықтың тығызлығы, 3.3-сүўретте көрсетилгендей, ҳәм областларында тербелмели, ал областында экспоненциаллық түрде сөнетуғын болады.

Шағылыстырыў ҳәм өткериў коэффициентлери болған

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.49) |

шамаларын табыў ушын менен шамаларын арқалы аңғартыўымыз керек. Толқын функциясының үзликсизлик шәрти менен ноқатларындағы оның туўындысының үзликсизлиги төмендеги теңликлерди береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.50) |
|  | (4.51) |
|  | (4.52) |
|  | (4.53) |

Соңғы еки теңлеме менен ушын мынадай аңлатпаларды береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.54) |

Бул еки аңлатпаны (4.50)- ҳәм (4.51)-аңлатпаларға қойып және ға бөлип бул еки теңлемениң сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.55) |
|  | (4.56) |

аңлатпаларына алып келетуғынлығына исениўге болады. Бул еки теңлемени менен ға қарата шешип, биз мыналарды аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.57) |
|  | (4.58) |

Буннан биз ҳәм коэффициентлерине ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.59) |
|  | (4.60) |

Биз ди арқалы былайынша жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.61) |

Енди теңлигиниң орынлы екенлигин есапқа алсақ,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.62) |

формуласына ийе боламыз.

шамасының шекли екенлигине итибар бериў керек. Бул бөлекшениң областына бара алатуғынлығын аңғартады (бирақ, классикалық физикада бөлекше областына ҳеш бара алмайды). Бул квантлық механикалық эффект болып табылады ҳәм ол бөлекшелердиң толқынлық қәсийети менен байланыслы. Бул қубылысты *туннеллик эффект* деп атайды: квантлық механиканың объектлери классикалық өткермейтуғын барьерлер арқалы өте алады. Барьер арқалы өтиў эффекти ҳәзирги заман физикасының ҳәр қыйлы тараўларында, элементар бөлекшелер физикасы менен ядролық физикадан баслап ярым өткизгишли әсбапларға шекем әҳмийетли орынды ийелейди. Мысалы, радиоактив ыдыраўлар ҳәм электронлық дүзилислердеги зарядлардың алып жүрилиўи туннеллик эффекттиң айқын түрдеги көриниўи болып табылады.

Бизлер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.63) |

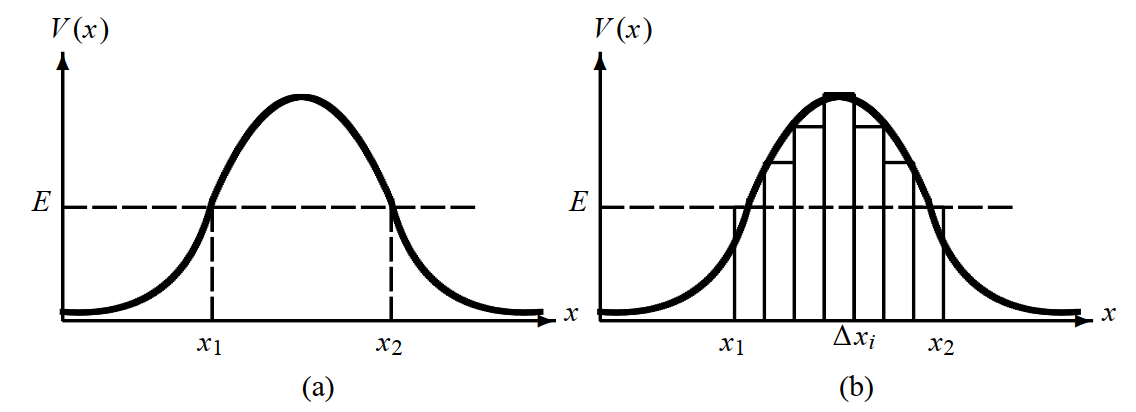
теңлигиниң орынлы екенлигин билетуғын болдық. Сонлықтан, менен ушын (4.61)- ҳәм (4.62)-аңлатпалардан төмендегидей формулаларға ийе бола аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.64) |
|  | (4.65) |

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.66) |
|  | (4.67) |

формулаларына ийе боламыз. Бул формулаларда



4.5-сүўрет. (а) - потенциал барьер арқалы туннеллениў. (b) Бир тегис өзгеретуғын потенциалын туўры мүйешли барьерлер менен аппроксимациялаў.

**Айрықша жағдайлар**:

Егер шәрти, яғный теңсизликлери орынланатуғын болса, онда түриндеги аппроксимацияны пайдалана аламыз. Бундай жағдайда (4.67)-өтиў коэффициентиниң асимпотикалық жақтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.68) |

формуласының жәрдеминде есапланатуғынлығына көз жеткеремиз. Бул өтиў коэффициентиниң классикалық физиканың нызамларына сәйкес нолге тең болмайтуғынлығын, ал шекли мәниске ийе болатуғынлығын көрсетеди. Солай етип, квантлық механика бойынша барьердиң арғы тәрепи ға шекли туннеллениў орын алады.

теңлиги орын алғанда, яғный болғанда (4.66)- ҳәм (4.67)-қатнаслары (4.46)-қатнасқа алып келинеди.

Классикалық шегин пайдаланған жағдайда (4.66)- ҳәм (4.67)- коэффициентлер классикалық ҳәм нәтийжелерине алып келинеди.

**§ 33. Туннеллик эффект**

Улыўма айтқанда туннеллик эффект бөлекшениң энергиясы потенциаллық энергиядан киши болған (яғный, теңсизлиги орынланатуғын) область арқалы тарқалыўы болып табылады. Классикалық жақтан бул областы бөлекшениң кириўи ушын қадаған етилген (егер бөлекше бул областқа киргенде оның кинетикалық энергиясы терис болған болар еди). ҳәм ноқатлары бурылыўдың классикалық ноқатлары деп аталады. Бирақ, квантлық механика бойынша бөлекше толқынлық қәсийетлерге ийе ҳәм, сонлықтан, барьер арқалы өте алады.

Квантлық механика бойынша бөлекше потенциал барьер менен соқлығысқанда, оның барьер арқалы өтиўиниң мүмкиншилиги болады (ҳәтте оның энергиясының шамасы барьердиң бийиклигинен киши болған жағдайда да). Бул қубылысты *квантлық туннеллениў* деп атайды.

Квантлық туннеллениў процессинде бөлекшениң толқын функциясы барьердиң арғы тәрепиндеги классикалық қадаған етилген областқа да тарқалады. Барьердиң арғы тәрепинде бөлекшени табыўдың итималлығы нолден өзгеше ҳәм усы итималлықтың мәниси барьердиң кеңлиги менен бийиклигиниң үлкейиўи менен экспоненциал түринде кемейеди. Бөлекше туннель арқалы өткенде оның энергиясы өзгермейди. Бул квантлық механикадағы энергияның сақланыў нызамының нәтийжеси болып табылады. Бөлекшениң кинетикалық энергия менен потенциаллық энергиядан туратуғын толық энергиясы туннеллениў процессиниң барысында турақлы болып қалады.

Туўры мүйешли барьер мысалында бөлекшениң туннеллениўиниң итималлығының шекли екенлиги көрсетилген еди. Сол жағдайда биз әпиўайы болған туўры мүйешли барьер менен ис алып барлық ҳәм сонлықтан туннеллениўдиң итималлығы ушын аналитикалық (4.67)-аңлатпаны ала алдық. Ал ықтыярлы түрдеги кеңисликлик тарқалыўға ийе болған потенциаллар ушын аналитикалық аңлатпалардың алыныўының мүмкиншилиги жоқ. Бундай жағдайларда жуўықлаў талап етиледи. Бундай жуўықлаў усылларының ишинде Вентцель-Крамерс-Бриллюэн усылын [Wentzel–Kramers–Brillouin (WKB) method] көрсетиўге болады. Бул усыл аппроксимацияның пайдалы усылларын береди. Биз V(x) потенциалы ушын өтиў коэффициентиниң мынадай формула менен берилетуғынлығын көрсетемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.69) |

Биз бул қатнасты турпайы аппроксимацияның жәрдеминде ала аламыз. Оның ушын классикалық жақтан қадаған етилген областын алыў ҳәм оны үлкен болмаған интервалларына бөлиў керек (4.5б сүўрет). Егер шамасы жеткиликли дәрежеде киши болса, онда ҳәр бир ноқатындағы потенциалын туўры мүйешли потенциал барьер түринде аппроксимациялаў мүмкин. Демек, биз потенциалы арқалы өтиўдиң итималлығын анықлаў ушын (4.68)-аңлатпаны пайдаланыўымыз мүмкин:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.70) |

4.5-сүўретте көрсетилген улыўма потенциал ушын өтиўдиң итималлығы (биз областын жүдә киши болған көп санлы интервалларына бөлген едик)

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.71) |

Бул қатнасқа алып келетуғын жақынласыў потенциалы бир тегис және әстелик пенен өзгеретуғын жағдайларда ғана дурыс.

**§ 34. Шексиз туўры мүйешли потенциал шуқыр**

Биз дәслеп асимметриялық туўры мүйешли шуқырды қараймыз.

Шексиз терең асимметриялы потенциал шуқырда қозғалыўға мәжбүр болған массасы болған бөлекшени қараймыз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.72) |

Классикалық көз-қараслар бойынша шуқырдың ишинде жайласқан импульси болған бөлекше шуқырдың дийўаллары менен соқлығысыўдың нәтийжесинде арман-берман қозғалады. Квантлық механика бойынша бөлекше байланысқан ҳалға сәйкес келетуғын шешимлерге ийе болады ҳәм азғанбаған энергия спектрине ийе. областында V(x) шексиз үлкен болғанлықтан бөлекшениң толқын функциясы шуқырдың шегарасында да, оннан сыртта да нолге тең. Демек, биз тек шуқырдың иши ушын шешимлерди излеймиз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.73) |

Бул теңлемеде Шешимлер былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.74) |

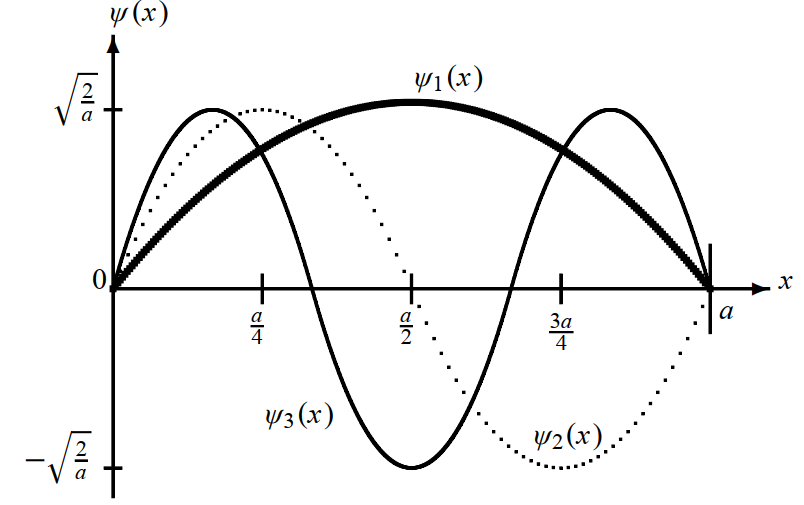
Толқын функциясы шуқырдың дийўалларында нолге айланады: теңлиги теңлигин береди. Ал шәрти

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.75) |

теңлигин, ал бул шәрт энергияның мәнисин есаплаўға мүмкиншилик береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.76) |

Энергия квантланады екен. Бул жағдай күтилген жағдай еди, себеби кеңисликтиң шекленген областы менен шекленген ҳал байланысқан ҳал болып табылады, ал энергия спектри болса дискрет. Бул жағдай бөлекшениң энергиясы қәлеген мәниске ийе болатуғын формуласы менен берилетуғын классикалық механиканың нәтийжелерине пүткиллей сәйкес келмейди. Классикалық энергия үзликсиз түрде өседи.



4.6-сүўрет. Шексиз терең потенциал шуқырдың ең төменги үш ҳалы. Толқын функциясы . ге қатнасы бойынша ҳалы жуп, ал ҳалы тақ.

(4.76)-аңлатпадан қоңсылас қәддилердиң энергияларының арасындағы айырманың турақлы емес екенлиги келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.77) |

Усының менен бирге

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.78) |

қатнаслары орынлы. Ал, классикалық шегинде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.79) |

Демек, қәддилер бир бирине жақынласады ҳәм әмелий жақтан оларды бир биринен айырыўдың мүмкиншилиги болмайды.

ҳәм теңликлери орынлы болғанлықтан, (4.74)-аңлатпа

функциясын береди. Биз функциясының нормировкасы шәртинен константасын сайлап ала аламыз. Ал, нормировка шәртиниң былайынша жазылыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.80) |

Демек, толқын функциялары былайынша жазылады екен:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.81) |

Бул аңлатпа бойынша алынған графиклер 4.6-сүўретте келтирилген.

Демек, ўақыттан ғәрезсиз болған Шрёдингер теңлемесиниң шешимлери бизге (4.76)-энергияны ҳәм (4.81)-толқын функцияларын берди. Квант саны ниң пүтин мәнислерине сәйкес келетуғын дискрет энергия қәддилериниң шексиз үлкен избе-излиги орын алады екен. теңлигиниң қызықлы болмаған нәтийжени беретуғынлығы түсиникли: ҳәм . Кейинирек биз бул жағдайдың физикалық нәтийжелерин қарап өтемиз.

Солай етип, ең киши энергия ямаса *тийкарғы ҳалдың энергиясы* ге сәйкес келеди. Бундай жағдайда

формуласы орынлы болады. Кейинирек биз диң энергияның ноллик ноқаты болып табылатуғынлығын түсиндиремиз. Себеби *ноллик энергияға ийе болған ҳал болмайды*. Квант санларының мәнислерине сәйкес келетуғын ҳалларды қозған ҳаллар деп атаймыз. Олардың энергиясы формуласының жәрдеминде бериледи.

Биз квантлық механикаға байланыслы болған еки теореманы еслетип өтемиз:

1-теорема. Бир өлшемли мәселеде байланысқан ҳалларға ийе болған системаның энергия қәддилери дискрет ҳәм азғынбаған.

2-теорема. Байланысқан ҳалларға ийе бир өлшемли системаның толқын функциялары ушын тийкарғы ҳалға сәйкес келетуғын болса, онда түйинге, ал тийкарғы ҳалға саны сәйкес келетуғын болса, онда түйинге ийе болады.

Жоқарыдағы 2-теоремада еслетилип өтилгениндей, ҳәр бир толқын функциясы тың бойында түйинге ийе болады. 4.6-сүўретте функциясының шуқырдың орайына қатнасы бойынша жуп, ал функциясының шуқырдың орайына қатнасы бойынша тақ екенлигин көриўге болады. Биз кейинирек симметриялы потенциал шуқырды изертлеймиз.

Энергия қәддилериниң ҳеш қайсысының азғынған емес екенлигине (энергияның ҳәр бир қәддине тек бир меншикли функция сәйкес келетуғынлығына), энергияның ҳәр қыйлы қәддилерине сәйкес келетуғын толқын функцияларының ортогоналлық екенлигине итибар бериў керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.82) |

Биз стационар ҳаллар менен ис алып баратырмыз. Ал, ўақыттан ғәрезли болған Шрёдингер теңлемесиниң ең улыўмалық шешимлери

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.83) |

формуласының жәрдеминде бериледи.

Енди ноллик ноқаттың энергиясына айрықша дыққат аўдарамыз ҳәм туўры мүйешли шуқырдың потенциалы ушын ноллик энергияның неликтен болмайтуғынлығын қарайық. Егер бөлекше ноллик энергияға ийе болса, онда ол шуқырдың ишинде тынышлық ҳалында турған болар еди. Ал бул жағдай Гейзенбергтиң анықсызлық принципин бузады. Бөлекшени кеңисликтиң шекленген областында локализациялаған жағдайда ол шекли импульске ийе болады ҳәм бул өз гезегинде минималлық кинетикалық энергияның пайда болыўына алып келеди. Яғный, бөлекшениң қозғалысын шеклеринде локализациялаў бөлекшениң орнының тәртибиндеги анықсызлығын пайда етеди. Координатадағы бундай анықсызлыққа импульстиң шамасындағы анықсызлыгы сәйкес келеди. Нәтийжеде шамасындағы кинетикалық энергия жүзеге келеди. Бул сапалық жақтан шамасына сәйкес келеди. Тереңирек изертлеўлер диң шамасының ге дәл тең келетуғын ноллик энергияның пайда болатуғынлығын көрсетеди.

Импульстиң мәнисиндеги анықсызлықтың шуқырдың кеңлигине кери пропопрциолнал екенлигине дыққат аўдарыў керек (яғный ). Егер шуқырдың кеңлиги киширейетуғын болса (яғный бөлекшениң орны және де көбирек шекленеди) ға қатнасы бойынша анықсызлық үлкейеди. Бул бөлекшени кем-кемнен тезирек қозғалыўға мәжбүрлейди ҳәм, нәтийжеде, оның энергиясы үлкейеди. Керисинше, шуқырдың кеңлиги үлкейетуғын болса, онда ноллик ноқаттың энергиясы кемейеди. Бирақ бул энергия ҳеш ўақытта жоғалмайды.

Демек, ноллик ноқаттың энергиясы локализацияның салдарынан бөлекшениң минималлық қозғалысының зәрүрлигин сәўлелендиреди. Ноллик ноқаттың энергиясы байланысқан ҳаллардың барлық потенциалларында қатнасады. Байланыс потенциалы бар болған жағдайда ең төменги энергиялық ҳал минималлық потенциаллық энергиядан жоқары болған энергияға ийе болады. Бул классикалық механиканың жуўмақларына қайшы келеди. Классикалық механикада мүмкин болған ең киши энергия ноллик кинетикалық энергиядағы потенциаллық энергияның минималлық мәнисине тең.

Бирақ, квантлық механикада ең төменги ҳал тек потенциалды емес, ал кинетикалық ҳәм потенциаллық энергияның қосындысын да минималлыстырады ҳәм бул шекли тийкарғы ҳалға ямаса ноллик ноқаттың энергиясына алып келеди. Бул микроскопиялық дүньяның областында оғада әҳмийетли болған физикалық нәтийжелерге алып келеди. Мысалы, ноллик ноқаттығы қозғалыс болмағанда атомлар стабилли болмаған болар еди, себеби электронлар ядроға қулап түскен болар еди. Усының менен бирге ноллик ноқаттың энергиясы жүдә төменги температуралардағы гелийдиң қатты ҳалға өтиўин болдырмайды.

Төменде келтирилген мысал ноллик ноқаттың энергиясының макроскопиялық системаларда да болатуғынлығын көрсетеди. Бирақ оның мәниси шексиз киши.

**Мәселе** (ноллик ноқаттың энергиясы)

Ноллик ноқаттың энергиясының макроскопиялық системалардан микроскопиялық системаларға өткенде үлкейиў идеясын иллюстрациялаў ҳәм шексиз терең потенциал шуқырдағы ноллик ноқаттың энергиясын есаплаў ушын төмендегидей үш жағдайды қараймыз:

(а) узынлығы 5 м болған жипке илдирилген салмағы 100 г болған шарик,

(б) өлшеми 2·10-10 м болған пәнжереде жайласқан кислород атомы,

(в) өлшеми 10-10 м болған атомдағы электрон.

Шешими:

(а) Узынлығы 5 м болған жипке илдирилген салмағы 100 г болған шардың ноллик ноқатының энергиясы мынаған тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.84) |

Энергияның бул мәнисин ҳәзирги ўақытлары бар болған эксперименталлық усыллардың жәрдеминде табыў ямаса өлшеў ушын дым киши.

(b) Өлшеми 2·10-10 м болған пәнжерениң ишиндеги кислород атомы ушын мыналарға ийе боламыз. Кислород атомы 16 нуклонға ийе, оның массасы шама менен кг. Сонлықтан, бул жағдайда мыналарға ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.85) |

(c) атомдағы ( м) электронның ноллик ноқатының энергиясы ()

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.86) |

Атомлық масштабта бул энергияның әҳмийети жоқары, себеби водород атомындағы электронның байланыс энергиясы шама менен 13,6 эВ қа тең. Бул мағлыўматлар ноллик ноқаттың энергиясының макроскопиялық объектлер ушын есапқа алмайтуғындай дәрежеде киши, бирақ микроскопиялық объектлер ушын әҳмийетли екенлигин көрсетеди.

Енди симметриялы потенциал шықырды қараўға өтемиз (4.7-сүўрет).

Егер (4.72)-потенциалды шепке қарай a/2 қашықлыққа жылыстырып, оны симметриялы қылғанда не болған болар еди? Бул жағдай ушын төмендегидей шәртлерди жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.87) |

Бириншиден, бундай жылыстырыўда (4.76)-энергия спектриниң өзгермейтуғынлығын күтиў керек. Себеби, биз қарап атырған жағдайда гамильтониан тек кинетикалық бөлимге ийе болғанлықтан, ол кеңисликлик орын алмастырыўларға қарата инвариант. Энергия спектри дискрет ҳәм азғынған емес.

Екиншиден, симметриялы потенциаллар ушын Сонлықтан, байланысқан ҳаллардың толқын функцияларының я жуп, я тақ болыўы керек. (4.87)-потенциалға сәйкес келетуғын толқын функциясын былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.88) |

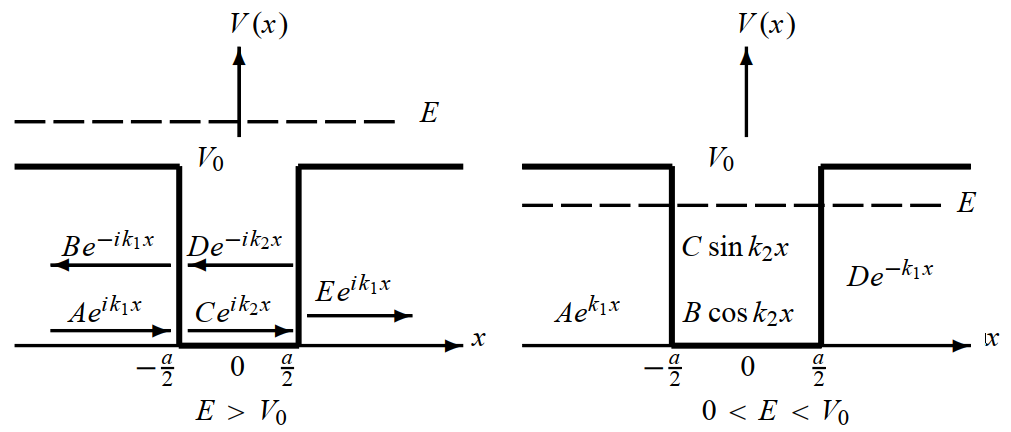
Демек, тақ болған квант санлары ушын толқын функциялары симметриялы, ал жуп болған квант санлары ушын толқын функциясы антисимметриялы болады екен.

**§ 35. Тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциал шуқыр**

Массасы болған ҳәм мынадай симметриялы потенциалда қозғалатуғын бөлекшени қараймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.89) |

ҳәм теңсизликлери орынланатуғын жағдайлар физикалық жақтан қызықлы болған жағдайлар болып табылады (4.7-сүўретке қараңыз). Биз теңсизлиги орынланатуғын жағдай ушын еки қайтара азғынған үзликсиз спектрге, ал теңсизлиги орынланатуғын жағдайда дискрет болған азғынбаған спектрди алыўымыз керек.



4.7-сүўрет. Тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциал шуқырдың потенциалы менен ҳәм болған жағдайлардағы түсиўши, шағылысқан ҳәм өткен толқынлардың бағытлары.

Шашыраў орын алатуғын жағдай ушын шешимлер ()

Классикалық көз-қараслар бойынша егер бөлекше турақлы болған импульси менен шеп тәрептен келип түсетуғын болса, онда ол шамасына шекем тезленеди, буннан кейин областында өзиниң дәслепки импульсине сәйкес келетуғын шамаға әстеленеди. Шеп тәрептен келип түсетуғын бөлекшелердиң барлығы өтеди, олардың ҳеш биреўи кери қарай шағылыспайды, демек ҳәм .

Биз текше ҳәм барьер тәризли потенциалларды қарап өткенде пайдаланылған квантлық механиканың көз-қарасларын бойынша өтиў коэффициенти ушын нолге тең болмайды. Шешимлерди алыў қыйын емес, тек жоқарыдағы параграфларда қарап өтилген процедураларды пайдаланыў керек. Барлық үш областта да толқын функциясы тербелмели характерге ийе болады (4.7-сүўретке қараңыз).

**Байланысқан ҳаллар ушын шешимлер** ()

Классикалық көз-қараслар бойынша болған жағдайларда бөлекшениң қозғалысы областында толығы менен шекленген. Ол ҳәм ноқатларының арасында турақлы импульси менен алға ҳәм кейин қарай қозғалыста болады.

Квантлық механикадағы шешимлер айрықша қызық. Бул жағдайда дискрет спектрдиң алыныўын күтиў керек, ҳәм областларында сөнеди, ал областында тербеледи. Бул үш область ушын Шрёдингер теңлемеси былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.90) |
|  | (4.91) |
|  | (4.92) |

Бул теңликлерде , .

тың үлкен мәнислеринде экспоненциаллық түрде өсетуғын ҳәм биз қарап атырған жағдайға сәйкес келмейтуғын шешимлерди алып таслаған жағдайда ҳәм областларындағы шешимлердиң төмендегидей болатуғынлығына көз жеткеремиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.93) |
|  | (4.94) |

Биз жоқарыда симметриялы бир өлшемли гамильтонианға ийе болған байланысқан ҳаллардың меншикли функцияларының кеңисликтиң инварсиясында я жуп, я тақ болатуғынлығын аңғарған едик. Бундай жағдайда (4.90)-(4.92) теңлемелердиң шешимлери я жуп (симметриялы), я тақ (антисимметриялы) болады. Тақ болған жағдай:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.95) |

Жуп болған жағдай:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.96) |

Меншикли мәнислерди анықлаў ушын ноқатларындағы үзликсизлик шәртин пайдаланыўымыз керек. логарифмлик туўындысының үзликсизлиги ҳәм ноқатларындағы функциясының үзликсизлиги мынаны береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.97) |

Тап сол сыяқлы ноқатларындағы логарифмлик туўындысының үзликсизлиги мынаны береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.98) |

(4.97)- ҳәм (4.98)-трансцендент теңлемелерди тиккелей шешиўдиң мүмкиншилиги жоқ. Бизлер оларды графикалық ямаса санлы усыллар менен шеше аламыз. Теңлемелерди графикалық усыл менен шешиў ушын оларды бизиң ойлаўымызды талап ететуғын түрде былайынша жазыўымыз керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.99) |
|  | (4.100) |

Бул аңлатпада ҳәм Бул теңлемелер (4.97) менен (4.98) ге пенен аңлатпаларын қойыў жолы менен алынған. (4.99)- ҳәм (4.100)-теңликлердиң шеп тәрепи тригонометриялық функциялардан, ал оң тәрепи радиусы болған шеңберден турады. шеңбери ҳәм функцияларына сәйкес келетуғын иймекликлер менен кесилисиў ноқатларындағы шешимлер алынады (4.8-сүўрет). Шешимлер дискрет жыйнақты пайда етеди. 4.8-сүўретте көринип турғанындай, киши шеңбердиң менен кесилисиўи тек бир байланысқан ҳалды береди, , ал, үлкен шеңбердиң менен кесилисиўи еки байланысқан ҳалға алып келеди, , оның пенен кесилисиўи еки байланысқан ҳалды береди, бул жағдайда .

Теңлемелердиң саны шамасынан ғәрезли, ал усы шамасының өзи тереңлигинен ҳәм шуқырдың кеңлиги дан ғәрезли. Себеби . Шуқыр қаншама терең ҳәм кең болса, диң мәниси де үлкен ҳәм соған сәйкес байланысқан ҳаллардың саны да көп болады. диң мәнисиниң қаншама киши болатуғынлығына қарамастан ең кеминде бир байланысқан ҳалдың (яғный бир кесилисиўдиң) орын алатуғынлығына итибар бериў керек. Егер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.101) |

шәрти орынланатуғын болса, онда ге сәйкес келетуғын тек бир байланысқан ҳал (бул ҳал тийкарғы ҳал ҳәм жуп ҳал болып табылады). Ал,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.102) |

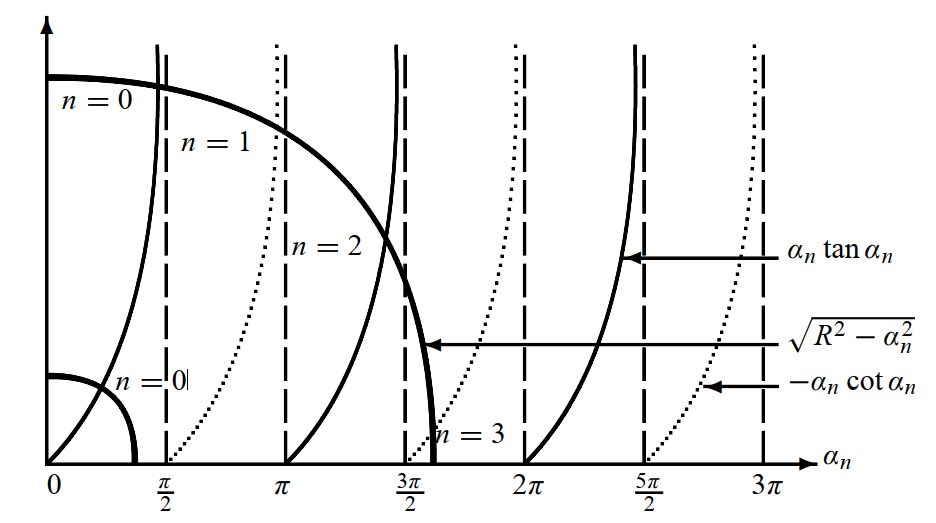
шәрти орынланатуғын болса, онда еки байланысқан ҳал жүзеге келеди: олардың бири жуп (тийкарғы ҳал), оған квант саны сәйкес келеди. Екиншиси ге сәйкес келетуғын биринши тақ ҳал болып табылады. Ал,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.103) |

шәрти орынланатуғын жағдайда үш байланысқан ҳал алынады: тийкарғы ҳал (жуп ҳал), , биринши қозған ҳал (тақ ҳал), оған сәйкес келеди, екинши қозған ҳал (жуп ҳал), оған квант саны сәйкес келеди. Шуқырдың кеңлиги дана ҳалдың жүзеге келиўин болдыратуғын улыўма жағдай ушын мынадай шәртлерди жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.104) |

Солай етип, спектр жуп ҳәм тақ ҳаллардың избе-излигинен туратуғын ҳаллардың жыйнағынан турады екен: ең төменги ҳал тийкарғы ҳал болып табылады ҳәм ол жуп, келеси ҳал (биринши қозған ҳал) тақ ҳ.т.б.



4.8-сүўрет. Шекли тереңликке ийе болған потенциал ушын графикалық шешимлер: шешимлер шеңбериниң ҳәм функцияларына сәйкес келетуғын иймекликлер менен кесилисиў ноқатлары болып табылады. ҳәм

Шеклик жағдайда шеңбердиң радиусы де шексиз үлкен болады, усыған сәйкес функциясы ҳәм функцияларына сәйкес келетуғын иймекликлер менен асимптоталарында кесилиседи. Себеби шегинде ҳәм шамалары да шексиз үлкен болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.105) |
|  | (4.106) |

Бул еки жағдайда бириктирип, биз мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.107) |

Биз

формуласының орын алатуғынлығын еске түсирсек, онда жоқарыдағы аңлатпалардан пайдаланып шексиз терең потенциал шуқырдағы ушын формуланы ала аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4.108) |

**§ 36. Гармоникалық осциллятор**

Бир өлшемли гармоникалық осциллятор ҳаққындағы мәселе пүткил теориялық физиканың әҳмийетли мәселелериниң бири болып табылады. Оны изертлеўдиң нәтийжелери физиканың көплеген тараўларында (механика, классикалық электродинамика, радиофизика, оптика, атом физикасы ҳ.т.б.) үлкен әҳмийетке ийе болған тербелислер теориясын дүзиўде кеңнен пайдаланылады. Соңғы жыллары атом физикасында пайда болған жаңа теориялар әпиўайы болған мәселелерде, соның ишинде гармоникалық осциллятордың теориясын дүзиўде "сынақтан" өткерилди. Қурамалы системалардың қозғалысын жийи түрде гармоникалық осцилляторлардың тербелислерине эквивалент болған нормаль тербелислердиң жыйнағын қараўға алып келинеди. Бизиң ушын гармоникалық осциллятордың теориясын дөретиў методикалық жақтан да әҳмийетли. Бул мәселени дәл шешиўге ҳәм усының менен бирге ең әпиўайы болған мысалда Шрёдингер теңлемесин айқын маселелерди шешиўге қолланыўды иллюстрациялаўға болады.

Гармоникалық осциллятор ҳаққындағы мәселе майданның квантлық теориясын дөретиўде де ("екинши квантлаў" усылы), электромагнит вакуумның ноллик энергиясын таллағанда да әҳмийетли орынды ийеледи. Гармоникалық осциллятор ҳаққындағы мәселе тең салмақлық нурланыў теориясында, соның менен бирге еки атомлы молекулалардың спектрлериниң теориясы менен жыллылық сыйымлығы теориясын дөретиўде айқын түрде пайдаланылды.

Квантлық гармоникалық осциллятор ҳаққында гәп еткенде әдетте массасы болған бөлекше жайласқан парабола тәризли потенциаллық шуқырдан туратуғын моделди нәзерде тутады. Соның менен бирге ол әпиўайы гармоникалық осциллятордың аналогы болып табылады[[7]](#footnote-7). Берилген системаның қәсийетин таллағанда бөлекшеге тәсир ететуғын күшлер қаралмайды, ал гамильтониан, яғный системаның толық энергиясы қаралады. Соның менен бирге потенциал энергия координатаның квадратынан ғәрезли деп болжанады. Потенциаллық энергияны қатарға жайғанда квадратлық ағзадан кейинги ағзаларды есапқа алыў ангармоникалық осциллятор түсинигине алып келеди.

Биз потенциаллық энергияны аўысыўдың дәрежелери бойынша қатарға жаямыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.1) |

Бул аңлатпада арқалы шәрти менен анықланатуғын тең салмақлық орыннан аўысыў белгиленген. Егер массасы m болған бөлекше өзиниң тең салмақлықта туратуғын орынның әтирапында киши тербелиске ушырайтуғын болса, онда (26.1)-қатарда тек биринши еки ағзаны сақлап қалыўға болады. Энергияның шамасын ден баслап аламыз. Бундай жағдайда Гамильтонның классикалық функциясын былайынша жазамыз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.2) |

Бул аңлатпада (26.2)-аңлатпада берилген потенциаллық энергияның түри тың үлкен мәнислеринде де сақланады деп болжаймыз (ҳакыйқый системаны идеалластырыў).

Бөлекшениң (26.2)-аңлатпа түриндеги Гамильтон функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын классикалық қозғалыс теңлемеси әпиўайы түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.3) |

Бул формулада . Бундай жағдайда бөлекше өзиниң тең салмақлық орнының әтирапында гармоникалық тербеледи, ал сәйкес системаларды гармоникалық осцилляторлар деп атайды. Бундай қозғалыслардың қатарына молекулалардағы ҳәм қатты денелердеги атомлардың тербелислери, сфералық атом ядролық бетлериниң тербелислери ҳ.т.б. киреди.

(26.2)- ҳәм (26.3)-аңлатпалардан гармоникалық осциллятордың классикалық тербелислериниң энергиясының

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.4) |

формуласының жәрдеминде анықланатуғынлығын көриўге болады. Демек, гармоникалық осциллятордың энергиясы тербелистиң амплитудасынан ҳәм аўысыўдың квадратының орташа мәниси болған шамасынан ғәрезли екен.

Енди гармоникалық осциллятордың стационар ҳалларын квантлық механиканың усылларының жәрдеминде анықлаймыз. (26.2)-аңлатпадағы классикалық шамаларды сәйкес координаталық көринистеги операторлар менен алмастырыў жолы менен Шрёдингер теңлемесин аламыз:

Өлшем бирлиги жоқ өзгериўшилерге өтемиз. Оның ушын төмендегидей белгилеўлерди қабыл етемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.5) |

Нәтийжеде екинши тәртипли теңлемени аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.6) |

аңлатпасын (26.6)-аңлатпаға қойып, функциясы ушын теңлемени аламыз:

Бул теңлемедеги штрих өзгериўшиси бойынша туўынды алыўды аңғартады. функциясының шекли болыўы ушын шешимлериниң өзгериўшисине қарата шекли тәртиптеги полиномы болыўы талап етиледи. Егер

теңлиги орынлы болатуғын болса бундай шешимлер болады. шамасының ҳәр бир мәнисине тәртипли *Эрмит полиномы* деп аталатуғын полином сәйкес келеди.

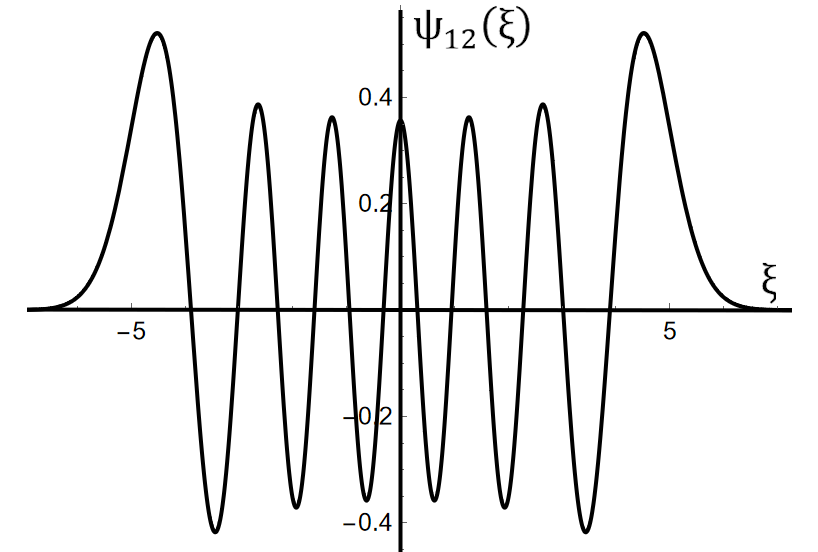
Гармоникалық осциллятордың стационар ҳалларының нормировкаланған толқын функциялары былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.7) |

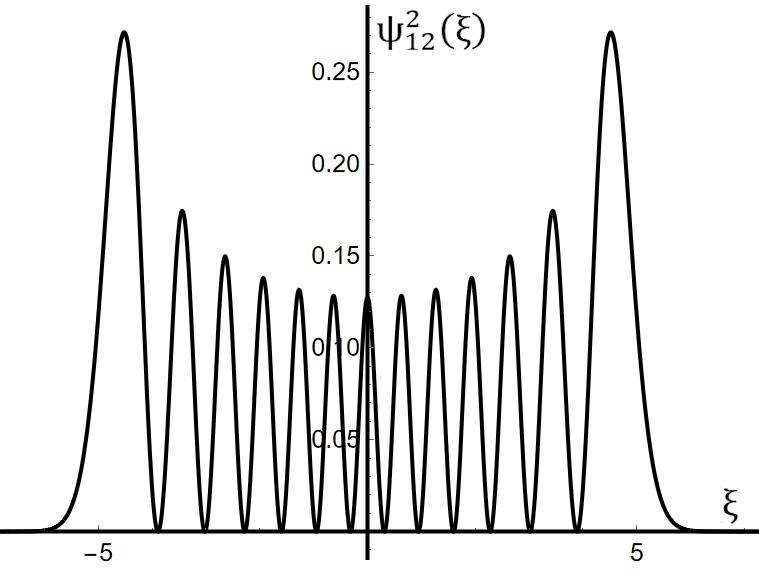
(26.6)-аңлатпаны пайдаланып энергияның мәнисин табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.8) |

ниң бир мәнисине (26.7)-функцияның биреўи сәйкес келеди. Демек гармоникалық осцилляторда азғыныў болмайды екен. Тийкарғы ҳалдың энергиясы *ноллик энергия* деп аталады.



-сүўрет. функциясының графиги.



- сүўрет. функциясының графиги.

Осциллятордың потенциаллық энергиясы инверсия түрлендириўине қарата инвариант болғанлықтан стационар ҳаллар жуп ҳәм тақ ҳаллар болып бөлинеди. Барлық жуп лерге сәйкес келетуғын ҳаллар жуп ҳалларға киреди. Тақ лерге сәйкес келетуғын ҳаллар тақ ҳаллар болып табылады, олардың толқын функциялары түрлендириўинде белгисин өзгертеди. Оның дурыс екенлигине исениў ушын биз Эрмиттиң биринши полиномларының айқын түрин жазыў жеткиликли:

Улыўма жағдайда жуплық шәрти (26.7)-теңлик бойынша анықланады. Эрмит полиномлары әпиўайы рекуррентли қатнасларды қанаатландырады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.9) |
|  | (26.10) |

Бул аңлатпаларды билиў есаплаўлар жүргизгенде пайдалы болады[[8]](#footnote-8).

Енди ҳалындағы диң орташа мәнисинен орташа квадратлық аўысыўды есаплаймыз. Орташа мәнис

Себеби, интеграл белгисиниң астында диң тақ функциясы тур. Сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.11) |

теңлигине ийе боламыз. (29.6)-аңлатпаны пайдаланып мынадай қатнастың орын алатуғынлығын табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.12) |

Бул қатнасты және бир рет пайдаланып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.13) |

(26.13)-аңлатпаны (26.11) ге қойып ҳәм функцияларының ортонормировкаланғанлығын есапқа алып төмендегилерге ийе боламыз:

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.14) |

Соңғы аңлатпаны жазғанда биз (26.5)-аңлатпаны есапқа алдық. (26.14)-аңлатпадан ноллик тербелислердиң амплитудасының квадратының орташа мәнисиниң

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

аңлатпасының жәрдеминде анықланатуғынлығы келип шығады. (26.14)-аңлатпаның жәрдеминде (26.8)-формуланы былайынша көширип жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.15) |

(26.15)- ҳәм (26.4)-аңлатпаларды салыстырып, биз классикалық ҳәм квантлық теориялардағы энергияның тең салмақлық орнынан аўысыўдың квадратының орташа мәниси арқалы бирдей болып аңғартылатуғынлығын көремиз.

(26.12)-аңлатпадан ҳәм функцияларының ортонормировкланыўшылығын пайдаланып координата операторының матрицалық элементлерин аңсат есаплаўға болады. Оның ушын биз Дирак тәрепинен киргизилген белгилеўлерди пайдаланамыз:

функциясын бойынша дифференциаллап ҳәм (26.10)-аңлатпаны есапқа алып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.16) |

ямаса

қатнасларын табамыз.

(26.16)- аңлатпадан (26,12)-аңлатпаны есапқа алғанда еки пайдалы қатнас келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.17) |

Енди

операторын киргиземиз ҳәм ол (26.15)-аңлатпаға сәйкес импульс операторы пенен

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.18) |

қатнасы бойынша байланысқан. Бундай жағдайда (26.15)-аңлатпаны былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (29.19) |

Бул теңликте операторлар төмендегидей теңликлер менен анықланған:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (29.20) |

(26.19)-аңлатпалардың жәрдеминде операторын избе-из пайдаланыў жолы менен ноллик ҳалдағы толқын функциясынан -ҳалдың толқын функциясын алыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.21) |

толқын функциясының түри нормировка көбетиўшисине шекемги дәлликте шәртинен алынады. Бул шәрт (26.19)-теңликлерден келип шығады. операторының координаталық көринистеги айқын түрин (26.21)-аңлатпаға қойып функциясын координаталық көринисте анықлайтуғын

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

теңлемесин аламыз. Бул теңлемениң шешими әпиўайы түрге ийе:

(26.20)-аңлатпаны пайдаланып, операторлар төмендегидей коммутациялық қатнасларды қанаатландыратуғынлығына аңсат исениўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.22) |

(26.19) ды избе-из пайдаланыў жолы менен мынадай теңликлердиң дурыс екенлигин дәлиллеўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.23) |

Бул теңликлерден (26.22) де келип шығады.

(26.23) тен операторлардың ҳәм көбеймелериниң меншикли мәнислериниң сәйкес () ҳәм ге тең екенлиги келип шығады. Демек, бул операторлардың матрицалары өзлериниң меншикли көринислеринде диагоналлық екен:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.24) |

Егер (26.24)-теңликлерди пайдалансақ, онда операторларға өткенде алынатуғын (26.2)-аңлатпадан Гамильтон операторының меншикли функцияларын аңсат есаплаўға болады. Ҳақыйқатында да, (26.5)- ҳәм (26.18)-аңлатпаларды есапқа алсақ, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.25) |

теңлигиниң орынлы екенлигин табамыз. Екинши тәрептен, (26.24)-операторлардың анықламасына сәйкес мынаған ийе боламыз:

Солай етип,

ямаса

**§ 37.** **Металдан электронлардың салқын эмиссиясы** (Блохин)

Егер металға кернеўлиги үлкен болған электр майданын түсирсек (шама менен 106 в/см ҳәм оннан да үлкен) ҳәм оны катод сыпатында пайдалансақ, онда бундай майдан электронларды ушырып шығарады. Нәтийжеде электр тоғы пайда болады. Бул қубылыс "салқын эмиссия" атамасына ийе болды. Бул қубылысты бөлекшелердиң потенциал барьер арқалы өтиўиниң тийкарында улыўма түрде тәжирийбелерде алынған нәтийжелерге сәйкес етип түсиндириўге болады.

Бул параграфта биз бул эффекттиң теориясын қараймыз. Бул теория потенциал барьер арқалы өтиў процессине байланыслы болған ең әпиўайы қубылыслардың бири болып табылады. Дәслеп бир сыртқы электр майданы болмаған жағдайдағы металдағы электронлардың қозғалысын еске түсириўге ҳәрекет етемиз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | сүўрет. Металдың шегарасындағы майдан. Тутас сызық - сыртқы майдан болмаған жағдайда, пунктир сызық - сыртқы майданы бар жағдайда. Сыртқы майданы түсирилген жағдайда потенциал барьери пайда болады. |

Электронды металдан шығарыў ушын базы бир жумыс ислеў керек. Демек, электронның металдағы потенциаллық энергиясы металдан сырттағы потенциаллық энергиядан төмен. Бул фактты әпиўайы түрде былайынша аңғарта аламыз: металдың ишиндеги потенциаллық энергияны нолге, ал металдан сырттағы потенциаллық энергияны шамасына тең деп есаплаймыз. Бундай жағдай -сүўретте көрсетилген. Потенциаллық энергияның ҳақыйқый жүрисин тап усындай жоллар менен схемаластырып, биз металдағы орташа майдан менен жумыс алып барамыз. Ал, ҳақыйқатында, металдың ишиндеги потенциал ноқаттан ноқатқа өткенде өзгереди. Бул өзгеристиң дәўири кристалдың турақлысының шамасына тең. Бизиң жуўықлаўымыз еркин электронлар гипотезасына сәйкес келеди, себеби ҳәм металдың ишинде электронға тәсир ететуғын ҳеш қандай күшлер жоқ.

Биз бул жерде усындай жақынласыўдың дурыс болыў дәрежесин талламаймыз, ал металлардағы электронларды еркин қозғалыўшы бөлекшелер ("электронлық газ") деп қараўдың металлардағы көп санлы қубылыслардың мәнисин түсиниўге мүмкиншилик беретуғынын көрсетип өтиў менен шекленемиз. Бундай газдиң электронларының энергия бойынша тарқалыўы мынадай: электронлардың басым көпшилиги энергиясына ийе болады. Температураның абсолют нолинде электронлар энергиясы ден шамасына шекемги қәддилердиң барлығын толтырады. шамасын ноллик энергия деп атаймыз. Металдың ишинен оның бетине түсетуғын ағысты арқалы белгилеймиз. Электронлар энергиясына ийе болғанлықтан, бул ағыс метал-вакуум шегарасындағы потенциалдың секириўинде толық шағылысады.

Енди металдың бетине қарай бағытланған электр майданы түсирилген деп есаплайық. Бундай жағдайда электронның турақлы болған электр майданындағы потенциаллық энергиясына энергиясы қосылады (электронның заряды ге тең). Енди электронның толық потенциаллық энергиясы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (98.1) |

Енди потенциаллық энергия иймеклиги басқа түрге ийе болады. Ол - сүўретте пунктир менен көрсетилген. Металдың ишинде үлкен майданды пайда етиўге болмайтуғынлығын аңғарамыз, сонлықтан тың өзгериси металдың сыртында ғана жүзеге келеди.

Бизлер потенциал барьердиң пайда болғанлығын көремиз. Классикалық механика бойынша электронның энергиясы теңсизлигин қанаатландырған жағдайда ғана ол барьер арқалы өте алады. Бундай электронлардың саны жүдә аз (олар киши термоионлық эмиссияны пайда етеди). Сонлықтан, классикалық механика бойынша майдан түсирилгенде тоқтың пайда болыўы мүмкин емес. Бирақ, егер майданы жеткиликли дәрежеде үлкен ҳәм барьердиң кеңлиги киши болса бир потенциаллық энергияның кескин өзгериси менен ис алып барамыз ҳәм бундай жағдайда классикалық механиканы пайдаланыўдың мүмкиншилиги жоқ: электронлар потенциал барьер арқалы өтеди.

Бул барьердиң көшериниң бағытындағы қозғалысында энергияға ийе электронлар ушын өткериў коэффициентин есаплаймыз. Бундай жағдайда мәселе

интегралын есаплаўға алып келинеди. Бул аңлатпада менен арқалы бурылыў ноқатларының координаталары белгиленген. Биринши бурылыў ноқатының координатасы ( -сүўретке қараңыз). Себеби қәлеген энергия ушын бағытындағы қозғалыстың энергиясына сәйкес келетуғын горизонт бағытындағы туўрысы потенциаллық энергия иймеклигин ноқатында кесип өтеди. Сүўретте көринип турғанындай, екинши ноқаты

теңлиги орынланғанда алынады. Буннан

теңлигине ийе боламыз ҳәм соған сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (98.2) |

формуласын аламыз. Буннан кейин

интеграллыў өзгериўшисин киргиземиз. Бундай жағдайда мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (98.3) |

Солай етип, бағытындағы қозғалысының энергиясы болған электронлар ушын өткериў коэффициенти мынаған тең болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (98.4) |

Бул коэффициенттиң мәниси ҳәр қыйлы лар ушын ҳәр қыйлы. Бирақ, теңсизлиги орынлы болғанлықтан орташа (электронлардың энергиялары бойынша) өткериў коэффициенти мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (98.5) |

Бул аңлатпада менен шамалары металдан ғәрезли болған константалар. Салқын эмиссия тоғы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (98.6) |

формуласының жәрдеминде анықланады. Тоқтың шамасының майданнан ғәрезлиги өткерилген экспериментлерде тастыйықланған.

**§ 38.** **α-ыдыраў теориясы** (Блохин)

Көплеген радиоактив элементлердиң α-бөлекшелерин шығарыў менен ыдырайтуғынлығы белгили. Атом ядросынан ушын шыққан α-бөлекшеси еки еселенген оң зарядқа ийе болғанлықтан () атом ядросының кулонлық майданында тезленеди. α-бөлекшеси шығып кеткеннен кейинги элементтиң номерин арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда элементтиң α-бөлекшеси шығарылмастан бурынғы номери ге тең. α-бөлекшесиниң үлкен беккемлиги оны ядроның ишиндеги өз бетинше объект деп қараўға мүмкиншилик береди. Демек, α-бөлекшеси атом ядросы қуралатуғын ең әпиўайы дүзилислердиң бири болып табылады ден есаплаўға болады. Егер атом ядросының қасындағы область α-бөлекшениң потенциаллық энергиясының минимумы болып табылатуғын болса, онда ол ядрода узақ ўақытлар даўамында жасай алады. α-бөлекшесиниң шамасына тең болған потенциаллық энергиясы ( арқалы α-бөлекшесинен ядроға шекемги қашықлық белгиленген) ядроға жақынласқан сайын монотонлы түрде үлкейеди (81-сүўретте пунктир сызық пенен көрсетилген). Сонлықтан ядроға жақын қашықлықларда электрлик күшлерден басқа қандай да бир күшлер күшлер тәсир еткен жағдайда ғана энергияның минимумы алынады. Нуклонлардың арасында тәсир ететуғын бундай күшлерди ядролық күшлер деп атайды[[9]](#footnote-9). Бул күшлердиң шамасы жүдә үлкен ҳәм киши қашықлықларда ғана тәсир етеди. Усы күшлердиң бар болыўының салдарынан ядроның қасындағы кулонлық ийтерисиў күши 81-сүўретте тутас сызық пенен көрсетилген тартысыў күши менен алмасады. Потенциалдың усындай қәсийетин *потенциал шуқырдың* ямаса *потенциал кратердиң* пайда болыўы деп атайды. Усындай күшлердиң бар болыўының салдарынан қашықлықларында (яғный тартысыў күшлери майданында) жайласқан α-бөлекшеси ядроның ишинде көп ўақыт жасайды. Усы жағдайға байланыслы α-ыдыраў қалайынша жүзеге келеди деген сораў пайда болады. Бул сораўға көп ўақытлар даўамында ҳеш ким жуўап бере алмады. Бир ўақытлары Кельвин радиоактив элемент тәрепинен шығарылатуғын бөлекшелер потенциал кратердиң ишинде қайнап турады деп болжады. Ўақыттың өтиўи менен бөлекшелердиң бири қандай да бир себеплерге байланыслы орташа энергиясына қосымша энергияға ийе болады. Үлкен энергияға ийе болған бөлекше барьер арқалы өтеди.

|  |  |
| --- | --- |
| 81-сүўрет.  α-бөлекшесиниң ядродан қашықлықтың функциясы сыпатындағы потенциаллық энергиясының иймеклиги (). Тап сол () иймеклик схема түринде көрсетилген ( ден кейинги кескин түсиў). |  |

Бирақ, Резерфорд бул көргизбели болған картинаның өзиниң басшылығында өткерилген тәжирийбелердиң нәтийжелерине қайшы келетуғынлығын көрсетти. Бул тәжирийбелерде баянлаўға өтемиз.

Резерфорд радиоактив уран атомларын торийдиң α-бөлекшелери менен бомбалады. торийдиң α-бөлекшелериниң энергиясы 8,11 МэВ. Бундай бөлекшелер кулонлық ийтериўди жеңип, ядроға жүдә жақын келе алады. Ең киши жақынласыў қашықлығы диң мәнисин баҳалаймыз. Әлбетте, қашықлығы α-бөлекшениң потенциаллық энергиясының басланғыш кинетикалық энергияға, яғный МэВ шамасына тең болатуғын қашықлық. Бул аңлатпаларда уранның номери, ол 92 ге тең. Сонлықтан, биз 3·10-12 см шамасын аламыз.

Бақлаўлар α-бөлекшелердиң оларға тек колон майданы тәсир ететуғындай болып шашырайтуғынлығын көрсетти. Бул α-бөлекшелерине ядролық күшлердиң 3·10-12 см ден киши қашықлықларда ғана тәсир ете баслайтуғынлығын аңғартады. Сонлықтан, ядроның ишиндеги α-бөлекшелери радиусы 3·10-12 см дан киши болған областта жайласады.

Екинши тәрептен уранның өзи радиоактив элемент болып табылады ҳәм оның өзи α-бөлекшелерин шығарады. Бул бөлекшелердиң энергиясын өлшеўлер, оның 4,12 МэВ ке тең екенлигин көрсетти.

Бул α-бөлекшелери ядродан, яғный 3·10-12 см ден киши қашықлықлардан ушып шығады. Бундай жағдайда, кулон майданында тезленип, олардың потенциал барьердиң бийиклигине тең энергияға (қандай болғанда да 8,11 МэВ тен үлкен энергияға) ийе болыўы керек (81-сүўретке қараңыз). Олар 6·10-12 см қашықлықтан ушып шыққандай нәтийжелер алынады. Солай етип, классикалық физиканың көз-қараслары бойынша парадокслық жағдайға алып келди: кулонлық электр майданы ядроға сырттан келип түсетуғын бөлекшелерге тәсир етеди, ал ядродан ушып шығатуғын бөлекшелерге тәсир етпейди деп есаплаў ямаса радиоактив ыдыраўды энергияның сақланыў нызамы орынланбайды деген пикирге келиў керек.

Бул мәселениң шешими квантлық механикадан келип шығады. Ол бундай жағдайда тартысыў областын () ийтерисиў областынан () айырып турған потенциал барьер арқалы туннеллик эффекттиң орын алатуғынлығына алып келеди.

Бундай жағдайда парадокс толық шешиледи: ядроның ишинде турған бөлекшениң энергиясы барьердиң бийиклигинен киши болған жағдайда да усы барьер арқалы өтиўи мүмкин. Сырттан ушын келетуғын бөлекше барьердиң киши өтиў коэффициентине ийе болыўының салдарынан ядро тәрепинен жүдә сийрек тутып алынады (оның ядрода турыў ўақытының жүдә киши болғанлығының себебинен). Сонлықтан, сырттан келип түсетуғын α-бөлекшелериниң шашыраўы барьердиң шеклеринен сыртындағы кулонлық күшлердиң тәсиринде жүзеге келеди. Барьердиң мөлдирлигиниң киши екенлиги ҳаққындағы болжаў радиоактив ыдыраўдың дәўириниң жүдә үлкен екенлиги менен сәйкес келеди.

Потенциал барьерлер арқалы өтиў теориясын пайдаланып, жоқарыда айтылған идеяларға математикалық форманы бериў ҳәм радиоактив ыдыраў константасы λ ушын аңлатпаны келтирип шығарыў аңсат. Бул константаның былайынша анықланатуғынлығын еске саламыз. Егер ўақыттың моментинде еле ыдырамаған ядролардың саны болса, онда ўақыты ишинде ыдыраған ядролардың санын арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда ушын мынадай аңлатпаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.1) |

Ыдыраў константасын есаплаў ушын биз бөлекшелердиң потенциал барьер арқалы өтиўдиң жоқарыда баянланған квантлық теориясын пайдалана аламыз. Бул теорияға сәйкес, ядроның ишиндеги α-бөлекшесин "квазистационар" ҳалда турған бөлекше деп қараўға болады. Бул ҳалдағы бөлекшениң тезлигин , барьердиң радиусын , барьердиң өткериў коэффициентин арқалы белгилеп, биз мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.2) |

Енди ны есаплаў керек. Барьердиң формасының қурамалы болғанлығына байланыслы, биз мынадай аңлатпаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.3) |

81-сүўреттен биринши бурылыў ноқаты тың (ядроның радиусы) екенлиги көринип тур. Екинши бурылыў ноқаты () мынадай шәрттиң тийкарында алынады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.4) |

Демек,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.5) |

теңлигине ийе боламыз. Жаңа өзгериўшисин киргизип, биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.5') |

Ең ақырында, егер теңлиги бар деп есапласақ, биз алынған интегралды қыйыншылықсыз есаплаймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.6) |

шамасының 1 ден киши екенлигин пайдаланып, менен ди қатнасының дәрежелери бойынша қатарға жаямыз ҳәм еки ағза менен шеклениўди жеткиликли деп болжаймыз. Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.7) |

формуласына ийе боламыз. Бул формулада арқалы ядродан узақтағы сан мәниси шамасына тең тезлик белгиленген. Солай етип, (100.3)-ыдыраў константасы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.8) |

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100.9) |

түрине ийе болады. Бул формула беретуғын ең зор нәтийже λ менен α-бөлекшесиниң тезлиги арасындағы ғәрезлик болып табылады. Бундай ғәрезлик квантлық механика пайда болмастан барын Гайгер менен Нэттол тәрепинен өткерилген тәжирийбелерде табылған еди.

Буннан кейин биз шамасының элементтиң номери тен () ҳәм ядроның радиусынан ғәрезли екенлигин көремиз.

Тәжирийбелер ыдыраў константаларының кең шеклерде өзгеретуғынлығын көрсетеди: от 106 сек-1 ден 10-18 сек-1 ге шекем. Егер усындай шеклерди λ ни анықлайтуғын параметрлерди вариациялаў (өзгертиў) керек болатуғын болса, онда, шамасы, теория дурыс болмаған болар еди. (100.9)-формуланың ең зор нәтийжеси λ бойынша алынған эмперикалық мағлыўматлар бойынша ядролардың радиусларын анықлаў болып табылады. Есаплаўлардың барлығы ядролардың радиусларының 5·10-12 см ден 9-12 см ге шекемги тар шеклериниң ишине киретуғынлығын көрсетеди[[10]](#footnote-10). Ҳәр қыйлы элементлер ушын λ шамасының ҳәр қыйлы болатуғынлығы ядролардың радиусларының ҳәр қыйлы болыўының салдары емес, ал ушын шығатуғын α-бөлекшелериниң энергияларының мәнислериниң ҳәр қыйлы болатуғынлығы менен байланыслы. λ шамасының диң мәнисинен әззи ғәрезликке, ал тезлик дан күшли ғәрезликке ийе екенлигин теорияның дурыс екенлиги түринде қараў керек.

**1-мәселе**. Еркин қозғалыс жағдайындағы фундаменталлық шешимлер.

болған жағдай ушын бир өлшемли толқын теңлемесин шешиңиз ҳәм алынған нәтийжелердиң физикалық мәнисин таллаңыз.

**Шешими**:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.1) |

теңлемеси өзгериўшилерди ажыратыўға мүмкиншилик береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.2) |

Себеби, (160.2)-аңлатпаны (160.1)-теңлемеге қойсақ

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.3) |

теңликлерин аламыз. Бул теңликлерде арқалы ажыратыў турақлысы белгиленген. (160.3) ти еки айырым теңлемеге ажыратып,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.4) |

ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.5) |

теңлемелерин табамыз. Егер ҳақыйқый шама болса, онда толқын функциясы дәўирли ҳәм ўақыттан ғәрезсиз болады (стационар ҳал). Егер ω оң мәниске ийе болса, онда

шамасы да оң шама болып, сонлықтан (160.5)-шешим кеңисликлик өзгериўши тың дәўирли функциясы болады.

Толқын функциясының ўақыттан ғәрезлигиниң түриндеги комплексли формасы квантлық механиканың өзине тән өзгешеликлерин көрсетеди: ҳәм ҳақыйқый функциялары дифференциаллық теңлемесиниң шешимлери болып табылмайды. Шрёдингер теңлемесиниң ўақыт бойынша биринши тәртипли теңлеме екенлиги оның классикалық физикадан ең зор өзгешелиги болып есапланады.

(160.1)-теңлемениң шеп тәрепиндеги операторды Гамильтон операторы сыпатында қабыл етип (бул жағдайда Гамильтон операторы тек кинетикалық энергия операторынан турады) ω параметриниң физикалық мәниси анықлаўға болады. Буннан ның кинетикалық энергия екенлиги ҳәм сонлықтан оның оң, ал бизиң шешимимиздиң гамильтонианның меншикли функциясы екенлиги келип шығады.

шамасы оң болғанлықтан, (160.5)-теңлемениң ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.7) |

теңлемесиниң улыўмалық шешими

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.8a) |

түрине ийе болады. Сонлықтан бир өлшемли

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.8b) |

толқын функциясы қарама-қарсы бағытларда тарқалатуғын еки толқыннан турады. Толқынлардың екеўиниң де фазалық тезлиги бирдей мәниске ийе.

Егер тығызлық

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.9) |

ҳәм ағыс

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.10) |

ушын аңлатпаларды айқын түрде жазса, онда (160.8a) толқын функциясының кеңисликлик бөлиминиң физикалық мәниси түсиникли болады. (160.8b)-аңлатпаға сәйкес, биз мынаған ийе боламыз:

Көринип турғанындай, амплитудалары менен ға тең болған еки толқын қарама-қарсы бағытланған ағысларға сәйкес келеди, олардың интенсивликлери толқынлардың салыстырмалы нормировкалаўшы турақлылар менен анықланады ҳәм ға пропопрционал. Тығызлық ушын аңлатпа кеңисликлик дәўирликти пайда ететуғын еки (когерентли) толқынлардың интерференциясының бар екенлигин көрсетеди.

Когерентликтиң пайда болыўына жетиў ушын айрықша себеплер болмаған жағдайларды (мысалы шегаралық шәртлер) ҳәр бир толқынды өз алдына қараў ақылға муўапық келеди. Бундай жағдайда теңлиги теңсизлигин, ямаса теңлиги теңсизлигин береди деп болжаў керек. Нәтийжеде бөлекшениң ана ямаса мына бағыттағы туўры сызықлы қозғалысы алынады. шамасы еки белгиге де ийе бола алады деп болжап, биз алған нәтийжелерди былайынша жуўмақлаўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.11) |

Бул теңликлерден ω ны жоғалтып,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.12) |

теңлигине ийе боламыз. Сонлықтан бөлекшениң импульси менен классикалық тезлиги сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (160.13) |
|  | (160.14) |

шамаларына тең. Соңғы аңлатпа фазалық тезлик болған

шамасына сәйкес келмейди, ал толқынның группалық тезлиги болған

тезлигине сәйкес келеди.

**Ескертиў**: (160.1)-аңлатпада келтирилген

дифференциаллық теңлемесин жормал диффузия коэффициенти D ға тең *диффузия теңлемеси* түринде қараўға болады:

Өзгериўшилерди ажыратыў квантлық механикада (диффузия теориясында емес) әҳмийетли орынды ийелейтуғын болғанлықтан, диффузия мәселелери ушын тән болған (бундай жағдайда арқалы ҳақыйқый коэффициентти белгилейди)

шешими квантлық механикада пайдаланылмайды.

(160.1)-теңлемедеги ўақыттың бағытын өзгертиў толқын функциясын функциясы менен алмастырыўға алып келеди.

**2-мәселе**. Еркин қозғалыс болған жағдайдағы толқын пакети.

Толқын пакетин қурып, оның ўақытқа байланыслы эволюциясын изертлеў керек.

**Шешими**. Биз толқын теңлемесиниң дара шешиминен баслаймыз ҳәм оны жоқарыда табылған (160.11) түринде жазамыз[[11]](#footnote-11):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.1) |
|  | (170.2) |

Бул аңлатпадағы ықтыярлы турақлы амплитуда. болса елеге шекем еркин параметр. Сонлықтан, толқын теңлемесиниң улыўма шешими (170.1)-аңлатпадан алынған k бойынша қәлеген жыйнақлы интеграл түринде жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.3) |

Бул теңлик ең улыўмалық түрдеги бир өлшемли толқын пакетин тәрийиплейди. Интегралдың жыйнақлы болыўы ушын шегинде амплитудасының нолге умтылыўы керек (ең кеминде түринде). Керек болған түрде сайлап алынған қәлеген амплитудасы белгили болған түрдеги шешимге алып келеди.

Енди толқын пакетин ўақыттың басланғыш моментинде ноқатының әтирапындағы кишкене областтың ишинде усы толқын функциясы тәрийиплейтуғын бөлекшени табыўдың итималлығы нолге тең болмайтуғын ҳәм бөлекше импульси менен қозғалатуғындай етип қурамыз. Бундай жағдайды ушын толқын функциясын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.4) |

түринде жазамыз. Ҳақыйқатында да, бул жағдайда

тығызлығы областында локализацияланған бөлекшеге жуўап береди, ал (160.10)-ағыс мынаған тең:

шамасына тең. Сонлықтан шамасы бөлекшениң тезлиги, ал пакеттиң импульси болып табылады. Толқын функциясы бир бөлекшени тәрийиплейтуғын болғанлықтан, мынадай нормировка шәрти орын алады:

яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.5) |

(170.3)- ҳәм (170.1)-аңлатпаларды пайдаланып, (170.4)-аңлатпаны тегис толқынлар бойынша қатарға жайыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.6) |

Бирақ, бул интеграл Фурье интегралы болып табылады. Бул интегралдан

аңлатпасын аламыз. Бул интегралды жақсы белгили болған

формуласының жәрдеминде есаплап, ушын ақырғы аңлатпаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.8) |

Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасын пайдаланып бул нәтийжени аңсат түсиниўге болады. Басланғыш ҳалда бөлекшениң координатасындағы анықсызлық (170.4)-аңлатпаға сәйкес ға барабар. Екинши тәрептен, (170.8)-аңлатпаның көрсетиўинше, толқын функциясына тийкарғы үлести диң қасындағы кеңлиги (ямаса ) шамасына тең жолақта жатқан спектрдиң бөлими береди. Демек, шамасын сайлап алыўдан ғәрезсиз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.9) |

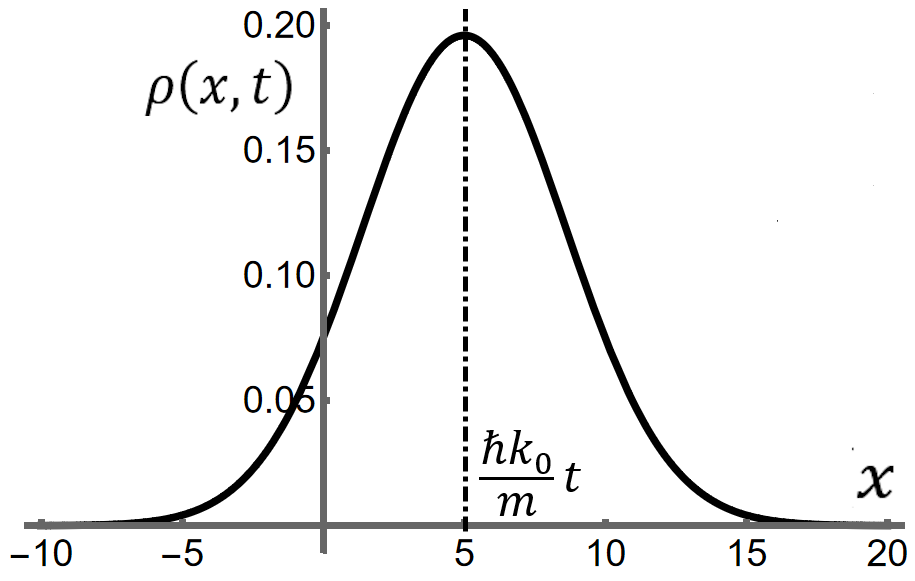
аңлатпасы орын алады. Бирақ, бул қатнастың өзи Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасы болып табылады. ўақыт моментиндеги басланғыш ҳал бойынша амплитудасын анықлап, биз *ўақыттың қәлеген моментиндеги* улыўмалық (170.3)-интегралды есаплаўға өтемиз:

Бул аңлатпада экспонентада ның квадратлық формасы тур. Сонлықтан, бул интеграл (170.7)-қәтелер интегралына және де алып келе алады. Нәтийже мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.10) |

Егер енди қәлеген ўақыт моментиндеги тығызлық менен ағыс ти және де қарайтуғын болсақ, онда ең ақырғы қурамалы аңлатпаны түсиниў қыйын болмайды. Бул жағдайда тығызлық мынаған тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.11) |



- сүўрет. ўақыт моменти ушын функциясының графиги.

координатасының функциясы сыпатында функциясы қоңыраўдың формасына ийе, бирақ оның максимумы ноқатынан ноқатына жылысқан (бул жағдайда тың дан ғәрезли екенлигине итибар бериў керек). Демек, (170.10)-аңлатпа менен тәрийипленетуғын максимум тезлиги менен жылысады (группалық тезлик бөлекшениң тезлигине тең). Усы ўақыттың ишинде (170.11)-экспонентаның бөлими ўақыт моментиндеги шамасынан

шамасына шекем үлкейеди. (170-8)-түрдеги спектраллық функцияның түринен келип шыққан ҳалда бул эффектти аңсат түсиндириўге болады. Толқынлық санлардың спектри кеңлигине ийе болғанлықтан айырым толқынлардың тезликлери кеңлиги шамасындағы областта жайылған болады. Сонлықтан, пакет шамасына жайылады. Бул жуўмақ жоқарыда да алынған еди.

Ағыс ушын аңлатпа (170.10)-аңлатпаның жәрдеминде алынады:

(170.11)-аңлатпа менен салыстырыўдан кейин өткерилген тиккелей есаплаўлар

|  |  |
| --- | --- |
|  | (170.2) |

аңлатпасын береди. Буннан ўақыт моменти ушын алынған дей аңлатпа сыяқлы аңлатпаға ықтыярлы ўақытта пүткиллей ийе болмайды екенбиз. Бул да тезликлер спектриниң шекли кеңлигиниң нәтийжеси болып табылады. Пакеттиң максимумы ушын (170.12)-теңлик те элементар түрдеги қатнасына алып келеди. Екинши тәрептен ушын аңлатпасына ийе боламыз. Бул ақылға толық муўапық келеди, себеби ўақыт моментинде шекем () ноқатына толқын пакетиниң тезлиги ден киши (үлкен) болған бөлими жетип келеди.

Ең ақырында мына жағдайды еске салып кетиў керек: нормировка шәрти барлық ўақыт ушын орынланады ҳәм бул заттың сақланыў нызамының аңлатпасы болып табылады.

**3-мәселе**. Турғын толқынлар.

Бөлекше ҳәм ноқатларында жайластырылған еки өткермейтуғын дийўалдың арасында жайласқан. Дийўаллар бөлекшени күшли ийтерилиске ушырататуғын күшли ийтерисиўдиң идеализациясы болып табылады. Меншикли ҳалларды табыңыз ҳәм олардың қәсийетлерин таллаңыз.

**Шешими**. Стационар ҳаллар ушын биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.1) |

аңлатпасының орынлы екенлигин билемиз. Толқын функциясының кеңисликлик бөлими Шрёдингер теңлемесин қанаатландырады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.2) |

Бул теңлемеде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.3) |

Ең улыўма жағдайда мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.4) |

Өткермейтуғын дийўаллардың бар екенлиги мынадай шегаралық шәртлерди береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.5) |

Егер фазалық көбейтиўшиге итибар бермесек (квантлық механикада бул көбейтиўшини сайлап алыў ҳеш қандай тәртипке салынбаған), онда шегаралық шәртлер менен (180.4)-аңлатпа

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.6) |

нормировка шәрти менен бирге меншикли функцияларды толық анықлаўға мүмкиншилик береди.

(180.4)-аңлатпаны (180.5)-қатнасқа қойып, менен шамаларын анықлаўға мүмкиншилик беретуғын еки сызықлы бир текли теңлемелер системасын аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Бул теңлемелер системасының шешимге ийе болыўы ушын оның анықлаўшысының нолге тең болыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.7) |

ямаса

(180.7)-шәртти меншикли мәнислери

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.8) |

шәртин қанаатландыратуғын меншикли мәнислери ғана қанаатландырады.

мәниси де (180.7)-шәртти қанаатландырады, бирақ бул мәнистиң (180.6)-нормировка шәртине қайшы келетуғынлығына байланыслы, оны есапқа алмаймыз. Энергияның меншикли мәнислер ушын жазылған (180.3)- ҳәм (180.8)-қатнаслардан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.9) |

формуласын аламыз. (180.8)-аңлатпаның тийкарында

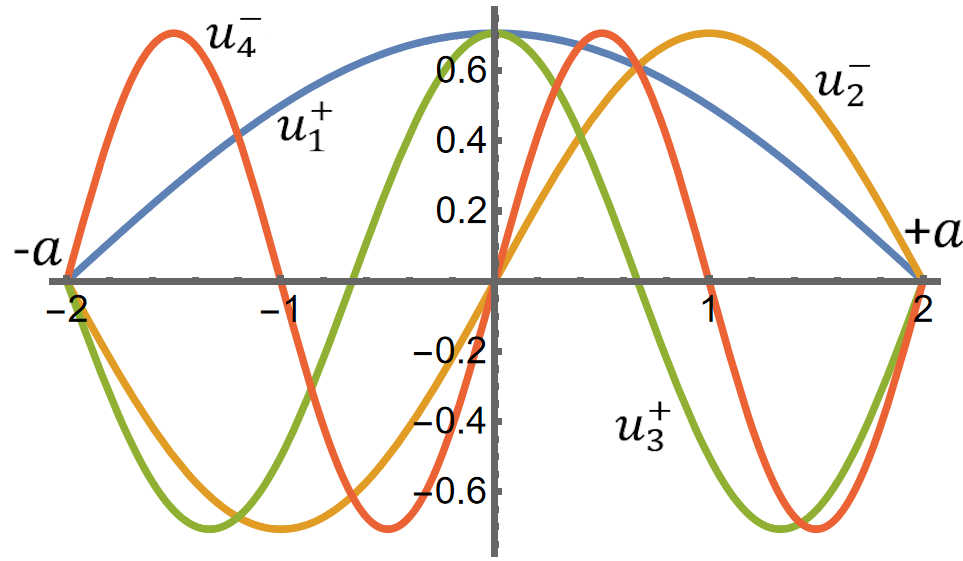
ҳәм сонлықтан

теңлигине ийе боламыз. Егер тақ сан болса, онда , ал нормировкаланған толқын функциялары мыналарға тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.10a) |

Егер жуп сан болса, онда ҳәм биз мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (180.10b) |



сүўрет. ушын алынған , , меншикли фунцияларының графиклери.

Егер (180.10b)-формуладағы функциясының белгисиниң үлкен емес өзгериўине итибар бермесек, онда оның ниң белгисинен ғәрезсиз екенлигин көремиз, сонлықтан ниң терис мәнислерине итибар бермеўге болады. Мысалы, ең төменги төрт ҳалдың толқын теңлемелери былайынша жазылады:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  |  |  | (180.11) |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |

Меншикли функциялардың координата басына қарата гезек пенен жуп ( - тақ) ямаса тақ ( - жуп) болатуғынлығын атап өтиў керек. Толқын функцияларының усындай қәсийетлери ҳаққында гәп еткенде ҳалдың жуплығы ҳаққында айтады: симметриялық толқын функциясы орын алғанда биз жуплық оң, ал антисимметриялы толқын функциясы орын алғанда жуплық терис деймиз. Қабыл етилген белгилеўлерде ( ҳәм ) ҳалдың жуплығы жоқарғы "+" ҳәм "-" индекслери менен белгиленеди. Биринши төрт меншикли функциялар - сүўретте көрсетилген.

Меншикли функциялардың кеңисликлик бөлимлери затлық болғанлықтан, ақырғы итималлық тоғы ҳеш бир ҳалда бола алмайды. Бул (180.4)-формулада теңлигиниң нәтийжеси болып табылады. (180.4)-аңлатпадағы ҳәм амплитудаларына ийе толқынлар тоқлар менен импульслерге қарама-қарсы үлеслерди қосады. Демек, энергияның дискрет меншикли мәнислерине тийисли болған гамильтонианның меншикли функциялары

операторының меншикли функциялары болып табылмайды. Ҳақыйқатында да, (180.10a)- ҳәм (180.10b)-функцияларды дифференциаллаў сунусоидалық шешимлерди косинусоидалық шешимлер менен алмастырады. Импульстиң орташа мәнисин

формуласының жәрдеминде есаплаўға болады. Барлық ҳаллар ушын интеграл жоғалады, себеби интеграл астындағы аңлатпа тың тақ функциясы болып табылады. Солай етип, итималлық тоғының тығызлығының нолге айланыўына сәйкес теңлиги орын алады.

**4-мәселе**. Дәўирли потенциал болған жағдайда толқын функциялары ҳәм энергия спектри ушын улыўмалық қатнасларды алыў.

**Шешими**. Егер дәўири ға тең болған дәўирли функция болса, онда Шрёдингер теңлемеси пүтин сан еселенген трансляцияларына қарата инвариант:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.1) |

ҳәм арқалы Шрёдингер теңлемесиниң сызықлы ҳәм бир биринен ғәрезсиз болған еки шешимин белгилеймиз. Бундай жағдайда ҳәм шешимлери де усы теңлемениң шешимлери болып табылады. Қәлеген шешимди менен функцияларының сызықлы комбинациялары түринде көрсетиўге болғанлықтан, бул жағдай ҳәм функциялары ушын да дурыс:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.2) |

Енди шешимлердиң ишинде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.3) |

шәртин қанаатландыратуғын ҳәм шешимлериниң де болатуғынлығын дәлиллеўге болады (Флоке теоремасы). Бул теңликте λ арқалы турақлы көбейтиўши белгиленген. Биз қарап атырған жағдайға ийкемлестирсек, мынадай теңликтиң алынатуғынлығы айқын:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.3a) |

биз излеп атырған дәлиллеў мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.4) |

(280.2)-аңлатпаға сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

теңлигин аламыз. Егер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.5) |

теңликлери орынлы болса, онда (280.4)-аңлатпа қа тең. Еки бир текли сызықлы теңлемеден туратуғын (280.5)-системаның шешимге ийе болыўы ушын оның детерминантының нолге тең болыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.6) |

λ ге қарата бул квадрат теңлемениң еки түбири менен лерге еки ҳәм функциялары сәйкес келеди.

(280.3)-формуладан

анықлаўшысының (оны Вронский анықлаўшысы ямаса вронскиан деп атайды)

қатнасын қанаатландыратуғынлығын келип шығады. Грин теоремасы бойынша Вронский анықлаўшысы тан ғәрезли емес[[12]](#footnote-12), сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.7) |

теңлигине ийе боламыз. (280.3a) теңлигин қарап, менен параметрлери ҳаққында толығырақ мағлыўматларды алыўға болады. Мейли, теңсизлиги орынлы болсын. Бундай жағдайда шегинде шексиз өседи, ал шегинде шексиз киширейеди. теңсизлиги орынланғанда қарама-қарсы ситуация орын алады. Бундай шешимлерди нормировкалаўға болмайды. Сонлықтан физикалық мәниске ийе шешимлер теңлиги орынланатуғын жағдайларда, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.8) |

теңликлери орынланған жағдайда алынады. Бул теңликлердеги затлық шама.

теңлиги орынланатуғын болғанлықтан ның

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.9) |

интервалындағы мәнислери менен шеклениўге болады. Бул бизге барлық мүмкин болған толқын функцияларының толық жыйнағын береди. Солай етип тың барлық шекленген шешимлери ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.10) |

функцияларына ийе боламыз. Бул жағдай

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.11) |

теңлиги орын алған жағдайларда ғана орынлы болады. Бул аңлатпада - дәўирли функция, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.12) |

Бул нәтийже *Блох теоремасының* мазмунын қурайды.

Биз Блох теоремасының қатты денелер физикасының әҳмийетли теоремасы екенлигин атап өтемиз. Бул теорема дәўирли потенциалда жайласқан бөлекшениң толқын функциясының түрин анықлаўға мүмкиншилик береди. Швейцариялы физик Феликс Блохтың исми менен аталған. Бир өлшемли жағдайда бул теореманы Флоке теоремасы деп жийи айтады. Теорема 1928-жылы келтирип шығарылған.

Енди энергия спектри мәселесин таллаймыз. интервалында (280.4)-аңлатпада исленгениндей, шешимин ямаса шешиминиң биреўи арқалы қурамыз. Дәўирликтиң қоңсы интервалы ушын (280.10)-формулаға сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.13) |

аңлатпасын аламыз. аргументиниң мәнисиниң буннан алдыңғы интервалға киретуғынлығын аңғарамыз. Бул интерваллардың шегарасында, яғный ноқатында (280.4)- ҳәм (280.13)-аңлатпалар да, олардың туўындылары да сәйкес келиўи керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.14) |

ҳәм ға қарата бул бир текли теңлемелер детерминанты нолге тең болған жағдайда ғана шешиледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Детерминантты ашып,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (280.15) |

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпаның бөлиминде аргументтиң қәлеген мәниси ушын алынған вронскиан тур (вронскиан константа болғанлықтан, оның айқын мәнисин көрсетиўдиң зәрүрлиги жоқ).

(280.15)-теңлеме меншикли мәнислердиң бар болыў шәртин көрсетеди. Егер оң бөлиминиң абсолют мәниси 1 ден үлкен болмаған жағдайда ғана теңлемени шешиў мүмкин ҳәм бундай жағдайда шамасының мәнисин анықлаўға болады. Бул шәртти қанаатландыратуғын энергияның мәнислериниң бир қатар интерваллары ҳәм бул шәрт орынланбайтуғын олар менен гезеклесетуғын энергияның мәнислериниң интерваллары бар. Солай етип, энергия спектри айырым қәддилерден турмайды, ал бир бири менен гезеклесип жайласатуғын руқсат етилген ҳәм қадаған етилген энергия зоналарынан турады. Энергия зоналарының шегаралары (280.15) ке сәйкес шәрти бойынша анықланады.

**IV бап. Импульс моменти**

**§ 39. Импульс моменти**

Квантлық механиканың бир өлшемли бир қатар мәселелерин шешкеннен кейин үш өлшемли мәселелерди шешиўге өтиўге болады. Бирақ, атомлар сыяқлы системаларды үйрениў ушын мүйешлик момент формализмин үйрениў керек. Сонлықтан бул бап буннан кейинги баплар ушын қандай да бир кирисиў хызметин атқарады.

Импульс моменти классикалық механикада да, квантлық механикада да әҳмийетли орын ийелейди. Бул сфералық симметрияға ямаса орайлық симметрияға ийе майданларда жайласқан системалардың динамикасын үйрениў ушын айрықша пайдалы. Бундай системалардың орбиталық моментлери ушын потенциаллары сақланады. Жоқарыда (1-бапта) водород атомының Бор моделиндеги (бул моделде электрон протонның кулонлық потенциалында, яғный орайлық потенциалда қозғалады) ең тийкарғы момент мүйешлик моменттиң квантланыўына тийкарланған. Усының менен бирге мүйешлик момент молекулалардың айланыўында, атомлардағы электронлардың ҳәм нуклонлардың ядролардағы қозғалыўында шешиўши орынды ийелейди. Демек, мүйешлик моменттиң квантлық теориясы молекулалық, атомлық ҳәм ядролық системаларды үйрениўдиң зәрүрли болған шәрти болып табылады.

Бул бапта биз мүйешлик моменттиң улыўмалық формализмин қараймыз.Биз дәслепмүйешлик момент операторының ҳәр қыйлы қәсийетлерин қарап өтемиз ҳәм буннан кейин оның меншикли функциялары менен меншикли мәнислерин қараймыз. Ең ақырында бул формализмди спинлик ҳәм орбиталық мүйешлик моментлердиң меншикли мәнислери менен меншикли векторларын табыўға ҳәрекет етемиз.

Импульстиң сақланыў нызамын келтирип шығарғанда әдетте бөлекшелердиң жабық системасына қатнасы бойынша кеңисликтиң бир теклигинен пайдаланады (кеңисликтиң бир текли болыўының салдарынан импульс сақланады). Бир теклилик пенен бир қатарда кеңислик изотроплық қәсийетке де ийе болады. Кеңисликтеги барлық бағытлар эквивалент. Сонлықтан барлық системаны пүтини менен ықтыярлы бағыттың дөгерегинде ықтыярлы мүйешке бурғанда оның гамильтонианы өзгериссиз қалады. Бул шәрттиң ықтыярлы шексиз киши бурыўда орынланыўын талап етиў жеткиликли.

Мейли, шамасы шексиз киши бурыў векторы болсын. Оның бағыты бурыў орын алған көшер менен бағытлас, ал сан шамасы бурыў мүйешине тең. Усындай бурыўдағы ның өзгерислери (бөлекшениң радиус-вектор ның)

шамасына тең. Усы түрлендириўде ықтыярлы функциясы

функциясына өтеди.

аңлатпасы шексиз киши бурыў операторы болып табылады. Шексиз киши бурыўдың системаның гамильтонианы өзгертпеў факты бурыў операторының операторы менен коммутативлиги менен аңғартылады. шамасы турақлы вектор болғанлықтан бул шәрт базы бир сақланыў нызамын аңғартатуғын мына қатнасқа алып келинеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.1) |

Сақланыўы кеңисликтиң изотроплық қәсийетинен келип шығатуғын шама системаның *импульс моменти* болып табылады. Солай етип, операторы турақлы көбетиўшиге шекемги дәлликте системаның қозғалысының толық импульс моментине, ал сумманың ҳәр бир ағзасына айырым бөлекшениң толық импульс моменти сәйкес келиўи керек.

Пропорционаллық коэффициентиниң мәнисин қа тең етип алыў керек. Бундай жағдайда бөлекшениң моменти операторы ушын жазылған аңлатпаcы классикалық аңлатпасына дәл сәйкес келеди. Буннан былай биз барлық ўақытта ℏ бирликлеринде өлшенген моменттен пайдаланамыз. Усындай жоллар менен анықланған айырым бөлекшениң моменти операторын арқалы, ал барлық системаның моментиниң операторын арқалы белгилеймиз. Демек, бөлекшениң моменти операторын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.2) |

ямаса қураўшыларында

түринде жазамыз.

Сыртқы майданда турған система ушын улыўма жағдайда импульс моменти сақланбайды. Бирақ майданның белгили болған симметрияларында моменттиң сақланыўы орын алады. Мысалы, егер система орайға қарата симметриялы майданда жайласқан болса, онда орайдан шығатуғын барлық бағытлар эквивалент, сонлықтан усы орайға қарата қозғалыс муғдарының моменти сақланады. Тап сол сыяқлы, аксиаллық симметрияға ийе болған майданда моменттиң симметрия көшериниң бойындағы қураўшысы өзгериссиз қалады. Классикалық механикадағы бул сақланыў нызамларының барлығы да квантлық механикада өзлериниң күшин сақлайды.

Стационар ҳаллардағы сақланбайтуғын моментке ийе болған системада момент белгили бир мәнислерге ийе болмайды. Бундай жағдайларда берилген стационар ҳалдағы моменттиң орташа мәниси қызығыў пайда етеди. Қәлеген азғынбаған стационар ҳалдағы моменттиң орташа мәниси нолге тең. Ҳақыйқатында да, ўақыттың белгиси өзгергенде энергия өзгериссиз қалады ҳәм энергияның берилген қәддине тек бир стационар ҳал сәйкес келетуғын болғанлықтан, ны ға өзгерткенде системаның ҳалының өзгериссиз қалыўы керек. Бул барлық шамалардың, соның ишинде моменттиң де орташа мәнислериниң өзгермей қалатуғынлығын аңғартады. Бирақ, ўақыттың белгиси өзгергенде импульс моменти де белгисин өзгертеди ҳәм, сонлықтан теңлигиниң алыныўы керек. Буннан теңлиги келип шығады. Тап усындай нәтийжени орташа мәнисиниң математикалық анықламасынан келип шыққан ҳалда да алыўға болады (математикалық анықлама бойынша орташа мәниси шамасының интегралы болып табылады). Азғынбаған ҳаллардың толқын функциялары ҳақыйқый. Сонлықтан

аңлатпасы жормал, ал шамасы, әлбетте, ҳақыйқый болғанлықтан теңлигиниң орын алыўы керек.

Момент операторының координаталар ҳәм импульслер операторлары менен коммутация қағыйдаларын анықлаймыз.

1927-жылы Гейзенберг тәрепинен табылған (16.2)-қатнаслардың жәрдеминде мынадай қатнаслардың орынлы екенлигин аңсат келтирип шығарамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.3) |

Солай етип,

теңликлериниң орынлы екенлигине көз жеткеремиз.

(26.3)- барлық қатнасларды тензорлық түрде жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.4) |

Бул аңлатпада арқалы үшинши рангалы бирлик тензор белгиленген, ал еки рет қайталанатуғын "гүң" индекслер бойынша суммалаў нәзерде тутылады.

Тап усындай қатнаслардың момент ҳәм импульс операторлары ушын да орын алатуғынлығына аңсат исениўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.5) |

Бул формулалардың жәрдеминде моменттиң қураўшылары операторларының бир бири менен коммутацияланыў қағыйдаларын табыў аңсат:

Солай етип,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.6) |

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.7) |

Тап усындай қатнаслар системаның толық моменти ҳәм операторлары ушын да орын алады. Ҳақыйқатында да, ҳәр қыйлы бөлекшелердиң моментлери операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болғанлықтан (мысал ретинде) төмендегидей қатнаслар орын алады:

Демек,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.8) |

(26.8)-қатнаслар моменттиң үш қураўшыларының бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алмайтуғынлығын көрсетеди (буған үш қураўшының барлығының бир ўақытта нолге тең болыўы кирмейди). Бул бойынша момент үш қараўшысы да бир ўақытта өлшениўи мүмкин болған импульстен әдеўир үлкен айырмаға ийе.

операторларынан момент векторының абсолют мәнисиниң квадраты операторын дүземиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.9) |

Бул оператор , , операторларының ҳәр бири менен коммутацияланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.10) |

Ҳақыйқатында да, мысал ретинде, (26.8)-аңлатпаны пайдаланып, мынаған ийе боламыз:

Бул теңликлерди қосып, соңғы қатнаслардың ең ақырғысын аламыз.

(26.10)-қатнаслар физикалық жақтан моменттиң квадратының (яғный оның абсолют шамасының) оның қураўшыларының бири менен анық мәниске ийе болатуғынлығын аңғартады.

, операторларының орнына олардың комплексли комбинацияларын пайдаланған қолайлы:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.11) |

(26.8)-аңлатпаның жәрдеминдеги туўрыдан-туўры есаплаўлардың жәрдеминде бул комбинациялар ушын мынадай коммутация қағыйдаларының дурыс екенлигине исениўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.12) |

Соның менен бирге

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.13) |

теңликлериниң орынлы екенлигин тексерип көриў қыйын емес.

Ең ақырында айырым бөлекшениң моменти ушын сфералық координаталардағы жийи қолланылатуғын аңлатпаны жазамыз. Оның ушын сфералық координаталар менен декарт координаталарының арасындағы әдеттеги қатнасларды жазамыз:

Бул формулаларды пайдаланыў менен өткерилген әпиўайы есаплаўлардың нәтийжесинде төмендегидей аңлатпаларды аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.14) |
|  | (26.15) |

Оларды (26.13)-аңлатпаға қойып, бөлекшениң моментиниң квадраты операторын аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.16) |

Бул аңлатпаның көбейтиўши дәллигиндеги Лаплас операторының мүйешлик бөлими екенлигине итибар беремиз.

**§ 40. Импульс моментиниң меншикли мәнислери**

Бөлекшениң импульс моментиниң базы бир бағытқа түсирилген проекциясының меншикли мәнислерин табыў ушын оның операторының сфералық координаталардағы аңлатпасын пайдаланған қолайлы. Бундай жағдайда поляр көшерди бир қарап атырған бағыт пенен бағытлас етемиз. түринде жазылатуғын (26.14)-формулаға сәйкес, формуласын былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.1) |

Оның шешими былайынша жазылады[[13]](#footnote-13):

Бул аңлатпада арқалы менен өзгериўшилериниң ықтыярлы функциясы белгиленген. Функцияның бир мәнисли болыўы ушын оның дәўири 2π ге тең дәўирли болыўы керек. Буннан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.2) |

теңлигин табамыз[[14]](#footnote-14). Солай етип тиң меншикли мәнислери терис ҳәм оң пүтин санлар екен (олардың ишинде ноль де бар). операторының меншикли функциялары ушын тән болған φ ден ғәрезли көбейтиўшини

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.3) |

арқалы белгилеймиз. Бул функциялар нормировкаланған. Сонлықтан,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.4) |

Көринип турғанындай, системаның толық моментиниң -қураўшысының меншикли функциялары да оң ҳәм терис пүтин санларға тең

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.5) |

көшериниң бағытын алдын ала ҳеш нәрсе айырып көрсетпейтуғын болғанлықтан бундай нәтийже қураўшылары ушын да, улыўма айтқанда қәлеген бағыттағы моменттиң қураўшылары ушын да орынлы. Олардың барлығы тек пүтин мәнислерге ийе болады. Биринши рет қарағанда бул нәтийжениң парадокслық болып көриниўи мүмкин (әсиресе оны бир бирине шексиз жақын бағытлар ушын қолланатуғын болсақ). Бирақ, ҳақыйқатында, мына жағдайды нәзерде тутыў керек: операторларының бирден-бир улыўмалық меншикли функциясы бир ўақыттағы

мәнислерине сәйкес келеди. Бундай жағдайда импульс моментиниң векторы ҳәм оның қәлеген бағытқа түсирилген проекциясы нолге тең. Егер , , меншикли мәнислериниң кеминде биреўи нолге тең болмаса, онда сәйкес операторлардың улыўмалық меншикли функциялары болмайды. Басқа сөз бенен айтқанда, моменттиң еки ямаса үш қураўшысының бир ўақытта ҳәр қыйлы бағытлардағы белгили болған (нолге тең емес) мәнислериниң болыўы мүмкин емес. Сонлықтан, биз олардың тек биреўиниң пүтин мәниске ийе болатуғынлығын ғана айта аламыз.

Системаның ниң мәниси бойынша айрылатуғын стационар ҳаллары бирдей энергияға ийе болады. Бул көшериниң бағытының алдын-ала белгиленип алынбағанлығына байланыслы байланыслы болған улыўмалық көз-қараслардан келип шығады. Демек, сақланатуғын моментке (нолге тең болмаған) ийе системаның энергия қәддилери улыўма алғанда азғынған.

Енди моменттиң квадратының меншикли мәнислерин излеўге өтемиз ҳәм тек (26.8)-коммутация қағыйдасынан келип шыққан бул мәнислерди қалайынша табыўдың мүмкин екенлигин көрсетемиз. квадратының бирдей мәнислерине ийе стационар ҳаллардың толқын функцияларын арқалы белгилеймиз.

Бул жерде моменттиң квадратының ҳәр қыйлы мәнислеринде энергияның мәнислериниң бирдей болыўына алып келетуғын ҳеш қандай қосымша азғыныўдың жоқ екенлигин түсиниў керек. Бул дискрет спектр ушын орынлы ҳәм үзликсиз спектрдиң энергия қәддилери ушын орынлы емес. Бирақ, қосымша азғыныў болған жағдайда меншикли функцияларды шамасының белгили болған мәнислерине сәйкес келетуғындай етип сайлап алыў керек ҳәм буннан кейин олардан бирдей ҳәм шамаларына тең болған ҳалларды сайлап алыўға болады. Математикалық жақтан бул коммутацияланатуғын операторлардың матрицаларын бир ўақытта диагоналлық түрге келтириўдиң мүмкин екенлигин аңғартады.

Ең дәслеп z көшериниң еки бағытының да физикалық жақтан эквивалент болғанлықтан мүмкин болған ҳәр бир оң мәнис ушын сондай терис мәнистиң болатуғынлығын аңғарамыз. шамасының ең үлкен мүмкин болған мәнисин арқалы белгилеймиз (пүтин оң сан ямаса ноль). Бундай жоқары шектиң болыў фактының өзи айырмасының барлық жағдайларда оң шама болған физикалық шамасының операторы екенлиги менен байланыслы. Сонлықтан оның меншикли функцияларының терис болыўы мүмкин емес.

операторын операторының меншикли функциясы болған ге қолланып ҳәм (26.12)-коммутация қағыйдасынан пайдаланып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26.6) |

теңлемесине ийе боламыз. Буннан функциясының (нормировка турақлысына шекемги дәлликте) шамасының ге сәйкес келетуғын меншикли функция екенлиги көринип тур:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.7) |

Егер бул теңликлердиң бириншисинде теңлиги орынланады деп есапланса, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.8) |

теңлигиниң орынланыўы керек. Себеби, анықлама бойынша ҳаллары жоқ. Бул теңликке операторын қолланып ҳәм (26.13)-теңликти пайдаланып

теңликлерин аламыз. Бирақ функциялары ҳәм операторларының улыўмалық меншикли функциялары болғанлықтан

теңлемелериниң орынлы екенлиги айқын. Сонлықтан алынған теңлеме

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.9) |

теңлигин береди.

(27.9)-формуланың жәрдеминде моменттиң квадратының биз излеп атырған меншикли мәнислери анықланады. саны барлық оң мәнислерге ийе болады (солардың ишинде ноль де бар). диң берилген мәнисинде моменттиң қураўшысы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.10) |

мәнислерине ийе бола алады (яғный барлығы болып ҳәр қыйлы болған мәнис). Демек, моментине сәйкес келетуғын энергияның қәдди қайтара азғынған. Бул азғыныў ҳаққында гәп етилгенде моменттиң бағытлары бойынша азғыныў ҳаққында айтады. Нолге тең моментке (, бундай жағдайда оның қураўшыларының үшеўи де нолге тең) ийе ҳал азғынбаған. Бундай ҳалдың толқын функциясының сфералық симметрияға ийе екенлигин атап өтемиз. Буның дурыс екенлиги шексиз киши бурыўдағы оның φ аңлатпасы беретуғын өзгерисиниң бул жағдайда нолге айланатуғынлығынан түсиникли.

Биз қысқалық ушын системаның " моменти" ҳаққында жийи гәп етемиз. Бирақ бул жағдайда биз ге тең болған квадраты бар моментти нәзерде тутамыз. Ал, моменттиң -қураўшысы ҳаққында гәп еткенде әдетте әпиўайы түрде "моменттиң проекциясы" ҳаққында айтамыз.

Бир бөлекшениң моментин киши ҳариби менен белгилеймиз, яғный оның ушын (27.9)-формуланы былайынша жазамыз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27.11) |

**§ 41. Импульс моментиниң меншикли функциялары**

менен ниң мәнислерин бериў менен бөлекшениң толқын функциясы толығы менен анықланбайды. Буның себеби усы шамалардың сфералық координаталардағы операторларының тек θ ҳәм φ мүйешлерине ийе екенлиги менен байланыслы. Олардың меншикли функциялары ден ғәрезли болған ықтыярлы көбейтиўшиге ийе бола алады. Биз бул жерде моменттиң меншикли функциялары ушын тән болған толқын функциясының мүйешлик бөлимин ғана қараймыз. Бул функцияны түринде белгилеймиз ҳәм

шәрти тийкарында нормировкалаймыз. Бул аңлатпада арқалы денелик мүйештиң элементи белгиленген.

Буннан кейинги есаплаўлар ҳәм операторларының улыўмалық меншикли функцияларын анықлаў ҳаққындағы мәселениң θ ҳәм φ өзгериўшилерин ажыратыўға мүмкиншилик беретуғынлығын көрсетеди ҳәм бул функцияларды

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.1) |

түринде излеўге болады. Бул теңликте арқалы (27.3)-формуланың жәрдеминде анықланатуғын операторының меншикли функциялары белгиленген. функциялары (27.4)-аңлатпа бойынша нормировкаланған болғанлықтан функциясының

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.2) |

шәрт бойынша нормировкаланыўы керек.

Ҳәр қыйлы менен ге ийе болған функциялары ҳәр қыйлы меншикли мәнислерге сәйкес келетуғын момент операторларының меншикли функциялары сыяқлы автомат түрде өз-ара ортогоналлық болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.3) |

операторының меншикли функциясы (оның меншикли мәнислерине сәйкес келетуғын) сыяқлы функциясы да ортогоналлық. функциялары болса момент операторларының қандай да бириниң меншикли функциялары болып табылмайды. Олар диң ҳәр қыйлы мәнислеринде өз-ара ортогоналлық (бирақ ниң ҳәр қыйлы мәнислеринде емес).

Биз излеп атырған функцияларды есаплаўдың ең туўрыдан-туўры усылы сфералық координаталарда жазылған операторының меншикли функцияларын излеў ҳаққындағы мәселени тиккелей шешиў болып табылады [(26.16)-формула].

теңлемеси

теңлемесиниң орынлы екенлигин көрсетеди. Бул теңлемеге ψ ди (28.1)-аңлатпаны қойып, ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.4) |

теңлемесин аламыз.

Бул теңлеме шар функциялар теориясында жақсы белгили. Ол пүтин ҳәм оң мәнислеринде шекли болыў менен бир мәнислилик шәртлерин қанаатландыратуғын шешимлерге ийе. Сәйкес шешимлери Лежандрдың бириктирилген полиномлары деп аталатуғын полиномлар болып табылады ҳәм олар түринде жазылады[[15]](#footnote-15). Шешимди (28.2)-шәрт пенен нормировкалап, мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.5) |

Лежандрдың бириктирилген полиномларының былайынша жазылатуғынлығын атап өтемиз:

Бул аңлатпадағы Лежандр полиномы былайынша жазылатуғын Родригес формуласының жәрдеминде анықланады:

(28.5)-аңлатпада теңсизлиги орынлы деп есапланады. Терис леп ушын ди

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.6) |

қатнасының жәрдеминде анықлаймыз. Демек, болған жағдайда функциясы (28.5)-формула менен бериледи. Бул формулада ниң орнына | ди жазып, көбейтиўшисин таслап кетиў керек.

Солай етип, моменттиң меншикли функциялары белгили бир тәртипте нормировкаланған сфералық функциялар болып табылады екен. Буннан кейин пайдаланыўдың қолайлы болыўы ушын жоқарыда келтирилген барлық анықламаларды есапқа алатуғын олардың аңлатпасын жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.7) |

Егер шәрти орынланатуғын болса, онда (28.7)-аңлатпа мынадай аңлатпаға айланады:

Оларды нормировкаланған *сфералық гармоникалар* деп атайды. Дара жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.7) |

шамасының белгиси бойынша айрылатуғын функциялардың бир бири менен

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.8) |

қатнасы менен байланысқан екенлиги айқын.

теңлиги орынланғанда (бундай жағдайда теңлиги автомат түрде келип шығады) шар функция турақлы шамаға алып келинеди. Басқа сөз бенен айтқанда, бөлекшениң моменти нолге тең болған ҳалларының толқын функциялары тек ден ғәрезли, яғный толық шарлық симметрияға ийе болады. Бундай жуўмаққа биз 27-параграфта келген едик.

берилген жағдайда диң шамасынан басланатуғын мәнислери шамасының избе-из меншикли мәнислерин олардың өсиўи бағытында номерлейди. Сонлықтан, меншикли функциялардың ноллери ҳаққындағы улыўмалық теореманың тийкарында биз мынадай жуўмаққа келемиз: функциясы θ мүйешиниң ҳәр қыйлы болған дана мәнислеринде нолге айланады. Басқа сөз бенен айтқанда, ол түйинлик сызықлар сыпатында шардың "кеңлигиниң дөңгелеклерине" ийе болады. Егер толық мүйешлик функцияларға келетуғын болсақ, егер көбейтиўшисиниң орнына ямаса ди алатуғын болсақ, онда олар түйинлес сызықлар сыпатында және "меридианлық дөңгелеклерге" ийе болады. Солай етип, түйинлес сызықлардың улыўмалық саны ге тең.

Енди функциясын басқа усыл болған матрицалық усылдың жәрдеминде анықлаўдың мүмкин екенлигин көрсетемиз. Оның ушын осциллятордың толқын функцияларының қалайынша есапланатуғынлығын еске түсиремиз. (27.8)-аңлатпаға қайтып келемиз ҳәм теңлемесин пайдаланамыз. операторы ушын (26.15)-аңлатпа болған

аңлатпасынан пайдаланып ҳәм

аңлатпасын қойып, ушын мынадай теңлемени аламыз:

Буннан

теңлигиниң орынлы екенлиги келип шығады. ты нормировка шәртинен анықлап, мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.10) |

Буннан кейин (27.12)-аңлатпаны пайдаланып, мынаны жазамыз:

Бул формуланы және бир рет қолланыў мынаны береди:

операторы ушын жазылған (26.15)-аңлатпаның жәрдеминде теңликтиң оң тәрепин есаплаў аңсат. Бундай есаплаўлардың нәтийжесинде

аңлатпасын аламыз. Бул формуланы қайтадан қолланыў мынаны береди:

Ең ақырында усы қатнасларды ҳәм ушын жазылған (28.10)-аңлатпаны пайдаланып (28.5)-формулаға сәйкес келетуғын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28.11) |

формуласын аламыз. Жоқарыда келтирилген қатнаслардан пайдаланып, болған жағдайлар ушын биз сфералық гармоника ушын мынадай аңлатпаны аламыз:

Енди функцияларының менен ниң ҳәр қыйлы мәнислери ушын сфералық ҳәм декарт координаталарындағы қалайынша жазылатуғынлығы менен танысамыз.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

-сүўретте функциясының теңликлери орынланатуғын жағдайдағы графиги көрсетилген.

|  |  |
| --- | --- |
|  | - сүўрет.  теңликлери орынланатуғын жағдайдағы  функциясының графиги. |

**§ 42. Моментлерди қосыў**

Бир бири менен әззи тәсирлесетуғын еки бөлимнен туратуғын системаны қараймыз. Өз-ара тәсирлесиўди толығы менен есапқа алмағанда олардың ҳәр бири ушын импульстиң сақланыў нызамы орынланады. Бундай жағдайда барлық системаның толық моменти ди оның бөлимлериниң моментлери болған ҳәм шамаларының қосындысынан турады. Келеси жақынласаўды әззи тәсирлесиўди есапқа алғанда менен шамаларының сақланыў нызамлары қатаң түрде орынланбайды. Бирақ, оларды анықлайтуғын менен санларының квадратлары системаның ҳалын жуўық түрде тәрийиплеў ушын жарамлы болған "жақсы" квант санлары болып қала береди. Егер мәселени көргизбели түрде, яғный классикалық көз-қарасларда қараса, онда бундай жақынласыўда менен лер мәнислери өзгермеген ҳалда бағытының әтирапында айланады.

Усындай системаларды қараўдың нәтийжесинде *моментлерди қосыў нызамы* ҳаққындағы мәселе туўылады. менен ниң берилген мәнислериндеги диң мүмкин болған мәнислери қандай? Моменттиң проекцияларының қосылыў нызамына келсек, мәселе айқын: қосындысынан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (31.1) |

келип шығады. Моментлердиң квадратлары ушын усындай әпиўайы қатнас жоқ ҳәм оларды "қосыў нызамынан" келтирип шығарыў ушын былайынша таллаймыз:

Егер физикалық шамалардың толық системасы сыпатында , , шамаларын сайлап алсақ, онда ҳәр бир ҳал , , , санларының мәнислери бойынша анықланады. Берилген , санларында , санлары сәйкес ҳәм мәниске ийе болады. Демек, бирдей болған , ге барлығы болып ()() ҳәр қыйлы ҳаллар сәйкес келеди. Бул ҳалдағы толқын функцияларын арқалы белгилеймиз.

Жоқарыда келтирилген төрт шаманың орнына , , шамаларын да сайлап алыўға болады. Бундай жағдайда ҳәр бир ҳал , санлары менен тәрийипленеди. Сәйкес толқын функцияларын арқалы белгилеймиз. Берилген , санларына, әлбетте, бурынғыдай ҳәр қыйлы ()() ҳал сәйкес келеди, яғный берилген , санларына санларының жубы ҳәр қыйлы болған ()() мәнислерге ийе болады. Бул мәнислерди төмендегидей таллаўлардың тийкарында анықлаўға болады.

Биз төрт дана , , шамалары менен бирге толық системаны пайда ететуғын басқа шамалардың да бир қатарының бар екенлигин атап өтемиз. Буннан кейинги таллаўларда бул шамалардың бир қатары ҳеш қандай әҳмийетке ийе емес ҳәм, сонлықтан, қысқалық ушын олар ҳаққында ҳеш нәрсе айтпаймыз ҳәм көрсетилген төрт шаманың толық системасы ҳаққында гәп етемиз.

менен ниң мүмкин болған ҳәр қыйлы мәнислерин қосып, сәйкес ниң мәнисин аламыз:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |
|  |  |  |

Биз шамасының ең мүмкин болған мәнисиниң екенлигин көремиз. Оған φ диң бир ҳалы сәйкес келеди (, мәнислериниң бир жубы). Сонлықтан, ψ ҳалларындағы ниң ең мүмкин болған мәниси, усыған сәйкес диң мүмкин болған мәниси болып табылады. Буннан кейин болған еки φ ҳалы бар. Демек, ниң усы мәниси менен еки ψ ҳалы болады. Олардың бири ҳалы (ҳәм ), екиншиси ҳалы (бул жағдайда ). ҳалы ушын ҳәр қыйлы болған үш φ ҳалы болады. Бул , мәнисилери менен бир қатарда мәнисиниң де мүмкин екенлигин көрсетеди.

Бул таллаўларды ниң мәниси 1 ге кемейгенде берилген ниң мәнисине ийе ҳаллардың саны 1 ге көбейгенше тап усындай түрде даўам етиўге болады. Бул таллаўдың ниң мәнисиниң ге жеткенше даўам етиўге болатуғынлығын аңғарыў аңсат. шамасының буннан кейинги кемейиўлеринде ҳаллардың саны ге тең болыў менен қалып ( теңсизлиги орынлы болса), үлкейиўди қояды. Бул шамасының диң мүмкин болған ең киши мәниси екенлигин аңғартады.

Солай етип биз берилген ҳәм ниң мәнислеринде шамасы мынадай мәнислерге ийе болады деген жуўмаққа келемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (31.2) |

Ҳәр қыйлы мәнислердиң саны ( теңсизлиги орынлы деп есаплағанда). санларының ҳәр қыйлы мәнислериниң ҳақыйқатында да шамасына тең болатуғынлығын аңсат тексерип көриўге болады. Бундай жағдайда (31.2)-аңлатпадан диң мүмкин болған мәнислериниң ҳәр бирине тек бир ҳалдан сәйкес келетуғынлығын атап өтиў әҳмийетли (егер берилген деги санының дана ҳәр қыйлы мәнислериниң бар екенлигине итибар бермеген жағдайда).

Бул нәтийжени *векторлық модель* деп аталатуғын моделдиң жәрдеминде сүўретлеўге болады. Егер узынлықлары менен ге тең болған ҳәм векторларын киргизсе, онда диң мәнислери ҳәм векторларын векторлық қосқанда алынатуғын узынлығы пүтин санға тең векторы түринде сүўретленеди. Ең үлкен болған мәниси ҳәм векторлары өз-ара параллель жайласқан жағдайда, ал ең киши болған мәниси ҳәм векторлары өз-ара антипараллель жайласқан жағдайда алынады.

менен моментлериниң ҳәм толық момент диң белгили мәнислерине ийк ҳалларда белгили мәнислерге , скаляр көбеймелери де белгили мәнислерге ийе болады. Бул мәнислерди аңсат табыўға болады. ни есаплаў ушын теңлигин жазамыз ямаса квадратқа көтерип, айырым ағзаларды теңликтиң екинши тәрепинен көширип

Теңликтиң оң бөлиминдеги операторларды олардың меншикли мәнислери менен алмастырып, теңликтиң шеп тәрепиндеги оператордың меншикли мәнисине ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (31.3) |

Тап усындай жоллар менен мынаны табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (31.4) |

**Мәселелер**

**1-мәселе**. Шексиз киши айланыўлар.

скаляр функциясының шексиз киши айланыўдағы түрлениўиниң қозғалыс муғдары моментиниң операторы арқалы аңсат аңғартылатуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими**. Мейли, координаталар системасының бурылыўы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (470.1a) |

формуласы менен тәрийипленеди. менен үш ядролы матрицалар.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (470.1b)) |

Бул аңлатпаға қатнасатуғын шексиз киши шамалары үш көшерлериниң дөгерегиндеги бурылыў мүйешлерин береди. Кери түрлендириўди барлық үш шамаларының белгилерин өзгертиў, ямаса транспонирленген матрицасына өтиў жолы менен алынады. Демек,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (470.1c) |

(470.1a)- (470.1c) түрлендириўлериниң нәтийжесинде функциясы жаңа аргументлердиң функциясына өтеди. Бул функцияны Тейлор қатарына жайыўды пайдаланып ески координаталары арқалы аңғартыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (470.3) |

Сонлықтан, (470.2)-аңлатпаны былайынша жазыўға болады:

Бирдей ларға ийе ағзаларды жыйнап ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (470.4) |

ҳ.т.б. импульс моменти операторын киргизип (цикллық орын алмастырыў), мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (470.5) |

Бул теңликте арқалы қураўшылары болған вектор белгиленген. (470.5)-аңлатпадағы соңғы ағза шексиз киши болғанлықтан, биз бул жерде менен арасындағы айырманы есапқа алмаймыз, сонлықтан (470.5)-аңлатпаға басқа форма бериўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (470.6) |

Усы ўақытқа шекем биз функциясының скаляр екенлигинен, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (470.7) |

айланыўларына қарата инвариантлығынан пайдаландық. Соңғы теңлик (470.6)-қатнасқа киретуғын барлық шамаларды арқалы белгилеўге мүмкиншилик береди. Сонлықтан оның ең ақырғы түри былайынша жазылады:

**2-мәселе**. Сфералық координаталарындағы импульс моменти.

Буннан алдыңғы мәселениң нәтийжелеринен пайдаланып, импульс моментиниң қураўшыларын сфералық координаталар арқалы аңлатыў керек.

**Шешими**. (470.5) теңлигиндеги тың орнына ди жазамыз. Сонлықтан мынадай теңликти аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.1) |

Ең дәслеп z көшердиң дөгерегиндеги бурыўды әмелге асырамыз. Бундай бурыўға

Екинши тәрептен, (480.1)-формулаға сәйкес мынаған ийе боламыз:

Бул аңлатпаларды салыстырыў

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.2) |

формуласын береди.

Енди координаталар системасын көшериниң дөгерегиндеги мүйешке бурыўды қараймыз. Бул жағдайда да, бурынғыдай теңлиги орынланады, бирақ сфералық мүйешлер θ менен φ лердиң екеўи де өзгереди:

(470.1a)- ҳәм (470.1b)-аңлатпаларға сәйкес, биз қарап атырған бурыў туўры мүйешли координаталарда былайынша жазылады:

Биринши тәрептен,

ҳәм

ал, екинши тәрептен

теңликлери орынлы болғанлықтан, бул аңлатпаларды салыстырыўдан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.3) |

теңлиги келип шығады.

Тап усындай жоллар менен

ҳәм

аңлатпаларын салыстырып

ҳәм δθ ушын (480.3)-формуланы есапқа алып,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.4) |

аңлатпасына ийе боламыз. (480.3)- ҳәм (480.4)-формулаларды пайдаланып, Тейлор қатарына жайыўды былайынша жазамыз:

(480.1)-қатнастан

формуласы алынады. Бул еки аңлатпаны салыстырыў мынаны береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.5) |

Ең ақырында, координаталар системасын көшериниң дөгерегинде мүйешине бурыўды қараймыз. θ ҳәм φ мүйешлериниң өсимлерин бул жағдайда да δθ ҳәм δφ арқалы белгилеймиз. Енди олар

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.6a) |

ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.6b) |

(480.6b)-формуладан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.7) |

ал, (480.6a)-формуладан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.8) |

аңлатпаларын аламыз. Солай етип,

теңлигине ийе боламыз. Бирақ, бул соңғы аңлатпаның (480.1)-аңлатпадан келип шығатуғын

аңлатпасына сәйкес келиўи керек. Сонлықтан,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.9) |

теңлиги алынады. (480.5)- ҳәм (480.9) қураўшыларының орнына олардың комбинацияларын пайдаланған қолайлы:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (480.10a) |
|  | (480.10b) |

(480.2)-, (480.5)- ҳәм (480.9)-аңлатпалар менен қойылған мәселе толық шешиледи.

**3-мәселе**. Импульс моменти ҳәм Лаплас операторы.

операторын сфералық координаталарда жазыңыз. Алынған аңлатпаны Лаплас операторы ҳәм кинетикалық энергия операторы менен салыстырыңыз.

**Шешими**. (480.10a)- ҳәм (480.10b)-формулаларының жәрдеминде анықланған ҳәм операторларын пайдаланып,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (490.1) |

аңлатпасын жазыў мүмкин. көбеймеси мынаған тең:

Буннан кейин экспонентаны жоқ етиўге мүмкиншилик беретуғын

орын алмастырып қойыў қатнасын пайдаланып ҳәм

теңлигиниң орынлы екенлигин нәзерде тутып,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (490.2) |

аңлатпасына келемиз.

Тап усындай жоллар менен операторын да таба аламыз. Ол ҳәзир ғана алынған аңлатпадан соңғы ағзаның белгиси бойынша айрылады. Солай етип, (490.1)-формула енди

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (490.3) |

аңлатпаларын береди. Бул соңғы жазыўда квадрат қаўсырманың ишиндеги аңлатпа Лаплас операторының мүйешлик бөлимине сәйкес келеди. Сонлықтан, мынадай аңлатпаны жазыў мүмкин:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (490.4) |

Классикалық механикадан кинетикалық энергияны былайынша жазыўға болады:

Бул кинетикалық энергияға

операторы сәйкес келетуғын болғанлықтан (490.4)-теңлиги мынадай қатнасқа алып келеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (490.5) |

Бул аңлатпа операторының көбейтиўшиге шекемги дәлликте Лаплас операторының радиаллық бөлимине сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Классикалық радиаллық импульске сәйкес келетуғын операторы енди (490.5)-аңлатпадан факторизация жолы менен алынады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (490.6) |

Ҳақыйқатында, еки рет пайдаланылған соңғы аңлатпа (490.5)-теңликтиң оң тәрепин береди. операторының эрмитлик екенлигин, оның да, координата диң де каноникалық орынларын алмастырып қойыў қатнасларын қанаатландыратуғынлығын көрсетиўге болады.

**БАП. ҮШ ӨЛШЕМЛИ МӘСЕЛЕЛЕР**

**§ 43. Үш өлшемли мәселелерге улыўмалық кирисиў**

Бул бапта биз үш өлшемли потенциалда қозғалатуғын спинге ийе емес бөлекшелер ушын жазылған Шрёдингер теңлемесиниң қалайынша шешилетуғынлығын қараймыз. Дәслеп биз декарт координаталарында бөлекшениң ҳәр қыйлы потенциаллардағы қозғалысларын үйренемиз: еркин бөлекшениң, туўры мүйешли үш өлшемли потенциалдағы ҳәм гармоникалық осциллятордың потенциалындағы бөлекшениң. Бул изертлеўлердиң барлығы жоқарыда келтирилген бир өлшемли мәселелердиң әпиўайы түрдеги улыўмаластырылыяы болып табылады. Бирақ, бир өлшемли мәселелердегиге салыстырғанда, үш өлшемли мәселелер потенциал қандай да бир симметрияға ийе болғанда азғыныўдың пайда болыўын демонстрациялайды. Екиншиден, сфералық координаталарды пайдаланыў жолы менен биз сфералық симметрияға ийе болған потенциаллардағы бөлекшелердиң қозғалысларын үйренемиз. Улыўмалық мәселелерди шешкеннен кейин биз алған билимлеримизди еркин бөлекшелер менен гармоникалық осциллятордан баслап водород атомына шекемги мәселелерди шешиў ушын пайдаланамыз. Биз бул бапты Зееман эффектине алып келетуғын магнит майданына қойылған атомлардың энергиясының қәддилерин есаплаў менен жуўмақлаймыз.

**Декарт координаталарындағы үш өлшемли мәселелер. Улыўмалық усыл. Өзгериўшилерди ажыратыў**. Үш өлшемли потенциалдың тәсиринде қозғалатуғын массасы болған бөлекше ушын ўақыттан ғәрезли Шрёдингер теңлемеси мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.1)) |

- лапласиан, . Биз жоқарыда ўақыттан ғәрезсиз болған потенциалда қозғалатуғын бөлекшениң толқын функциясының кеңисликлик ҳәм ўақытлық қураўшылардың көбеймеси түринде жазыўға болатуғынлығын көрдик.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.2) |

Бул аңлатпада арқалы ўақыттан ғәрезсиз Шрёдингер теңлемесиниң шешими белгиленген. Бундай теңлемени былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.3) |

Бул теңлемени түринде жазыў мүмкин. Әдетте, дара туўындылы бул дифференциаллық теңлемени шешиў қыйын. Бирақ, потенциалы бир биринен ғәрезсиз болған бир өлшемли қосылыўшыдан туратуғын болса (бул қосылыўшыларды вектор менен шатастырыўға болмайды), онда теңлемени шешиў аңсатласады. Бундай жағдайда потенциал былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.4) |

Бундай жағдайда (n6.3)-теңлемени биз *өзгериўшилерди ажыратыў* усылының жәрдеминде шеше аламыз. Бул усыл үш өлшемли Шрёдингер теңлемесин бир биринен ғәрезсиз болған үш бир өлшемли (n6.3)-Шрёдингер теңлемесине ажыратыўдан ибарат. Усындай үш теңлемениң қалайынша алынатуғынлығы менен танысайық. (n6.3)-теңлемениң (n 6.4)-аңлатпа менен биргеликте

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.5) |

түринде жазылатуғынлығына итибар берейик. Бул теңлемедеги лер былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.6) |

потенциалы бир биринен ғәрезсиз болған үш ағзаға бөлинетуғын болғанлықтан биз толқын функциясын да ҳәр қайсысы бир өзгериўшиниң функциясы болған үш функцияның көбеймеси түринде жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.7) |

(n6.7) ни (n6.5) ке қойып ҳәм көбеймесине бөлип

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.8) |

Квадрат қаўсырмалардаңы аңлатпалардың ҳәр бири өзгериўшилериниң тек биреўинен ғәрезли ҳәм усы үш аңлатпаның қосындысы константасына тең болғанлықтан ҳәр бир аңлатпаның өзи де константа болып, олардың үшеўиниң қосындысы константасына тең болады. Мысалы, аңлатпаның тан ғәрезли болған бөлими былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.9) |

, функциялары ушын да тап усындай аңлатпаларды жазамыз. Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.10) |

теңлигиниң орынланыўы керек. *Өзиниң мәниси бойынша өзгериўшилерди ажыратыў усылы үш өлшемли (n6.3)-Шрёдингер теңлемесин (n6.9) түриндеги үш бир өлшемли теңлемеге ажыратыўдан ибарат*.

**§ 44. Еркин бөлекше**

Еркин бөлекше болған ең әпиўайы жағдайда Шрёдингер теңлемеси ҳәм теңликлери орын алатуғын үш теңлемеге алып келинеди. Олардың өзгериўшисине ийе болған бири

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.11) |

түринде жазылады. Бул теңлемеде ҳәм ). Бир өлшемли мәселелерди қараўдың барысында (n6.11)-теңлемениң нормировкаланған шешимлериниң былайынша жазылатуғынлығын үйрендик:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.12) |

Солай етип (n6.3)- үш өлшемли Шрёдингер теңлемесиниң шешими мынадай формуланың жәрдеминде бериледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.13) |

Бул аңлатпада арқалы бөлекшениң толқын векторы, арқалы бөлекше турған орынның радиус-векторы белгиленген. Ал, энергиясына келетуғын болсақ, онда ол үш бир өлшемли теңлемелердиң меншикли мәнислериниң қосындысынан турады [(n6.11)-теңлеме]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.14) |

Бул теңликтен тек энергияның шамасынан ғәрезли екенлиги көринип тур. ның ҳәр қыйлы қураўшылары болған лер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.15) |

шәртине бағынады ҳәм олар (n6.13) меншикли функцияларын энергияны өзгертпей қалдырып генерациялайды. Өзиниң сан мәнисин сақлайтуғын векторының бағытларының саны шексиз көп болғанлықтан, еркин бөлекшениң энергиясы шексиз көп азғынған болады.

Ўақыттан ғәрезли болған (n6.1)-Шрёдингер теңлемесиниң шешимлери (n6.13)-аңлатпаны (n6.2)-аңлатпаға қойыў жолы менен алынған екенлигине итибар бериў керек ( қатнасының орынлы екенлигин умытпаў керек):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.16) |

(n6.16)-аңлатпа толқын векторы менен тарқалатуғын толқынды береди. Бул толқын функциясының ортонормировкаланыў шәрти

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.17) |

Бул теңликлерди Дирак белгилеўлеринде былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.18) |

Еркин бөлекшени толқын пакети түринде көрсетиўдиң мүмкин екенлигин еске түсиремиз (ҳәр қыйлы толқын векторларына сәйкес келетуғын толқын функцияларының суперпозициясы):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.19) |

Бул аңлатпада арқалы толқын функциясының Фурье-түрлендирилиўи белгиленген:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.20) |

Классикалық көз-қараслар бойынша бөлекшениң орнының пакеттиң орайына сәйкес келетуғынлығын умытпаў керек.

**§ 45. Потенциал қуты**

Биз таллаўларымызды туўры мүйешли потенциал қутыдан баслаймыз. Ол симметрияға ийе емес. Буннан кейин куб формасына ийе потенциалды қараймыз. Онда көшерлери бир бирине эквивалент.

**Туўры мүйешли қуты тәризли потенциал**. Қабырғаларының узынлығы болған қутыдағы массасы болған спини жоқ бөлекшени қараймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.21) |

(n6.4)-санлы теңлигинен

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.22) |

аңлатпасына ийе боламыз ҳәм пенен лер ушын да усындай теңликлерди жаза аламыз. толқын функциясының қутының дийўалларында нолге тең болыўы керек. Биз бундай потенциал ушын шешимниң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.23) |

түринде, ал сәйкес келетуғын меншикли мәнислердиң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.24) |

түринде жазылатуғынлығын көрдик. Бул аңлатпалардан биз нормировкаланған үш өлшемли меншикли функциялар менен оларға сәйкес келетуғын энергияларды жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.25) |
|  | (n6.26) |

6.1-сүўрет. Кублық потенциалы ушын энергия қәддилери ҳәм олардың азғыныўлары

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | () |  |
| 3 | (111) | 1 |
| 6 | (211), (121), (112) | 3 |
| 9 | (221), (212), (122) | 3 |
| 11 | (311), (131), (113) | 3 |
| 12 | (222) | 1 |
| 14 | (321), (312), (123), (132), (213), (231) | 6 |

**Кублық формаға ийе потенциал**. Тәреплериниң узынлығы ге тең куб тәризли қуты болған әпиўайы жағдайда энергия ушын жазылған аңлатпаны (n6.26) дан келтирип шығарыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.27) |

теңлиги орынланған жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.28) |

формуласын аламыз. Биз жоқарыда шамасының бир өлшемли қутыдағы бөлекшениң ноллик ноқатының энергиясы екенлигин көрсеткен едик. Демек, үш өлшемли қутыдағы ноллик ноқаттың энергиясы бир өлшемли қутыдағы ноллик ноқаттың энергиясынан үш есе үлкен болады екен. 3 көбейтиўшиси бөлекшени барлық өлшемлерде симметриялы түрде шеклеўдиң салдарынан алынады.

Биринши қозған ҳал () квант санларының квант санларының мүмкин болған үш түрли жыйнағына ийе () = (211), (121), (112). Олар ҳәр қыйлы болған үш ҳалға сәйкес келеди: , ҳәм . Бул жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.29) |

ҳәм функциялары да тап функциясына сәйкес түрге ийе. Бундай ҳалларға сәйкес келетуғын энергиялар:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.30) |

Солай етип, биринши қозған ҳал үш қайтара азғынған ҳал болып шықты.

Мәселеде симметрия болған жағдайда ғана азғыныў орын алады екен. Үш өлшемниң барлығы эквивалент болғанлықтан кублық қутадағы бөлекше мысалындағы симметрия жоқары. Туўры мүйешли қуты ушын азғыныўдың алынбағанлығына, себеби сол жағдайда өлшемлердиң бир бири менен эквивалент емес екенлигине итибар бериў керек. Соның менен бирге бир өлшемли мәселелерди қарағанымызда азғыныў болмаған ҳәм бундай бир өлшемли мәселелер тек бир квант санының пайда болыўына алып келетуғын еди.

Екинши қозған ҳал да ҳәр қыйлы болған үш ҳалдан турады. Демек, он үш қайтара азғынған. Олардың энергиялары ге тең: .

Энергия спектри 6.1-кестеде көрсетилген. Бул кестеде ҳәр бир -қәдди өзиниң энергиясы, квант санлары ҳәм азғыныў менен тәрийипленеди.

**§ 46. Гармоникалық осциллятор**

Биз дәслеп симметрияға ийе емес анизотроплық осциллятордан баслаймыз, буннан кейин көшерлери эквивалент болған изотроп осцилляторды қараймыз.

Енди үш өлшемли анизотроп осцилляторлық

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.31) |

потенциалында қозғалатуғын массасы болған бөлекшени қараймыз. Бундай потенциал ушын жазылған Шрёдингер теңлемеси (n6.9)-аңлатпаға сәйкес үш теңлемеге ажыралады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.32) |

Тап усындай теңлемелерди ҳәм ушын да жазыўға болады. (n6.31)-потенциалға сәйкес келетуғын меншикли мәнислер:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.33) |

түринде жазылады. Бул формулада Сәйкес стационар ҳаллар

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.34) |

функциялары менен тәрийипленеди. Бул формуладағы , ҳәм лер гармоникалық осциллятордың бир өлшемли толқын функциялары.

Бул ҳаллар азғынған емес, себеби (n6.31)-потенциал симметрияға ийе емес (ол анизотроп).

**Изотроп гармоникалық осциллятор**. Енди изотроп гармоникалық осциллятордың потенциалын қараймыз. Оның энергиясының меншикли мәнислерин (n6.33)-аңлатпадан шамаларын пайдаланып табыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.35) |

Энергия суммасынан ғәрезли болғанлықтан, суммасы бирдей болған квант санларының қәлеген жыйнағы теңдей энергияларға ийе болған ҳалларды береди.

Энергиясы

шамасына тең тийкарғы ҳал азғынған емес. Биринши қозған ҳал үш қайтара азғынғын. Себеби , ҳәм ҳалларына бирдей болған энергиясы сәйкес келеди. Екинши қозған ҳал алты қайтара азғынған, оның энергиясы ге тең.

Улыўма айтқанда, биз -қозған ҳалдың азғыныўы болған шамасының

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.36) |

шамасына тең екенлигин аңсат табыўға болады. Бул теңликте .

6.2-кесте. Изотроп гармоникалық осциллятор ушын

энергия қәддилери ҳәм олардың азғыныўы

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |
| 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), (021),  (120), (102), (012),  (111) | 10 |

**§ 47. Орайлық потенциал**

Биз бул параграфта сфералық симметрияға ийе потенциалда қозғалатуғын массасы болған бөлекше ушын жазылған Шрёдингер теңлемесиниң қурылысын үйренемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.41) |

Бундай потенциалды орайлық потенциал деп те атайды. Бул параграфта арқалы магнит квант санын белгилеймиз. Сонлықтан, бөлекшениң массасын арқалы белгилеймиз.

Импульси ҳәм орны радиус-векторы менен усы бөлекше ушын ўақыттан ғәрезсиз болған Шрёдингер теңлемеси мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.42) |

Гамильтониан сфералық симметрияға ийе болғанлықтан сфералық координаталарды пайдаланамыз. Олар декарт координаталары менен былайынша байланысқан:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.43) |

лапласиан радиаллық ҳәм мүйешлик бөлимлерине былайынша ажыралады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.44) |

Бул теңликлерде арқалы орбиталық момент белгиленген. Оны

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.45) |

формуласының жәрдеминде анықлайды. Сфералық координаталарда Шрёдингер теңлемеси мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.46) |

Бул теңлемениң биринши бөлими *радиаллық кинетикалық энергия* деп қараўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.47) |

Себеби, радиаллық импульс операторы мынадай эрмитлик формада бериледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.48) |

Мына жағдайға айрықша итибар беремиз: бөлекше ийелеген орын операторы менен радиаллық импульс операторы арасындағы коммутатордың түрине ийе болатуғынын көрсетиўге болады.

(n6.46)-аңлатпадағы екинши ағза болған ағзасын айланыўдың кинетикалық энергиясы менен теңлсетириўге болады. Себеби бул ағза бөлекшениң координата басының дөгерегиндеги "таза" айланыўының нәтийжесинде жүзеге келеди (яғный радиаллық өзгериўши турақлы болып қалғанда, - бөлекшениң координата басына салыстырғандағы инерция моменти).

(n6.45)-аңлатпада көрсетилгениндей, енди шамасы r ден ғәрезсиз болғанлықтан, ол менен де, радиаллық кинетикалық энергия менен де, демек гамильтонианы менен де коммутацияланады. Усының менен бирге операторы операторы менен коммутацияланатуғын болғанлықтан, , ҳәм лер өз-ара коммутацияланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.49) |

Демек, ҳәм операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады екен. Буннан алдыңғы бапта биз менен операторларының бир ўақыттағы меншикли функцияларының сфералық функциялары менен берилетуғынлығын көрдик:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.50) |
|  | (n6.51) |

(n6.46)-гамильтониан радиаллық ҳәм мүйешлик бөлимлердиң қосындысы болғанлықтан, биз шешимлерди радиаллық ҳәм мүйешлик бөлимлердиң көбеймеси түринде излеймиз. Бул жағдайда мүйешлик бөлим сфералық гармоника болып табылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.52) |

Орайлық потенциалда қозғалатуғын системаның орбиталық мүйешлик моментиниң сақланатуғынлығына дыққат аўдарыў керек. Себеби, (n6.49)-аңлатпада көрсетилгениндей, ол гамильтониан менен коммутацияланады.

Радиаллық толқын функциясы еле табылған жоқ. квант саны тың меншикли мәнислерин идентификациялаў ушын киргизиледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.53) |

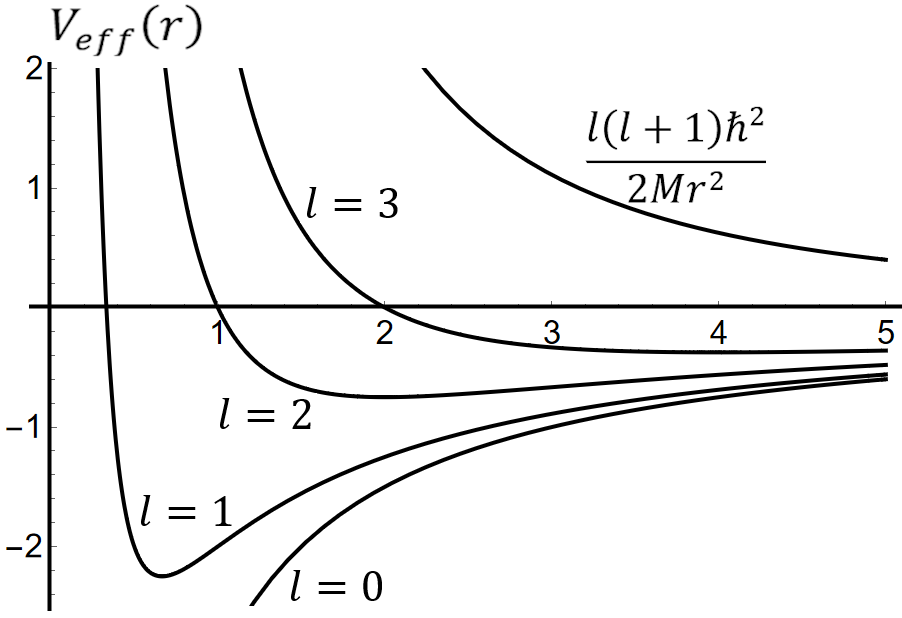
(n6.52)-аңлатпаны (n6.46)-аңлатпаға қойып ҳәм функциясының операторының меншикли функциясы екенлиги фактын пайдаланып, буннан кейин ге бөлип биз радиаллық ҳәм мүйешлик еркинлик дәрежелери бир биринен ажыратылған теңлемени аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.54) |

Биринши квадрат қаўсырманың ишиндеги ағзалар θ менен φ ден, ал екинши квадрат қаўсырманың ишиндеги ағзалар ден ғәрезли емес. Сонлықтан, олар өз алдына константалар болыўы ҳәм бул константалардың суммасының нолге тең болыўы керек. Екинши қаўсырма (n6.50)-аңлатпадан басқа ҳеш нәрсе емес, ол операторының меншикли мәнислери шамаларын анықлайтуғын теңлеме болып табылады. Бул орайлық потенциал ушын радиаллық теңлеме деп аталатуғын теңлемениң пайда болыўына алып келеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.55) |

Системаның энергия қәддилерин беретуғын (n6.55)-теңлемениң магнит квант саны нен ғәрезсиз екенлигине дыққат аўдарыў керек. Солай етип, энергия қайтара квантланған. Бул берилген энергияның берилген бир мәнисине сәйкес келетуғын квант саны ушын ҳәр қыйлы болған () дана меншикли функциялардың бар екенлиги менен байланыслы (яғный, , ). Бул азғыныў қәсийети орайлық потенциалларға тән.



6.1-сүўрет. мәнислерине сәйкес келетуғын эффективлик потенциалы. - орайлық тартыў потенциалы, - ийтериўши (орайдан қашыўшы) потенциал. Бул сүўретте

(n6.55)-теңлемениң r бойынша бир өлшемли структураға ийе екенлигине итибар бериў керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.56) |

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.57) |

Бул теңлемениң шешимлери системаның энергия қәддилерин анықлайды. толқын функциясы мынадай формула бойынша бериледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.58) |

Эффективлик потенциалын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.59) |

теңлиги бойынша есаплаймыз. Бул потенциал *эффективлик* ямаса *орайдан қашыўшы* потенциал сыпатында белгили. Бул аңлатпада -орайлық потенциал, ал потенциалын мүйешлик момент пенен байланыслы болған *ийтериўши* ямаса орайдан *қашыўшы потенциал* деп атайды. Бул потенциал бөлекшени орайдан сыртқа қарай ийтериўге тырысады. Кейинирек диң электрон менен ядроның арасындағы тартысыў күшиниң бар болыўының себебинен пайда болған кулонлық потенциал екенлиги көрсетиледи. (n6.57)-теңлемениң бир өлшемли теңлемениң структурасына ийе болса да, оның Шрёдингердиң бир өлшемли потенциалынан бир тийкарғы қәсийети бойынша айрылатуғынлығына итибар бериў керек: өзгериўшиси терис мәнислерге ийе бола алмайды, ол 0 менен тиң арасында өзгереди. Усыған байланыслы биз функциясының диң 0 ден ке шекемги барлық мәнислеринде шекли болыўын талап етиўимиз керек (айрықша теңлиги орынланған жағдайда). Бирақ, шекли болса, онда теңлиги орынланғанда функциясының нолге тең болыўы керек, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.60) |

Солай етип, (n6.57)-теңлемени меншикли мәнислерди табыў ушын арналған бир өлшемли мәселеге алып келиў ушын областында бөлекшениң потенциалы эффективлик потенциал менен бериледи, ал областында шексиз үлкен потенциал менен бериледи деп болжаў керек.

Меншикли мәнислерди табыў ушын арналған (n6.57)-теңлемениң байланысқан ҳалды тәрийиплеўи ушын потенциалының тартыўшы (яғный терис) болыўы керек. Ал, потенциалы болса ийтериўши потенциал болып табылады. 6.1-сүўретте диң үлкейиўи менен эффективлик потенциалының тереңлиги киширейетуғынлығы, ал оның минимумының координаталар басынан алысқа жылысатуғынлығы көринип тур. Бөлекше координаталар басынан қаншама алыста жайласқан болса, ол кемирек байланысқан болады. Бул бөлекшениң мүйешлик моментиниң үлкейиўи менен оның кем-кемнен кемирек байланысқан болатуғынлығын аңғартады.

Жуўмақ шығара келип, биз сфералық симметрияға ийе потенциаллар ушын (n6.46)-Шрёдингер теңлемесиниң ушын тривиаллық мүйешлик (n6.59)-теңлемеге ҳәм (n6.57)-бир өлшемли радиаллық теңлемеге өтетуғынлығын атап өтемиз.

**Ескертиў**.

Бөлекше орбиталық ҳәм спинлик еркинлик дәрежесине ийе болса, онда оның толық толқын функциясы болған функциясы кеңисликлик бөлим ҳәм спинлик бөлим лердиң көбеймесинен турады, . Орайлық майданда қозғалатуғын электронды қараған жағдайда оның ҳалын толық тәрийиплеў ушын квант санлары менен спин менен байланыслы болған төртинши квант саны керек болады: Демек

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.61) |

Спин кеңисликлик еркинлик дәрежелеринен ғәрезсиз болғанлықтан, спин операторы толқын функциясына тәсир етпейди, бирақ спинлик бөлим ға тәсир етеди. операторы болса тек кеңисликлик бөлимге ғана тәсир етеди.

**§ 48.** **Сфералық координаталардағы еркин бөлекше**

Буннан былай жоқарыда ислеп шығылған улыўмалық формализмди массасы ҳәм энергиясы болған еркин бөлекшени үйрениў ушын қолланамыз. ушын жазылған аңлатпада арқалы толқын саны белгиленген (.

Еркин бөлекшениң гамильтонианы түринде жазылады ҳәм ол ҳәм операторлары менен коммутацияланады. Еркин бөлекше ушын , сонлықтан еркин бөлекшениң гамильтонианы айланыўларға қарата инвариант. Бул жағдай еркин бөлекшени орайлық потенциал ушын дара жағдай сыпатында қараўға болатуғынлығын көрсетеди. Соның менен бирге биз толқын функциясының радиаллық ҳәм мүйешлик бөлимлериниң ажыратылатуғынлығын көрсеткен едик. Сонлықтан .

Еркин бөлекше ушын радиаллық теңлемени (n6.55)-теңлемеге теңлигин қойыў жолы менен алынады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.62) |

Бул теңлемени былайынша көширип жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.63) |

Бул теңлемеде .

6.3-кесте. Бессель менен Нейманның бир неше сфералық функциялары

|  |  |
| --- | --- |
| Бессель функциялары | Нейман функциялары |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

өзгериўшисин пайдаланып, биз бул теңлемени

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.64) |

теңлемесине алып келемиз. Бул теңлемеде . Бул дифференциаллық теңлеме Бесселдиң сфералық теңлемеси атамасы менен белгили. Бул теңлемениң улыўма шешими Бесселдиң сфералық функциясы менен Нейманның сфералық функциясының ғәрезсиз сызықлы комбинациясы түринде бериледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.65) |

Бул теңликтеги

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.66) |

Бессель менен Нейманның биринши бир неше сфералық функциялары 6.3-кестеде, ал олардың графиклери 6.2-сүўретте көрсетилген.

менен ди ρ ның дәрежели қатарына жайып, биз менен функцияларының ρ ның киши мәнислеринде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.67) |

киширейетуғынлығын ҳәм ның үлкен мәнислеринде

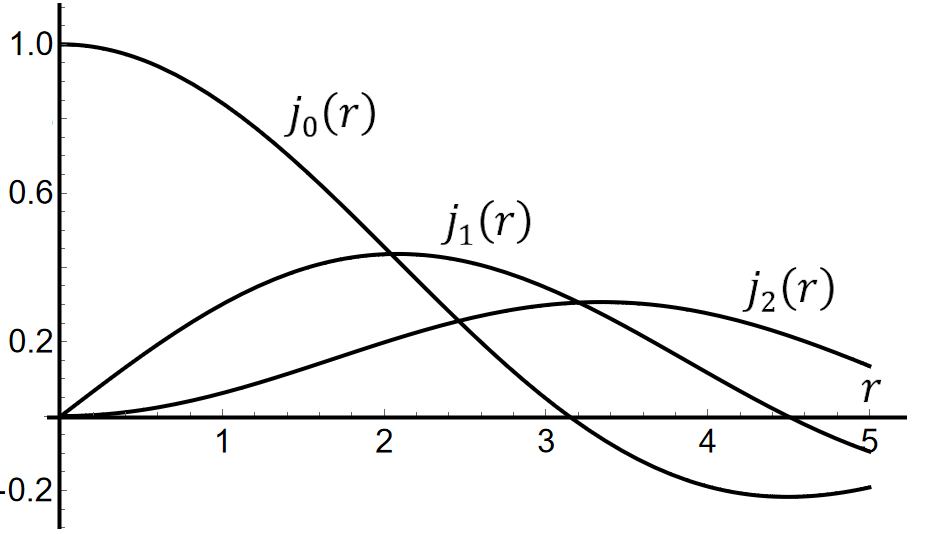
|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.68) |

үлкейетуғыны көринеди.

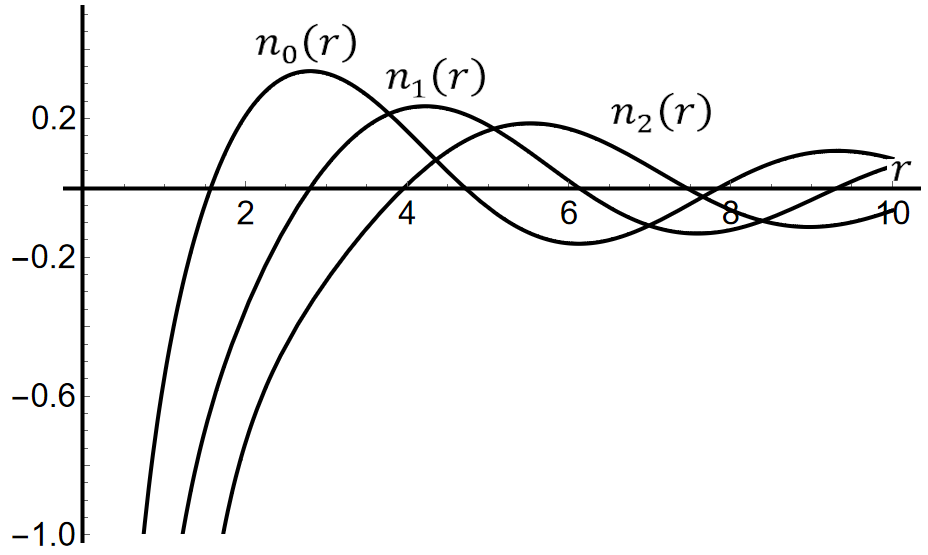
Нейман функциясы координата басында тарқалатуғын ҳәм толқын функциясы кеңисликтиң барлық ноқатларында шекли болғанлықтан функциясы мәселениң пайдаланылатуғын шешими бола алмайды. Демек, еркин бөлекшениң меншикли функцияларына тек Бесселдиң сфералық функциялары еркин бөлекшениң меншикли функцияларына үлес қоса алады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.69) |

Бул теңликте 6.2-сүўретте толқын функциясының амплитудасының диң үлкейиўи менен кем-кемнен киширейетуғынлығы көринип тур. Үлкен қашықлықларда толқын функциялары сфералық толқынлар менен көрсетиледи.



6.2a сүўрет. Бессель функцияларының Mathematica компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде дүзилген графиклери.



6.2б сүўрет. Нейман функцияларының Mathematica компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде дүзилген графиклери.

аңлатпасындағы индексиниң үзликсиз өзгеретуғынлығын аңғарамыз, сонлықтан еркин бөлекшениң энергия спектри азғынған. Бул жағдайдың жүзеге келиўи кеңисликтеги берилген ның барлық бағытларына энергияның бир мәнисиниң сәйкес келиўи менен байланыслы.

**Ескертиў**.

Биз еркин бөлекшени декарт ҳәм сфералық координатада үйрендик. Еки координаталар системасында да энергия бир формула менен берилетуғын болғанлықтан декарт координаталардағы толқын функциялары тегис болған толқын түринде [(n6.13)-аңлатпаға қараңыз], ал сфералық координаталарда [(n6.69)-аңлатпаға қараңыз] сфералық толқынлар түринде бериледи. Бирақ, биз толқын функцияларының еки жыйнағының эквивалент екенлигин көрсете аламыз. Себеби биз тегис толқынды сфералық толқынларының терминлеринде аңғарта аламыз. Дара жағдайда, биз тегис толқынды бирдей ға ийе, бирақ ҳәр қыйлы менен ге ийе болған сфералық ҳаллардың сызықлы комбинациясы түринде жүзеге келтире аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.70) |

Солай етип, мәселе қатарға жайыўдың коэффициентлерин табыўға алып келинеди екен. Мысалы, векторы көшери бойлап жататуғын болса ҳәм теңлиги орынланатуғын болса, онда биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.71) |

теңлигиниң орынлы екенлигин көрсете аламыз. Бул аңлатпада - Лежандр полиномы, соның менен бирге . толқын функциялары энергиясы ҳәм мүйешлик моменти болған еркин бөлекшени тәрийиплейди, бирақ олар сызықлы импульс ҳаққында ҳеш қандай информация бермейди ( толқын функциясы ҳәм операторлары беретуғын меншикли ҳал, бирақ беретуғын меншикли ҳал емес). Екинши тәрептен пенен операторларының меншикли функциясы болған (бирақ, ҳәм операторалырың меншикли функциясы емес) функциясы бөлекшениң мүйешлик моменти ҳаққындағы ҳеш қандай информацияны бермейди. Яғный, тегис толқынлар дәл анықланған сызықлы импульслерге ийе ҳалларды тәрийиплейди, бирақ белгили болған мүйешлик импульске ийе ҳалларды тәрийиплемейди. Керисинше, сфералық толқынлар дәл анықланған мүйешлик моментке ийе ҳалларды тәрийиплейди, ал дәл анықланған сызықлы импульслерге ийе ҳалларды жаман тәрийиплейди.

**§ 49. Сфералық шуқырдың потенциалы**

Енди потенциалы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.72) |

түрине ийе шуқырдағы массасы болған бөлекшени қараймыз. Енди ҳәм болған жағдай ларды өз алдына қараймыз.

6.3.3.1 болған жағдай.

Шуқырдың ишинде теңсизликли орынланған жағдайда биз қарап атырған бөлекше ушын Шрёдингер теңлемесин (n6.55)-аңлатпадан алыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.73) |

өзгериўшисин пайдаланамыз, бул теңликте . Бундай жағдайда (n6.73)-аңлатпа (n6.64)-Бессельдиң сфералық дифференциаллық теңлемесине алып келинеди. Еркин бөлекше болған жағдайдағыдай, радиаллық толқын функциясының барлық орынларда шекли болыўы керек ҳәм түриндеги сфералық Бессель функциялары түринде былайынша берилетуғынлығын көремиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.74) |

Бул аңлатпада арқалы нормализациялаўшы константа белгиленген.

теңсизлиги орынланатуғын жағдай. шеклеринде бөлекше еркин қозғалады. Биз қарап атырған бөлекше ушын (n6.62)-Шрёдингер теңлемеси былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.75) |

Бул жағдайда энергияның терис ямаса оң болыўына байланысты еки жағдай жүзеге келеди.

• Терис энергияға ийе ҳал байланысқан ҳалға, яғный энергияның дискрет спектрине сәйкес келеди. (n6.75)-теңлемениң улыўма шешими (n6.63)-шешимге уқсас, бирақ енди жормал сан болып табылады. Бундай жағдайда биз ны менен алмастырыўымыз керек, демек, шешимлер ) менен ) функцияларының сызықлы комбинацияларынан турады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.76) |

Бул теңлемеде - нормировкалаўшы константа, . Және бир ескертиў: менен функцияларының сызықлы комбинацияларын Ханкелдиң биринши әўлад ҳәм екинши әўлад сфералық функциялары түринде былайынша аңлатыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.77) |
|  | (n6.78) |

Хенкелдиң биринши әўлад сфералық функцияларының дәслепки бир нешеси былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.79) |

шегиндеги Ханкель функцияларының асимтоталық қәсийетин (n6.68)-аңлатпадан келтирип шығарыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.80) |

(n6.76)-аңлатпада сақлаў керек болған шешимлердиң барлық орынларда шекли болыўы керек. (n6.80)-теңлемеден тек Ханкелдиң биринши әўлад функциялары болған функцияларының диң үлкен мәнислеринде шекли болатуғынлығы ҳаққында жуўмақ шығарыўға болады ( функциясы диң үлкен мәнислеринде тарқалады). Демек, шуқырдан сыртта Ханкелдиң биринши әўлад функциялары түринде жазылған толқын функциялары ғана физикалық мәниске ийе болады екен [(n6.76)-аңлатпаға қараңыз]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.81) |

теңлиги орынланғандағы радиаллық толқын функциясының үзликсизлиги

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.82) |

болған ҳаллар ушын бул теңлеме мынадай қатнасқа алып келинеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.83) |

Бул үзликсизлик шәрти буннан алдыңғы бапта бир өлшемли туўры мүйешли потенциал шуқырды үйренгенде алынған трансцендент теңлемеге уқсас.

• Оң энергия орын алған жағдай үзликсиз спектр орын алатуғын жағдайға сәйкес келеди (байланыспаған ҳал ямаса шашыраў ҳалы). Бундай жағдайда шешимлер асимптоталық тербелмели болады. Шешим менен функцияларының сызықлы комбинациясынан турады. Бул аңлатпаларда Шешим барлық орынларда шекли болатуғын болғанлықтан, теңлиги сызықлы комбинацияның коэффициентлерин анықлайды. Бөлекше шексизликке шекем шекли кинетикалық энергиясы менен шексизликке кете алады.

**§ 50. Изотроп гармоникалық осциллятор**

Анизотроп гармоникалық осциллятордың потенциалы болған

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.84) |

потенциалда қозғалатуғын массасы болған бөлекше ушын Шрёдингер теңлемеси былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.85) |

Биз шешимлердиң асимптоталық шеклердеги қәсийетлерин үйрениўден кейин бул теңлемени шешемиз ( диң жүдә үлкен ҳәм жүдә киши мәнислериндеги). Биринши тәрептен шегинде менен ағзалары ағзасына салыстырғанда жүдә киши болады. Демек, шегинде (n6.85)-теңлеме

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.86) |

теңлемесине айланады. Бул теңлемениң шешими түрине ийе болады. Екинши тәрептен, шегинде ағзасы ағзасына салыстырғанда жүдә киши болады, демек (n6.85)-теңлемениң шешиминиң асимптоталық формасы былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.87) |

Бул теңлеме шешиминиң алыныўына мүмкиншилик береди. (n6.86)- ҳәм (n6.87)-теңлемелерин бириктирип, биз (n6.85) диң шешимлерин

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.88) |

түринде жаза аламыз. Бул шешимди арқалы диң функциясы белгиленген. Бул аңлатпаны (n6.85) ке қойып, биз ушын теңлемеге ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.89) |

Бул теңлемениң шешимин

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.90) |

түринде излейик. Бул функцияны (n6.89)-теңлемеге қойып, мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.91) |

Өз гезегинде бул теңлеме мынадай теңлемеге алып келинеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.92) |

Бул теңлемениң орынланыўы ушын диң ҳәр қыйлы коэффициентлериниң алдындағы коэффициентлердиң ҳәр қайсысының өз алдына нолге айланыўы керек. Мысалы, болған жағдайдағы ниң алдындағы коэффициенти ҳақыйқатында да нолге тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.93) |

Бул теңлемениң орынланыўы ушын диң нолге тең болыўы шәрт емес. (n6.92) деги диң алдында турған коэффициент ге сәйкес келеди. Бул коэффициенттиң нолге тең болыўы ушын бизиң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.94) |

теңлигине ийе болыўымыз керек. квант саны пүтин оң болғанлықтан нолге тең бола алмайды. Сонлықтан санының нолге тең болыўы керек.

ниң алдындағы коэффициент

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.95) |

Бул теңлеме мынадай рекуррентли теңлемеге алып келеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.96) |

Бул рекуррентли формула ниң тақ мәнислерине сәйкес келетуғын коэффициентлериниң деп баслап нолге тең болатуғынлығын көрсетеди [(n6.94)-аңлатпаға қараңыз]. Демек, функциясының диң тек жуп дәрежелерге ийе болатуғынлығын көремиз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.97) |

Бул аңлатпада коэффициентлериниң барлығы ( ден басқасы) ге пропорционал екен.

Енди шегинде функциясының тарқалатуғынлығына итибар беремиз. Себеби ол өзин асимптоталық жақтан функциясына уқсас. Шекли шешимди алыў ушын (n6.97)-қатардың тың максималлық дәрежесинде үзилиўин талап етиўимиз керек. Демек, қатардың полиномиаллық қатар болыўы керек. Оның ушын ниң нолге тең болыўы керек. Солай етип, рекуррентли (n6.96)-формулаға мәнисин қойып ҳәм екенлигин есапқа алып биз дәрҳәл

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.98) |

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.99) |

квантланыў шәртин аламыз. Бул аңлатпаларда саны жуп [(n6.97)-аңлатпаға қараңыз]. санын арқалы белгилеп (), биз кейинги аңлатпаны былайынша көширип жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.100) |

Бул аңлатпада . Энергиясы

шамасына тең тийкарғы ҳал азғынған, ал биринши қозған ҳал үш қайтара, ал екинши қозған ҳал алты қайтара азғынған (6.4-кесте). -қәддиниң неше қайтара азғынған екенлиги төменги аңлатпада берилген:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.101) |

Бул аңлатпа изотроп гармоникалық осциллятор ушын декарт координаталарда алынған (n6.36)-аңлатпаға сәйкес келеди. Ең ақырында радиаллық толқын функциясы түринде аңлатылады, бул теңликте функциясы (n6.88) де көрсетилген, болса тәртибиндеги көп ағзалы болып табылады. Изотроп гармоникалық осциллятор ушын толық толқын функциясы былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.102) |

Бул теңликлердеги тек жуп ямаса тек тақ мәнислерди қабыл етеди. Мысалы, тийкарғы ге сәйкес келеди. Оның толқын функциясы былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.103) |

Биринши, екинши ҳәм үшинши қозған ҳаллардың -конфигурациялары былайынша анықланады: Биринши қозған ҳал үш азғынған ҳал сәйкес келеди: . Екинши қозған ҳал 6 азғынған ҳалға ийе: ҳәм . Үшинши қозған ҳал 10 азғынған ҳалға ийе: . Бул толқын функциясының айырымлары төмендегидей формулалар менен бериледи:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | (n6.104) | | | |
|  | | (n6.105) | |
|  | | | (n6.106) |

6.4-кесте. Изотроп гармоникалық осциллятор ушын

энергия қәддилери менен азғыныў

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |  |
| 0 |  |  | 0 | 1 |
| 1 |  | 0 1 |  | 3 |
| 2 |  | 1 0  0 2 | 0 | 6 |
| 3 |  | 1 1  0 3 |  | 10 |

**§ 51. Водород атомы**

Водород атомы электрон менен протоннан турады. Әпиўайылық ушын биз олардың өз көшериниң дөгерегинде айланыўын есапқа алмаймыз. Бундай жағдайда толқын функциясы алты координатадан ғәрезли болады: ҳәм . Бул аңлатпаларда менен арқалы электрон менен протонның радиус-векторлары белгиленген. Толқын функциясының итималлықлық интерпретациясына сәйкес, шамасы ўақыт моментинде электрон менен протонның турған орынларын бир ўақытта өлшеў электронның көлеминде, ал протонның көлеминде болыўының итималлығын береди. Водород атомы ушын ўақыттан ғәрезли болған Шрёдингер теңлемеси былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.112) |

Бул аңлатпада менен лар арқалы сәйкес протон менен электрон ушын жазылған лапласианлар белгилерген. Олар былайынша жазылады:

ҳәм

арқалы электрон менен протон арасындағы потенциал (тәсирлесиўге сәйкес келетуғын потенциаллық энергия) белгиленген. Бул өз-ара тәсирлесиў электрон менен протонның арасындағы қашықлықтан ғана ғәрезли болып, кулонлық потенциалға сәйкес келеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.113) |

**Ескертиў**: Биз китапта кулонлық потенциал ушын CGS системасының бирликлеринен пайдаланамыз. Бундай жағдайда потенциалды түринде жазамыз. Ал, MKS системасында оны түринде жазады.

|  |  |
| --- | --- |
| - сүўрет. Водород атомы. |  |

ўақыттан ғәрезсиз болғанлықтан, (n6.112) теңлемениң шешимлери стационар болады. Демек, оларды былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.114) |

Бул теңлемеде - электрон-протонлық системаның толық энергиясы. Бул аңлатпаны (n6.112)-теңлемеге қойып, биз водород атомы ушын жазылған ўақыттан ғәрезсиз болған Шрёдингер теңлемесин аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.115) |

**§ 52. Массалар орайының қозғалысын айырып алыў**

потенциалы электрон менен протонның арасындағы салыстырмалы қашықлықтан ғана ғәрезли болғанлықтан координаталарының орнына (электрон менен протонның турған орынларының радиус-векторлары) массалар орайының координаталарын ҳәм протон менен электронның салыстырмалы координаталары ны пайдаланған мақсетке муўапық келеди. лардан , лерге түрлендириў былайынша бериледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.116) |

Бизлер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.117) |

лапласианларының

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.118) |

аңлатпасы бойынша байланысқан екенлигин билемиз. Бул теңликлердеги

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.) |

улыўмалық ҳәм келтирилген массалар болып табылады. Ўақыттан ғәрезсиз болған Шрёдингер теңлемеси (n6.115) енди былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.120) |

Бул теңликте . Енди бул теңлемени өзгериўшилерди ажыратыў жолы менен шешейик. Демек, бул жағдайда теңлемени биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.121) |

түринде шешемиз. Бул аңлатпада ҳәм массалар орайы менен салыстырмалы қозғалыслардың толқын функциялары. Бул толқын функцияларын (n6.120)-теңлемеге қойып ҳәм көбеймесине бөлип, мынадай теңлемеге ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.122) |

Биринши қаўсырма тек ден, ал екиншиси тек ден ғәрезли. менен векторлары бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан, (n6.122)-аңлатпаның шеп тәрепиндеги еки аңлатпаны бир биринен сәйкес турақлының жәрдеминде ажыратыўға болады. Солай етип, биз (n6.122)-теңлемени төмендегидей еки теңлемеге алып келе аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.123) |
|  | (n6.124) |

Бул теңлемелерде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.125) |

Солай етип, биз ҳәм өзгериўшилерине ийе болған (n6.120)-Шрёдингер теңлемесин (n6.123)- ҳәм (n6.124)-түрдеги ҳәр қайсысы өзиниң ишине тек бир өзгериўшини алатуғын еки теңлемеге айландырдық. (n6.123)-теңлемениң массалар орайының массасы болған еркин бөлекшедей болып қозғалатуғынлығына итибар бериў керек. Бундай теңлемениң шешими жоқарыда қарап өтилди. Ол мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.126) |

Бул аңлатпада - массалар орайы менен байланыслы болған толқын факторы.

турақлысы лабораториялық системадағы массалар орайының кинетикалық энергиясын береди (улыўмалық масса массалар орайы координаталарының басында жайласқан).

(n6.124)-аңлатпадағы екинши теңлеме орайлық потенциалында қозғалатуғын массасы шамасына тең жалған бөлекше ушын Шрёдингер теңлемеси болып табылады.

Улыўмалық толқын функциясы болған диң сийрек қолланылатуғынлығын атап өтиў керек. Водород пенен байланыслы болған мәселе қаралғанда тийкарғы дыққат менен ге аўдарылады, яғный водородтың толқын функциясы менен энергиясы функциясы менен арқалы емес, ал менен арқалы анықланады деп болжанады.

**§ 53. Водород атомы ушын радиаллық теңлемени шешиў**

Салыстырмалы қозғалыс ушын жазылған (n6.124)-Шрёдингер теңлемеси орайлық потенциал ушын дүзилген теңлемениң формасына ийе. толқын функциясы, яғный бул теңлемениң шешими мүйешлик ҳәм радиаллық бөлимлердиң көбеймеси болып табылады. Мүйешлик бөлим сфералық гармоника менен бериледи. Радиаллық бөлим төмендеги радиаллық теңлемени шешиў жолы менен алынады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.127) |

Бул теңлемеде . Бул радиаллық теңлемени шешиў ушын биз дәслеп оның асимптоталық шешимлерин қараймыз, ал оннан кейин оның дәрежели қатар түриндеги шешимин табыўға тырысамыз.

(а) **Радиаллық толқын функциясының асимптоталық қәсийетлери**. диң жүдә киши мәнислеринде (n6.127)-теңлеме мынадай теңлемеге айланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.128) |

Бул теңлемениң шешими

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.129) |

түринде жазылады. Бул аңлатпада менен арқалы константалар белгиленген. теңлиги орынланған жағдайда функциясы нолге айланатуғын болғанлықтан, болған жағдайда тарқалатуғын ағзасының алып тасланыўы керек. Демек, киши леп ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.130) |

функциясын шешим сыпатында қабыл етиў керек.

Енди, диң жүдә үлкен мәнислериниң шеклеринде (n6.127)-теңлемени

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.131) |

түрине аппроксимациялаў керек. Электрон менен протон бир бири менен байланысқан ҳаллардағы энергияның терис болыўының керек екенлигине итибар бериў керек. Демек, бул теңлемениң шешими түрине ийе болады. Бул аңлатпада . Физикалық жақтан минус белгисине ийе шешимди қолланыў керек, себеби шамасы диң үлкен мәнислеринде тарқалады. Демек, диң үлкен мәнислеринде функциясы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.132) |

түрине ийе болыўы керек. (n6.127)-теңлемелериниң шешимлери (n6.130)- ҳәм (n6.132)-аңлатпаларды бириктириўдиң нәтийжесинде алынады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.133) |

Бул аңлатпада арқалы ден ғәрезли болған функция белгиленген. (n6.133)-функцияны (n6.127)-теңлемеге қойып, биз функциясының формасын анықлайтуғын дифференциаллық теңлемени аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.134) |

**(b) Радиаллық теңлеме ушын дәрежели қатарлар түриндеги шешимлер**. Үш өлшемли гармоникалық осциллятор болған жағдайдағыдай, (n6.134)-теңлемени дәрежели қатар түринде шешип көрейик:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.135) |

Бул шешимди (n6.134)-теңлемеге қойсақ, төмендегидей теңлемеге ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.136) |

Бул теңлеме мынадай рекуррентли қатнасқа алып келеди (соңғы ағзада ны ге өзгертиў жолы менен):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.137) |

ның үлкен мәнислериниң шеклеринде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.138) |

коэффициентлериниң избе-излиги

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.139) |

қатнасына алып келеди. Избе-из келетуғын коэффициентлердиң қатнасы болған

аңлатпасы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.140) |

формуласының жәрдеминде анықланатуғын болғанлықтан экспоненциаллық қатардың қәсийети жоқарыда келтирилгендей болады. Демек, (n6.135)-аңлатпаның асимптоталық қәсийети былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.141) |

Демек, (n6.133)-теңлемениң радиаллық шешими мынадай болып шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.142) |

Бирақ, бул нәтийже (n6.133) ке қарама-қарсы келеди: диң үлкен мәнислеринде (n6.133) радиаллық функцияның физикалық жақтан қолланыўға болатуғын түри менен, ал (n6.142) ниң асимптоталық қәсийети аңлатпасы менен бериледи. Буннан (n6.142) түриндеги толқын функциясын физикалық жақтан қолланыўға болмайды.

**(c) Энергияның квантланыўы.** Физикалық жақтан қолланыўға болатуғын шешимди алыў ушын (n6.135) избе-излигиниң ниң белгили шамасында тоқтаўы керек. Бул функциясының -тәртипли көп ағзалы (полином) болып табылатуғынлығын көрсетеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.143) |

Бул , ... коэффициентлериниң барлығының нолге тең болыўын талап етеди. теңлиги орынланған жағдайда (n6.137)-рекуррентли формула мынаны береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.144) |

шамасынан баслап ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.145) |

белгилеўин пайдаланып ( шамасының бас квант саны, ал шамасының радиаллық квант саны екенлиги белгили), биз энергияны анықлай аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.146) |

Алынған аңлатпаны былайынша жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.147) |

Бул формулада арқалы Бор радиусы белгиленген. Демек, . λ шамасын арқалы былайынша жаза алатуғынлығымызға итибар бериңиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.148) |

теңлиги орынлы болғанлықтан ниң мәнислерин нолге тең болмаған пүтин оң санлар болады: Усының менен бирге, ниң берилген мәнисинде орбиталық квант саны болған саны 0 ден ге шекемги пүтин мәнислерди қабыл етеди.

**Ескертиўлер**:

• (n6.147)-аңлатпаның Бордың квантланыў шәрти бойынша энергия ушын алынатуғын аңлатпаға уқсас екенлигине итибар бериңиз. Оны Ридберг турақлысы болған шамасын пайдаланып былайынша жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.149) |

Бул формулада эВ. Соның менен бирге шамасының жүдә киши екенлигин есапқа алып (), биз мынадай формулаға ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.150) |

Солай етип, егер бир протонның массасын электронның массасынан шексиз үлкен деп есапласақ, онда энергия ушын Бор тәрепинен алынған формуласына келеди екенбиз.

• Водород тәризли атомлардың энергиясы: Енди ядросының заряды ге тең болған ҳәм тек бир электронға ийе атомның ямаса ионның энергиясын қалай есаплаймыз деген сораў бериледи. Ядроның заряды шамасына тең болғанда жалғыз электрон потенциалында қозғалады. Усының нәтийжесинде электронның энергиясын (n6.147)-аңлатпадан шамасын пенен алмастырыў жолы менен есаплаўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.151) |

Бул теңликте эВ. Бул қатнасты киргизиў арқалы биз ядроның массасын электронның массасына салыстырғанда шексиз үлкен деп болжадық.

**(d) Водород атомының радиаллық толқын функциялары**. радиаллық толқын функциясын (n6.143) ти (n6.133)-аңлатпаға қойыў жолы менен алыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.152) |

Бул аңлатпаны алғанда биз (n6.148)-аңлатпа бойынша теңлигиниң орынлы екенлигин есапқа алдық, - нормировкалаўшы константа.

функциясын қалайынша анықлаўға болады? Бул мәселе

полиномын ҳәм нормировкалаўшы константасын табыўды талап етеди. Оның ушын биз еки усылды үйренемиз: биринши усыл әпиўайы есаплаўға тийкарланған, ал екиншиси арнаўлы функцияларды пайдаланады.

(i) Биринши усыл: функциясын әпиўайы түрде есаплаў:

Бул усыл функциясын қурыўдын ибарат. Биз тек дәслепки бир неше толқын функциясын қалайынша қурыўдың мүмкин екенлигин көрсетемиз. Мысалы, егер ҳәм теңликлери орынлы болса, онда теңлиги де орынлы. теңлиги тийкарында (n6.152)-аңлатпаны былайынша жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.153) |

ди функциясының нормировка шәртинен анықлаймыз: Оның ушын

теңлигинен пайдаланып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.154) |

теңлигине ийе боламыз. Демек, теңликлериниң орынлы екенлигин көремиз. Сонлықтан, функциясы ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.155) |

аңлатпасының орынлы екенлигине көз жеткеремиз.

Енди, функциясын табыўға ҳәрекет етемиз. теңликлеринен ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.156) |

теңликлерине ийе боламыз. (n6.138)-аңлатпадан биз ди арқалы былайынша аңғарта аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.157) |

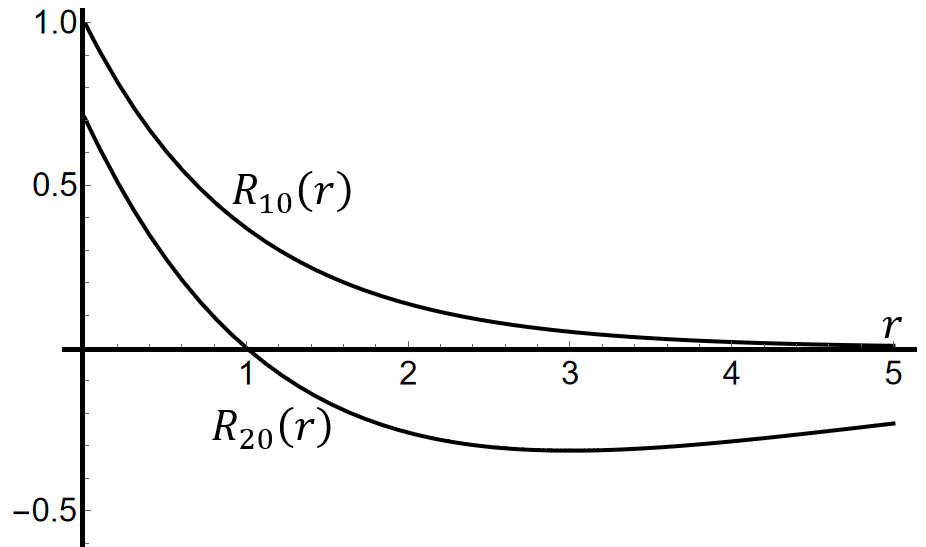
Бул теңликлерди алыўда ҳәм теңликлериниң орынлы екенлиги есапқа алынды. Солай етип, (n6.157)-аңлатпаны (n6.156)-аңлатпаға қойып, буннан кейин нормировкалап шамасын аламыз. Демек, ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.158) |

аңлатпасына ийе боламыз.

Усындай жоллар менен даўам етип, биз қәлеген толқын функциясы ушын аңлатпаны ала аламыз. Соның менен бирге шамасын билиў арқалы қалған барлық , , ... ларды есаплаў ушын (т6.138)-рекуррентли қатнасты пайдаланатуғынлығымызды аңғарамыз.

k-сүўретте ҳәм функцияларының графиклери көрсетилген.



k-сүўрет. теңлиги орынланатуғын жағдайдағы ҳәм функцияларының графиклери.

(ii) Екинши усыл: функциясын арнаўлы функциялардың жәрдеминде анықлаў.

(n6.152)-аңлатпада қатнасатуғын

көп ағзалы ямаса дәрежели полином болып табылады. арқалы белгилененуғын бул полиномды Лагеррдиң бириктирилген полиному деп аталады. Бул полином (n6.134)-Шрёдингер теңлемесиниң шешими болып табылады. (n6.134) түриндеги дифференциаллық теңлемелер Лагерр тәрепинен квантлық механика пайда болмастан әдеўир бурын үйренилди. Оның менен байланыслы болған -дәрежели Лагерр полиномы арқалы былайынша анықланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.159) |

Бул теңликте

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.160) |

Лагер полиномларының бир нешеси 6.5-кестеде берилген.

6.5-кесте. Лагердиң биринши бир неше полиномы ҳәм олар менен байланыслы болған Лагеррдиң бириктирилген полиномлары

|  |  |
| --- | --- |
| Лагерр полиномлары () | Лагеррдиң бириктирилген полиномлары () |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

Бизлер менен полиномларының төмендегидей дифференциаллық теңлемелерди қанаатландыратуғынлығын тексерип көре аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.161) |
|  | (n6.162) |

Ең соңғы теңлеме водород атомының радиусына ғәрезли болған функциясы ушын жазылған (n6.134)-теңлемеге усайды. Оны былайынша дәлиллеймиз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.163) |

өзгериўшисин пайдаланған ҳәм теңлигиниң орын алатуғынлығын (Бор радиусы) есапқа алған жағдайда (n6.134)-теңлемениң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.164) |

теңлемеге алып келинетуғынлығын көриўге болады. Бул теңлемеде (n6.164)-теңлемени келтирип шығарғанда биз теңлигиниң орынлы екенлигин пайдаландық [(n6.143)-аңлатпаға қараңыз]. (n6.162)- менен (n6.164)-теңлемелердиң бирдей екенлигине итибар бериңиз. Солай етип, (n6.134)-теңлемениң шешимлери Лагеррдиң сәйкес полиномларының жәрдеминде бериледи екен. Бундай жағдайда водород атомының толқын функциясы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.165) |

түринде жазылады. Бул аңлатпадағы шамасы радиаллық толқын функциясын нормировкалаўдың нәтийжесинде табылады.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.166) |

Лагердиң сәйкес функцияларының нормировка шәртин пайдаланып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.167) |

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада Нәтийжеде шамаларын есаплаў мүмкиншилигине ийе боламыз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.168) |

Нәтийжеде ушын мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

Водород атомының толқын функциялары

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.169) |

түринде жазылады. Егер радиаллық толқын функциясы ушын ҳәзир ғана жазылған аңлатпаны пайдалансақ, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.170) |

формуласына ийе боламыз. Бундай жағдайда водород атомының толқын функциялары ушын

аңлатпасын жаза аламыз.

Биз бир неше радиаллық толқын функцияларын анықлаў ушын Mathemathica универсаллық компьютерлик алгебра системасын пайдалансақ, онда төмендегидей нәтийжелерди аламыз:

ушын:

ушын:

ушын:

ушын:

ушын:

ушын:

**(e) Водородтың радиаллық толқын функцияларының қәсийетлери**. Водород атомының радиаллық толқын функциялары төмендегидей қәсийетлерге ийе (6.3-сүўретке қараңыз):

• Киши лерде функциясына усайды.

• Үлкен лерде олар экспоненциаллық түрде киширейеди, себеби полиномы де ең үлкен мәниске ийе.

• Ҳәр бир функциясы дана радиаллық түйинге ийе, себеби полиномы дәрежели полином болып табылады.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

6.3-сүўрет. Водород атомы ушын бир неше радиаллық толқын функциялары радиаллық узынлық Бор радиусы бирликлеринде аңлатылған. функциясының дана түйинге ийе болатуғынлығына итибар бериңиз.

Водород атомының ядросының дөгерегинде электронлы табыўдың итималлығының тығызлығының тарқалыўы функциясының жәрдеминде анықланады. Бул функцияның графиклери 6.3.1-сүўретте кетлирилген.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

6.3.1-сүўрет. Водород атомының ядросының дөгерегинде электронлы табыўдың итималлығының тығызлығының тарқалыўы.

**Водородтың байланысқан ҳалларының азғыныўы**. Энергия қәддилериниң m квант санынан ғәрезли емес екенлиги орайлық потенциаллардың қәсийети болап табылады. Соның менен бирге (n6.147)-энергия қәддилери l квант санынан да ғәрезсиз. Бул қосымша азғыныў орайлық потенциаллардың қәсийети емес, ал кулонлық потенциалдың айрықша өзгешелигиниң ақыбети. Орайлық потенциалларды энергия әдетте еки квант санынан ғәрезли: менен ден. Бул жағдай ди береди.

Бас квант саны тек ноллик емес мәнислерди қабыл етеди 6.7-кестеде көринип турғанындай, берилген квант санында квант саны 0 ден ге шекем өзгереди. Ал, диң ҳәр бир мәнисине квант саны ден ге шекем өзгере алады.

ҳалының азғыныўы (ол менен байланыслы болған ҳәр қыйлы ҳаллардың улыўмалық саны менен анықланады) былайынша анықланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.171) |

6.7-кесте. Водород атомының энергия қәддилери ҳәм олардың азғыныўы (электронның спинин есапқа алмаған жағдайда)

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  | Орбиталлар |  |  |  |
| 1 | 0 | s | 0 | 1 |  |
| 2 | 0 | s | 0 | 4 |  |
|  | 1 | p | -1, 0, 1 |  |  |
| 3 | 0 | s | 0 | 9 |  |
|  | 1 | p | -1, 0, 1 |  |  |
|  | 2 | d | -2, -1, 0, 1, 2 |  |  |
| 4 | 0 | s | 0 | 16 |  |
|  | 1 | 0 | -1, 0, 1 |  |  |
|  | 2 | d | -2, -1, 0, 1, 2 |  |  |
|  | 3 | f | -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3 |  |  |
| 5 | 0 | s | 0 | 25 |  |
|  | 1 | 0 | -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 |  |  |

**Ескертиўлер**:

• Ҳәр бир электронның ҳалы үш () квант санларының жәрдеминде анықланады. Оларды *бир бөлекшели* ҳал ямаса *орбиталь* деп атайды. Спектроскопиялық мағлыўматларға муўапық квант санларына сәйкес келетуғын ҳалларды арқалы белгилейди, ҳәриплери сәйкес *sharp, principal, diffuse* ҳәм *fundamental* сөзлеринен келип шыққан ( ҳәриплери менен белгиленетуғын ҳалларға айрықша атама берилмеген. 6.7-кестеде көринип турғанындай, берилген ҳалына 1 орбиталь (), ал -ҳалға 3 орбиталь (, ), ал d орбиталь болса 5 дана орбиталларына ийе. Бул жағдайда ҳ.т.б.

• Егер биз электронның спинин есапқа алатуғын болсақ, онда ҳәр бир электронның ҳалы төрт квант санларының жәрдеминде анықланады. саны электронның спининиң -қураўшысына сәйкес келеди. Демек, водород атомының толық толқын функциясы толқын функциясы менен спинлик бөлим болған бөлимниң көбеймесине тең болады екен:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.172) |

• Спинди есапқа алғанда водород атомының энергия қәддилериниң азғыныўы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (n6.173) |

формуласының жәрдеминде есапланады. (n6.171)-азғыныўға қосымша спинге байланыслы энергияның ҳәр бир қәдди еки қәддиге ажыралады екен. Мысалы, водородтың -13,6 эВ энергияға ийе тийкарғы ҳалы ҳәм ҳалларына ажыралады. Тап усыған сәйкес биринши қозған ҳал сегиз қайтара [] азғынған болып табылады ҳәм оларды былайынша жазамыз: , ҳәм , олар тап сол муғдардағы -13,6/4 эВ = -3,4 эВ энергияға ийе болады.

**VII бап. Спин**

**§ 54. Спин**

Классикалық механикадағы сыяқлы квантлық механикада да моменттиң сақланыў нызамы жабық системаға қарата кеңисликтиң изотропиясының салдарынан келип шығады. Усы жағдайдың өзинен моменттиң айланыўларға қарата симметрия менен байланысы көринеди. Бирақ, квантлық механикада бул байланыстың мәниси әдеўир терең. Усының менен бирге моменттиң классикалық механикада берилетуғын моменттиң [] анықламасы радиус-вектор менен импульсти бир ўақытта өлшеўдиң мүмкин емес екенлигине байланыслы өзиниң тиккелей мәнисин жоғалтады.

Биз жоқарыда менен санларының мәнислерин бериў арқалы бөлекшениң толқын функциясының мүйешлик ғәрезлигин анықланатуғынлығын, усының менен бирге айланыўларга қарата симметрияның барлық қәсийетлерин көрдик. Ең улыўма түрде бул қәсийетлерди келтирип шығарыў координаталар системаларын бурғандағы толқын функцияларының түрлениў нызамына алып келеди.

Бөлекшелер системасының толқын функциясы (яғный момент менен оның проекциясы ниң берилген мәнислериндеги) координаталар системасын тек көшериниң дөгерегинде бурғанда ғана өзгериссиз қалады (әлбетте, әҳмийетке ийе болмаған фазалық көбейтиўши дәллигинде). тиң бағытын өзгертетуғын қәлеген бурыў моменттиң көшерине түсирилген проекциясының анық мәниске ийе болмайтуғынлығына алып келеди. Бул жаңа координаталарда толқын функциясының барилген деги ниң мүмкин болған ҳәр қыйлы мәнислерине сәйкес келетуғын дана функциялардың суперпозициясынан (сызықлы комбинациясынан) туратуғынлығын аңғартады. Координата системаларының бурылыўларында дана функциялары бир бири арқалы түрленеди деп айтыўға болады. Бул түрлендириўдиң нызамы, яғный суперпозиция коэффициентлери (координаталар көшерлериниң бурылыўларының функциясы сыпатында) L диң берилиўи менен толық анықланады. Солай етип, момент координаталар системасының бурылыўларына қатнасы бойынша системаның ҳалларын олардың трансформациялық қәсийетлери бойынша классификациялайтуғын квант санының мәнисине ийе болады. Квантлық механикадағы момент түсинигиниң бул аспекти толқын функцияларының мүйешлерден тиккелей айқын байланысқа ийе емес екенлигине байланыслы айрықша әҳмийетке ийе. Олардың бир бири арқалы түрлендириў нызамын усы байланысты есапқа алмай-ақ келтирип шығарыўға болады.

Тутасы менен қозғалмайтуғын ҳәм белгили болған ишки ҳалда туратуғын қурамалы системаны қараймыз (мысалы, атом ядросын). Белгили болған ишки энергия менен бирге, ол өзиниң шамасы бойынша анықланған ҳәм усы системаның ишиндеги бөлекшелердиң қозғалыслары менен байланыслы моментине де ийе болады. Бул момент кеңисликте бағытқа да ийе бола алады. Басқа сөз бенен айтқанда, қурамалы бөлекшениң тутасы менен қозғалысын қарағанда оның координаталары менен бир қатарда биз және бир дискрет өзгериўшини бериўимиз керек. Бул дискрет өзгериўши оның ишки моментиниң кеңисликтеги базы бир сайлап алынған бағытқа түсирилген проекциясы болып табылады.

Егер биз моментти тап усындай етип түсинетуғын болсақ, онда оның келип шығыўы ҳаққындағы мәселе әҳмийетке ийе болмай қалады ҳәм биз тәбийий түрде "меншикли" момент ҳаққындағы көз-қарасқа келемиз. Бөлекшеге меншикли момент түсинигин бергенде оның "қурамалы" ямаса "элементар" екенлиги ҳеш қандай орынды ийелемейди.

Солай етип, квантлық механикада элементар бөлекшеге оның кеңисликтеги қозғалысы менен байланыссыз болған базы бир "меншикли" момент бериледи. Элементар бөлекшелердиң бул қәсийети шегинде жоғалатуғын таза квантлық эффект болып табылады ҳәм сонлықтан ол классикалық интерпретацияға ийе емес.

Бөлекшениң меншикли моментин оның спини деп атайды. Оның бөлекшениң кеңисликтеги айланыўына байланыслы пайда болған ҳәм "орбиталық момент" деп аталатуғын момент пенен байланысы жоқ[[16]](#footnote-16). Таллаўды элементар бөлекше ҳаққында да, соның менен бирге қаралып атырған анаў ямаса мынаў жағдайларда элементар бөлекшедей қәсийетте көрсететуғын (мысалы, атом ядросы) қурамлық бөлекшелер ҳаққында да жүргизиў мүмкин. Орбиталық момент сыяқлы ℏ бирликлеринде өлшенген бөлекшениң спинин арқалы белгилеймиз.

Спинге ийе болған бөлекшелер ушын ҳалды толқын функциясының жәрдеминде анықлаў тек оның кеңисликтеги ҳәр қыйлы орынларының итималлығын ғана емес, ал спинниң мүмкин болған ҳәр қыйлы бағытларының итималлығын да анықлайды. Басқа сөз бенен айтқанда, толқын функциясы тек үш үзликсиз өзгериўшилер болған бөлекшениң координаталарынан ғана емес, ал спинниң кеңисликтеги белгиленип алынған бағытқа ( көшерине) түсирилген проекциясының мәнисин анықлайтуғын дискрет спинлик өзгериўшиден де ғәрезли болады. Дискрет спинлик өзгериўшини биз арқалы белгилеймиз.

Мейли, усындай толқын функциясы болсын. Шын мәнисинде ол σ ның ҳәр қыйлы мәнислерине жуўап беретуғын координаталардың ҳәр қыйлы функцияларының жыйнағынан турады. Бул функциялар ҳаққында биз толқын функцияларының спинлик қураўшылары ҳаққында гәп етемиз. Бундай жағдайда

интегралы бөлекшениң белгили болған σ мәнисине ийе болыўының итималлығын анықлайды. Бөлекшениң көлеминде σ ның ықтыярлы мәнисине ийе болып жайласыўының итималлығы

аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Спинниң квантлық механикалық операторы менен толқын функциясына тәсир еткенде ол спинлик өзгериўши σ ға ғана тәсир етеди. Басқа сөз бенен айтқанда ол толқын функциясының қураўшыларының бирин екиншиси арқалы түрлендиреди. Бул оператордың түри төменде келтирип шығарылады. Бирақ, улыўмалық көз-қараслар бойынша , , операторларының орбиталық моменттиң операторлары қанаатландыратуғын коммутациялық қатнасларды қанаатландыратуғынлығы келип шығады.

Момент операторы тийкарынан шексиз киши бурыў операторына сәйкес келеди. Орбиталық момент ушын аңлатпаны келтирип шығарғанымызда биз бурыў операциясынның координаталар функциясына тәсириниң нәтийжесин қараған едик. Спинлик моментти қарағанда бул мәнисин жоғалтады, себеби спин операторы координаталарға емес, ал спинлик өзгериўшиге тәсир етеди. Сонлықтан излеп атырылған коммутация қатнасларын алыў ушын шексиз киши бурыў операциясын улыўма түрде системаның бурылыўы түринде қараўымыз керек. ҳәм көшерлериниң дөгерегинде избе-из шексиз киши бурыўларды әмелге асырып, буннан кейин тап усы көшерлердиң дөгерегинде кери бағыттағы бурыўларды әмелге асырып, сол операциялардың нәтийжелериниң z көшериниң дөгерегиндеги шексиз киши бурыўға эквивалент екенлигине тиккелей есаплаўлардың нәтийжесинде исениўге болады ( ҳәм көшерлериниң дөгерегиндеги бурылыў мүйешлериниң көбеймесине тең мүйешке). Биз бул жерде бул әпиўайы есаплаўларды орынламаймыз. Бул есаплаўлардың нәтийжесинде импульс моменти операторлары арасындағы әдеттегидей коммутация қатнаслары алынады. Бундай коммутациялық қатнаслардың спин операторы ушын да (оннан келип шығатуғын барлық физикалық нәтийжелер менен бирге) орынлы болыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (54.1) |

(54.1)-қатнаслар спинниң абсолют шамалары менен қураўшыларының мүмкин болған мәнислерин анықлаўға мүмкиншилик береди. (27.7)-(27.9) формулаларды алыўдың барысында исленген барлық жуўмақ коммутация қатнасларынан тийкарланған еди, сонлықтан оларды ҳәзир де пайдаланыўға болады. Бул формулалардағы диң орнына ти түсиниў керек болады. (27.7)-формуладанспинниң проекциясының меншикли мәнислериниң 1 ге айрылатуғын санлардың избе-излигин пайда ететуғынлығы келип шығады. Бирақ, биз бул жағдайда бул санлардың пүтин ямаса пүтин болмаўы ҳаққында ҳеш нәрсени тастыйықлай алмаймыз (орбиталлық моменттиң проекциясы ҳаққында гәп еткенимизде проекцияның меншикли мәнислериниң пүтин санға тең болатуғынлығын көрген едик).

Соның менен бир қатарда меншикли мәнислериниң избе-излиги төменнен ҳәм жоқарыдан абсолют мәниси бойынша бирдей ҳәм белгиси бойынша қарама-қарсы шама менен шекленген. Оны арқалы белгилеймиз. Ең үлкен ҳәм ең киши мәнислердиң арасындағы айырма тиң пүтин сан ямаса ноль болыўы керек. Демек, саны 0, ½, 3/2, ... мәнислерине ийе болыўы керек. Солай етип, спинниң квадратының меншикли мәнислери мыналарға тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (54.2) |

Бул аңлатпадағы тың мәниси пүтин (солардың ишинде нол де бар) ямаса ярым пүтин болыўы керек. Берилген те спинниң қураўшысы мәнислерине тең бола алады, яғный барлығы болып мәниске ийе. Усыған сәйкес, спинине ийе болған бөлекшениң толқын функциясы қураўшыға ийе болады.

саны бөлекшелердиң ҳәр қыйлы түрлери ушын берилген сан болғанлықтан, онда классикалық механикаға шеклик өтиўде () спинлик момент нолге айланады. Бирақ, саны ықтыярлы мәниске ийе бола алғанлықтан, орбиталлық момент ушын бундай көз-қарас дурыс емес. Классикалық механикаға өтиўде бир ўақытта тың нолге, диң шексизликке умтылыўының орын алыўы керек. Бундай жағдайда көбеймеси шекли мәниске ийе болады.

Тәжирийбелер элементар бөлекшелердиң көпшилиги болған электронлардың, протонлардың, нейтронлардың, μ-мезонлардың ҳәм барлық гиперонлардың (Λ, Σ, Ξ) ½ ге тең спинге ийе болатугынлығын көрсетеди. Олар менен бир қатарда спини нолге тең болған π-мезонлар менен K-мезонлар бар.

Бөлекшениң толық импульс моменти оның орбиталлық момент ҳәм спинлик момент тиң қосындысынан турады. Олардың операторлары пүткиллей ҳәр қыйлы өзгериўшилердиң функцияларына тәсир етип, әлбетте, бир бири менен коммутацияланады.

Толық моменттиң меншикли мәнислери

|  |  |
| --- | --- |
| . | (54.3) |

векторлық қосындысы түринде жазылады ҳәм ҳәр қыйлы болған еки бөлекшениң орбиталық моментлериниң қосындысы анықланатуғын "векторлық моделдиң" қағыйдалары бойынша анықланады. менен тиң берилген мәнислеринде толық момент мәнислерине ийе болады. Мысалы, нолге тең болмаған орбиталық моментке ийе электронда (спини ½ ге тең) толық моменттиң мәниси ге тең болады. теңлиги орынланатуғын жағдайларда моменти, әлбетте, мәнисине тең.

Бөлекшелер системасының толық моменти операторы сол бөлекшелердиң ҳәр бириниң моментиниң операторы лердиң қосындысына тең. Демек, бул жағдайда да оның мәниси векторлық моделдиң қағыйдалары бойынша анықланады. моментин былайынша көрсетиўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (54.4) |

ти системаның толық спини, ал ди системаның толық орбиталық моменти деп атаўға болады.

Егер системаның толық спини ярым пүтин болса (ямаса пүтин болса), онда орбиталық моменттиң барлық ўақытта пүтин болатуғынлығына байланыслы, толық момент ушын да тап сондай жағдай орын алады. Мысалы, егер система бирдей болған жуп сандағы бөлекшелерден туратуғын болса, онда оның толық спини барлық жағдайда да пүтин, сонлықтан толық моменте те пүтин мәниске ийе болады.

Бөлекшениң толық моменти операторлары (ямаса бөлекшелер системасының толық моменти ) орбиталық момент ямаса спин операторлары қанаатландыратуғын коммутация қағыйдаларын қанаатландырады. Себеби бул қағыйдалар қәлеген импульс моменти ушын дурыс болған улыўмалық қагыйдалар болып табылады.

**§ 55. Спин операторы**

Биз төменде толқын функцияларының координаталардан ғәрезлигин изертлемеймиз. Мысалы, системаны бурғандағы функцияларының қәсийетлери ҳаққында айтқанда бөлекшени координаталар басында жайласқан, сонлықтан бурыўдың нәтийжесинде оның координаталары өзгермейди деп есаплаўға болады. Бундай жағдайда алынған нәтийжелер ψ функциясының спинлик өзгериўши σ дан ғәрезлиги ушын тән болады.

σ өзгериўшиси әдеттеги өзгериўшилерден (мысалы, координаталардан) өзиниң дискретлиги менен айрылады. σ дискрет өзгериўшисиниң функциясына тәсир ететуғын сызықлы оператордың ең улыўмалық түрин былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.1) |

Бул аңлатпада арқалы турақлы шамалар белгиленген. көбеймесин қаўсырманың ишине алып, биз операторының тәсиринде буннан кейин алынған спинлик аргументтиң басланғыш ψ функциясына тийисли емес екенлигин атап өтиўди атап өткимиз келди. шамаларының әдеттеги

қағыйда менен анықланған оператордың матрицалық элементлерине сәйкес келеди. Жоқарыдағы координаталар бойынша интеграллаў енди дискрет өзгериўши бойынша суммалаў менен алмастырылады. Нәтийжеде матрицалық элементти анықлаў мынадай түрди қабыл етеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.2) |

Бул жерде менен арқалы ҳәм меншикли мәнислерине жуўап беретуғын операторының меншикли мәнислери белгиленген. Бундай ҳәр бир функция бөлекше тиң белгили болған мәнисине ийе болған ҳалға жуўап береди, яғный толқын функциясының барлық қураўшыларының ишинде тек биреўи болған

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.3) |

нолге тең болмайды. (55.1)-аңлатпаға сәйкес, мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

(55.2)-аңлатпағы ның орнына қойғаннан кейин соңғы теңлик автомат түрде қанаатландырылады. Усының менен келеси тастыйықлаў дәлилленеди.

Солай етип, σ ның функцияларына тәсир ететуғын операторлар () қатарлы матрицалар түринде көрсетиледи екен. Дара жағдайда бул спинниң операторының өзине де тийисли. Оның толқын функциясына тәсири (55.1)-аңлатпаға сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.4) |

формуласы менен аңғартылады.

Биз матрицаларының матрицаларына сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз ("моменттиң меншикли мәнислери" параграфын қараңыз ҳәм ондағы ҳәм ҳәриплерин пенен σ ҳәриплери менен алмастырыў керек). Бундай жағдайда мынадай аңлатпаларға ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.5) |

Усылай етип биз спин операторын анықладық.

Спинниң мәниси ½ болған жағдай жүдә әҳмийетли болған жағдайлардың қатарына киреди. Бундай жағдайда бул матрицалар еки қатарлы. Оларды былайынша жазады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.6) |

Бул аңлатпада

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.7) |

Матрицаларды (55.7) түринде жазғанда қатарлар менен бағаналар σ ның мәниси бойынша номерленеди. Бундай жағдайда қатардың номери биринши, ал бағананың номери матрицалық элементтиң екинши индексине сәйкес келеди. Биз қарап атырған жағдайда бул номерлер +1/2, ден -1/2 ге шекемги мәнислерди қабыл етеди. (55.4)-аңлатпаға сәйкес, оператордың тәсири матрицаның σ-қатарын бағана бойынша жайласқан толқын функциясының қураўшылары менен көбейтиўди аңғартады:

(55.7)-матрицаларды *Паули матрицалары* деп атайды. матрицасы диагоналлық ( шамасының өзиниң меншикли функциялары бойынша анықланған матрица сыяқлы). Бул жағдайда спинниң проекциясы менен Паули матрицаларын бирдей ҳәрип пенен белгилеў алжасықларға алып келе алмайды: Паули матрицалары ҳәриптиң үстиндеги "^" менен белгиленеди.

Паули матрицаларының өзине тән болған қәсийетлерин атап өтемиз. (55.7)-матрицаларды бир бири менен тиккелей көбейтиўдиң нәтийжесинде мынадай теңликлерди аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.8) |

Оларды коммутацияның улыўмалық қағыйдалары (54.1) менен комбинациялап

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.9) |

теңлигиниң орынлы екенлигин табамыз ҳәм Паули матрицаларының антикоммутативлик екенлигин көремиз. Бул теңликлердиң жәрдеминде төмендегидей пайдалы формулалардың дурыс екенлигине көз жеткеремиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.10) |

Бул аңлатпаларда ҳәм арқалы еки ықтыярлы вектор белгиленген. (55.8)-(55.10) теңликлердиң оң тәрепиндеги дан ғәрезсиз болған ағзаларды еки қатарлы бирлик матрицаға көбейтилген константалар деп түсиниў керек. Бул қатнаслар бойынша матрицаларынан қуралған қәлеген скаляр полиномлық аңлатпа дан ғәрезсиз болған ағзаларға ҳәм ның биринши дәрежели ағзаларына алып келинеди. Буннан операторының қәлеген скаляр функциясының сызықлы функцияға алып келинетуғынлығы келип шығады. Ең ақырында Паули матрицаларының ҳәм олардың көбеймелериниң излериниң мәнислерин (диагоналлық қураўшылардың суммаларын) атап өтемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.11) |

Толқын функцияларының спинлик қәсийетлерин толық үйрениўге, соның ишинде координаталар системасын ықтыярлы бурыўлардағы оның қандай қәсийетлерди көрсететуғынлығына усы баптың келеси параграфлар бағышланған. Бирақ, сонда да бул функциялардың әҳмийетли қәсийети болған z көшериниң дөгерегиндеги бурыўларға қарата қандай қәсийетлерге ийе екенлигин ҳәзир қарап өтемиз.

көшериниң дөгерегинде шексиз киши бурыўын жүзеге келтиремиз. Бундай бурыў операторы момент операторының жәрдеминде (биз қарап атырған жағдайда спинниң жәрдеминде) түринде аңғартылады. Сонлықтан, бурыўдың нәтийжесинде функциялары функцияларына өтеди. Бул теңликте

Бул қатнасты түринде жазып ҳәм интеграллап, шекли φ мүйешине бурғанда функциясының мынадай функцияға өтетуғынлығын табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55.12) |

Мысалы, 2π мүйешине бурғанда олар барлық σ лар ушын бирдей ҳәм шамасына тең көбейтиўшисине көбейтиледи (2σ санының жуплығы да тиң жуплығындай). Солай етип,  *көшериниң дөгерегинде системаны толық бурғанда пүтин спинге ийе болған толқын функциялары өзиниң ең алдыңғы мәнисине қайтып келеди, ал ярым пүтин спинге ийе бөлекшелердиң толқын функциялары белгисин өзгертеди екен.*

**§ 56. Спинорлар**

Квантлық механикада спинор электронлар, протонлар, нейтронлар ҳ.т.б. элементар бөлекшелердиң меншикли мүйешлик моментин (спинин) тәрийиплеўде пайдаланылатуғын математикалық объект болып табылады. Жоқарыда айтылып өтилгениндей спин бөлекшелердиң фундаменталлық қәсийети болып табылады. Оның классикалық аналогы жоқ.

Математикалық жақтан спинорлар спинорлық майданлардың жәрдеминде тәрийипленеди. Олар спинорлық кеңислик деп аталатуғын математикалық кеңисликтиң элементлери болып табылады Спинорлық майданлар ярым пүтин бөлекшелердиң қәсийетлерин тәрийиплеў ушын пайдаланылады.

Спин нолге тең болғанда толқын функциясы тек бир қураўшысына ийе болады. Спин операторы тәсир еткенде ол нолге айланады: операторының шексиз киши бурыўлар операторы менен байланысын нәзерде тутқан ҳалда бул ноллик спинге ийе болған бөлекшениң толқын функциясының координаталар системасын бурғанда өзгермейтуғынлығын аңғартады (яғный скаляр болып табылады).

Спини 1/2 ге тең болған бөлекшениң толқын функциясы еки қураўшыға ийе: ψ(1/2) ҳәм ψ(—1/2). Буннан кейинги улыўмаластырыўдың қолайлы болыўы ушын биз бул қураўшыларды ҳәриптиң оң тәрепиндеги жоқарыға жазылған сәйкес 1 ҳәм 2 индекслери менен белгилеймиз. Бундай жағдайда алынатуғын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.1) |

шамасын *спинор деп атайды*.

Координаталар системасын ықтыярлы түрде бурғанда спинордың қураўшылары сызықлы түрлендириледи

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.2) |

Оны былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.3) |

Бул аңлатпаларда арқалы түрлендириў матрицасы белгиленген (бул жағдайда жазыўы матрицасының қатарын матрицасының бағанасы менен көбейтиўди аңғартады). Улыўма айтқанда бул матрицаның элементлери комплексли болып табылады ҳәм координаталар көшерлериниң бурылыў мүйешлериниң функциялары болып табылады. Олар бир бири менен бөлекшениң толқын функциясы сыпатындағы спинорларға қойылатуғын физикалық талаплардан тиккелей келип шығатуғын қатнаслар бойынша байланысқан.

Бисызықлы форманы қараймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.4) |

Бул аңлатпада ψ менен φ арқалы еки спинор белгиленген. Әпиўайы есаплаўлар мынаны береди

Демек, (56.4) шамасы координаталар системасының бурылыўында өзи өзине түрленеди екен. Бирақ, егер өзине өзи арқалы түрленетуғын барлығы болып бир функция бар болса, онда оны спинге сәйкес келетуғын ноль деп қараўға болады ҳәм оның скаляр болыўы керек (яғный координаталар системасын бурғанда өзгериссиз қалыўы керек). Буннан мынадай теңликти аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.5) |

Түрлендириў матрицасының детерминанты 1 ге тең. Еки шаманың усындай түрлениўин *бинарлық* деп атайды.

Буннан кейинги қатнас бөлекшени берилген ноқатта табыўдың итималлығын анықлайтуғын аңлатпаның скаляр болатуғынлығынан келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.6) |

Түрлендирилиўши шамалардың модуллериниң квадратларының суммасын инвариант етип қалдыратуғын түрлендириў унитарлық түрлендириў болып табылады. Демек, бундай жағдайда теңлигиниң орынланыўы керек. (56.5)-шәртте кери матрица

түринде жазылады. Оны түйинлес матрицаға теңлестирсек

матрицасына ийе боламыз ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.7) |

қатнасларын аламыз. (56.5) менен (56.7) қатнаслары бойынша төрт комплексли шамалар ҳақыйқатында барлығы болып үш ғәрезсиз параметрге ийе. Бул үш параметр үш өлшемли координаталар системасының бурылыўларын анықлайтуғын үш мүйешке сәйкес келеди.

(56.4)- ҳәм (56.6)-скалярлардың аңлатпаларын салыстырып менен шамаларының түринде түрлендирилиўиниң керек екенлигин көремиз ҳәм (56.5)- ҳәм (56.7)-қатнаслар бойынша ҳақыйқатында да усындай екенлигин аңсат тексерип көриўге болады.

Бул қәсийет ўақыттың белгисиниң өзгериўине қарата симметрия менен тығыз байланысқан. Бундай симметрияға толқын функциясын оның комплексли түйинлесине алмастырыў сәйкес келеди. Бирақ, ўақыттың белгиси өзгергенде моменттиң проекциясының белгиси де өзгереди. Сонлықтан, ҳәм қураўшыларына комплексли түйинлес функциялар өзлериниң қәсийетлери бойынша спинлериниң сәйкес -1/2 ҳәм 1/2 проекцияларына жуўап беретуғын қураўшыларға эквивалент болады.

Спинорлардың алгебрасына тензорлық алгебраға уқсас болған форманы бериўге болады. Буны әмелге асырыў ушын спинордың контравариантлық қураўшылары ҳәм менен (индекслер жоқарыда) бирге

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.8) |

анықламасы бойынша ковариантлық қураўшыларды (индекслер төменде) киргизиў керек. Бундай жағдайда еки (56.4) спинорларының инвариант комбинациясы скаляр көбейме түринде жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.9) |

Бул аңлатпада ҳәм буннан кейинги аңлатпаларда еки рет қайталанатуғын (гүң) индекслер бойынша суммалаў нәзерде тутылады (тензорлық алгебрада қабыл етилген тәртипке сәйкес). Спинорлық алгебрада нәзерде тутылыўы керек төмендегидей қағыйданың бар екенлигин аңғарамыз. Мынаған ийе боламыз:

яғный,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.10) |

Буннан қәлеген спинордың өзи өзине скаляр көбеймесиниң нолге тең екенлиги келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.11) |

Жоқарыда айтылғанларға сәйкес менен шамалары ҳәм шамаларындай болып түрленеди, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.12) |

көбеймесин транспонирленген матрицасы менен түринде жазыўға да болады. матрицасының унитарлығын нәзерде тутып теңлигине ийе боламыз, сонлықтан ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.13) |

Әдеттеги тензорлық алгебрадағы векторлардан тензорларға өтиўге уқсас, жоқары рангалы спинорлар ҳаққындағы түсиникти киргизиўге болады. Екинши рангалы спинор деп қураўшылары биринши әўлад еки спинорларының қураўшылары түринде түрленетуғын төрт қураўшыға ийе шамасына айтамыз. контрвариант қураўшылары менен бир қатарда ковариантлы ҳәм аралас қураўшыларын қараўға болады. Олар сәйкес ҳәм аңлатпаларында болып түрленеди. Қәлеген рангалы спинорлар тап усындай болып анықланады.

Спинорлардың контравариант қураўшыларынан ковариант қураўшылары ҳәм кери өтиўди былайынша көрсетиўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.14) |

Бул аңлатпаларда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.15) |

арқалы еки өлшемли векторлық кеңисликтеги *метрлик спинор* белгиленген. (56.15)-матрицаның матрицасына сәйкес келетуғынлығын аңғарамыз. Мысалы, тап усындай жоллар менен мыналарға ийе боламыз:

Сонлықтан, ҳ.т.б. дың өзлери екинши рангалы антисимметриялы спинор болып табылады. Координаталарды түрдлендиргенде оның қураўшыларының өзгериссиз қалатуғынлығына ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.16) |

теңлигиниң орынланатуғынлығына аңсат исениўге болады. Әдеттеги тензорлық алгебрадағы сыяқлы, спинорлық алгебрада да еки тийкарғы операция бар - олар жуп индекслер бойынша көбейтиў ҳәм әпиўайыластырыў. Еки спинорды көбейтиў жоқары рангалы спинорды береди. Екинши ҳәм үшинши рангалы ҳәм еки спинордан бесинши рангалы спинорын пайда етиўге болады. Индекслердиң бир жубы бойынша әпиўайыластырыў (яғный бир ковариант ҳәм бир контрвариант индекслердиң бирдей индекси бойынша қураўшыларды суммалаў) спинордың рангасын еки бирликке төменлетеди. Мысалы, спинорын μ ҳәм ν индекслери бойынша әпиўайыластырыў үшинши рангалы спинорын береди. спинорын әпиўайыластырыў скалярын береди. Бундай жағдайда (56.10)-формула менен аңғартылатуғын қағыйдаға уқсас болған қағыйда орын алады: егер әпиўайыластырыў әмелге асырылатуғын жоқарғы ҳәм төменги индекслердиң орынларын алмастырсақ, онда шаманың белгиси өзгереди (яғный, Буннан дара жағдайда егер спинор өзиниң қандай да еки индексине қарата симметриялы болса, онда бул индекслер бойынша әпиўайыластырыўдың салдарынан нолди аламыз. Мысалы, екинши рангалы симметриялы спинор ушын теңлигине ийе боламыз.

-рангалы симметриялық спинор деп өзиниң барлық индекслери бойынша симметриялы болған спинорға айтамыз. Симметрияластырыў жолы менен (яғный, мүмкин болған қураўшылардың мүмкин болған орынларын алмастырып қойыў жолы менен) асимметриялық спинордан симметриялы тензорды пайда етиўге болады. Жоқарыда айтылғанларға байланыслы симметриялы спинордың қураўшыларынан (әпиўайыластырыў жолы менен) төменирек рангалы спинорды алыўға болмайды.

Ал, өзиниң барлық индекслери бойынша антисимметриялы спинорға келетуғын болса, онда тек екинши рангалы спинор усындай антисимметриялы спинор бола алады. Ҳақыйқатында да, ҳәр бир индекс тек еки мәниске ийе бола алатуғын болғанлықтан, онда индекслердиң саны үш ямаса оннан зыят болған жағдайда кеминде еки индекс бирдей мәниске ийе болады. Сонлықтан, спинордың қураўшылары нолге айланады. Қәлеген екинши рангалы антисимметриялы спинор бирлик спинор ға көбейтилген скалярға алып келинеди. Усы айтылған жағдайлардан келип шығатуғын мынадай жағдайды атап өтемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.17) |

Бул теңликтеги - ықтыярлы спинор. Бул қағыйда (56.17)- теңликтиң шеп тәрепиндеги аңлатпаның үшинши рангалы антисимметриялы спинор екенлигиниң салдары болып табылады.

спинорын өзи өзине көбейтиўден қуралған ҳәм индекслердиң бир жубы бойынша әпиўайылыстырылған спинор, екинши жуп бойынша антисимметриялы, ҳақыйқатында да

Сонлықтан, жоқарыда айтылғанларға байланыслы бул спинордың скалярға көбейтилген спинорға алып келиниўи керек. Скалярға көбейтилген бул спинорды индекслердиң екинши жубы бойынша әпиўайылатырыўдың дурыс нәтийже беретуғындай етип анықлап, мынаны табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56.18) |

спиноры менен комплексли түйинлес болған спинорының қураўшылары контрвариант спинорының қураўшыларындай болып түрлендириледи. Қәлеген спинордың қураўшыларының модуллериниң квадратларының суммасы, демек, инвариант болып табылады.

**Қосымша мағлыўматлар**:

Еки электроннан туратуғын системаға қайтып келемиз ҳәм оның ҳалын қараймыз. Бул системаның толқын функциясының спинниң +1, 0. -1 проекцияларына жуўап беретуғын үш қураўшыға ийе болыўы керек. Бул қураўшылар ψ ҳәм φ спинорларының қураўшыларынан дүзилген, өзлекриниң индекслери бойынша симметриялы,

түрлендириўлерине сәйкес түрленетуғын аңлатпалар болып табылады:

Системаның толық спининиң σ проекциясы еки электронның спинлериниң проекцияларының суммасына тең. Сонлықтан, жоқарыда келтирилген функциялардың σ ның мәнислерине сәйкеслиги айырым электронның спининиң проекцияларын көрсететуғын спинорлық 1 ҳәм 2 индекслеринен мәнисинен түсиникли болып шығады: бул функциялардың бириншиси еки 1 индексине ийе ҳәм, сонлықтан, проекциясына жуўап береди. Екиншиси бир-бирден 1 ҳәм 2 индекслерине ийе, сонлықтан Ең ақырғысы еки 2 индексине ийе. Оның ушын ге ийе боламыз.

Толқын функцияларының "спинлик" қәсийетлериниң мәниси олардың координаталар системасының бурыўларына қатнасы бойынша қәсийетлери болып табылады. Спини 1 ге тең болған бөлекше ҳәм тап усындай толық спинге ийе бөлекшелер системасы ушын спинлик толқын функциялары бир бири менен бирдей. Сонлықтан нәтийжеси улыўмалық характерге ийе: спини 2 ге тең болған қәлеген бөлекшениң толқын функциясы 2-рангалы *симметриялық спинор* болып табылады. 2-рангалы спинор деп координаталар системасын бурғанда 1-рангалы еки спинордың сәйкес қураўшыларының көбеймелери түринде түрленетуғын төрт шаманың жыйнағына айтады (бирақ, усындай түрлениўлерге алып келинетуғын шамалар ғана емес). Биз бул жерде екинши рангалы тензордың вектордың қураўшыларының көбеймеси сыпатында түрленетуғын шамалардың жыйнағы екенлигин еске түсиремиз. 2-рангалы симметриялы спинорда Сонлықтан бир биринен ғәрезсиз болған тек үш қураўшы болады. Биз 2-рангалы антисимметриялық спинордың тек бир ғәрезсиз қураўшыға ийе болатуғынлығын ескертип өтемиз: ( ). Оның қәсийетлери жоқарыда қарап өтилген шамасының қәсийетлерине сәйкес келеди. Басқа сөз бенен айтқанда, 2-рангалы антисимметриялы спинор скалярға алып келинеди. Олардың ψ(σ) толқын функциясының қураўшыларына сәйкеслиги

формулалары бойынша бериледи.

Спини 1 ге тен болған бөлекшениң толқын функциясы үш өлшемли ψ векторы сыпанында да бериледи. Бул үш өлшемли вектордың координаталар системасын бурғанда бир бири арқалы түрленетуғын тап сол үш шаманың жыйнағы екенлигинен көринип тур. 2-рангалы симметриялы спинордың қураўшылары менен вектордың қураўшыларының арасындағы сәйкеслик төмендегидей формулалар менен көрсетиледи:

Олардың мәниси мынадан ибарат: спинордың теңликтиң шеп тәрепинде турған қураўшылары оң тәрептеги вектордың қураўшыларының комбинацияларының түрлендирилиў нызамы бойынша түрлендириледи. Бул сәйкесликтиң дурыс екенлигине спинорлардың түрлендириў нызамы аңлатпасынан алынатуғын z көшериниң дөгеригендеги бурыў мысалынан көриўге болады.

Белгили болған ҳәм теңликлерине сәйкес

теңликлерине ийе боламыз. Бул теңликлерде менен арқалы дәслепки система көшериниң дөгерегинде φ мүйешине бурылғанда пайда болған координаталар системасындағы спинордың қураўшылары белгиленген. Сонлықтан, 2-рангалы спинордың қураўшылары ушын мыналарға ийе боламыз:

Тап усындай формулалар менен координаталар системаларының екеўиндеги вектордың қураўшылары лар да байланысқан.

Екинши тәрептен, координаталар көшерин ықтыярлы түрде бурғандағы вектордың қураўшыларының улыўма белгили болған нызамынан жоқарыдағы формулалар бойынша салыстырыўдан спинорларды түрлендириўдиң улыўмалық нызамын табыўға болады. Биз ҳәзир бул мәселени қарамаймыз.

Ең ақырында, ықтыярлы спинге ийе болған бөлекше қаралатуғын улыўма жағдайда толқын функциясы өзиниң барлық индекслери бойынша симметриялы болған 2s-рангалы спинорды береди. Бундай спинордың бир биринен ғәрезсиз қураўшыларының санының 2s+1 ге тең болыўының керек екенлигин аңсат көриўге болады.

**§ 57. Электронлардың поляризациясы**

Спини 1/2 ге тең болған бөлекшелерге (биз электронлар ҳаққында гәп етемиз) тән болған әҳмийетли қәсийет мынадан ибарат: егер электронның ҳалы базы бир толқын функциясы менен тәрийипленетуғын болса, онда кеңисликте спинниң проекциясыниң мәниси белгили болған шамасына тең болатуғын бағыт болады. Бул бағытты электронның поляризациясының бағыты деп атаўға болады, демек, бундай жағдайда электрон толық поляризацияланған деп айтамыз.

Ҳақыйқатында, z көшериниң бағытын сәйкес түрде сайлап алып берилген спинордың (спини 1/2 ге тең болған бөлекшениң толқын функциясы) қураўшыларының бирин барлық ўақытта нолге тең етиўге болады (мысалы толқын функциясын). Бул кеңисликтеги бағыттың еки шама менен (мысалы, сфералық координаталардың еки мүйешиниң жәрдеминде) анықланатуғынлығынан анық көринип тур. Демек, бизиң қолымыздағы параметрлердиң саны биз нолге айландырғымыз келген шамалардың санына тең (комплексли ниң затлық ҳәм жормал бөлимлери). теңлиги меншикли мәнисиниң итималлығының нолге айланыўын аңғартады. Спини болған бөлекше ушын тап усындай усыл менен толқын функциясының қураўшыларының биреўинен басқасын нолге айландырыўдың мүмкин емес екенлигин атап өтемиз. Олардың саны дым көп.

Мейли, көшери электронның поляризация бағытында сайлап алынған болсын. Усы бағыт пенен орташа спин векторы те бағытлас, сан шамасы бойынша ол 1/2 ге тең. Спинниң проекциясының көшерине салыстырғанда θ мүйешке еңкейген басқа бағытқа (z' көшери) түсирилген проекциясының шамасына тең болыўының итималлығы ти анықлаймыз. ти көшерине проекциялап, усы көшердиң бойындағы спинниң орташа мәнисиниң екенлигин табамыз. Екинши тәрептен, итималлықларының анықламасы бойынша

теңлигине ийе боламыз. теңлигиниң орынлы екенлигин де есапқа алып

теңликлерине ийе боламыз.

Электронның толық поляризацияланған ҳалы менен бир қатарда шалама-шекки поляризацияланған деп аталатуғын ҳаллары да бар. Бул ҳаллар (өзлериниң спинлик қәсийетлерине қатнасы бойынша) толқын функцияларының жәрдеминде емес, ал тек тығызлық матрицаларының жәрдеминде тәрийипленеди (яғный олар спинлери бойынша аралас ҳаллар болып табылады, бөлекшениң орбиталлық қозғалыслары менен байланыслы болған ҳаллар ушын да усындай түсиниклерди киргизиў мүмкин).

Егер биз дәслеп таза ҳалдағы (толық поляризация ҳалы) спинниң орташа векторын қарасақ, онда усындай шалама-шекки поляризацияланған ҳалларды тәрийиплеў усылына тәбийий түрде келемиз. Физикалық шамалардың операторларының анықламасы бойынша ψ толқын функциясына ийе ҳал ушын

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада спинлик өзгериўши σ бойынша суммалаў спинордың қураўшылары бойынша суммалаў түринде көрсетилген. Бул параграфта биз спинорлық индекслерди 1 ҳәм 2 мәнислерине ийе болатуғын α, β индекслери арқалы көрсетемиз. Жуўан ҳәрибиниң жәрдеминде қураўшылары ҳәм болған Паули матрицасы болып табылатуғын "матрицалық векторды" белгилеймиз. ( - турақлы шамалар) аңлатпасына сәйкес спин операторы болған операторының тәсири

түрлендирилиўин аңғартады. Бул аңлатпада арқалы матрицалардың элементлери белгиленген. Сонлықтан, жоқарыда ушын жазылған аңлатпаны

Бул теңликте

ал бул теңлик ушын

теңлигиниң орынлы екенлигин айқын. Усының менен бирге толқын функцияларының нормировка шәртине сәйкес

Шалама-шекки поляризация орын алған улыўма жағдайда электронның ҳалы таза ҳалдан өзгеше, ең соңғы еки шәртти қанаатландыратуғын ҳәм ти формуласына сәйкес анықлайтуғын тығызлықтың поляризациялық матрицасының жәрдеминде анықланады. Бирақ, бул матрицаның элементлери көбеймелерине тарқалмайды. векторының абсолют шамасы 0 ден 1/2 ге шекемги мәнислерге ийе бола алады.1/2 мәнис толық поляризацияға, ал 0 мәниси поляризацияланбаған ҳалға сәйкес келеди.

Төрт шамалары сегиз затлық параметрге эквивалент. Бирақ, бес данаҳәм катнасларына сәйкес, олардың үшеўи ғана бир биринен ғәрезсиз. Затлық векторы да тап сондай сандағы шамаларға (қураўшыларға) ийе болады. Сонлықтан, қураўшылардың барлығы да бир бирин бир мәнисли түрде анықлайтуғынлығы түсиникли. Басқа сөзлер менен айтқанда, спини 1/2 ге тең болған бөлекшениң поляризациялық ҳалы орташа спин векторын бериў менен толық анықланады.

Спинниң z-қураўшысының орташа мәниси

Буннан менен лердиң ҳәм меншикли мәнислериниң итималлықлары екенлиги көринип тур. шамасы болса пенен лердиң орташа мәнислери менен байланыслы. Паули матрицаларынан пайдаланып

теңлигиниң орынланатуғынлығына көз жеткериўге болады.

(Левич)

**§ 58. Қозғалыс муғдарының толық моменти**

Қозғалыс муғдарының толық моменти орбиталық ҳәм спинлик моментлердиң қосындысынан турады. Векторлық операторларды қосыў қағыйдалары бойынша толық моменти операторы ушын мынадай аңлатпаны аламыз:

Орбиталық ҳәм спинлик моментлер операторлары ҳәр қыйлы өзгериўшилерге, бириншиси кеңисликлик өзгериўшилерге, ал екиншиси тек спинлик өзгериўшилерге тәсир етеди. Сонлықтан бул операторлардың бир бири менен коммутацияланады. Оннан орбиталық ҳәм спинлик моментлердиң проекцияларының қандай қағыйдаларға бағынатуғын болса, толық моменттиң проекцияларының коммутациясының да тап сондай қағыйдаларға бағынатуғынлығы келип шығады. Бул орынларын алмастырып қойыў қағыйдалары толық момент операторы менен бурыў операторының арасындағы байланыстан келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (62.2) |

Мына теңликлер де тап сол байланыстан келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (62.3) |

(62.2)-қатнаслардан операторының меншикли мәнислериниң мынадай түрге ийе болатуғынлығын келип шығады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (62.4) |

квант санының мәнислери қозғалыс муғдарының толық моментин анықлайды. Квантлық механикадағы моментлерди қосыў қағыйдалары бойынша берилген ҳәм санларында саны мынадай бир қатар мәнислерге ийе болады:

Егер спинниң мәниси пүтин болса, саны да пүтин мәниске, ал спин ярым пүтин санға тең болса, онда саны да ярым пүтин мәниске ийе болады.

Еркин кеңисликте ямаса орайлық симметрияға ийе болған майданда қозғалатуғын бөлекше болған жағдайда қозғалыс муғдарының моменти қозғалыс интегралы болып табылатуғынлығын көрсетеди. Дәлиллеў ушын толқын функциясының спинлик координаталарын да, кеңисликлик координаталарын да өзгерисин есапқа алатуғын бурыў операторы ди киргиземиз. Координаталар системасын z көшериниң дөгерегинде базы бир киши δφ мүйешине бурыўды қараймыз. Усындай бурыўдағы толық толқын функциясының өзгерисин аңсат анықлаўға болады:

Тап усындай қатнаслар, әлбетте, қәлеген көшердиң дөгерегиндеги бурыўлар ушын да орын алады. Демек, биз бурыў операторы менен қозғалыс муғдарының толық моменти операторының байланыслы екенлигин көремиз. Бирақ, кеңисликтиң изотроплығына байланыслы бурыў операциясы жабық системаның гамильтонианын өзгерте алмайды (ямаса орайлық симметрияға ийе системаның). Математикалық жақтан бул операторының (соның менен бирге операторының да) бөлекшениң гамильтонианы пенен коммутацияланатуғынлығын аңғартады. Солай етип, толық қозғалыс моментиниң сақланыў нызамы кеңисликтиң изотроп екенлигиниң нәтийжеси болып табылады. Спинлик ҳәм орбиталық моментлер ушын бөлек сақланыў нызамлары спин-орбиталық өз-ара тәсирлесиўди есапқа алмаған жағдайда жуўық түрде орынланады.

Егер биз бир бири менен тәсирлеспейтуғын бөлекшелердиң системасына ийе болсақ, онда барлық системаның қозғалыс муғдарының толық моменти барлық бөлекшелердиң моментлери лардың квантлық механикадағы қосыў қағыйдасы бойынша анықланады:

Жоқарыда көрсетилип өтилгениндей, системаның қозғалыс муғдарының орбиталық моменти операторы менен толық спини операторы ти киргизиўге болады. Оларды былайынша анықлайды

Буннан кейин теңлигиниң орынлы екенлигин нәзерде тутсақ, онда

теңлигине ийе боламыз.

Ҳәр қыйлы бөлекшелерге тийисли болған операторлар бир бири менен коммутацияланады. Себеби олар ҳәр қыйлы өзгериўшилерге тәсир етеди. Сонлықтан, ҳәр қыйлы бөлекшеге тийисли болған  толық моментлердиң проекциялары операторлары ушын да тап сондай коммутациялық қатнаслар орын алады. Мысалы, толық моменттиң проекцияларының , лер ушын мынадай теңликлерге ийе боламыз

Тап усындай нәтийжени операторының басқа проекциялары ушын да, ҳәм операторлары ушын да алыўға болады.

Айырым бөлекшелерге тийисли болған операторлардың берилген меншикли мәнислеринде операторларының ҳәм моментлердиң проекциялары операторларының меншикли мәнислери квантлық механикадағы моментлерди қосыў қағыйдасы тийкарында анықланады. Бөлекшелер системасы ушын толық момент сақланатуғын шама болып табылады.

**§ 59. Паули теңлемеси**

Спинниң ҳәм электронның магнит моментиниң болыўы релятивистлик эффект болып табылады. Бул тастыйықлаўды кейинге қалдырып, биз меншикли момент операторын киргиземиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.1) |

Бундай жағдайда электромагнит майданындағы электрон ушын Гамильтон операторы былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.2) |

Бул теңлемеде арқалы магнит майданының кернеўлиги белгиленген. Гамильтониан спиннен ғәрезли болғанлықтан электронның толқын функциясы да спинлик өзгериўшиден ғәрезли болады, яғный

Магнит майданындағы толқын функциясы ушын теңлемени биринши рет Паули келтирип шығарды ҳәм *Паули теңлемеси* деп аталады. Оны былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.3) |

Итималлық ағысының тығызлығы векторын табамыз. Оның ушын ψ функциясы ушын түйинлес болған функциясы ушын теңлеме жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.3a) |

(63.3)-аңлатпаны шеп тәрептен ке, (63.3a)-аңлатпаны оң тәрептен ψ ге көбейтип, буннан кейин биреўин екиншисинен аламыз. теңлигиниң орынлы екенлигин итибарға алып, бир қанша түрлендириўлерген кейин төмендегидей теңлемени аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.4) |

Операторлар менен операциялар ислеў қағыйдаларынан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.5) |

теңлиги келип шығады ҳәм спин операторының эрмитлигинен теңлигин аламыз. Солай етип, квадрат қаўсырманың ишиндеги қосылыўшылар нолге айланады ҳәм бир итималлық ағысы векторы ушын аңлатпа аламыз (оған еки қураўшыға ийе толқын функциялардың киретуғынлығын нәзерде тутыў керек). Оны заряд ге көбейтип, электр тоғының тығызлығы векторын аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.6) |

(63.4)-аңлатпа итималлық ағысы векторы ды ға шекемги дәлликте анықлайды ( арқалы ықтыярлы вектор белгиленген). теңлигиниң орынлы екенлигин көрсетиўге болады. Сонлықтан электр тоғының тығызлығы ушын толық аңлатпа мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.7) |

Бөлекше турақлы магнит майданында қозғалатуғын ҳәм электр майданы болмаған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда векторлық потенциалын былайынша сайлап алыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.8) |

Бул векторлық потенциалға

қатнасы орынлы екенлигин есапқа алып (63.3)-Паули теңлемесин түрлендиремиз. Усының менен бирге магнит майданын ҳәлсиз деп болжаймыз ҳәм усыған сәйкес, Паули теңлемесинде тың квадраты бар ағзаларды таслап кетемиз. Бундай жағдайда

Усының менен бирге

теңлиги орынлы болғанлықтан ( арқалы қозғалыс муғдарының орбиталық моменти белгиленген)

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.9) |

теңлемесин аламыз. операторы болған

операторын орбиталық магнит моменти операторы деп атаған тәбийий (спинлик магнит моменти операторын арқалы белгилегенимиздей).

Биз орбиталық магнит моменти диң механикалық момент ге қатнасының классикалық физикадағыдай шамасына тең екенлигин көремиз. Спинлик моментлер ушын бул қатнастың шамасы еки есе үлкен.

(63.3)- ҳәм (63.9)-теңлемелер бөлекшелер системасы ушын тәбийий түрде улыўмаластырылады. Әззи магнит майданында жайластырылған заряды ге, массасы ге тең болған бөлекшелер системасы ушын (63.9)-Паули теңлемеси мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.10) |

Бул теңлемеде системаның толық орбиталық, ал спинлик моментлери (суммалаў системаның барлық бөлекшелери бойынша жүргизиледи). - бөлекшелердиң бир бири менен өз-ара тәсирлесиўине сәйкес келетуғын потенциаллық энергия.

Магнит майданы бойынша квадратлық болған ағзаны есапқа алыў қыйыншылық пайда етпейди. Бундай жағдайда Паули теңлемеси мынадай түрге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63.11) |

Базы бир жағдайларда квадратлық ағзаның әҳмийетли орынды ийелейтуғынлығын көриўге болады.

Егер магнит майданы болмаса ҳәм өз-ара тәсир етисиўге сәйкес келетуғын потенциаллық энергия бөлекшелердиң спинлеринен ғәрезсиз болса (мысалы. зарядланған бөлекешелердиң кулонлық тәсирлесиўинде) системаның гамильтонианы спинлик өзгериўшилерге ийе болмайды. Бундай жағдайда толқын функциясын сәйкес координаталық ҳәм спинлик толқын функцияларының көбеймеси түринде көрсетиўге болады. Бөлекшелердиң ықтыярлы спинлик ҳалда турыўы мүмкин, ал координаталық функция болса әдеттеги Шрёдингер теңлемесин қанаатландырады.

**1-мәселе**. Паули матрицаларының айқын түри.

Спини 1/2 ге тең болған бөлекшелер үш түрли фундаменталлық өзгешеликлерге ийе болады:

1. Оларға кеңисликлик координаталардан ғәрезсиз ишки векторлық қәсийет тән.

2. Сәйкес векторы қозғалыс муғдарының моменти (спин) болып табылады. Оны бөлекшениң әдеттеги орбиталық моментине қосыў керек.

3. Спинниң қандай да бир қураўшысын өлшегенде ямаса мәнислериниң бири алынады.

Бул өзгешеликлерди еки қураўшыға ийе болған толқын функцияларының жәрдеминде тәрийиплеўге болады. Оларға сәйкес келетуғын спинлик операторлар еки қатарлы матрицалардың жәрдеминде сүўретленеди. Оның айқын түрин табыў керек.

**Шешими**. Мейли,

операторы спин векторының операторы болсын. Бундай жағдайда мынадай орын алмастырып қойыў қатнасларының орын алыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.1a) |

ҳ.т.б. қатнасларының орын алыўы керек. Олар қозғалыс муғдары моментиниң операторлары ушын дурыс. Өлшем бирлиги жоқ операторы ушын бул қатнас мынадай түрге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.1b) |

Бул операторлардың ҳәр қайсысының меншикли мәнислери +1 ҳәм -1 ге тең. Сонлықтан, операторларын еки гильберт кеңислигинде еки қатарлы матрицалар түринде көрсетиўге болады. Бул матрицалардың коммутативлик емес екенлигинен олар бир гильбертлик координаталар системасында олардың диагоналлық болыўы мүмкин емес. Гильбертлик координаталар системасын матрица

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.2) |

түринде жазылатуғындай диагоналлық етип сайлап аламыз. Бундай жағдайда бирлик координаталық векторларды мына түрде жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.3) |

Сонлықтан,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.4) |

Егер бөлекше гильберт векторы тәрийиплейтуғын ҳалда жайласқан болса, онда бул ҳалда спин көшериниң оң (терис) бағыты менен бағытлас болады.

Енди ҳәм матрицаларын улыўма түрде жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.5) |

Матрицалық элементлерди табыў ушын, биз дәслеп пенен ке қарата сызықлы болған (129.1b) орын алмастырып қойыў қатнасынан пайдаланамыз:

ямаса

ҳәм

ямаса

Солай етип,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.6) |

теңликлерине ийе боламыз ҳәм бизге тек менен матрицалық элементлерди табыўға туўры келеди. Үшинши орын алмастырып қойыў қатнасы

ямаса

және бир теңликти береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.7) |

(129.6)- ҳәм (129.7)-теңликлер және бир комплексли параметрди (айтайық, ни) анық емес етип қалдырады. Егер бул параметрди ықтыярлы түрде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.8) |

бирге тең деп алған алсақ, онда ең ақырында Паули матрицалары мынадай түрлерге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.9) |

Егер операторының (129.3)-меншикли векторларын пайдалансақ, онда (129.9)-теңликти теңликлердиң эквивалент болған системасы менен алмастырыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129.10) |

**2-мәселе**. Паули матрицаларының меншикли векторлары.

ҳәм операторларының меншикли векторларын табыңыз ҳәм шәртиниң зәрүрли екенлигин көрсетиңиз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.1) |

"баспалдақ" операторлардың ҳәм спин векторының квадраты

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.2) |

операторының қәсийетлерин айқынластырыңыз.

**Шешими**. Буннан алдыңғы мәселениң нәтийжелеринде деп белгилеп

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.3) |

ҳәм, усыған сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.4) |

теңликлерин аламыз. Мейли, еки қураўшыға ийе толқын функциясы болсын:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.5) |

Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.6) |

теңликлерин аламыз. операторының меншикли векторлары

теңлемесин қанаатландырады, бул теңликте меншикли мәнис. Бул теңлемени қураўшылар арқалы

түринде жазыўға болады. Тек болған жағдайда ғана соңғы теңлемелер бир бирине үйлеседи. Солай етип, меншикли векторлар ушын төмендегилерди аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.7) |
|  |

Спинниң бағытының жоқары қараўының (z көшериниң оң бағыты) ҳәм төменде қараўы α ҳәм β Гильберт векторларындағы коэффициентлердиң модуллериниң квадратына пропорционал. Атап айтқанда: 1 ҳәм . Бирақ, еки бағыттың арасында артықмаш бағыт болмағанлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.8) |

теңлиги келип шығады. Келтирилген таллаўларды операторы ушын да қолланыўға болады. Бул жерде де, буннан кейин де биз анықлық ушын теңлиги орынлы деп есаплаймыз. Солай етип, ҳәр бир матрицасының меншикли мәниси +1 ҳәм -1 ге тең. Ал олардың меншикли векторлары

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.9a) |
|  | (130.9b) |
|  | (130.9c) |

түрине ийе.

Паули матрицаларының үшеўи де эрмитлик, , ал оның меншикли мәнислери ҳақыйқый. Керисинше,

|  |  |
| --- | --- |
| ҳәм | (130.10) |

операторлары эрмитлик болып табылмайды:

Олар ушын меншикли мәнислерди табыў мәселеси шешилетуғын мәселе емес. Себеби бул операторларды диагоналлық түрге алып келиўге болмайды. Бул гәплердиң дурыс екенлигине былайынша исениўге болады:

Егер

түриндеги әҳмийети жоқ фазалық көбеймеден бас тартсақ (θ, ξ, η арқалы ҳақыйқый параметрлер белгиленген), онда ең улыўмалық жақтан еки қатарлы унитарлық матрицаны жазыўға болады. операторының үстинен унитарлық түрлендириўди өткерип

матрицасын аламыз. Бирақ соңғы матрицаны ҳақыйқый параметрлерди қәлегенше сайлап алғанда да диагоналлық етиўге болмайды. Себеби менен функциялары θ аргументиниң ҳеш бир мәнисинде бир ўақытта нолге айланбайды.

Егер ҳәм операторлары менен α ҳәм β гильберт векторларына тәсир етсек, онда (130.6)-теңликке сәйкес мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.11) |

Бул операторлар

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.12) |

Егер ҳәм операторларынан нормировкаланған

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.13) |

операторларына өтсек, онда олар ҳәм операторлары сыяқлы спинниң z-қураўшысының меншикли мәнисин 1 ге жылыстырады (ℏ бирликлеринде):

Спинниң шамасына тең проекциясы операторының тәсиринде спинниң проекциясы болған α ҳалына өтеди, операторы да тап сондай болып, бирақ басқа тәрепке қарай тәсир етеди. менен зәрүрлиги бойынша нолге айланыўы керек, себеби жоқарыда келтирилген жылысыўдың қағыйдасы бойынша проекциялары ҳәм шамаларына тең спинниң пайда болыўы керек. Бирақ, биз қарап атырған Гильберт кеңислигинде бундай ҳаллар пүткиллей жоқ.

Ең ақырында спин векторының квадраты операторын қараймыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130.14) |

матрицаларының үшеўиниң де бирлик матрицалар екенлигин көрсетиў қыйын емес, сонлықтан матрицасы диагоналлық болып табылады:

Оның мәниси 3 ке тең (Гильберт кеңислигиниң қандай векторын алсақ та). Бул нәтийжениң дурыс екенлигине пенен көбеймелери ушын (130.11)-қатнастан пайдаланып (130.14)-аңлатпаның екиншисиниң жәрдеминде көз жеткериўге болады.

(130.14)-теңликтен

теңлиги келип шығады. Егер квант санын киргизетуғын болсақ, онда соңгы теңликтиң оң тәрепин былайынша жаза аламыз:

Бул теңликте "Спини ге тең" ҳал ҳаққында гәп еткенде усы жағдайды нәзерде тутады.

**VIII бап. Бөлекшелердиң бирдейлиги. бөлекшелердиң бирдейлиги принципи**

**§ 60. Бөлекшелердиң бирдейлиги, Бөлекшелердиң бирдейлиги принципи. Симметриялы ҳәм антисимметриялы ҳаллар**

Биз дүнья жүзинде кеңнен тарқалған инглиз тилиндеги "Identical Particles" сөзин қарақалпақ тилине "бирдей бөлекшелер" деп аўдарамыз ҳәм усы ўақатқа шекем тийкарынан бир бөлекшениң қозғалысын үйренгенимизди атап өтемиз. Енди биз бирдей болған көп бөлекшелерден (мысалы, электронлардан, протонлардан, нейтронлардан, фотонлардан ҳ.т.б.) туратуғын системаларға тийкарғы дыққатты аўдарамыз ҳәм олардың толқын функцияларының қалайынша алынатуғынлығын үйренемиз. Бундай системаларда классикалық физикада аналогы болмаған жаңа жүдә әҳмийетли болған өзгешеликлер орын алады. Бул өзгешеликти макроскопиялық ҳәм микроскопиялық бөлекшелердиң соқлығысыў процессинде айқын көриўге болады.

Классикалық механикада ҳәр бир бөлекшениң қәсийетлери тек бир шама - оның массасы менен тәрийипленеди. Егер бөлекшелердиң екеўиниң де массалары бирдей болса, онда бөлекшелерди бирдей деп есаплаўға болады. ўақыт моментиндеги ҳәр бир бөлекшениң ҳалы басланғыш шәртлердиң жәрдеминде анықланады.

Белгили болған траекториялар менен қозғалып, бөлекшелер кеңисликтиң базы бир ноқатында серпимли соқлығысады ҳәм сәйкес траекториялар бойынша қозғалысын даўам етеди.

Егер баслангыш шәртлер берилген болса, онда ҳәр бир бөлекшениң траекториясы анықланған ҳәм ҳәр бир бөлекшениң қозғалысын бақлап барыўға болады. Сонлықтан, классикалық механикада бөлекшелер бирдей болса да, олар өзлериниң индивидуаллығын сақлайды. Кеңисликтиң берилген ноқаты арқалы соқлығыўшы бөлекшелердиң қайсысының өтетуғынлығын барлық ўақытта да айтыўға болады.

Бирақ, микробөлекшелерди қарағанда тап сол соқлыгысыў процесси пүткиллий басқаша жүзеге келеди. Мейли, соқлығысқан моментте бөлекшелер кеңисликтиң белгили болған ноқатларында жайласқан болсын. Бундай жағдайда анықсызлық қатнаслары бойынша олардың импульслери анық мәниске ийе бола алмайды. Соқлығысқаннан кейин биз бөлекшелердиң "траекторияларын" сүўретке түсире аламыз (мысалы, Вильсон камерасындағы еки из). Бирақ, егер соқлығысыўшы бөлекшелердиң тәбиятлары бирдей болса (мысалы еки электрон ямаса еки протонның соқлығысыўы), онда усы еки бөлекшениң қайсысының берилген из бенен байланыслы екенлигин табыўдың мүмкиншилиги жоқ.

Екинши мысал сыпатында бир еки водород атомынан туратуғын системаны қараймыз. Егер атомлар бир биринен жеткиликли дәрежеде алыста турса, онда электронлық бултлар бир бири менен бетлеспейди ҳәм ҳәр бир электрон өзиниң ядросының қасында локализацияланған. Атомлардың бир бирине жақынласыўының барысында электронлық бултлардың бетлесиўи орын алады. Бул бетлесиў областында электронлардың екеўин де табыўдың итималлығының бар екенлигин аңғартады. Мейли, өлшеўдиң барысында усы областта электрон табылған болсын. Бундай жағдайда бул электронның қайсы ядроға тийисли екенлигин анықлаўдың ҳеш қандай мүмкиншилиги болмайды.

Жоқарыда келтирилген мысаллар квантлық бөлекшелердиң бирдейлигиниң, классикалық бөлекшелердиң "бирдейлигине" салыстырғанда әдеўир терең тәбиятқа ийе екенлигин көрсетеди. Квантлық бөлекшелер тек бирдей болып қалмай, пүткиллий бирдей болып табылады.

Егер биз бир электронды екиншиси менен алмастырыў жолы менен системаның басланғыш ҳалын өзгертсек, бәри бир, системада ҳеш қандай физикалық өзгерис болмаған ҳәм ҳеш бир физикалық тәжирийбе бундай алмастырыўды таба алмаған болар еди.

Жоқарыда келтирилген мысалларда ситуацияны бир қанша схемаластырғанымызда атап өтиў зәрүрли. Мысалы, егер, соқлығысыўшы бөлекшелердиң екеўи де импульслердиң белгили мәнислерине ийе болған болса, онда олар координаталардың белгили болған мәнислерине ийе бола алмайды. Сонлықтан, ҳәтте соқлығысыў областын көрсетиў де мүмкин емес. Усындай жоллар менен биз *бирдейлик принципине* келемиз. Оған былайынша анықлама бериўге болады: *бирдей болған бөлекшелер системасында олардың қәлеген екеўиниң орынларын алмастырып қойғанда өзгермей қалатуғын ҳаллар ғана жүзеге келеди*.

Микробөлекшелердиң бирдейлиги жүдә әҳмийетли ҳәм терең нәтийжелерге алып келеди.

Бирдей болған дана бөлекшелерден туратуғын системаны қараймыз. Бундай системаның толқын функциясы ψ мынадай түрге ийе:

Бул аңлатпада арқалы -бөлекшени тәрийиплейтуғын координаталар менен спинлик өзгериўшилердиң жыйнағы белгиленген. Егер еки бөлекшениң орынларын алмастырып қойса, яғный -бөлекшениң координаталары менен спинлерин -бөлекшениң сәйкес шамалары менен алмастырса, онда бирдейлик принципи бойынша системаның ҳалы өзгериске ушырамайды. Демек, толқын функциясы тек фазалық көбейтиўшиге ғана өзгериске ушырайды.

Еки бөлекшениң орынларын алмастырып қойғаннан кейинги толқын функциясын дәслепки толқын функциясы арқалы былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (64.1) |

Бул теңликте - базы бир затлық шама. Егер - ҳәм - бөлекшелердиң орынларын және бир рет алмастырып қойсақ, онда бөлекшелер системасы өзиниң дәслепки ҳалына қайтып келеди.

Екинши тәрептен, (64.1)-операцияны қайтадан орынлап, биз мынадай теңликти жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | () |

Буннан шамасының 1 ге тең екенлиги келип шығады, демек

теңлиги орынлы болады екен. Солай етип, бирдей болған еки бөлекшелердиң орынларын алмастырып қойғанда системаның толқын функциясының пүткиллей өзгермей қалыўы ямаса белгисин кери белгиге өзгертиўи мүмкин. Биринши типтеги толқын функцияларын *симметриялы*, ал екинши типтеги толқын функцияларын *антисимметриялы* толқын функциялары деп атайды. Буннан кейинги таллаўларымыз ушын әҳмийетли болған орын алмастырып қойыў операторын ямаса алмастырыў операторы ны киргиземиз. Анықламасы бойынша операторы системаның толқын функциясына тәсир еткенде жаңа

|  |  |
| --- | --- |
|  | (64.2) |

функциясының алыныўы керек. Бундай алмасыўға -бөлекшениң бурын -бөлекше ийелеген орынға ҳәм -бөлекшениң бурын -бөлекше ийелеген орынға көшиўи сәйкес келеди.

(64.2)-аңлатпаны (64.1)-аңлатпа менен салыстырып, биз операторының меншикли мәнисиниң шамасына тең екенлигин көремиз. Бундай жағдайда симметриялы ҳәм антисимметриялы функциялар сәйкес +1 ҳәм -1 мәнислерине сәйкес келетуғын операторының меншикли мәнислери болып табылады.

Орын алмастырып қойыў операторының жәрдеминде симметрия қәсийетиниң ўақыттың өтиўи менен сақланатуғынлығын көрсетемиз. Бул, егер система ўақыттың басланғыш моментинде симметриялық ямаса антисимметриялық ҳалда турған болса, онда буннан кейинги ҳеш бир сыртқы тәсирдиң оның симметриясын өзгертпейтуғынлығын аңғартады. Басқа сөз бенен айтқанда система барлық ўақытта симметриялық ямаса антисимметриялық ҳалда қала береди. Бул тастыйықлаўды дәлиллеў ушын операторының Гамильтон операторы менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиў зәрүрли. Бирдей болған еки бөлекшениң орынларын алмастырып қойыў системаның гамильтонианын пайда ететуғын суммадағы ағзалардың орынларын алмастырып қойыўды аңғартады. Усындай жағдайды бирдей болған еки бөлекшеден туратуғын система мысалында аңсат көриўге болады. Бул жағдайда гамильтонианды былайынша жазады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (64.3) |

Бул аңлатпада арқалы бөлекшелердиң бир бири менен тәсирлесиў энергиясы белгиленген, ал сыртқы майдан менен өз-ара тәсирлесиўге жуўап береди ҳәм, әлбетте, бирдей болған еки бөлекше ушын бирдей түрге ийе. Бөлекшелерди алмастырып қойғанда жаңа гамильтониан ушын мынаған ийе боламыз:

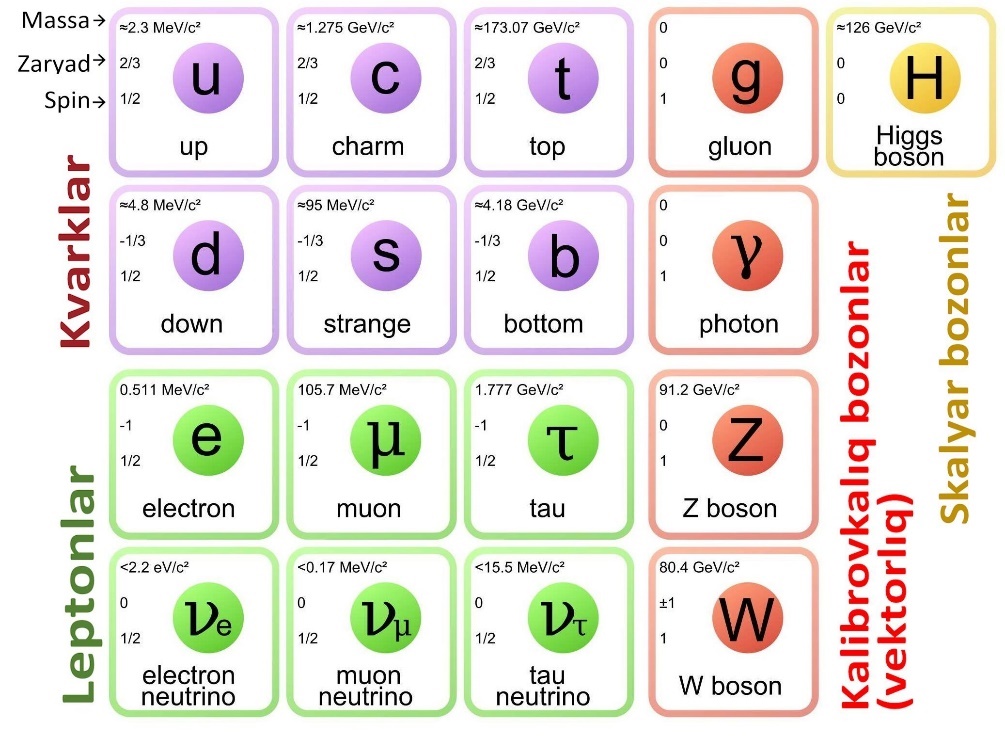
|  |  |
| --- | --- |
|  | (64.4) |

Бул гамильтонианның бөлекшелердиң орынларын алмастырып қоймастан бурынғы гамильтониан екенлиги пүткиллей айқын. Алынған нәтийжени N дана бөлекшеден туратуғын система аңсат алып өтиледи. Биз бөлекшелердиң орынларын алмастырып қойыўдың гамильтонианды өзгертпейтуғынлығын көремиз. Сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (64.5) |

Демек, системаның симметрия қәсийети қозғалыс интегралы болып табылады ҳәм барлық ўақытта сақланады. Сонлықтан, симметрияны системаны қурайтуғын бөлекшелердиң өзлериниң қәсийетлери менен анықланады деп ойлаў тәбийий. Пүтин спинге ийе бөлекшелердиң симметриялы толқын функциялары, ал ярым пүтин спинге ийе бөлекшелердиң антисимметриялы толқын функциялары менен тәрийпленетуғынлығын көрсетиўдиң сәти түсти. Биринши бөлекшелер Бозе-Эйнштейн бөлекшелери ямаса *бозонлар*, екинши бөлекшелер Ферми-Дирак бөлекшелери ямаса *фермионлар* деп аталады.

Элементар бөлекшелер физикасының Стандарт моделиниң элементар бөлекшелери - сүўретте келтирилген (бул сүўретте гравитон жоқ). Олар фундаменталлық элементар фермионлардан (кварклар, лептонлар) ҳәм бозонлардан (глюонлар, фотонлар, аралықлық ҳәм бозонлары, Хиггс бозоны) туратуғынлығын көриўге болады. Бул сүўреттеги фермионлар затларды пайда етеди, ал калибровкалық бозонлар деп аталатуғын бозонлар болса фермионлардың арасындағы фундаменталлық өз-ара тәсирлесиўди тәмийинлейди.



- сүўрет. Элементар бөлекшелер физикасының Стандарт моделиниң элементар бөлекшелери. Лептонлар менен кварклар спинлери 1/2 ге тең фермионлар, калибровкалық бозонлар спини 1 ге тең, ал скаляр бозонлар (ҳәзирше олардың тек биреўи ғана белгили) спини 0 ге тең бозонлар болып табылады (элементар бөлекшелердиң атамалары инглиз тилинде берилген).

Бирдей болған бөлекшелерден туратуғын системаның симметрия қәсийетлерин аныклаў ушын қурамалы бөлекшениң толық спинин анықлаў керек. Элементар бөлекшеде орын алған жағдай сыяқлы қурамалы бөлекшениң спини пүтин санға тең болған жағдайларда толқын функциясы бөлекшелердиң орынларын алмастырып қойыўға қарата симметриялы, ал қурамалы бөлекшениң спини ярым пүтин болғна жағдайда антисимметриялы.

Мысал сыпатында α-бөлекшелерден туратуғын системаны қараймыз. Системаның толқын функциясының симметрия қәсийетлерин анықлаў ушын α-бөлекшесиниң толық спинин есаплаў керек. α-бөлекшесиниң еки протоннан ҳәм еки нейтроннан туратуғынлығы белгили. Оған киретуғын бөлекшелердиң спинлери 1/ 2 ге тең, ал бөлекшелердиң саны жуп, сонлықтан α-бөлекшесиниң толық спини пүтин сан еселенген ℏ қа тең. Солай етип, α-бөлекшелер системасының толқын функциясы симметриялы толқын функция болып табылады.

**§ 61. Фермионлар менен бозонлардың толқын функциялары.**

**Паули принципи**

Бир бири менен тәсирлеспейтуғын бирдей болған N дана бөлекшеден туратуғын системаны қараймыз. Усындай системаның стационар ҳаллары ушын Шрёдингер теңлемеси мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65.1) |

Биз бундай теңлемениң шешиминиң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65.2) |

түринде жазылатуғынлығын билемиз. Бул формулада , , ... арқалы бөлекшелер туратуғын ҳаллардың квант санлары. Ҳәр бир арқалы айырым алынған бөлекшениң ҳалын тәрийиплейтуғын квант санларының толық жыйнағы белгиленген. толқын функциясы бир бөлекше ушын Шрёдингер теңлемесиниң шешими болып табылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Бирақ, (65.2)-теңлеме симметрияның талапларын қанаатландырмайды. Улыўма жағдайда ол симметриялық ямаса антисимметриялық функцияларға кирмейди. (65.1)-теңлеме сызықлы болғанлықтан, онда (65.2) типиндеги шешимлердиң суперпозициясы да оның шешими болып табылады. Талап етилетуғын симметрияға ийе толқын функциясын алыў ушын толқын функцияларының сәйкес суперпозициясын алыў керек. Әпиўайылық ушын бир бири менен тәсирлеспейтуғын еки бөлекшеден туратуғын системаны қараймыз. Бундай жағдайда симметрияластырылмағын толқын функциялары болып, әлбетте,

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

функциялары хызмет етеди. Бундай жағдайда 1 ҳәм 2 индекслери ҳәм толқын функцияларында бөлекшениң ҳәр қыйлы болған еки ҳалын анықлайды. ҳәм толқын функциялары системаның бирдей энергиясына жуўап береди. Бул функциялардан сол энергияға сәйкес келетуғын еки симметрияласқан комбинацияны пайда етиўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Биринши толқын функция бөлекшелердиң орынларын алмастырып қойыўға қарата симметриялы, ал екиншиси бөлекшелердиң орынларын алмастырып қойыўға қарата антисимметриялы. ҳәм шамаларының нормировка шәртинен анықланыўы мүмкин. Егер ҳәм функцияларын 1 ге нормировкаласа, ал функциясын ( функциясын да)

шәрти менен нормировкаласа, онда еки жағдайда да әпиўайы есаплаўлар

теңликлерин береди. Сонлықтан, нормировкаланған ҳәм симметрияластырылған толқын функцияларын былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65.3) |
|  | (65.4) |

Енди (65.3)- ҳәм (65.4)-формулаларды ықтыярлы сандағы бир бири менен тәсирлеспейтуғын бөлекшелер ушын улыўмаластырыўға болады. Симметриялы функциялар менен тәрийипленетуғын бозонлар системасы ушын мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65.5) |

## Бул аңлатпадағы суммалаў индекслериниң мүмкин болған барлық орын алмастырыўлары бойынша алып барылады. арқалы бирдей болған -мәниске ийе индекслердиң саны белгиленген. Солай етип, саны берилген ҳалында қанша бөлекшениң бар екенлигин көрсетеди екен. Сонлықтан, (65.5)-толқын функциясы 1 ге нормировкаланған. Ҳақыйқатында да, функциясының ортогоналлығынан нормировкалаўшы интегралға үлести тек сумманың ҳәр бир ағзасының модулиниң квадраты ғана береди. Сумманың ағзаларының саны шамасына тең. Тап сондай жоллар менен фермионлар системасы ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65.6) |

аңлатпасына ийе боламыз.

Симметрияластырылған ҳәм толқын функциялары сәйкес N дана өз-ара тәсирлеспейтуғын бозонлар менен фермионларды тәрийиплейди.

Енди бирдей болған бөлекшелер арасында өз-ара тәсирлесиў болған жағдайда толқын функциясының қалайынша өзгеретуғынлығын қараймыз. Толқын функциясы ўақыттан ғәрезли деп болжаймыз. Дәл толқын функциясы

суперпозицияларының бири түринде жазылады. ҳәм функциялары сәйкес i- ҳәм k-симметриялы ҳәм антисимметриялы ҳаллардың ўақыттан ғәрезли болған итималлықларының амплитудаларын береди.

Өз-ара тәсирлесиў системадағы өтиўлерди пайда етеди. Симметрияның сақланыў нызамы бойынша қәлеген сыртқы тәсирде система тап сондай симметрияға ийе болған ҳалға өтеди[[17]](#footnote-17). Солай етип, өз-ара тәсирлесиўши бөлекшелер системасын тәрийиплейтуғын толқын функциясы белгили симметрияға ийе болған бир бири менен тәсирлеспейтуғын бөлекшелер системасының толқын функциясы менен аңғартылады екен. Табылған (65.5)- ҳәм (65.6)-толқын функциялары бир қатар әҳмийетли нәтийжелерди алыўға мүмкиншилик береди.

Ең дәслеп ферми-бөлекшелери системасын қараймыз. Системадағы бөлекшелер бирдей ҳалларда жайласқан деп болжаймыз, яғный . Бул бөлекшелердиң екеўиниң де квант санларының бирдей жыйнағына ийе екенлигин аңғартады (мысалы, орайлық симметрияға ийе майдандағы қозғалыста квант санларының бирдей мәнислери ямаса белгили импульске ийе болған еркин қозғалыстағы санларының бирдей мәнислери). Бундай жағдайда (65.6)-анықлаўшыда барлық қатарлар бирдей болады, ал толқын функциясы бирдей болып нолге айланады. Усының менен бирге мынадай тастыйықлыў дәлилленеди: системадағы бирдей болған Ферми бөлекшелерин өлшегенде *бир квантлық ҳалда еки ямаса екиден көп бөлекшеның табылыўы мүмкин емес*. Бул тәжирийбелерде алынған мағлыўматларды таллаўдың нәтийжесинде квантлық механика пайда болмастан бурын табылған Паули принципи болып табылады.

Көпшилик жағдайларда Паули принципин квазиклассикалық жақынласыўдың терминлеринде айтады: "көлеми шамасына тең фазалық кеңисликтиң қутысында берилген бағыттағы спини бар бөлекшениң тек биреўи ғана жайласа алады".

Статистикалық физикада Паули принципи ярым пүтин спинге ийе бирдей болған бөлекшелерден туратуғын системалардың статистикалық қәсийетлерин анықлайды. Бул принциптиң көп электронлы атомлар менен қурамалы ядроларды қурыўдағы әҳмийети жүдә уллы.

Енди бирдей болған дана бозоннан туратуғын системаны қараймыз. Бозонлардың ҳәр бири берилген ўақыт моментинде толқын функциясына ийе болған бир ҳалда жайласқан болсын. Бул толқын функциясы былайынша нормировкаланған:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Усы ҳалдағы системаның орташа энергиясын анықлаймыз. Бөлекшелердиң усындай системасының гамильтонианын былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65.7) |

Бул аңлатпада арқалы -бозонның энергия операторы, ал арқалы - ҳәм -бозонлардың өз-ара тәсирлесиў энергиясы операторы белгиленген. Бозонлар системасының 1 ге нормировкаланған толқын функциясы ўақыттың усы моментинде

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

түрине ийе болады. Бул ҳалдағы системаның орташа энергиясы мынаған тең:

Бозонлардың бирдейлигин есапқа алып ҳәм болған жағдай ушын мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65.8) |

Егер бөлекшелер бир бири менен тәсирлеспейтуғын болса, онда ҳәм энергияның орташа мәниси мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65.9) |

(65.8)- ҳәм (65.9)-аңлатпалар бизге буннан кейинги таллаўларды өткериў ушын керек болады.

**§ 62. Спини 1/2 ге тең болған еки бөлекшеден туратуғын системаның толқын функциясы**

Енди еки электроннан ямаса еки протоннан туратуғын системаның толқын функциясын қараймыз. Толық толқын функция еки бөлекшениң кеңисликлик ҳәм спинлик координаталарынан ғәрезли ҳәм бул өзгериўшилерде антисимметриялы. Сыртқы магнит майданы жоқ, ал бөлекшелердиң арасындағы өз-ара тәсирлесиў олардың спинлеринен ғәрезсиз деп болжап, толық толқын функцияны тек кеңисликлик ҳәм спинлик өзгериўшилердиң толқын функцияларының көбеймеси түринде көрсетемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.1) |

Системаның толық толқын функциясы φ ди спинниң квадраты операторының меншикли функциялары менен бөлекшелердиң ҳәр бириниң z көшерине түсирилген проекциясының көбеймеси (олар түринде жазылады). Проекциялардағы индекслер спинниң z көшерине түсирилген проекциясын, ал қаўсырманың ишиндеги санлар бөлекшелердиң номерлерин аңғартады.

Ең улыўма түрде функцияны былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.2) |

Бул аңлатпада ҳәм - ықтыярлы константалар.

Берилген толық спин ҳәм оның көшерине түсирилген прорекцияларына ийе ҳалды тәрий иплейтуғын спинлик толқын функцияларын анықлаймыз.

Спинлер моментлерди қосыўдың улыўмалық қағыйдасы бойынша қосылатуғын болғанлықтан, еки бөлекшеден туратуғын системаның толық спини еки мәниске ийе бола алады: . теңлиги орынланғанда оның көшерине түсирилген проекциясы 1, 0 ҳәм -1 мәнислерине ҳәм теңлиги орынлы болғанда (ℏ бирликлеринде).

Берилген пенен қа сәйкес келетуғын ҳалды тәрийиплейтуғын φ функциялары

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.3) |

түринде жазылады.

Бул теңлемелерде - системаның толық спини операторы. Системаның спинлик функциясы болған (66.2)-аңлатпадағы ҳәм коэффициентлерин φ ушын жазылған (66.3)-аңлатпадағы теңлемелердиң екеўи де қанаатландырылатуғындай етип сайлап алыў керек.

Тиккелей тексериў менен системаның жоқарыда келтирилген барлық шәртлерди қанаатландыратуғын спинлик функциясының былайынша жазылатуғынлығына исениўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.4) |
|  | (66.5) |

Бул аңлатпалардағы жоқарғы индекс еки бөлекшениң толық спинин, ал төменги индекс оның көшерине түсирилген проекциясын аңғартады.

Биринши ҳәм екинши бөлекшениң орынларын алмастырып қойса, яғный ҳәм алмастырыўлары орын алғанда (66.4)-спинлик функциялардың өзгермейтуғынлығын аңғарыўға болады. Демек, бөлекшелердиң спинлерине қарата бул функциялар симметриялы. Бөлекшелердиң орынларын алмастырып қойған жағдайда (65.5)-спинлик функция белгисин өзгертеди ҳәм антисимметриялы функция болып табылады.

(66.4)-спинлик функциялар спинлик триплетти пайда етеди. Триплеттиң үш қураўшысының жыйнағы спини 1 ге тең болған бөлекшениң үш қураўшыға ийе спинлик функциясына эквивалент. Нолге тең болған спинге ийе ҳалды тәрийиплейтуғын (66.5)-спинлик функция спинлик синглетти пайда етеди.

Синглетлик ҳәм триплетлик ҳаллардағы () скаляр көбеймесиниң меншикли мәнислерин анықлаймыз. Усы көбейме бизге буннан кейин кейин де керек болады.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

теңлиги орынлы болғанлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.6) |

Бул теңликтиң оң тәрепине операторлардың меншикли мәнислерин қойып, мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.7) |

Бундай жағдайда триплетлик ҳал ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.8) |

ал, теңлиги орынлы болған синглетлик ҳал ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.9) |

теңликлери орынлы болады.

Енди кеңисликлик өзгериўшилердиң функциясы болған функциясын қараймыз. (66.1)-толқын функция антисимметриялы болғанлықтан, онда ҳалда координаталық толқын функциясы антисимметриялы, ҳалда симметриялы болады. Егер бөлекшелер бир бири менен тәсирлеспейтуғын болса ҳәм базы бир ҳәм ҳалларында туратуғын болса, онда координаталық функция мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.10) |
|  | (66.11) |

Улыўма жағдайда системаның салмақ орайының қозғалысы менен бөлекшелердиң салыстырмалы қозғалысын тәрийиплейтуғын координаталарына өткен қолайлы.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.12) |

Енди (66.12)-толқын функциясының симметриялы ямаса антисимметриялы болыўы талабының қандай нәтийжелерге алып келетуғынлығын анықлаймыз. Ең дәслеп өз-ара тәсирлесиў потенциалы бөлекшелердиң арасындағы қашықлықтан ғәрезли екенлигин аңғарамыз. Сонлықтан бундай системада бөлекшелердиң салыстырмалы қозғалысы менен байланыслы болған қозғалыс муғдарының орбиталық моменти сақланады. Енди бөлекшелердиң орынларын алмастырып қоямыз: . Бундай орын алмастырыўда салмақ орайының радиус-векторы өзгермейди. Демек, толқын функциясы да өзгериске ушырамайды. Салыстырмалы қозғалыстың радиус-векторы белгисин өзгертеди. Егер бөлекшелердиң салыстырмалы қозғалысы менен байланыслы болған орбиталық момент квант саны тәрепинен бериледи ҳәм анықланады. Сонлықтан, алмастырыўындағы функциясының түрлениў нызамы мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.13) |

Биз орын алмастырыўларында (66.12)-координаталық толқын функциясының Мы видим, что в этом случае координатная волновая

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66.14) |

нызамы бойынша түрленетуғынлығын көремиз.

Из (66.14)-аңлатпадан бөлекшелер триплетлик ҳалда жайласқан жағдайларда квант санының тек тақ мәнислерге ийе бола алатуғынлығын көремиз. Керисинше, егер бөлекше синглетлик ҳалда () жайласқан болса, онда тек тақ мәнислерди қабыл ете алады.

**§ 63. Алмасыў тәсирлесиўи. Химиялық және ядролық өз-ара тәсирлесиўлер**

Квантлық бөлекшелердеги бирдейлик принципи бөлекшелер арасындағы өз-ара тәсирлесиўлер ҳаққындағы классикалық көз-қараслардың фундаменталлық өзгерислерине алып келеди. Усындай өзгерислердиң мәнисин түсиниў ушын дәслеп бир әпиўайы мысалды қарап өтемиз.

Ярымпүтин спинге ийе болған еки бирдей бөлекше классикалық мәнисте бир бири менен тәсирлеспейтуғын болсын Бул системаның гамильтонианында бөлекшелердиң арасындағы өз-ара тәсирлесиўди тәрийиплейтуғын ағзаның жоқ екенлигин билдиреди.

Мейли, бөлекшелердиң бири фазалық кеңисликтиң сызықлы өлшемлери болған базы бир қутысында жайласқан болсын. Мынадай қатнастың орын алатуғынлығы түсиникли:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Бул аңлатпада - бөлекшениң координатасындағы анықсызлық, - бөлекшениң импульсиндеги анықсызлық.

Паули принципине сәйкес, екинши бөлекше фазалық кеңисликтиң бул қутысына келип түсе алмайды. Сонлықтан, оның биринши бөлекшеден шамасынан үлкен кашықлықта жайласыўы ямаса шамасынан үлкен болған импульсине, яғный импульсине ийе болыўы керек. Тек усындай жағдайда ғана ол биринши бөлекшеге дан киши қашықлыққа жақынласып келиўи ҳәм фазалық кеңисликтиң басқа қутысына (ямаса клеткасына) келип түсиўи мүмкин. Демек, егер салыстырмалы қозғалысқа сәйкес келетуғын жеткиликли дәрежедеги үлкен импульске ийе болмаса, онда спинлери параллель болған бөлекешелер бир бирине жақын келе алмайды екен. Бөлекшелердиң тап усындай қәсийетлери олардың арасындағы базы бир ийтерисиў күшиниң пайда болыўына эквивалент. Егер бөлекшелердиң спинлери антипараллель болатуғын болса, онда жоқарыда айтылған гәплер мәнисин жоғалтады. Себеби Паули принципи бундай бөлекшелерге фазалық кеңисликтиң бир қутысында жайласыўды қадаған етпейди.

Солай етип, бөлекшелердиң ҳалларына шек қоятуғын Паули принципинен бөлекшелердиң спинлериниң бағытларына ғәрезли болған өз-ара тәсирлесиўдиң бар екенлиги ҳаққындағы факт келип шығады.

Бозонлар арасындағы өз-ара тәсирлесиўди усындай көргизбели мысалда иллюстрациялаўдың мүмкиншилиги жоқ. Бирақ, сонда да, толқын функциясына қойылатуғын симметрияластырыў талабы бөлекшелер системасының энергиясының оның толық спининен ғәрезли екенлигине сәйкес келеди, яғный бөлекшелердиң арасындағы өз-ара тәсирлесиўдиң пайда болыўына алып келеди.

Енди спинлери 1/2 ге тең болған бөлекшелердиң арасында операторы менен тәрийипленетуғын базы бир әззи тәсирлесиў бар деп болжаймыз. Бул оператордың аңлатпасындағы арқалы бөлекшелердиң арасындағы қашықлық белгиленген. Көргизбелилик ушын, операторын еки зарядтың арасындағы Кулонлық ийтерисиўге сәйкес келеди деп болжайық, яғный теңлигиниң орын алыўы керек. Бундай жағдайда биринши жақынласыўдағы өз-ара тәсирлесиўдиң орташа энергиясы мынаған тең:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67.1) |

Бул жерде арқалы сырттан тәсир тиймеген ҳалдың нормировкаланған толқын функциясы. Суммалаў спинлик өзгериўшилердиң барлық мәнислери бойынша жүргизиледи.

Болжаў бойынша ноллик жақынласыўда бөлекшелерди бир бири менен тәсирлеспейди деп есаплаймыз. Сонлықтан, спинлик ҳәм координаталық толқын функциялары ажыралады. Қала берсе, бул функциялар симметрияланған ҳәм антисимметрияларған (66.10)- ҳәм (66.11)-көбеймелер түринде жазылады.

операторының мәниси менен толқын функцияларын (67.1) ге қойып, мынаған ийе боламыз:

Бул теңликлерде 1 ҳәм 2 санлары сәйкес биринши ҳәм екинши электронның координаталарын аңғартады, ал болса олардың арасындағы қашықлық. + менен - белгилери орын алмастырыўларға қарата симметриялы ҳәм антисимметриялы болған бөлекшелердиң ҳалларына тийисли. Бул формулада спинлик өзгериўшилер бойынша суммалаў өткерилген ҳәм бул суммалаў 1 ди береди. Усының менен бирге дурыслығы көринип турған

теңлигинен пайдаландық. Соңғы теңликте интеграллаў индекслери 1 менен 2 ни алмастырғанда бир интеграл екиншисине өтеди.

Енди төмендегидей белгилеўлерди киргиземиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67.2) |
|  | (67.3) |

Нәтийжеде (67.1)-тәсирлесиў энергиясын былайынша жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67.4) |
|  | (67.5) |

белгиси антипараллель спинлерди (спинлик синглет), ал белгиси параллель спинлерди (спинлик триплет) аңғартады.

Жоқарыда келтирип шығарылған (67.4)- ҳәм (67.5)-формулалардан олардың улыўмалық түриниң тек кулонлық тәсирлесиўге сәйкес келетуғынлығы келип шықпайды. Сонлықтан, оларды бөлекшелердиң коордлинаталарынан ғәрезли болған қәлеген өз-ара тәсирлесиў ушын да алыў мүмкин.

Бул нәтийжени ҳәр қыйлы тәбиятқа ийе болған бөлекшелер ушын өткерилген нәтийжелер менен салыстырыў қызықлы. Бундай жағдайда биз симметрияластырылмаған толқын функциясы ушын аңлатпасын жазған ҳәм оған сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67.6) |

формуласын алған болар едик.

(67.6)-формула әпиўайы мәниске ийе. Ол еки бөлекшениң арасындағы кулонлық ийтерисиўге сәйкес келетуғын энергияның орташа мәнисин береди. Ҳалында турған бөлекшелердиң бириниң орны итималлықтың тығызлығы менен, ал екиншисиники менен тәрийипленеди.

(67.4)- ҳәм (67.5)-формулаларда C интегралы (67.6) ға уқсас болған структураға ийе ҳәм жийи кулонлық интеграл деп аталады. Бирақ, қатаң түрде айтқанда, ол усындай интерпретацияны ислеўге мүмкиншилик бермейди. Себеби бирдей болған бөлекшелердиң қайсысының , қайсысының ҳалда турғанын көрсетиўге болмайды.

Әдетте алмасыў интегралы деп аталатуғын интегралы (немисше Austausch - алмасыў) ҳеш қандай классикалық аналогқа ийе емес. Айқын системалар ушын орынланған есаплаўлар менен интегралларының барлық ўақытта оң мәниске ийе болатуғынлығын көрсетеди. (67.4)- ҳәм (67,5)-формулалардан бөлекшелердиң бир бири менен тәсир етисиўине байланыслы орташа энергияға қосылатуғын дүзетиўдиң олардың спинлериниң бағытларынан ғәрезли екенлигин көрсетеди.

Өз-ара тәсирлесиў еки бөлимнен (классикалық ҳәм алмасыў) турады деп есаплаўдың дурыс емес екенлигин атап өтемиз. Ҳақыйқатында, өз-ара тәсирлесиўди еки бөлимге бөлиў мүмкин емес (себеби шамасын классикалық интерпретациялаў мүмкин емес).

Алмасыў тәсирлесиўиниң өзине ең тән болған бөлими (67.3)-аңлатпадағы A интегралы менен аңғартылады. Бул интегралды биринши бөлекшениң ҳалынан ҳалына, ал екинши бөлекшениң ҳалынан ҳалына өтиўине сәйкес келетугын матрицалық элемент сыпатында трактовкалаўға болады. (64.2)-формула менен анықланатуғын ҳәм бөлекшелердиң орынларын алмастыратуғын операторын киргиземиз. Бундай жағдайда

Демек, операторы биринши ҳәм екинши бөлекшениң алмасыў операторы болып табылады. Усы оператордың жәрдеминде интегралын былайынша көрсетиўге болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67.7) |

Демек, алмасыў тәсирлесиўи операторын операторы менен алмастырыўды аңғартады екен. Алмасыў операторының жәрдеминде өз-ара тәсирлесиўдиң толық энергиясын былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67.7') |

Биз квантлық механикадағы бөлекшелердиң бирдейлиги олардың өз-ара тәсирлесиўин әдеўир үлкен өзгертетуғынлығын көремиз. Егер өзлериниң тәбияты бойынша операторы менен тәрийипленетуғын ықтыярлы өз-ара тәсирлесиўге ийе болса, онда бирдей болған бөлекшелерде бул өз-ара тәсирдиң операторы түринде жазылады. Бул жуўмақ өз-ара тәсирлесиўдиң тәбиятынан, яғный операторының характеринен ғәрезли емес. Мысалы бирдей болған бөлекшелердиң электрлик өз-ара тәсирлесиўи (мысалы еки электронның, позитронның ямаса еки протонның) ҳәр қыйлы болған бөлекшелердиң (мысалы, позитрон менен протонның) өз-ара тәсирлесиўинен басқаша болады.

Солай етип, ҳалы симметрияластырылғын толқын функциялары менен тәрийипленетуғын бирдей бөлекшелердиң өзгешелиги әҳмийетли болған улыўмалық нәтийжеге алып келеди: системаның ҳалы оның қосынды спининен ғәрезли болып шығады. Бул жағдай параграфтың басында келтирилген сапалық көз-қараслардың санлы аңлатпасы болып табылады.

Бөлекшелер системасының энергиясының толық спиннен ғәрезли болатуғынлығы бөлекшелердиң арасындағы өз-ара тәсирлесиўдиң бар болатуғынлығы ҳаққындағы тастыйықлаў менен эквивалент. Бул тәсирлесиў *алмасыў тәсирлесиўи* атамасына ийе.

Алмасыў тәсирлесиўи өзине тән квантлық характерге ийе. Формаллық жақтан бул классикалық шекте системаның спининиң нолге айланатуғынлығынан келип шығады. Сонлықтан, классикалық шекке өткенде ҳәр қыйлы спинлерге ийе ҳаллардың арасындағы айырма, соның ишинде сол ҳаллардың энергияларының арасындағы айырма толық жоғалады.

Усы ўақытқа шекем гәп ярым пүтин спини бар бөлекшелер ушын айтылған болса да, сапалық жуўмақты пүтин спинге ийе болған бөлекшелер болған бозонлар ушын да шығарыўға болады. Спини нолге тең болған еки бозоннан туратуғын системада сәйкес Шрёдингер теңлемеси формаль түрде шешиўдиң нәтийжесинде алынатуғын барлық ҳаллар жүзеге келмейди.

Системаның физикалық ҳалларына ҳәм оның энергиясының белгили болған мәнислерине симметриялы болған толқын функциялары жуўап береди. Спини 1 ге тең еки бозон болған жағдайда системаның энергиясы да толық спиннен ғәрезли болып шығады.

Еки фермионнан ямаса бозоннан туратуғын система ушын алынған нәтийжелер бирдей болған бөлекшелердиң ықтыярлы санынан туратуғын система ушын тиккелей алып өтиледи.

Еки электронның өз-ара тәсирлесиўи бойынша келтирилген мысалға қайтып келип алмасыў күшлериниң төмендегидей көргизбели ҳәм қатаң емес интерпретация ислеўге мүмкиншилик беретуғынлығын көриўге болады: t=0 ўақыт моментинде биринши электрон ҳалында, ал екинши электрон ҳалында турды деп болжайық. Және бир рет мына жағдайды атап өтиў керек: усындай формулировканы тек моменти ушын тийисли ҳәм буннан кейинги таллаўлар алмасыў тәсирлесиўи эффектине тек көргизбелилик бериў ушын хызмет етеди. Бундай жағдайда басланғыш толқын функциясы

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

түрине ийе.

Симметриялық ҳәм антисимметриялық толқын функциялары менен тәрийипленетуғын ҳаллар стационар ҳаллар болып табылады. Олардың энергиялары сәйкес

аңлатпаларының жәрдеминде бериледи. Сонлықтан, ҳәм толқын функцияларының ўақыттан ғәрезлиги

формулалары менен анықланады. ўақыт моментлериндеги толық толқын функциясы олардың суперпозициясы болып табылады ҳәм, сонлықтан, стационар ҳалды тәрийиплемейди.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67.8) |

(67.8)-формула мынадай жағдайдың орын алатуғынлығын көрсетеди: егер ўақыт моментинде 1-электрон ҳалында, ал 2-электрон ҳалда турған болса, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67.9) |

ўақты өткенде электронлар ҳалларын алмастырады.

толқын функциясы биринши электронды ҳалда, ал екинши электронды ҳалда табыўға жуўап береди. 2τ ўақыты өткеннен кейин олар басланғыш ҳалға қайтып келеди ҳ.т.б. Солай етип, электронлар τ дәўири менен ҳалларын алмастырады екен. Усындай ҳалларды алмасыўды көргизбели түрде былайынша жийи көрсетеди: системаның электронларының бири (мысалы) бир атомнан ушып шығады ҳәм екинши атом тәрепинен жутылады. Өз гезегинде, екинши атомнан электрон ушын шығады ҳәм ол биринши атом тәрепинен жутылады. Электронлардың "ушып шығыўы" менен "тутып алыныўы" процессинде сәйкес атомлардың импульслериниң өзгерислери орын алады. Атомлардың импульслериниң өзгериси олардың арасында қандай да бир өз-ара тәсирлесиўдиң бар екенлигин аңғартады. Алмасыў тәсирлесиўин усындай етип схема түринде және көргизбели қараў "алмасыў" термининиң дурыс сайлап алынғанлығын ақлайды. Бирақ, оны туппа-түўры түсиниўдиң кереги жоқ.

Бул ендиги таллаўды айқын түрде көринеди: мейли ҳәм ҳаллары еки атомдағы электронлардың байланысқан ҳаллары болсын. Егер, биз жоқарыда тәрийипленген алмасыў процессин классикалық мәнисте туппа-туўры түсинетуғын болсақ, онда қарама-қарсылық пайда болған болар еди. Ҳақыйқатында да, сырттан байланыс энергиясының мәнисинен үлкен энергия алынбаса (ямаса берилмесе) атомнан электрон атомнан "ушып шыға" алмаған ямаса баска атом тәрепинен "тутып алынбаған" болар еди. Ҳақыйқатында, алмасыў тәсирлесиўи орын алатуғын еки атомның ҳәр бири белгили болған энергияға ийе ҳалда турмайды. Системаның энергиясындағы анықсызлық ниң мәнисиниң тәртиби шамасындай. Шамасы

қатнасының жәрдеминде анықланатуғын алмасыў ўақыты болған τ ўақыты ишинде энергияның турақлы болатуғынлығы ҳаққында гәп етиўдиң мәниси жоқ. τ ўақыты ишинде система белгили болған энергия менен импульске ийе ҳалда турмайды. Бундай жағдайда электронлардың екеўи де толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалда турады.

Усы жағдайға байланыслы атомлардың "электронлар менен алмасқанындағы" тебиў импульси векторының бағыты ҳәм усыннан келип шыққан ҳалда өз-ара тәсирлесиў энергиясының белгисин анықлаўға тырысыўдың керек емес екенлиги айқын болады. Солай етип, бөлекшелер менен алмасыў ҳаққында гәп еткенде бул алмасыўдың ҳақыйқый характерге ийе емес, ал виртуаллық характерге ийе екенлигин есте сақлаў керек. Бул жағдайда "виртуаллық" сөзи тиккелей мәниске системаның тек басланғыш ҳәм ақырғы ҳалларының ийе екенлигин аңғартады.

Алмасыў интегралы ның нолге тең емес мәнислери болыўы ушын бөлекшелердиң ҳәм толқын функцияларының бир бири менен жеткиликли дәрежеде бетлесиўи керек (яғный кеңисликтиң бир ноқатында нолге тең болмаўы шәрт). Егер, керисинше, ҳәм толқын функцияларының мәнислери кеңисликтиң ҳәр қыйлы областларында нолге тең болмаса, онда алмасыў интегралы нолге тең болады. Егер, мысалы, ҳәр қыйлы атомлардағы электронлардың байланысқан ҳалларын ҳәм толқын функциялары тәрийиплейтуғын болса, онда атомлар бир бирине тиккелей жақынласқан жағдайда ғана алмасыў тәсирлесиўи жүзеге келеди. Мейли, енди толқын функциялары бир атомдағы еки байланысқан ҳалға сәйкес келетуғын болсын. Мысалы, ҳалы тийкарғы ҳал, ал ҳалы қозған ҳаллардың бири болсын. Бундай жағдайда алмасыў интегралының шамасы менен ҳалларының энергиясы үлкен айырмаға ийе болатуғын жоқарғы қозған ҳаларға өткенде тез кемейеди. Ең ақырында, тегис толқынлар менен тәрийипленетуғын еркин бөлекшелердиң өз-ара тәсирлесиўи ҳаққында гәп етилген жағдайда, онда алмасыў интегралы импульслериниң мәнислери бир бирине жақын болған бөлекшелер ушын ғана нолден өзгеше болады. Егер, мысалы, бөлекшелердиң импульслери бир биринен сезилерликтей айырмаға ийе болса ҳәм өз-ара тәсирлесиўдиң энергиясы координаталарға байланыслы салыстырмалы әстелик пенен өзгеретуғын болса, онда интеграл астындағы да әстелик пенен өзгеретуғын ҳәм тез осцилляцияланатуғын функцияның көбеймеси болады. Бундай жағдайда барлық интегралдың шамасы киши. Солай етип, бир бирине жақын жайласқан (кеңисликтиң киши областында локализацияланған ямаса энергия менен импульслериниң мәнислери жақын болған) бөлекшелер ушын ғана алмасыў тәсирлесиўи орын алады.

Алмасыў тәсирлесиўиниң бул қәсийетинен әҳмийетли болған нәтийже келип шығады: алмасыў тәсирлесиўи тойыныў қәсийетине ийе, сонлықтан үлкен сандағы бөлекшеден туратуғын системада алмасыў тәсирлесиўиниң энергиясы бөлекшелердиң саны ге пропорционал. Ҳақыйкатында да, алмасыў тәсирлесиўи менен байланысқан еки бөлекше (мысалы антипараллель спинлерге ийе еки электрон) өзлерине үшинши бөлекшени қосып ала алмайды.

Егер жуп тәсирлесиўдиң әдеттеги энергиясы жуплардың санына пропорционал болса, яғный ге тең болса, онда алмасыў тәсирлесиўине барлық жуплар қатнаспайды, ал "жақын" ҳалларда туратуғын бөлекшелери бар жуплар ғана қатнасады (жоқарыда көрсетилген мәнисте). Сонлықтан алмасыў тәсирлесиўи менен байланысқан бөлекшелер жубының толық саны бир бирине жақын жайласқан бөлекшелерден туратуғын жуплардың санына тең. Жуплардың бул санының ге тең екенлиги айқын.

Ең ақырында мынадай жағдайға итибар беремиз: өз-ара тәсирлесиў ушын формула өз-ара тәсирлесиў операторы бөлекшелердиң спининен ғәрезли болған шамаларға ийе емес деген болжаў менен келтирип шығарылған еди. Бирақ, өз-ара тәсирлесиў операторы спин операторларына ийе болған жағдайларда да тап усындай нәтийжелерге келиўге болады.

**IX бап. Атом**

**§ 64. Энергиялардың атомлық қәддилери**

Релятивистлик жақынласыўда атомның стационар ҳаллары ядроның кулонлық майданында қозғалатуғын ҳәм бир бири менен электрлик тәсирлесетуғын электронлар системасы ушын жазылған Шрёдингер теңлемесиниң жәрдеминде анықланады. Бул теңлемеге электронлардың спини операторы пүткиллей кирмейди. Биз орайға қарата симметриялы майданда қозғалатуғын бөлекшелер системасы ушын толық орбиталық момент диң және ҳалдың жуплығының сақланатуғынлығын билемиз. Сонлықтан, атомның ҳәр бир стационар ҳалы моментиниң белгили болған мәниси ҳәм өзиниң жуплығы менен тәрийипленеди екен. Усының менен бирге, бирдей болған бөлекшелердиң стационар ҳалларының координаталық толқын функциялары белгили болған орын алмастырыўлар симметриясына да ийе болады. Биз жоқарыда орын алмастырып қойыў симметриясының ҳәр бир белгили болған типине системаның спининиң белгили болған мәнисиниң сәйкес келетуғынлығын да көрдик. Сонлықтан, ҳәр бир стационар ҳал электронның толық спини пенен де тәрийипленеди.

пенен диң берилген мәнислерине сәйкес келетуғын энергияның қәдди пенен векторларының кеңисликтеги мүмкин болған бағытларына сәйкес азғанған. ҳәм векторларының бағытлары бойынша азғыныўдың ретлиги ҳәм ге тең. Берилген менен шамаларына сәйкес келетуғын қәддиниң азғыныўы ге тең.

Бирақ, ҳақыйқатында, электромагнит тәсирлесиўде спиннен ғәрезли болған релятивистлик эффектлер орын алады. Бундай эффектлер атомның энергиясының тек ҳәм векторларынан ғәрезли болмай, олардың бир бирине салыстырғандағы жайласыўларынан да ғәрезли болатуғынлығына алып келеди. Қатаң түрде айтқанда, релятивистлик өз-ара тәсирлесиўлерди есапқа алғанда орбиталық пенен спинниң ҳәр қайсысы өз алдына сақланбайды. Тек толық момент дың сақланыў нызамы қалады ҳәм ол жабық системаға қатнасы бойынша кеңисликтиң изотроплығынан келип шығатуғын универсаллық нызам болып табылады. Сонлықтан, энергияның дәл қәддилери толық моменттиң мәниси бойынша тәрийипленеди.

Бирақ, егер релятивистлик эффектлер салыстырмалы әззи болса (көпшилик жағдайда орынланатуғын), онда оларды қозғалаң салыўшы сыпатында есапқа алыўға болады. Усы қозғалаңның тәсиринде берилген ҳәм ке ийе қәддилер толық момент тың мәниси бойынша айрылатуғын ҳәр қыйлы (бир бирине жақын жайласқан) қәддилердиң бир қатарына "ажыралады". Бул қәддилер (биринши жақынласыўда сәйкес секулярлық теңлеме менен анықланады. Ал олардың толқын функциялары болса (ноллик жақынласыўдағы) берилген ҳәм лерге сәйкес келетуғын азғынған қәддиниң толқын функцияларының белгили болған сызықлы комбинациялары болып табылады.

Биринши жақынласыўда бурынғыдай орбиталық момент пенен спинниң абсолют шамаларын (бирақ олардың бағытларын емес) сақланатуғын шамалар деп есаплап, қәддилерди ҳәм лер менен тәрийиплеўге болады.

Солай етип, релятивистлик эффектлердиң нәтийжесинде ҳәм тиң берилген мәнислерине сәйкес келетуғын қадди санының ҳәр қыйлы мәнислерине сәйкес келетуғын қәддилерге ажыралады екен. Бул ажыралыў ҳаққында гәп еткенде қәддиниң *жуқа структурасын* (ямаса *мультиплетлик ажыралыўын*) нәзерде тутады. Биз санының тен ке шекемги мәнислерди қабыл ететуғынлығын билемиз. Сонлықтан, берилген ҳәм лерге ийе қәдди ҳәр қыйлы болған дана қәддиге (егер теңсизлиги орынлы болса) ямаса (егер болса) қәддиге ажыралады. Бул қәддилердиң ҳәр қайсысы векторының бағытлары бойынша азғынған болып қалады. Бул азғыныўдың ретлиги ге тең. дың мүмкин болған мәнислериниң қатнасыўындағы санларының суммасының шамасына тең болатуғынлығын тексерип көриў аңсат.

Энергияның атомлық қәддилерин (ямаса атомлардың спектраллық термлери деп те атайды) моменттиң белгили болған мәнислерине ийе болған бөлекшелердиң ҳалларын белгилеў ушын қолланылатуғын символлар менен белгилеў қабыл етилген. Атап айтқанда, толық орбиталық момент диң ҳәр қыйлы мәнислерине ийе болған ҳаллар латын имласының үлкен ҳәриплериниң жәрдеминде былайынша белгиленеди:

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | ... |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  | ... |

Символдың жоқарысындағы шеп тәрепте *термниң мультиплетлиги* деп аталатуғын саны жазылады (бирақ, бул сан тек болған жағдайда ғана қәддиниң жуқа структурасының қураўшыларының санына сәйкес келеди). Төменде оң тәрепте толық момент ның мәниси көрсетиледи. Мысалы, символы квант санларына ийе болған қәддилерди аңғартады.

**§ 65. Атомдағы электронлардың ҳаллары**

Электронларының саны бирден көп болған атом ядроның майданында қозғалатуғын бир бири менен тәсирлесетуғын электронлардың қурамалы системасы болып табылады. Қатаң түрде айтқанда бундай системаның тутасы менен алғандағы ҳалларын қараўға болады. Бирақ, сонда да, атомдағы ҳәр бир электронның ҳалы бойынша ядро басқа электронлар менен биргеликте пайда еткен базы бир орайға қарата симметриялы эффективлик майдандағы электронның қозғалысының стационар ҳалы ҳаққандағы түсиникти жақсы дәлликте киргизиўге болады. Улыўма айтқанда атомдағы ҳәр қыйлы электронлар ушын бул майданлар ҳәр қыйлы, соның менен бирге олардың барлығы да бир ўақытта анықланыўы керек. Себеби электронлардың ҳәр бири басқа электронлардың ҳалларынан ғәрезли болады. Бундай майданды *өзи менен келистирилген майдан* деп атайды.

Өзи менен келистирилген майдан орайға қарата симметриялы болғанлықтан, электронның ҳәр бир ҳалы оның орбиталық моментиниң белгили болған мәниси менен тәрийипленеди. Берилген деги айырым электронның ҳалы бас квант саны ниң жәрдеминде номерленеди (олардың энергиясының өсиў бағытында). Бул сан мәнислерине ийе болады. Номерлеўди усындай тәртипте белгилеў қағыйдасы водород атомында қабыл етилген қағыйдаға сәйкес келеди. Бирақ, қурамалы атомлардағы ҳәр қыйлы ге ийе қәддилердиң үлкейиў избе-излиги, улыўма айтқанда, водород атомындағы тәртиптен өзгеше болады. Водород атомында энергия ден пүткиллей ғәрезсиз, сонлықтан үлкен ге ийе қәдди барлық ўақытта үлкен энергияға ийе болады. Бирақ, қурамалы атомларда басқа жағдай орын алады. Мысалы, қәдди қәддиден төменде жайласады.

Ҳәр қыйлы менен ге ийе электронлардың ҳалларын бас квант санының мәнисине сәйкес келетуғын саннан ҳәм ге сәйкес келетуғын ҳәрип пенен белгиленеди. Мысалы, белгиси ни билдиреди. Атомның ҳалын толық тәрийиплеў толық санларын бериў менен бирге барлық электронлардың ҳалларын көрсетиў керек болады. Мысалы, жазыўы гелий атомының ҳалын аңғартады. Бул ҳалда , ал еки электрон ҳәм ҳалларында жайласады. Егер бир неше электрон бирдей ҳәм санларына сәйкес келетуғын ҳалларда жайласатуғын болса, онда бал жағдайды қысқалық ушын дәрежедеги көрсеткиш түринде белгилеў қабыл етилген. Мысалы, жазыўы ҳалындағы еки электронды аңғартады. Атомдағы ҳәр қыйлы менен ге сәйкес келетуғын ҳаллар бойынша электронлардың тарқалыўы ҳаққында айтқанда *электронлық конфигурация* ҳаққында гәп етеди.

менен диң берилген мәнислеринде электрон орбиталық моменттиң () ҳәм спинниң көшерине түсирилген проекцияларының ҳәр қыйлы мәнислерине ийе бола алады. Берилген санында саны мәниске ийе болады. σ саны болса саны менен шекленген. Бундай ҳалларды *эквивалент ҳаллар* деп атайды[[18]](#footnote-18). Паули принципине сәйкес, олардың ҳәр қайсысында тек бир-бирден электрон болады. Солай етип, атомда бир ўақытта менен диң бирдей болған мәнислеринде 2() электроннан артық электрон бола алмайды. Берилген менен ге сәйкес келетуғын барлық ҳалларды толтыратуғын электронлардың жыйнағы ҳаққында гәп еткенде *берилген типтеги жабық қабық* ҳаққында айтады.

Бирдей электронлық конфигурациядағы ҳәм қыйлы лерге ийе атомлық қәддилердеги энергияның ҳәр қыйлы болыўы электронлардың электростатикалық өз-ара тәсирлесиўи менен байланыслы. Әдетте, бул энергиялардың арасындағы айырма салыстырмалы киши, ҳәр қыйлы конфигурацияларға сәйкес келетуғын энергиялардың айырмасынан бир неше есе киши. Бирдей конфигурацияға ийе, бирақ ҳәр қыйлы лерге ийе қәддилердиң өз-ара жайласыўы жөнинде Хунд (F.Hund) тәрепинен 1925-жылы ашылған төмендегидей эмперикалық қағыйда бар: берилген электронлық конфигурацияда тиң ең үлкен болған мәнисине ҳәм диң ең үлкен мәнисине сәйкес келетуғын терм ең киши энергияға ийе болады[[19]](#footnote-19).

Берилген электронлық конфигурацияға сәйкес келетуғын атомлық термлерди табыўдың жолын көрсетемиз. Егер электронлар эквивалентли болмаса, онда тиң мүмкин болған мәнислерин анықлаў моментлерди қосыў қағыйдасы бойынша әмелге асырылады. Мысалы, конфигурациясында ( менен лер ҳәр қыйлы) қосынды момент 2, 1, 0 мәнислерине, ал қосынды спин мәнислерине ийе. Оларды бир бири менен комбинациялап, термлерин аламыз.

Егер биз эквивалент электронларға ийе болсақ, онда Паули принципи тәрепинен қойылатуғын шеклерўлер пайда болады. Мысал сыпатында үш эквивалентли -электронның конфигурациясын қараймыз. теңлиги орынланған жағдайда (-ҳал) орбиталық моменттиң проекциясы мәнислерина ийе бола алады. Сонлықтан, санларының төменде көрсетилген жупларына ийе алты ҳалдың жүзеге келиўи мүмкин:

Үш электронды бул ҳаллардың қәлеген үшеўине жайластырыў мүмкин. Нәтийжеде атомның толық орбиталық момент пенен спинниң проекцияларына ийе болған ҳалларын аламыз:

менен тиң терис мәнислерине ийе ҳалларды жазыўдың кереги жоқ, себеби олар жаңа ҳеш нәрсени бермейди. , ҳалларының бар болыўы терминиң бар болыўының ҳәм бул термге және бир бирден (1, 1/2), (0, 1/2) сәйкес келиўиниң керек екенлигин билдиреди. Буннан кейин және бир ҳалы болып, оған (1, 1/2) ҳалларының бири сәйкес келеди. Ең ақырында (0, 3/2) ҳәм (0, 1/2) ҳаллары болып, оған ҳалы сәйкес келеди. Солай етип, эквивалент үш -электроннан туратуғын конфигурация ушын типиндеги термлердиң тек биреўиниң жүзеге келиўи мүмкин.

1-кестеде эквивалентли p- ҳәм d-электронлардың ҳәр қыйлы конфигурациялары ушын мүмкин болған термлер көрсетилген. Термниң символларының астындағы санлар (бул санлар 1 ден үлкен болғанда) берилген конфигурация ушын бар болған берилген типтеги термлердиң санын көрсетеди. Эквивалент электронлардың мүмкин болған ең үлкен санынан туратуғын конфигурацияда () терм барлық ўақытта болып табылады.

Биреўи қабықта екиншиси қабықтың толыўы ушын жетпейтуғын электронлардың санындай электронларға ийе болған конфигурацияларға жуўап беретуғын термлердиң характериниң бир бирине сәйкес келетуғынлығына итибар беремиз. Бул жағдайда қабықта электронның болмаўының, егер усы электрон қабықта болғанда ол ийе болатуғын квант санларына ийе тесиктиң пайда болатуғынлығының көзге көринип турған нәтийжеси болып табылады.

Белгили электронлық конфигурация бойынша атомның нормал болған термин анықлаў ушын Хунд қағыйдасын қолланғанда тек толмаған электронлық қабықты қараў керек. Себеби толған қабықлардағы электронлардың моментлери бир бирин толық компенсациялайды. Мысалы, мейли атомның туйық қабығының сыртында төрт -электрон бар болсын. -электронның магнит квант саны бес мәниске ийе болады: 0, ±1, ±2. Сонлықтан төрт электронның барлығы спинниң бирдей проекциясына ийе бола алады. Себеби максималлық толық спин ге тең. Буннан кейин биз электронларға ниң ең үлкен мәнисин беретуғын ҳәр қыйлы мәнислерин жазыўымыз керек. Бул санлар 2, 1, 0, -1 болып табылады. Сонлықтан диң ең үлкен мәниси 2 ге тең. Бул болған жағдайдағы диң ең үлкен мәнисиниң 2 ге тең екенлигин аңғартады ( терми).

1-кесте. Эквивалент электронлардан туратуғын конфигурациялардың мүмкин болған барлық термлери

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |
|  |  |

**§ 66. Энергияның водород тәризли қәддилери**

Водород атомы Шрёдингер теңлемеси дәл шешилетуғын бирден-бир атом болып табылады. Водород атомының, соның менен бирге водород тәризли барлық атомлардың ( ҳ.т.б. ионлар) энергиясының қәддилери оптика менен атом физикасынан кеңнен белгили болған Бор формуласының жәрдеминде анықланады:

Бул формулада - ядроның заряды, - ядроның массасы, - электронның массасы. Көринип турғанындай, энергияның ядроның массасынан ғәрезлиги жүдә әззи.

Жоқарыда келтирилген формула ҳеш қандай релятивистлик эффектти есапқа алмайды. Берилген квант санында энергия орбиталық квант саны ден ғәрезсиз. Басқа атомларда өзиниң қәсийетлери бойынша водородты еске түсиретуғын ҳаллар болады. Гәп күшли қозған ҳаллар ҳаққында айтылып атыр. Бундай атомларда электронлардың бири үлкен бас квант санына ийе болады ҳәм, сонлықтан, ядродан үлкен қашықлықларда жайласады. Бундай электронның қозғалысын эффективлик заряды 1 ге тең болған *атомлық қалдықтың* (бир қатар жағдайда *атомлық тулғаның*) кулонлық майданындағы қозғалыс деп базы бир жақынласыўда қараў мүмкин. Бирақ, усындай жоллар менен алынған энергияның қәддилериниң дәллиги дым төмен болады ҳәм сонлықтан, киши қашықлықтағы майданның кулонлық майданнан өзгеше болатуғынлығын есапқа алатуғын дүзетиўди киргизиў керек. Бундай дүзетиўдиң характерин төмендегидей көз-қараслар бойынша аңсат анықлаўға болады.

Үлкен квант санлары менен анықланатуғын ҳаллардың квазиклассикалық екенлигине байланыслы энергияның қәддилерин Бор-Зоммерфельддиң квантланыў қағыйдасы бойынша анықлаўға болады. Оның ушын Бор-Зоммерфельдтиң квантланыў қағыйдасының

түринде жазылатуғынлығын еске түсиремиз. Киши қашықлықларда ("орбитаның радиусы" на салыстырғанда) майданның кулонлық майданнан аўысыўын формаллық жақтан теңлиги орынланғандағы толқын функциясына қойылатуғын шегаралық шәрттиң өзгериси деп қабыл етиў керек. Бул өзгерислер радиаллық қозғалыстың квантланыўы шәртиндеги турақлысының өзгерисине алып келеди. Мәселениң басқа тәреплери бойынша бул шәрт өзгериссиз қалатуғын болғанлықтан биз мынадай жуўмаққа келемиз: энергияның қәддилери ушын водород атомындағы энергияны есаплайтуғын формуладағы бас квант санын саны менен алмастырыў керек болады ( арқалы базы бир турақлы шама белгиленген, она *Ридберг дүзетиўи* деп атайды):

Өзиниң анықламасы бойынша Ридберг дүзетиўи нен ғәрезсиз, бирақ қозған электронның азимуталлық квант саны диң функциясы (биз оны ның индекси түринде жазамыз), атомның ҳәм моментлериниң функциясы болып табылады. ҳәм моментлериниң берилген мәнислеринде шамасы диң үлкейиўи менен тез кемейеди. қаншама үлкен болса электрон ядроның қасында соншама қысқа ўақыт болады, сонлықтан энергияның қәддилериниң водородлық қәддилерге соншама жақын келиўи керек.

Ескертиў: Иллюстрация ушын гелий атомының күшли қозған ҳаллары ушын Ридберг дүзетиўлериниң мәнислерин келтиремиз. гелий атомының толық спини мәнислерине ийе болыўы мүмкин, ал толық орбиталық момент болса биз қарап атырған жағдайда қозған электронның моментине сәйкес келеди (екинши электрон ҳалында жайласады). Ридберг дүзетиўлери мынаған тең:

теңлиги орынланғанда = -0,140, = +0,012, =-0,0022.

теңлиги орынланғанда = -0, 296, = -0,068, = -0,0029.

**§ 67. Қозғалаңлар теориясының элементлери** (Шпольский)

Квантлық механикада дәл шешиў мүмкин болған мәселелердиң саны жүдә аз. Сонлықтан жуўық усыллар әҳмийетли орынлы ийелейди. Ҳәтте, бир қатар жағдайларда физикалық қубылысларды тереңирек түсиниў ушын жуўық усыллар сәйкес теңлемелерди санлы шешиўге қарағанда әдеўир баҳалырақ болады. Квантлық механиканың тийкарғы жуўық усыллары қозғалаңлар теориясы менен вариациялық принципке тийкарланған.

Биз гелий атомының үйрениўдиң алдында қозғалаңлар теориясының элементлери менен танысыўды мақул көрдик.

Бизди қызықтыратуғын мәселе аспан механикасындағы үш дене машқаласына жүдә уқсас: Қуяш тәрепинен Ньютонның тартылыс нызамына сәйкес тартылатуғын еки планета бир бири менен де тәсирлеседи. Бул өз-ара тәсирлесиўди есапқа алыў үш дене мәселесин дәл шешиў менен барабар. Классикалық механикада үш дене мәселесин шешиўдиң жуўық усыллары буннан көп ўақытлар бурын ислеп шығылған. Олар астрономияның әмелий мақсетлери ушын жеткиликли дәлликтеги нәтийжелерди алыўға мүмкиншилик береди. Бул усыллар қозғалаңлар теориясы деп аталатуғын теорияны пайда етеди ҳәм ол мәселени избе-из жақынласыўдардың жәрдеминде шешеди. Қозғалаңлар теориясының тийкарында планеталардың бир бири менен тәсирлесиўи олардың ҳәр қайсысының Қуяш пенен тәсирлесиўине салыстырғанда дым әззи деген болжаў жатады. Ноллик жақынласыў деп аталатуғын жақынласыўда планеталардың бир бири менен тәсирлесиўи пүткиллей есапқа алынбайды ҳәм ҳәр бир планета ушын өзиниң қозғалаң тиймеген орбитасы алынады. Буннан кейинги жақынласыўларда планеталардың арасындағы өз-ара тәсирлесиўлерди олардың орбиталарына тийетуғын киши қозғалаң түринде есапқа алыўға тырысады. Бирақ, өзлериниң орбиталары бойынша қозғалыўдың барысында еки планета ўақыттың ҳәр қыйлы моментлеринде бир биринен ҳәр қыйлы қашықлықларда турады ҳәм усыған сәйкес олардың арасындағы өз-ара тәсирлесиўге сәйкес келетуғын потенциаллық энергиясы сәйкес түрде өзгерислерге ушырайды. Әлбетте, жүдә қурамалы болған картина алынады. Бундай жағдайда классикалық механиканың қозғалаңлар теориясы өзиниң әпиўайылығы бойынша жүдә зор болған келеси нәтийжеге алып келеди. Қозғалаң тийген қозғалыстың энергиясы қозғалаң тиймеген қозғалыстың энергиясы менен *қозғалаң тиймеген қозғалыс бойынша орташаланған өз-ара тәсирлесиўдиң орташа энергиясының* қосындысынан турады екен.

Квантлық механикада да қозғалаңлар теориясы бар болып, ол классикалық механиканың тап ҳәзир ғана баянланған нәтийжесине алып келеди. Атомлық системалардағы орын алған шәртлер астрономиялық мәселени қараған жағдайдағыға салыстырғанда бир қанша қолайсызлығы менен көзге түседи. Себеби электронлардың бир бири менен тәсирлесиў энергиясының муғдары олардың ҳәр қайсысының ядро менен тәсирлесиў энергиясынан киши емес. Бирақ, усыған қарамастан, көплеген жағдайларда ең биринши жуўықлаўдың жүдә қанаатландырарлықтай нәтийжени беретуғыны усылдың зор өзгешелиги болып табылады.

Бул параграфта биз энергияның қәддилери әпиўайы, яғный энергияның ҳәр бир меншикли мәнисине би меншикли функция сәйкес келетуғын жағдай ушын қозғалаңлар теориясы менен танысамыз. Ал келеси параграфта алынған нәтийжелерди гелийдиң тийкарғы ҳалы ҳаққындағы мәселени шешиў ушын пайдаланамыз.

Бизди қызықтыратуғын мәселениң энергия операторын (оны биз "қозғалаң тийетуғын мәселе" деп атаймыз) дәл шешилиўи мүмкин болған мәселениң энергия операторынан тек азмаз ғана айрылатуғын болсын. Мейли, қозғалаң бар мәселедеги потенциаллық энергия қозғалаң жоқ болған мәселедеги потенциаллық энергиядан шамасына айрылатуғын болсын ( арқалы киши болған өлшем бирлиги жоқ параметр белгиленген):

Қозғалаң бар болған мәселедеги энергия операторы (гамильтониан) былайынша жазылады:

Бул теңликте арқалы қозғалаң жоқ болған мәселедеги гамильтониан белгиленген. Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85.2) |

түриндеги теңлеме дәл шешиледи ҳәм сонлықтан бизге меншикли функциялар да, меншикли мәнислери де белгили болады[[20]](#footnote-20). Бул параграфта биз бир меншикли мәниске бир меншикли функция сәйкес келетуғын, яғный азғынбаған ҳаллар ҳаққында гәп етемиз.

теңсизлиги орынланғанда қозғалаң бар болған мәселе

қозғалаң жоқ болған мәселеге өтеди. Бизиң болжаўларымыз бойынша шамасы киши болғанлықтан қозғалаң бар болған мәселедеги меншикли функциялар менен меншикли мәнислер лар қозғалаң жоқ болған мәселедеги ҳәм дан азмаз ғана айрылады. Сонлықтан биз оларды былайынша жаза аламыз:

Избе-из жазылған ағзалар ноллик, биринши, екинши ҳәм оннан да жоқары жақынласыўларды аңғартады. Бизиң мақсетлеримиз ушын биринши жақынласыў жеткиликли болғанлықтан, биз менен лерди былайынша көрсетемиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85.4) |
|  | (85.5) |

Оларды биз қозғалаң бар болған Шрёдингер теңлемесине қоямыз, операторының түрин есапқа алып

теңлигине ийе боламыз. Қаўсырмаларды ашып, мынаны аламыз:

Биз бул теңликте шамасына ийе ағзаларды жоқарырақ тәртипке сәйкес келетуғын шама деп есаплап, оны таслап кетемиз. Буннан кейин жоқарыда жазылған түриндеги теңлемеге сәйкес шеп тәрептеги биринши ағзаны да, оң тәрептеги биринши ағзаны да сызып таслаўға болады. Қалған теңлемени былайынша қайтадан жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85.6) |

Биз бир текли емес теңлемени алдық. Бул теңлемениң шеп тәрепи (85.2)-теңлемениң түрине ийе, бирақ оң тәрепинде бизге тың мәниси белгисиз. Оны табыў ушын мынадай әҳмийетли болған теоремадан пайдаланамыз: (85.6) түринде жазылған бир текли емес теңлемениң шешилиўи ушын, яғный үзликсиз шешимге ийе болыўы ушын оның оң тәрептеги бөлиминиң сәйкес бир текли

теңлемениң шешимине ортогоналлық болыўы керек (яғный ге).

Дәлиллеў ушын энергия операторының өзи-өзине түйинлеслигинен пайдаланамыз. (85.6)-теңлемениң шеп тәрепин толқын функциясына көбейтемиз ҳәм барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз.

операторының өзине өзи түйинлес екенлигинен пайдаланып, шеп тәрепин былайынша түрлендиремиз:

Солай етип, дәлиллениўи талап етилген

теңликти алдық. функциясын нормировкаланған деп болжап

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85.7) |

теңлигиниң орынлы екенлигин көремиз. Бирақ, бул аңлатпаның оң тәрепи сәйкес қозғалаң болмаған ҳал бойынша орташаланған қозғалаң тийгизиўши потенциалдың квантлық орташа мәниси болып табылады. Солай етип, қозғалаң болмаған жағдайдағы энергияның қәддилери менен меншикли функцияларды билип, биринши жақынласыўдағы қозғалаң болған жағдайдағы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85.8) |

қәддилерди анықлай алады екенбиз.

Меншикли функциялар ушын биринши жақынласыўды есаплаў ушын былайынша ҳәрекет етемиз: (85.6)-теңлемедеги функциясын қозғалаң болмаған ҳаллардың ортогоналлық функциялары бойынша қатарға жаямыз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85.9) |

ҳәм бул қатарды (85.6)-теңлемеге қоямыз ҳәм (85.2)-теңлемеге байланыслы

аңлатпаның алынатуғынлығы себепли

теңлигине ийе боламыз. Бул теңликтиң еки бөлимин де ге көбейтип интеграллаймыз ҳәм

теңлигиниң орынлы екенлигин нәзерде тутып,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85.10) |

аңлатпасын аламыз. Буннан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85.11) |

формуласы келип шығады. Бул формула (85.9)-қатардың коэффициентинен ( болған жағдай) басқа барлық коэффициентлерин есаплаўға мүмкиншилик береди. теңлиги орынланғанда (85.11)-формуланың бөлими нолге айланады ҳәм сонлықтан анық емес болып қалады. Бирақ, бул анықсызлықты қозғалаң болған жағдайдағы толқын функциясын нормировкалаў ушын пайдаланыўға болады.

**§ 68. Гелий атомы** (Левич)

Биз водород атомының ең әпиўайы болған бир электронлы система болып табылатуғынлығын ҳәм оның ушын жазылған Шрёдингер теңлемесиниң дәл шешимлерге ийе екенлигин билемиз. Көп электронлы системаларды үйрениўге өтиўде биринши гезекте ядроның дөгерегинде еки электрон айланатуғын гелий атомының қәсийетлерин изертлеўден баслаў керек. Ядроның массасы шексиз үлкен, сонлықтан ол қозғалмайды деп болжаймыз. Сонлықтан еки электроннан менен қозғалмайтуғын ядродан туратуғын системаның гамильтонианын былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.1) |

Бул теңлемеде менен лер биринши ҳәм екинши электронлардың радиус-векторлары, ал - олардың арасындағы қашықлық. (68.1)-теңлемедеги ағзалары ядроның майданындағы электронлардың потенциаллық энергиясына, ал ағзасы еки электрон арасындағы кулонлық өз-ара тәсир етисиў энергиясы болып табылады.

Гамильтонианды усындай формада бериўдиң бар қатар жуўықлаўлар менен байланыслы екенлигин атап өтиў керек. Электронлар магнит моментлерине ийе ҳәм олардың арасындағы тәсирлесиў кулонлық тәсирлесиўге салыстырғанда қурамалырақ характерге ийе болады. Соның менен бирге магнит моментлери де (спинлик ҳәм орбиталық) бир бири менен тәсир етиседи. Бирақ, биз киши дүзетиўлер характерине ийе болған бул эффектлерди арнаўлы түрде изертлемеймиз.

Системаның гамильтонианы спинлик операторларға ийе емес болғанлықтан, онда (68.1)-теңлемениң шешимин биреўи тек координаталардан, екиншиси спиннен ғәрезли болған функциялардың көбеймесинен турады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.2) |

Биз толық спин 1 ге тең болған жағдайда еки электронның спинлик функцияларының еки бөлекшениң орынларын алмастырып қойыўға қарата симметриялы екенлигин билемиз. Толық спин 0 ге тең болған жағдайда спинлик функция антисимметриялы. Солай етип, гелий атомының ҳаллары еки топарға бөлинеди екен. Спини нолге тең болған ҳаллар параҳаллар, ал спини 1 ге тең болған ҳалларды ортоҳаллар деп атайды. Егер (68.1)-гамильтониан системаны дәл тәрийиплегенде, онда спинниң проекцияларының z көшерине түсирилген проекциялары бойынша айрылатуғын үш ҳалдың барлығының бирдей энергияға ийе болған болар еди. Бирақ, спинлик ҳәм орбиталық магнит моментлердиң арасындағы әззи өз-ара тәсирлесиў азғыныўды сапластырады ҳәм бир бирине жақын жайласқан үш қәдди пайда болады. Демек, гелийдиң энергия спектри синглетлик ҳәм триплетлик қәддилердиң жыйнағынан турады.

Улыўмалық көз-қараслардан гелийдиң тийкарғы ҳалының қайсы группаға тийисли екенлигин табыўға болады. Биз гелийдиң тийкарғы ҳалының түйинлерге ийе емес толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғынлығын еслетип өтемиз. Әлбетте, антисимметриялы координаталық функция бундай функция бола алмайды. Себеби теңлиги орынланғанда координаталық функция нолге айланады.

Ҳақыйқатында да, егер функциясы еки өзгериўшиниң антисимметриялы функциясы болса, онда ол

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.3) |

қатнасын қанаатландырады. теңлиги орынланған жағдайда теңлигиниң орынлы болатуғынлығын көремиз.

Солай етип, тийкарғы ҳалда толқын функциясының координаталар бойынша симметриялы екенлигин көремиз ҳәм, усыған сәйкес, спинлер бойынша антисимметриялы. Гелийдиң тийкарғы ҳалы параҳал (спини нолге тең ҳал) болып табылады.

(68.1)-теңлемеде өзгериўшилер ажыралмайды ҳәм оның дәл шешимин алыўдың мүмкиншилиги жоқ[[21]](#footnote-21). Сонлықтан оны шешиў ушын бир қанша жуўық усыллар ислеп шығылған. Қозғалаң теориясын пайдаланыў толқын функцияларын, гелий атомының тийкарғы ҳалы ушын жеткиликли дәрежеде турпайы жақынласыўда энергияның мәнисин есаплаўға мүмкиншилик береди. (68.1)-теңлемедеги электронлардың арасындағы өз-ара тәсирлесиўлерди қозғалаң деп есаплаймыз. Бундай жағдайда ноллик жақынласыўда (68.1)-теңлемени былайынша жазыўға болады

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.4) |

Бул теңлеме өзгериўшилерди ажыратыў жолы менен шешиледи. Гелий атомының тийкарғы ҳалы ушын мынаны жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.5) |

менен арқалы заряды шамасына тең водород тәризли атомның тийкарғы ҳалына сәйкес келетуғын сәйкес энергия менен толқын функциясы белгиленген. функциясы болса электронлардың координаталарына қарата симметриялы.

Қозғалаң теориясының биринши жақынласыўына сәйкес, тийкарғы ҳалдың энергиясының қәдди былайынша анықланады:

Бул теңликтеги шамасы төмендегидей матрицалық элементтиң жәрдеминде анықланады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.5) |

Гелий атомының энергиясының жоқары қәддилерин есаплағанда қозғалаңға ушырамаған толқын теңлемесиниң шешимлери

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.6) |

Бул аңлатпаларда менен арқалы - ҳәм - квантлық ҳалларда турған водород тәризли атомлардың толқын функциялары белгиленген (сапалық нәтийжени алыў ушын биз орбиталық ҳәм магнит квант санлары бойынша азғыныўды есапқа алмаймыз).

Қозғалаңсыз теңлемениң шешиминиң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.7) |

болатуғынлығын түсиниў аңсат. Демек, еки қайтара азғыныў орын алады екен. (68.6) менен (68.7) ниң еки шешими де бир биринен электронлардың орынларын алмастырып қойыў менен айрылады. Буннан кейинги есаплаўларда азғыныў бар жағдайдағы қозғалаңлар теориясын пайдаланыў керек болады.

Биринши жақынласыўда энергиясына дүзетиў анықлаўшының нолге айланыў шәртинен табылады.

, , , шамалары матрицалық элементлер болып табылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.8) |

Бул теңликлерди таллаўда , теңликлериниң орынлы екенлигин аңсат аңғарыўға болады. Ҳақыйқатында да, егер мартицалық элементиниң аңлатпасындағы ди ге ҳәм ни ге алмастырсақ, онда ушын жазылған аңлатпаға дәл сәйкес келетуғын аңлатпаны аламыз. Тап усындай тастыйықлаўлар ҳәм матрицалық элементлерине де тийисли. Анықлаўшыны ашып,

теңлигиниң орынлы екенлигине көз жеткеремиз. Буннан энергия ушын еки дүзетиўди табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.9) |
|  | (68.10) |

Энергияның еки (68.9) ҳәм (68.10) мәнислерине

типиндеги еки толқын функциясы сәйкес келеди. Бул функциялардағы ҳәм коэффициентлери

теңлемелерин шешиў арқалы анықланады. ушын ал ушын теңлигиниң орынлы екенлиги келип шығады. Солай етип, қозғалаңның себебинен азғыныў сапластырылады екен ҳәм бир ҳәр қыйлы болған еки ҳалды аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68.11) |

Бул аңлатпаларда менен арқалы нормировкалаўшы константалар белгиленген.

(68.11)-формуладан көринип турғанындай, ҳәм ҳаллары электронлардың координаталарындағы сәйкес симметриялы ҳәм антисимметриялы толқын функциялары болып табылады. функциясы гелий атомының спини нолге тең болған ҳалын, ал функциясы болса толық спин 1 ге тең болған ҳалды тәрийиплейди.

толқын функциясы спини нолге ҳәм үлкен ге тең энергияға ийе параҳалды тәрийиплейди. Усыған сәйкес, толқын функциясы толық спин 1 гең болған ортоҳалға жуўап береди.

Анықламалары бойынша матрицалық элементлериниң кулонлық, ал матрицалық элементлериниң алмасыў интегралын береди. Гелийдеги еки электроннан туратуғын системаға алмасыў тәсирлесиўи талланған жағдайлардың барлығы да тийисли. Мысалы, егер 1-электрон тийкарғы ҳалда, ал 2-электрон қозған ҳалда турған болса, онда ўақыт өткеннен кейин олар ҳаллары менен алмасады

(68.9)- ҳәм (68.10)-қатнаслар атомның қәддилериниң толық картинасын бермейди. Ҳақыйқатында да, жоқарыда өткерилген есаплаўларда водород тәризли системалардың квант санлары бойынша азғыныўы есапқа алынбады. Электронлардың арасындағы өз-ара тәсирлесиў бул азғыныўды сапластырады. Сонлықтан, қәддилер тек бас квант санынан емес, ал орбиталық моментлерден де ғәрезли болады.

Жоқарыда келтирилген есаплаўлардың жоқары дәлликти бермейтуғынлығын атап өтемиз. Талланған теория бойынша алынған гелий атомының тийкарғы қәдди экспериментлерде алынатуғын шамалардан шама менен 20 процентке айырмаға ийе. Бундай күшли айырма жеткиликли дәрежеде киши болмайтуғын қозғалаңның сайлап алыныўы менен байланыслы.

**§ 69. Дейтронның элементар теориясы**

Биринши гезекте биз атом физикасында водород атомы қандай орынды ийелейтуғын болса, ядро физикасында бир протон менен бир нейтроннан туратуғын дейтронның да тап сондай орынды ийелейтуғынлығын атап өтемиз.

Дейтрон протон менен нейтроннан туратуғын салыстырмалы қурамалы болған бөлекше болып табылады. Бул дейтрон ушын толқын функциясының еки бөлекше арасындағы өз-ара тәсирлесиўди есапқа алыўының шәрт екенлигин аңғартады. Дейтрон ноллик спинге ийе ҳәм бул жағдай оның толқын функциясының спинорлық болатуғынлығын аңғартады. Соның менен бирге дейтрон байланыс энергиясына ийе. Бул өз гезегинде толқын функциясының байланысқан ҳалдың толқын функциясы екенлигин билдиреди. Биз водород атомының квантлық теориясының протон менен электрон арасындағы өз-ара тәсирлесиўди қарайтуғынлығын, бундай атомның ноллик спинге ийе екенлигин ҳәм тийкарғы ҳалда байланыс энергиясының болмайтуғынлығын еслетип өтемиз.

Бул өзгешеликлердиң себебинен дейтронның элементар теориясы водород атомының квантлық теориясына салыстырғанда қурамалы болады. Бирақ, дейтрон басқа ядроларға салыстырғанда ең әпиўайы система болып табылады. Сонлықтан оны ядроның структурасын үйрениўде модель сыпатында пайдаланыў мүмкин.

Бул мағлыўматларға қосымша және де жүдә әпиўайы болған төмендегидей мағлыўматларды беремиз:

• Дейтрондағы протон менен нейтрон арасындағы өз-ара тәсирлесиў ядролық тәсирлесиў (Юкава бойынша тәсирлесиў) болып табылады. Юкава бойынша тәсирлесиў киши аралықтағы (шама менен 1 ферми = 10-13 см) тартысыўды пайда ететуғын тәсирлесиў болып, тәсирлесиў массасы үлкен бөлекше менен алмасыў (π-мезон) жолы менен жүзеге келеди. Протон менен нейтрон арасындағы алмасыўда қатнасатуғын бөлекшениң массасы өз-ара тәсирлесиўдиң қандай қашықлықларға шекем тәсир ететуғынлығын көрсетеди.

• Күшли ядролық тәсирлесиўдиң тәсир етиў радиусы киши, шамасы электромагнит тәсирлесиўге салыстырғанда күшли. Бул дейтронның толқын функциясының кеңисликте локализацияланғанлығын аңғартады.

• Дейтронның ноллик спини толқын функциясының спинорлық болыўының керек екенлигин аңғартады. Спинордың еки қураўшыға ийе толқын функциясы екенлигин еске түсиремиз. Бул еки толқын функциясы дейтронның мүмкин болған еки спинлик ҳалына сәйкес келеди.

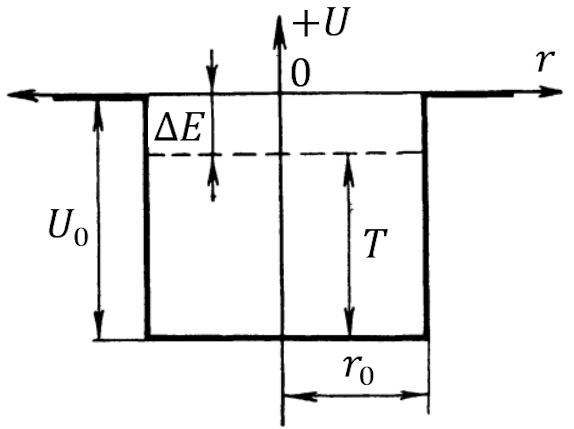
Усындай әпиўайы болған системаны изертлеў ядролық күшлердиң тәсир етиў нызамларының қандай дәлликте орынланатуғынлығын ҳәм тийкарғы теориялық усыллардың дурыс ямаса надурыс екенлигин тексерип көриўге мүмкиншилик туўғызады. Бирақ, дейтронның структурасының әпиўайы екенлигине, соның менен бирге оны изертлеўлердиң усы ўақытларға шекем даўам етип атырғанлығына қарамастан дейтронның қурылысының базы бир деталлары усы ўақытларға шекем анықланбаған.

Биз ядролық күшлердиң көриниўиниң өз-ара тәсирлесиўдиң потенциалының дәл түринен дым әззи ғәрезли екенлигин атап өтемиз. Сонлықтан, потенциал шуқырды туўры мүйешли формаға ийе деп есаплаўға болады (26-сүўрет). Басқа сөз бенен айтқанда, күштиң спиннен ғәрезлигин, бул күшлердиң орайлық симметрияға ийе емес екенлигин есапқа алмай, былайынша болжаймыз:

областында

областында

арқалы протон менен нейтронның арасындағы қашықлық белгиленген. Нуклонлардың биреўиниң орайын координаталар басы деп қабыл етемиз.



сүўрет. Дейтрон ушын сызылған туўры мүйешли потенциал шуқыр.

Еки бөлекше бир бирине жақынласқанда байланысқан ҳалдың пайда болыўы энергияның бөлинип шығыўы менен жүреди. Оларды бир биринен айырыў ушын тап сондай энергияны жумсаў керек. Егер дейтронды -нурлары менен нурландырсақ, онда γ-нурларының белгили болған базы бир энергиясында ол протон менен нейтронға ыдырайды:

Бундай энергияның жүриўи ушын керек болатуғын γ-нурларының энергиясы МэВ ке тең. Демек, энергиясы ядродағы еки бөлекшениң байланыс энергиясы болған ге тең екен.

шамасының ядролардағы нуклонлардың байланыс энергиясынан (шама менен 8 МэВ) киши екенлиги дейтрондағы нуклонлардың бир бири менен әззи байланысқанлығын билдиреди. 26-сүўретте пунктир сызық пенен байланыс энергиясы ниң қәдди көрсетилген. Егер усындай энергияны дейтрондағы нуклонға берсе, онда ол потенциал шуқырдан шығыў мүмкиншилигин алады, яғный ядро қыйрайды.

Әпиўайы есаплаўлар дейтрон ушын потенциал шуқырдың тереңлигиниң МэВ ке тең екенлигин көрсетеди. Дейтронның байланыс энергиясының 2,23 МэВ шамасына тең екенлигин есапқа алсақ, онда оның кинетикалық энергиясының тийкарғы қәддиниң шуқырдың жоқарғы шетине жүдә жақын жайласқан екенлигин аңғарамыз. Бул дейтронның орнықлы емес екенлигин дәлиллейди.

Енди мәселени теориялық жақтан таллаўға өтемиз.

Протон менен нейтрон арасындағы ядролық өз-ара тәсирлесиў олардың арасындағы қашықлық тен ҳәм еки бөлекшениң спинлери менен ниң бир бирине салыстырғандағы бағытларына ғәрезли бола алады. Ядролық өз-ара тәсирлесиў потенциалының айқын түри ҳәзирге шекем белгили емес. Сонлықтан, ҳәм шамаларынан ғәрезли болған потенциал энергия операторының ең улыўмалық түрин жазыў менен шекленемиз. Өз-ара тәсирлесиў операторының координаталар системасын бурыўда өзгериске ушырамаўы керек. Усының менен бирге ядролық тәсирлесиўде жуплықтың сақланыў нызамы орын алады. Бул өз-ара тәсирлесиў операторының координата көшерлериниң бағытын қарама-қарсы тәрепке қарай бурғанда (шағылыстырғанда) өзгермеўи керек екенлигин аңғартады (өз-ара тәсирлесиў операторының жуплық операторы менен коммутацияланыўы керек). Солай етип, үш ҳәм вектордан мүмкин болған скалярларды пайда етиў талап етиледи. Координаталар системасын бурғанда өзгермей қалатуғын шамалар мына скалярлар болып табылады: (), () ҳәм ().

Потенциаллық энергияға () ҳәм () шамалары бөлек-бөлек кире алмайды. Себеби спин векторы аксиаллық вектор, ал () көбеймеси координата көшерлери шағылысқанда белгисин өзгертетуғын псевдоскаляр. ()() көбеймеси шағылыстырғанда белгисин өзгертпейди ҳәм, сонлықтан, потенциаллық энергияға кире алады. Жоқары дәрежели спинлик операторлар тәсирлесиў энергиясы ға кирмейди, себеби спин операторларының жоқары дәрежелери

түриндеги Паули матрицалары ушын жазылған орынларын алмастырып қойыў қатнаслары бойынша тиң сызықлы комбинацияларына алып келинеди.

Солай етип, потенциаллық энергия ушын жазылған аңлатпа мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.1) |

Бул функцияда , - бөлекшелердиң арасындағы қашықлықтан ғәрезли болған базы бир функциялар. Әдеттеги типтеги потенциаллық энергияны көрсететуғын (76.1)-оператор менен бирге протон менен нейтронның арасындағы өз-ара тәсирлесиў алмасыў күшлериниң характерине де ийе. Бул тәсирлесиўди алмасыў операторы ниң жәрдеминде былайынша жазыўға болады

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.2) |

Бул аңлатпада , - бөлекшелердиң арасындағы қашықлықтың функциялары (олар спиннен ғәрезсиз). Улыўмалық мақсетинде бул функциялардың түриниң әдеттеги өз-ара тәсирлесиўдиң потенциаллық энергиясына киретуғын , функцияларының түринен өзгеше деп есапланады. Өз-ара тәсир етисиўдиң толық энергиясы (76.1)- ҳәм (76.2)-аңлатпалардың қосындысына тең. Дейтронның стабилли ҳаллары ҳаққындағы мағлыўматлардың жыйнағы, нейтронлардың протонлардағы шашыраўын изертлеўлер ҳ.б. ҳәзирши бул функциялардың түрин анықлаўға мүмкиншилик бермейди. Усының менен бирге функциялардың қайсысының екиншисине салыстырғанда киши ямаса үлкен екенлигин салыстырыў ушын да тийкарлар жоқ. Бул ҳәтте ең әпиўайы болған ядролық системаның атомлық системаларға салыстырғанда әдеўир қурамалы болып шығады.

Тәжирийбелерде алынған мағлыўматлар дейтронның ҳалларын классификациялаўға мүмкиншилик береди. Еки нуклоннан (протон менен нейтроннан) туратуғын системаның гамильтонианы жоқарыда келтирилген өз-ара тәсирлесиў энергиясы менен бирге еки сақланыў нызамына алып келетуғынлығын аңсат көриўге болады: толық моменттиң сақланыў нызамы менен жуплықтың сақланыў нызамы.

Дейтронның ҳаллары атомлардың ҳалларын белгилейтуғын символлар менен белгиленеди. Орбиталық момент ке сәйкес келетуғын ҳаллар сәйкес ҳ.т.б. ҳәриплер менен белгиленеди. Термниң () мультиплетлиги шеп тәрептеги жоқары мүйештеги индекс пенен белгиленеди ( арқалы дейтронның толық спини белгиленген). Оң тәрептеги төмендеги индекс дейтронның толық моменти ны билдиреди. Мысалы, ҳалында толық спин 1 ге тең, ҳәм толық момент нолге тең.

Протон менен нейтронның спинлериниң 1/2 ге тең екенлигин есапқа алып, системаның мүмкин болған ҳалларын таллаймыз. Моментлерди қосыў қағыйдасын формаль түрде пайдаланыў системаның мынадай мүмкин болған ҳалларына алып келеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (синглетлер) |
|  | (триплетлер) |

- пенен -ҳаллар жуп ҳаллар болып табылады, ал -ҳал тақ ҳал. Бул ҳаллардың қайсыларының жүзеге келетуғынлығын тек тәжирийбелерде алынған мағлыўматлардың тийкарында айтыўға болады. Тәжирийбелер дейтронның тийкарғы ҳалының жуп ҳалы екенлигин көрсетеди.

Енди моментлерди қосыў қағыйдаларын пайдаланып системаның толық моментке сәйкес келетуғын мүмкин болған ҳалларын табамыз. Протон менен нейтроннан туратуғын системаның қосынды спини нолге ямаса 1 ге тең. Егер спин нолге тең болса, онда болған бир ҳалдың жүзеге келиўи мүмкин. Бундай жағдайда толық момент .

1 ге тең болған спинде орбиталық момент мәнислерин қабыл ете алады. Демек, барлығы болып төрт ҳалдың жүзеге келиўи мүмкин: менен ҳаллары жүзеге келе алмайды, себеби олар тақ ҳаллар болып табылады.

Буннан кейин ямаса ҳалларының жүзеге келмейтугынлығын аңсат аңғарыўға болады. Себеби - ҳәм -ҳаллар ҳәр қыйлы жуплыққа ийе ҳәм олардың суперпозициясына жуўап беретуғын толқын функциясы жуплық операторының меншикли функциясы бола алмайды.

Демек, дейтрон ҳалында, ҳалында ямаса усы еки ҳалдың суперпозициясы болып табылатуғын ҳалда тура алады екен. Егер дейтрон бул ҳалда турған болса, оның квадруполлик моменти нолге тең болған болар еди. Бирақ, тәжирийбелер дейтронның квадруполлик моментиниң жүдә кишкене болса да бар екенлигин көрсетеди. Бул дейтронның тийкарғы ҳалының орайға қарата симметриялы ҳалы менен асимметриялық ҳалының суперпозициясы екенлигин көрсетеди.

Дейтронның квадруполлик моментиниң мәнисин билип, ҳалының дейтронның толқын функциясына қандай үлести қосатуғынлығын баҳалаўға болады. Бул үлес жүдә киши болып шықты. Солай етип, дейтронды ҳалы тәрепинен пайда етилетуғын асимметрияның қосымтасы бар орайға қарата симметриялы система деп қараўға болады екен.

Буннан кейинги баҳалаўлар ушын дейтронның турпайы моделин қараймыз. Бул моделде протон менен нейтронның арасындағы өз-ара тәсирлесиўдиң потенциаллық энергиясы тек олардың арасындағы қашықлықтан ғәрезли деп есаплаймыз. Басқа сөз бенен айтқанда (76.1)-формулада тек биринши ағза ди қалдырамыз. Бундай жағдайда дейтронды тийкарғы ҳалда турыпты деп есаплап, оның асимметриясын есапқа алмаймыз.

Протон менен нейтронның салыстырмалы қозғалысы ушын теңлемени былайынша жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.3) |

Бул жағдайда келтирилген масса μ былайынша анықланады:

Бул теңликте -протонның массасы, - нейтронның массасы. теңлиги орынлы болғанлықтан

теңлигине ийе боламыз.

потенциаллық энергиясына келсек, онда шегинде оның 0 ге тез умтылатуғынлығы менен ғана шекленемиз ( арқалы ядролық күшлердиң тәсир етиў радиусы белгиленген). болған жағдайда диң айқын түрин бере алмаймыз, себеби ядролық күшлердиң тәсир етиў нызамын билмеймиз.

Егер функциясын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.4) |

түринде алсақ, онда болған ҳал ушын ушын мынадай теңлемени аламыз[[22]](#footnote-22):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.5) |

теңсизлиги орынлы болған жағдайлар ушын (76.5)-теңлеме былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.6) |

Шешимди шексизликте кемейетуғын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.7) |

функциясы түринде излеймиз. (76.7)-аңлатпаны (76.6)-теңлемеге қойып, α ушын қатнасты аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.8) |

Бундай жағдайда толқын функциясы ушын мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.9) |

Дейтронның өлшемлериниң характеристикасы сыпатында шамасын қабыл етемиз (бундай қашықлықта толқын функциясының мәниси есе киширейеди). шамасының мәнисин (76.8)-аңлатпадан аңсат табыўға болады. Себеби дейтрон ушын байланыс энергиясының шамасы тәжирийбелерде жақсы анықланған ( = 2,19 Мэв). ℏ пенен ның мәнислерин (76.8)-аңлатпаға қойып 4,3·10-13 см шамасын аламыз. Демек, дейтронның толқын функциясы ядролық күшлер тәсир ететуғын областтан ( 2·10-13 см) әдеўир үлкен областта нолден өзгеше болады екен. Солай етип, нейтрон менен протонды бир биринен ядролық күшлер тәсир ететуғын қашықлыққа салыстырғанда әдеўир үлкен қашықлықларда да үлкен итималлық пенен табыўға болатуғынлығын көремиз.

қашықлықларда толқын функциясының қашықлықтан ғәрезлигин анықлаўға болмайды. Себеби бул областтағы потенциаллық энергия белгили емес. Бирақ, сфералық симметрияға ийе майдандағы қозғалыс теориясынан шегинде ның ге пропорционал екенлиги белгили. Усыған сәйкес -ҳалда ге пропорционал. Демек, киши қашықлықларда χ нолге умтылады.

функциясына киретуғын константасын нормировка шәртинен анықлаймыз. қашықлықлардағы толқын функциясы сыпатында оның (76.9)-түриндеги түрин пайдаланамыз. Бундай қатнас барлық кеңисликте орынланады деп болжаймыз. Бундай жағдайда биз үлкен қәтеге жол қоймаймыз. Себеби нормировкалаўшы интегралдың үлкен бөлеги областына тийисли. (76.9) ды нормировка шәртине қойып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.10) |

аңлатпасын табамыз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | 21-сүўрет.  функциясының ден ғәрезлиги. |

Енди шуқырдың кеңлиги менен оның тереңлигиниң арасындағы байланысты табамыз. Оның ушын (76.5)-теңлемени нолден ге шекем интеграллаймыз. Интеграллаўдың нәтийжесинде мынадай аңлатпаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.11) |

21-сүўретте көринип турғанындай, ноқатында алынған туўындысының мәниси туўындысының мәнисинен әдеўир киши. Усының менен бир қатарда байланыс энергиясын өз-ара тәсирлесиўдиң потенциаллық энергиясына салыстырғанда есапқа алмаўға болады (яғный теңсизлиги орынланғанда теңсизлиги орынлы болады). Киши қашықлықларда ( арқалы базы бир константа белгиленген). Бундай жағдайда (76.11)-аңлатпа

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.12) |

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76.13) |

түрине алып келинеди. (76.13)-аңлатпадағы интегралды менен алмастырып ( - өз-ара тәсирлесиўдиң базы бир орташа энергиясы, яғный шуқырдың базы бир тереңлиги), биз мынаған ийе боламыз:

**X бап. Релятивистлик квантлық механиканың элементлери**

**§ 70. Скаляр релятивистлик Клейн-Гордон теңлемеси (Соколов-Тернов)**

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

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.1) |

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.2) |

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

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.3) |

теңлемесине ийе боламыз.

Бул теңлемеге (2)-аңлатпадан операторлардың мәнислерин қоятуғын болсақ биз еркин бөлекше ушын Клейн-Гордон теңлемесин аламыз[[23]](#footnote-23):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.4) |

Электромагнит майданы қатнасатуғын жағдайда (6.1.2)-аңлатпаның орнына төмендегидей улыўмаласқан операторларды қойыў керек болады[[24]](#footnote-24):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.5) |

Бундай жағдайда майдан бар болған жағдай ушын релятивистлик теңлемени аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.6) |

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

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Бул аңлатпада

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

**Зарядтың ҳәм тоқтың тығызлығы**. Зарядтың ҳәм тоқтың тығызлығы ушын аңлатпаны электромагнит майданлары болмаған жағдай ушын табамыз ().

Шредингер теориясындағыдай жуўмақларымыздың тийкарына үзликсизлик теңлемесин қоямыз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.7) |

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.8) |

Соңғы теңликти

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.9) |

түрине түрлендириў мүмкин.

Енди заряд пенен тоқтың тығызлықларын сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.10) |
|  | (6.1.11) |

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.12) |

векторын пайда ететуғынлығын аңғарамыз. Бул аңлатпада

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.13) |

Тоқтың тығызлығы ушын (6.1.11)-формула релятивистлик емес

формула менен бирдей болады екен. Зарядтың тығызлығы ушын жазылған аңлатпа болғанда релятивистлик емес аңлатпасына өтеди. Ҳақыйқатында да алмастырыўын пайдаланып [(6.1.4)-формулаға қараңыз] (6.1.10)-аңлатпаның жәрдеминде зарядтың тығызлығы ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.14) |

Бул формула болса релятивистлик жақынласыўында әдеттеги формуласына өтеди. Бирақ релятивистлик теорияда ниң терис мәнислерине ийе екинши шешимның болыўы мүмкин (). Бундай жағдайда тығызлығы ушын ниң белгисине қарама-қарсы белгини қоямыз.

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

Бөлекшелердиң тығызлығы түсиниги болса (зарядтың тығызлығынан басқа)

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.15) |

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.16) |

аңлатпасынан тийкарғы айырмасы болып табылады.

**Водород тәризли атомның релятивистлик теориясы(спинди есапқа алмаған жағдай)**. Бул мәселени (*6.1.*6)-толқын теңлемесиниң жәрдеминде шешиўимиз керек. Бул теңлемеде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.17) |

Бундай жағдайда төмендегидей теңлемеге ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.18) |

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.19) |

Буннан кейин энергия операторы болған

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.20) |

операторының тәсирин есапқа алып (6.1.18)-теңлемени

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.21) |

түрине алып келемиз.

Шредингер теориясындағыдай соңғы теңлемениң шешимин

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.22) |

формасында излеймиз. Бундай жағдайда радиаллық бөлим ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.23) |

теңлемесин аламыз. Бул жерде шамасы бирлиги жоқ шама болып табылады ҳәм оны жуқа структура турақлысы деп атаймыз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.24) |

шегинде соңғы аңлатпа релятивистлик емес теорияның сәйкес аңлатпасына дәл өтеди.

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

Ең дәслеп шегиндеги асимптоталық шешимин изертлеймиз.

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.25) |

Бул теңлемениң шешимин

түринде излеймиз. Бундай жағдайда ти анықлаў ушын шешими

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.26) |

түриндеги

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.27) |

теңлемесин шешемиз. Бул жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.28) |

Егер

теңсизлиги орынланатуғын болса еки ҳәм түбири де шамасының қәлеген мәнисинде ҳақыйқый түбирге ийе болады. Бул жағдайда биз шамасы нолге тарқалмайтуғын шешими менен шекленсек болады (яғный бул жағдайда шәрти орынланады). Усының менен бирге ( теңсизлиги орынланғанда) шегинде толқын функциясы ушын аңлатпада экспоненциаллық түрде кемейетуғын шешим менен шеклениўге болады.

Еки тәрептен де кемейетуғын шешимлер менен шеклениў энергияның спектри ушын Шредингер теориясында алынғандай аңлатпаны береди (бул жағдайда теңлемесиндеги ди шамасына алмастырыў керек). Бундай жағдайда меншикли мәнислерди анықлаў ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.29) |

теңлемесине ийе боламыз. Бул теңлемеге ҳәм турақлыларының (6.1.24)-аңлатпа бойынша алынған мәнислерин қойып ()

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.30) |

формуласын аламыз. Бул аңлатпаны  бойынша қатарға жайып ҳәм нолге айланбайтуғын дәслепки еки ағзасын қалдырып энергия спектрин табамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.31) |

Биринши ағза релятвистлик емес теорияның сәйкес аңлатпасына сәйкес келеди; жуқа структура турақлысының квадратына туўры пропорционал болған екинши ағза релятивистлик дүзетиўлерди береди.

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

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.32) |

Экспериментте алынған мағлыўматлар менен салыстырыў Бальмер сериясы ушын сызықларға бөлиниўдиң ҳақыйқый кеңлигиниң (6.1.32)-формула бойынша алынған шамадан үш еседей киши екенлигин көрсетеди. Бундай қарама-қарсылықтың себеби мынадан ибарат: водород атомының қәддилериниң жуқа структурасы тек ғана энергия менен тезлик арасындағы байланыс пенен байланыслы емес. Төменде көрсетилетуғындай бул жағдайда электронның спинин де, яғный меншикли механикалық моментин де есапқа алыў керек болады. Дәслеп Клейн-Гордон теңлемеси релятивистлик электронды тәрийиплеў ушын жарамлы деп есапланды. Бирақ бул спини нолге тең болған бөлекшениң қозғалыс теңлемеси болып табылады. Ал электронның спини болса 1/2 ге тең. Клейн-Гордон теңлемесин спинлери нолге тең пи-мезонлар ушын қолланыўға болатуғын болса керек. Мысалы, бул теңлеме дара жағдайда терис пи-мезонлардың ядроның дөгерегинде айланыўын тәрийиплей алады. Тап усындай пи-мезоатомлар экспериментте алынды.

**Ескертиў**: Ең ақырында (6.1.27)-теңлемеде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.33) |

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

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6.1.34) |

Бул аңлатпада . Биз мәселемизди ҳәм шәрти менен шеклей алмаймыз. Себеби еки шешим де шегинде бирдей сингулярлыққа ийе болады.

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

**§ 71. Дирак теңлемесиниң структурасы ҳәм оның физикалық мәниси**

Өткен әсирдиң уллы физиклериниң бири П.Дирак (P. Dirac) өзиниң оғада әҳмийетли және ири физикалық изертлеўлердиң қатарына киретуғын тарийхый жумысында релятивистлик толқын теңлемесин алды ҳәм усыған сәйкес электронның теориясын дөретти. Бул теорияда 1928-жыллары жаңа қәлиплескен квантлық механикада ҳаллардың тығызлығы ушын терис шаманың алыныўы менен байланыслы болған машқала пайда болмады. Паули менен Вейскофф Клейн-Гордонның[[25]](#footnote-25) теңлемесине жаңа интерпретация бермегенше Дирактың теңлемеси бирден-бир дурыс релятивистлик теңлеме деп есапланды. Ҳәзирги ўақытлары биз Дирак теңлемесиниң де, Клейн-Гордон теңлемесиниң де бирдей дурыс екенлигин билемиз. Дирак теңлемеси спини 1/2 ге тең болған бөлекшелерге, ал Клейн-Гордон теңлемеси болса ноллик спинге ийе болған бөлекшелерге сәйкес келеди. Бул еки теңлеме белгили болған фундаменталлық элементар бөлекшелердиң көпшилигин тәрийиплейди.

Дирак теңлемеси электронның биспинорлық классикалық майданы ушын релятивистлик инвариант теңлеме болып табылады. Оны спинлери 1/2 ге тең болған басқа да фермионлар ушын қолланыўға болады. П.Дирак тәрепинен 1928-жылы релятивистлик инвариантлық талабы, сызықлылық (суперпозиция принципиниң дурыс екенлигин аңғартатуғын) ҳәм ўақыт бойынша биринши тәртипли туўындының болыўы (яғный берилген ўақыт моментиндеги ҳал бойынша буннан кейинги ўақыт моментлериндеги ҳалларды анықлаўдың мүмкин болыўы ушын) шәртиниң тийкарында келтирип шығарылды[[26]](#footnote-26). Басқа сөз бенен айтқанда, Дирак теңлемеси спини 1/2 ге тең (электрон, мюон, кварклар ҳ.б.) еркин (басқа бөлекшелер менен тәсирлеспейтуғын) бөлекшениң толқын функциясы ушын дүзилген оның ҳалының ўақыттың өтиўинен ғәрезли өзгериўин тәрийиплейтуғын релятивистлик теңлеме болып табылады. Спини 1/2 ге тең болған бөлекше ушын бул талапларды тек төрт теңлемеден туратуғын система ғана қанаатландырады, яғный толқын функциясының төрт қураўшыдан турыўы керек: , , , . Координаталар системаларын бурғанда ҳәм Лоренц түрлендириўдеринде олар

биспинорын пайда ететуғын ҳәм спинорларының жубындай болып түрленеди.

Дирак теңлемеси төрт теңлемеден туратуғын

системасының түрине ийе. Бул аңлатпада - кеңисликлик ҳәм ўақытлық координаталар ( - ўақыт);  *-* бөлекшениң массасы; - Дирак матрицалары.

Дирак матрицалары Паулидиң еки қатарлы матрицалары ҳәм бирлик матрицасы арқалы аңлатылады:

Еркин бөлекше ушын Дирак теңлемелери импульс пенен энергияның арасындағы релятивистлик қатнасты береди:

ямаса

Бул қатнас тынышлықта турған бөлекше ушын формуласын береди (бөлекшениң тынышлықтағы энергиясы). менен арасындағы мәнислердиң интервалы "қадаған етилген" болып табылады. Майданның квантлық теориясында терис энергияға ийе болған бөлекшениң ҳалы оң энергияға ийе, бирақ қарама-қарсы электр зарядына ийе антибөлекшениң ҳалы түринде интерпретацияланады. Солай етип, Дирак теңлемесиниң бир биринен ғәрезсиз болған төрт шешими спини ½ ге тең болған бөлекшениң ҳалын да, оның антибөлекшесиниң ҳалын да тәрийиплейди. Олардың ҳәр қайсысы импульстиң бағытына түсирилген спинниң бағытлары бойынша айрылады (+1/2 ҳәм -1/2). Позитронның экспериментте табылыўы Дирак теңлемесиниң жеңиси болып табылады.

Бир бири менен тәсирлесетуғын бөлекшелердиң Дирак теңлемеси усы өз-ара тәсирлесиўди есапқа алатуғын ағзаға ийе болады. Әззи ҳәм электромагнит тәсирлесиўлердиң бирлескен теориясы болған квантлық электродинамикадағы менен квантлық хромодинамикадағы бул қосылыўшының түри калибровкалық симметрия талабы бойынша анықланады. Мысалы, электродинамикада бул процедура Дирак теңлемесиндеги туўындысын аңлатпасы менен алмастырыўдың жәрдеминде әмелге асырылады. Бул аңлатпаларда - бөлекшениң заряды, - электромагнит майданның төрт өлшемли потенциалы. қосылыўшысы зарядланған бөлекшениң электромагнит майданы менен тәсирлесиўин тәрийиплейди. Спинорлық бөлекшелердиң векторлық калибровкалық майданлар менен тәсирлесиўине сәйкес келетуғын соған усаған ағзалар аты аталған басқа теорияларда да пайда болады.

Дирак теңлемеси менен тәрийипленетуғын зарядланған бөлекше магнит моментине де ийе болады (электрон ушын Бор магнетонына тең). Бирақ, майданның квантлық теориясындағы вакуум менен тәсирлесиў қосымша, аномаллық деп аталатуғын магнит моментиниң пайда болыўына алып келеди. Бундай магнит моментиниң шамасы адронлар ушын жүдә үлкен мәниске ийе болады. Мысалы, протонның магнит моментиниң эксперименталлық мәниси оның нормал болған ("Дираклық") шамасынан 2,8 есе үлкен.

Релятивистлик емес шекте электрон ушын жазылған Дирак теңлемеси Паули теңлемесине өтеди. Дара жағдайда бул теңлеме атомның энергиясының жуқа структурасын анықлайды.

Дирак теңлемеси Максвелл теңлемеси менен биргеликте еркин электронлардың электромагнит майданы менен өз-ара тәсирлесиўин, жақтылықтың электрондағы шашыраўын (Комптон эффекти), фотон тәрепинен электрон-позитронлық жуптың туўдырылыўын ҳ.т.б. түсиндиреди. Дирак теңлемеси Ньютонның классикалық теңлемеси, бөлекшелердиң релятивистлик классикалық қозғалыс теңлемесин ҳәм Шрёдингер теңлемесин әдеўир улыўмаластырады.

Бул теңлемени ашқаны ушын П. Дирак 1933-жылы физика бойынша Нобель сыйлығын алыўға миясар болды.

Биз дәслеп спини 1/2 ге тең болған бөлекшелердиң (яғный фермионлардың) төмендегидей үш фундаменталлық қәсийетлерге ийе болатуғынлығын атап өтемиз.

1. Оларға кеңисликлик координаталардан ғәрезсиз болған ишки векторлық қәсийет тән.

2. Сәйкес вектор қозғалыс муғдарының моменти болып табылады (спин), бул момент бөлекшениң әдеттеги орбиталық моментине қосылады.

3. Спинниң қандай да бир қураўшысын өлшегенде + ½ℏ ҳәм - ½ℏ шамаларының тек биреўи ғана алынады.

Бул қәсийетлерди еки қураўшыға ийе болған толқын функцияның жәрдеминде тәрийиплеўге болады. Оларға сәйкес келетуғын спинлик операторлар еки қатарлы матрицалардың (Паули матрицалары деп аталатуғын матрицалардың) жәрдеминде сәўлелендириледи. Олар былайынша жазылады:

Бул матрицалар бизге кейинирек керек болады.

Жақтылықтың корпускулалық қәсийетлери квантлық теорияның раўажланыўы ушын хызмет еткен тарийхый биринши фундаменталлық факт болып табылады. Бөлекшениң энергиясы ε менен оған сәйкес келетуғын электромагнит майданының жийилиги ω ны байланыстыратуғын Планк-Эйнштейнниң қатнасы квантлық турақлы болған ℏ шамасын өзиниң ишине алатуғын биринши қатнас болып табылады. Бирақ, системалы түрдеги избе-изликтеги квантлық механика фотонның квантлық механикасы дөретилместен бурын пайда болды. Бул жағдай терең физикалық себепке ийе. Атомлық бөлекшелер болған электронлар менен ядролар нолге тең болмаған массаға ийе. Олар ушын олардың тынышлықтағы энергиясынан киши болған энергиялардың областы бар болып, бул областта салыстырмалық теориясын есапқа алмаўға болады. Оған қарама-қарсы - фотонның массасы нолге тең ҳәм оның ушын релятивистлик область жоқ ҳәм фотонның квантлық механикасы ең бастан баслап релятивистлик теория болып табылады. Усындай себепке байланыслы релятивистлик квантлық теорияны үйрениўди электронның релятивистлик квантлық механикасынан баслаған тәбийий. Ал электронның квантлық механикасында тийкарында ψ толқын функциясы ушын Шрёдингер теңлемеси жататуғын релятивистлик квантлық механикадағы шеклик өтиўге болады:

Бул аңлатпада арқалы системаны гамильтонианы белгиленген (жазылған теңлемеде Планк турақлысының мәниси бирге тең деп есапланған).

Биз ең дәслеп релятивистлик емес ҳәм релятивистлик квантлық теорияларда кеңнен қолланылатуғын квантлық ҳалларды тәрийиплеў ушын қолланылатуғын бра ҳәм кет (инглиз тилинде bra-ket < bracket қаўсырма мәнисин береди) алгебралық формализминиң бар екенлигин еслетип өтемиз. Оларды Дирак белгилеўлери деп те атайды. Матрицалық механикада бул белгилеўлер системасы бәрше тәрепинен қабыл етилген. Бундай жағдайда стационар ҳал ушын жазылған Шрёдингер теңлемеси мынадай көриниске ийе:

Биз проективлик гильберт кеңислигиниң бар екенлигин ҳәм оның элементлериниң "ҳал векторлары" ("кет" векторлар) деп аталатуғынлығын және олардың арқалы белгиленетуғын да атап өтемиз.

**Теңлемениң көриниси**. Дирак теңлемеси

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

түринде жазылады. Бул теңлемеде арқалы электронның (ямаса теңлеме тәрепинен тәрийипленетуғын басқа фермионның) массасы, арқалы жақтылықтың тезлиги, арқалы импульстиң қураўшыларының үш операторы ( координаталары бойынша), арқалы Планк турақлысы, ҳәм t арқалы сәйкес кеңисликлик координаталар менен ўақыт белгиленген. - төрт қураўшыға ийе толқын функциясы (биспинор). ҳәм лер арқалы толқын функциясына тәсир ететуғын биспинорлар кеңислигиниң үстиндеги сызықлы операторлар (Паули матрицалары) белгиленген. Бул операторлар олардың ҳәр бир жубы антикоммутацияланатуғын, ал олардың ҳәр бириниң квадраты бирге тең болатуғындай болып сайлап алынған:

Бул теңликте теңсизлиги орынланатуғын жағдайда индекслери 0 ден 3 ке шекем өзгереди.

индекслери 0 ден 3 ке шекем өзгеретуғын жағдайларда .

Биз таллап атырған көринисте бул операторлар 4×4 өлшеминдеги матрицалардың жәрдеминде бериледи (бул антикоммутацияланыў шәрти орынланатуғын матрицалардың минималлық өлшеми болып табылады) ҳәм оларды Дирактың альфа-матрицалары деп атайды.

Теңлемениң шеп тәрепиндеги қаўсырманың ишиндеги оператордың барлығы Дирак операторы деп аталады. Бирақ, ҳәзирги ўақытлары қабыл етилген терминология бойынша оны Дирак гамильтонианы деп атаў керек. Себеби, ҳәзирги ўақытлары Дирак операторы деп Дирак теңлемеси түринде жазылатуғын ковариантлы операторды жазыў қабыл етилген.

Ҳәзирги заман физикасында Дирак теңлемесин жазыўдың

түриндеги ковариантлық формасы жийи қолланылады.

**Физикалық мәниси**. Дәслеп электрон менен позитрон ушын қолланылыўын қараймыз. Дирак теңлемесинен электронның меншикли механикалық моментке - шамасы Бор магнетоны болған (гиромагнитлик қатнасты есапқа алмаған жағдайда) ½ ге тең спинге ийе екенлиги келип шығады ( арқалы электронның заряды, арқалы оның массасы, арқалы жақтылықтың тезлиги, ℏ арқалы Дирак турақлысы ямаса редукцияланған Планк турақлысы белгиленген). Электронның усындай меншикли моментке (импульс моментине) ийе болатуғынлығы бурынырақ ашылды. Атап айтқанда, 1922-жылы Штерн-Герлах тәжирийбесинде атомлардың спинге ийе болатуғынлығы ҳәм олардың магнит моментлериниң бағытларының кеңисликлик квантланыў факты тастыйықланды. Илимге "спин" термини 1925-жылы С.Гаудсмит пенен Д.Уленбек киргизди.

Дирак теңлемесиниң жәрдеминде водород ҳәм водород тәризли (ионлардың) атомлардың энергияларының қәддилери ушын қәддилердиң жуқа структурасын өзиниң ишине алатуғын дәлирек формула алынды ҳәм Зееман эффекти түсиндирилди. Мысалы, водород атомы ушын энергияның дәл мәнислери ушын

түриндеги формула орынлы (бундай жағдайда электронды релятивистлик емес деп есаплайды).

Дирак теңлемесиниң тийкарында фотонлардың еркин электронлардағы шашыраўының итималлығы (Комптон эффекти) ҳәм электрон тормозланғанда жүзеге келетуғын нурланыўдың итималлығы ушын формулалар алынды. Бул формулалардың дурыслығы экспериментте тастыйықланды. Бирақ электронның қозғалысының избе-изликтеги релятивистлик тәрийиплениўи квантлық электродинамика тәрепинен бериледи.

Дирак теңлемесиниң өзине тән өзгешелиги - оның еркин бөлекшелер ушын шешимлериниң арасында терис ҳалларға сәйкес келетуғын шешимлердиң бар болыўында (бул бөлекшениң терис массасына сәйкес келеди). Бул жағдай теория ушын үлкен қыйыншылықты пайда етти. Себеби бундай ҳаллардағы бөлекшелер ушын жазылған барлық механикалық нызамлардың дурыс болмаўы керек. Ал квантлық теорияда болса бундай ҳалларға өтиўдиң мүмкиншилиги бар. Бөлекшелердиң бир бирине айлана алатуғынлығы дәлилленгеннен кейин терис энергияға ийе болған қәддилерге өтиўдиң мүмкиншилигиниң физикалық мәниси айқын болды. Дирак теңлемесинен массасы электронның массасындай, зарядының белгиси электронның зарядының белгисине қарама-қарсы болған (электронның антибөлекшеси) бөлекшениң бар болатуғынлығы келип шықты. Бундай бөлекше космослық нурларды изертлеўдиң барысында Америкалы физик Карл Дейвид Андерсен (1905-1991) тәрепинен 1932-жылы ашылды ҳәм позитрон деп аталды. Бул Дирактың электрон теориясының оғада үлкен жетискенлиги болып табылды. Электронның терис энергияға ийе ҳалдан оң энергияға ийе ҳалға өтиўи менен кериў өтиў процесслери электрон-позитрон жубының пайда болыўы ҳәм усындай жуптың аннигиляциясы деп интерпретацияланады.

**Басқа бөлекшелер ушын қолланылыўы**. Дирак теңлемеси тек электронлар ушын ғана емес, ал спини ½ ге (ℏ бирликлериндеги) тең болған басқа да бөлекшелер ушын дурыс (мысалы, мюонлар менен нейтринолар). Бундай жағдайда тәжирийбелердиң нәтийжелерине жақсы сәйкес келиў қурамалы (қурамлық бөлекшелер) емес, ал әпиўайы бөлекшелерде жақсы алынады. Мысалы, протон менен нейтрон ушын (олардың глюонлық майдан менен байланысқан спинлери ½ ге тең болған кварклардан туратуғынлығын еслетип өтемиз) Дирак теңлемесин туўрыдан-туўры қолланғанда магнит моментлериниң мәнислери ушын дурыс болмаған нәтийжелер алынады: "дирак" протоны ушын магнит моментиниң шамасы ядролық магнетон болған шамасына ( - протонның массасы), ал нейтронның магнит моментиниң шамасы (зарядланбаған болғанлықтан) нолге тең болыўы керек. Тәжирийбелер болса, протонның магнит моментиниң ядролық магнетоннан 2,8 есе үлкен екенлигин, ал нейтронның магнит моментиниң терис екенлигин ҳәм абсолют мәниси бойынша протонның магнит моментиниң шама менен 2/3 бөлегине тең екенлигин көрсетеди. Бул қубылыс протон менен нейтронның аномаллық магнит моменти атамасына ийе болды.

Бул бөлекшелердиң аномаллық магнит моменти олардың ишки структурасының бар екенлигинен дерек береди ҳәм олардың кварклық қурылысының эксперименталлық тастыйықланыўларының бири болып есапланады.

Ҳақыйқатында, берилген теңлемени спини ½ ге тең болған элементар бөлекшелер болып табылатуғын кварклер ушын қолланыўға болады. Дирактың модификацияланған теңлемесин элементар бөлекшелер болып табылмайтуғын протонлар менен нейтронларды (олар кварклардан турады) тәрийиплеў ушын пайдаланыўға болады.

**§ 72. Дирак теңлемеси ҳәм майданның квантлық теориясы**

Дирак теңлемеси бир электрон ушын итималлықтың амплитудасын емес (усындай болып көриниўи мүмкин), ал Дирак бөлекшесиниң зарядының тығызлығы ҳәм тоғы менен байланыслы болған шаманы тәрийиплейди: зарядтың сақланатуғынлығына байланыслы бөлекшени табыўдың толық итималлығы деп аталған шама сақланады. Солай етип, Дирак теңлемеси ең бастан баслап көп бөлекшелик теңлеме болып табылады.

Классикалық сыртқы электромагнит майданы менен тәсирлесетуғын Дирак теңлемесин өзиниң ишине алатуғын теорияны бөлекшелердиң туўылыўы менен жоқ етилиўине тийисли деп жүдә дурыс емес қабыл етеди. Теория электронның магнит моменти менен атомлардың спектриндеги сызықлардың жуқа структурасын жақсы болжайды. Ол электронның спинин түсиндиреди, себеби теңлемениң төрт шешимлериниң екеўи электронның еки спинлик ҳалларына сәйкес келеди. Ал терис энергияға ийе болған қалған еки шешим Дирак тәрепинен өзиниң теориясының тийкарында болжанған ҳәм дерлик дәрҳәл экспериментте табылған электронның антибөлекшесине (позитронға) сәйкес келеди.

Жоқарыда гәп етилген табыслары менен бир қатарда бундай теория бир қатар кемшиликлерге де ийе. Мысалы, теория квантланған электронлық майдан менен квантланған электромагнит майданның арасындағы өз-ара тәсирлесиўлерди, солардың ишинде өз-ара тәсирлесетуғын майданлардың релятивистлик теориясының фундаменталлық процесслериниң бири болған бөлекшелердиң туўылыўы менен жоқ етилиўин тәрийиплей алмайды. Бул қыйыншылық майданның квантлық теориясында шешилген. Электронларды изертлеген жағдайларда квантланған электромагнит майдан, электронлық майданның өзиниң квантланыўы ҳәм бул майданлардың бир бири менен тәсирлесиўи қосылады. Бундай жағдайда алынған теорияны квантлық электродинамика деп атайды.

**Дирак теңлемесин келтирип шығарыў**. Дирак теңлемеси

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

түринде жазылатуғын Шрёдингер теңлемесиниң улыўмаластырылыўы болып табылады. Қолайлылық ушын биз координаталық көринисте жумыс ислеймиз. Бундай көринисте системаның ҳалы функциясының жәрдеминде бериледи. Бундай көринисте Шрёдингер теңлемеси былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

Бундай жағдайда гамильтонианы толқын функциясына тәсир етеди.

Гамильтонианды системаның толық энергиясын тәрийиплейтуғындай етип анықлаўымыз керек. Ҳеш нәрсе менен тәсирлеспейтуғын ҳәм барлық басқа майданлардан изоляцияланған еркин электронды қараймыз. Релятивистлик модель ушын биз релятивистлик дүзетиўлерге, спинге итибар бермей, классикалық механикадағы кинетикалық энергияға уқсас болған

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

түриндеги гамильтонианды ғана алған болар едик. Бул теңликте арқалы импульстиң проекцияларының операторы белгиленген, ал индекслери декарт координаталарын анықлайды. Ҳәр бир усындай оператор толқын функциясына кеңислик бойынша туўынды түринде тәсир етеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

Релятивистлик бөлекшени тәрийиплеў ушын басқа гамильтонианды табыў керек. Бундай жағдайда импульс операторын ҳәзир ғана келтирилген анықламаны сақлайды деп болжаў керек. Релятивистлик қатнаслар бойынша системаның толық энергиясы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

түринде аңлатылады. Бул

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

теңлемесине алып келеди ҳәм ол толық қанаатландырарлық теңлеме бола алмайды. Себеби бул теңлемеде арнаўлы салыстырмалық теориясының негизлериниң бири болған лоренц-ковариантлық - ўақыт пенен кеңисликлик координаталардың формаллық жақтан тең ҳуқықлы екенлигин аңлататуғын лоренц-ковариантлық айқын түрде көринип турған жоқ. Соның менен бирге оператордан алынған түбир айқын жазылмаған. Бирақ, теңлемениң оң ҳәм шеп тәреплерин квадратқа көтериў лоренц-ковариант болған Клейн-Гордон-Фок теңлемесине алып келеди. Дирак теңлемениң оң тәрепи ўақыт бойынша биринши тәртипли туўындыға ийе болғанлықтан теңлемениң шеп тәрепи де кеңисликлик координаталар бойынша биринши тәртипли туўындыға ийе болыўы керек деп болжады (басқа сөз бенен айтқанда биринши дәрежели импульс операторының болыўы керек). Бундай жағдайда туўындылардың алдында турған коэффициентлердиң қандай тәбиятқа ийе болыўынан ғәрезсиз турақлы болыўы керек деп болжап (кеңисликтиң бир текли екенлигине байланыслы) былайынша жазыў ғана қалады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

Бул еркин бөлекше ушын жазылған Дирак теңлемеси болып табылады.

Бирақ бизлер еле коэффициентлерин ҳәзирше анықлағанымыз жоқ. Егер Дирактың болжамы дурыс болса, онда квадратқа көтерилген оң тәрептеги бөлим

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

қосындысын бериўи керек, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (8) |

Алынған теңлемениң шеп тәрепиндеги қаўсырмаларды ашып α ушын төмендегидей шәртлерди аламыз:

Барлық ушын

Барлық ушын

ямаса ушын барлығын биргеликте қысқаша түрде жазып

теңлигине ийе боламыз. Бул теңликте арқалы Кронекер символы белгиленген. Егер еки индекс бир бирине тең болса, онда Кронекер символы 1 ге, ал ҳәр қыйлы болатуғын болса нолге тең.

ушын буннан да қысқаша түрде мынадай теңликти жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

Бул теңликте арқалы түринде жазылатуғын антикоммутатор белгиленген.

Бундай қатнаслар әдеттеги санлар ушын орынланбайтуғын болғанлықтан (санлар коммутацияланады, ал α коммутацияланбайды) α ны базы бир сызықлы операторлар ямаса матрицалар деп болжаған мақул (бундай жағдайда қатнаслардың оң тәрепиндеги бирликлер менен ноллерди сәйкес ноллик операторлар ямаса матрицалар деп есаплаў керек болады) ҳәм сонлықтан жоқарыда келтирилген қатнасларды пайдаланып α лер ушын айқын түрдеги жыйнақты табыў керек болады.

Усы жерде әдеттеги физикалық кеңислик ямаса кеңислик-ўақыт пенен туўрыдан-туўры байланыспаған қандай да бир абстрактлық "ишки" кеңисликтиң векторларын нәзерде тутып биринши рет толқын функциясының бир компонентлик болмайтуғынлығын (яғный скаляр болмайтуғынлығын), ал векторлық болып табылатуғынлығын көриўге болады.

Гамильтонианның эрмитлик болыўы ушын матрицалардың да эрмитлик болыўы керек. Жоқарыда берилген критерийлерди қанаатландыратуғын матрицалардың ең киши өлшеми 4x4 өлшемге ийе болған комплексли матрицалар болып табылады (оларды айқын түрде сайлап алыў менен олардың көриниси бир мәнисли болмаса да). Бул матрицалар матрицалық көбейтиў операциялары менен биргеликте группаны пайда етеди. Бул группаның көринисин таңлап алыў Дирак теңлемесиниң қәсийетлерине тәсир етпейтуғын болса да, толқын функциясының қураўшыларының физикалық мәнислерине тәсирин тийгизеди. Әлбетте, бундай жағдайда толқын функциясы төрт өлшемли абстрактлы векторлық (яғный биспинорлық) майдан болады (яғный әдеттеги кеңислик-ўақыттың векторы менен туўрыдан-туўры байланыспаған).

Кирисиўде биз Дирак тәрепинен пайдаланылған көринисти келтирдик. Бул көринисти дурыс түрде былайынша жазады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10) |

Бул теңликлерде 0 менен сәйкес ноллик ҳәм бирлик матрицалар. болса () Паули матрицалары болып табылады. Бул Паули матрицалары кватернионлардың матрицалық көринислери болып табылады. Олардың антикоммутацияланатуғынлығы көп ўақытлардан бери белгили.

Теңлемедеги

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

гамильтониан Дирак гамильтонианы деп аталады.

Еки өлшемли ямаса үш өлшемли кеңисликтеги, бирақ болған жағдайдағы әдеттеги Дирак теңлемеси ушын альфа-матрицалардың орнына Паули матрицалары жеткиликли болады. Усының менен бирге, бул жағдайда төрт қураўшыға ийе болған биспинор майданның толқын функциясының орнын еки қураўшыға ийе болған спинорлық ийелейди.

**§ 73. Толқын функциясының тәбияты**

ψ толқын функциясына 4х4 матрицалары тәсир ететуғын болғанлықтан, ол төрт қураўшыға (компонентаға) ийе объект болып табылады. Кейинирек толқын функциясының еки еркинлик дәрежесине ийе болатуғынлығын көрсетиледи. Олардың бири оң энергияларға, ал екиншиси терис энергияларға сәйкес келеди. Соның менен бирге олардың ҳәр қайсысы белгиленип алынған бағытқа түсирилген спинниң проекциясы менен байланыслы болған және еки еркинлик дәрежесине ийе болады. Оларды "жоқарыға қарай бағытланған" ҳәм "төмен қарай бағытланған" сөзлери менен белгилейди.

Биз толқын функциясын бағана түринде жаза аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (12) |

Дуаллық толқын функциясын қатар түринде жазады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (13) |

Бул аңлатпаларда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (14) |

ҳәм \* символы әдеттеги комплексли түйинлесликти аңғартады.

Әдеттегидей бир қураўшыға ийе болған толқын функциясы болған жағдайдағыдай, толқын функциясының модулиниң квадратын киргизиўге болады. Ол координата пенен ўақыт ның функциясы сыпатында итималлықтың тығызлығын береди. Бул жағдайда модулдиң квадратының орнын толқын функциясы менен оған дуаллық болған функцияның скаляр көбеймеси, яғный биспинордың эрмитлик нормасының квадраты ийелейди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15) |

Итималлықтың сақланыўын нормировка шәрти береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16) |

Дирак теңлемеси пайдаланып, итималлықтың "локаллық" тоғын алыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17) |

Итималлық тоғы былайынша бериледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (18) |

шамасын электронның заряды e ге көбейтип, электрон ушын электр тоғының тығызлығына келемиз.

Толқын функциясының қураўшыларының мәниси координаталар системасынан ғәрезли. Дирак ψ толқын функциясының координаталар системасы өзгергенде (соның ишинде үш өлшемли кеңисликтеги бурыўларда) ҳәм бир бирине салыстырғанда тез қозғалатуғын есаплаў системаларын бир бирине түрлендиргенде қалайынша түрленетуғынлығын көрсетти. Бундай жағдайда кеңисликтиң айланыўларында ямаса Лоренц түрлендириўлеринде толқын функциясы ψ әдеттеги кеңисликтеги ямаса кеңислик-ўақыттағы вектор сыпатында түрленбейди (себеби оның қураўшылары әдеттеги кеңисликтеги бағытлар менен ең дәслептен байланыслы емес, сонлықтан толқын функциясының әдеттеги кеңисликтеги вектор сыпатында түрленбейтуғынлығы таң қаларлық емес). Бундай объект төрт қураўшыға ийе болған Дирак спиноры атамасына ийе болды. Бирақ, илимий әдебиятта Дирак спинор сөзиниң орнына Дирак биспиноры атамасы да қолланылады. Себеби, дәслепки ўақытлары спинорлар сыпатында жубы биспинорды пайда ете алатуғын тек еки қураўшыға ийе болған комплексли объектлерди түсинген. Биспинорды әдетте әдеттеги ("сыртқы") кеңислик пенен кесилиспейтуғын "ишки" кеңислик деп аталатуғын айрықша вектор сыпатында интерпретациялаў мүмкин. Бирақ, жоқарыда айтылып өтилгениндей, сыртқы кеңисликтиң координаталарын түрлендиргенде спинорлық толқын функцияларының қураўшылары белгили тәртипте өзгереди (әдеттеги кеңисликтиң векторларының қураўшыларының түрлендириўлеринен айрылатуғын болса да).

Мәселениң дәл болыўы ушын мына жағдайды атап өтиў керек: сыртқы кеңисликтеги координаталардың бурылыўы менен байланыслы болған барлық өзгерислерди α матрицаларына алып келиўге болады (бул матрицалар ҳәр қыйлы сыртқы координаталар системасында ҳәр қыйлы түрге ийе болады, бирақ олар өзлериниң тийкарғы қәсийетлери болған антикоммутативлигин ҳәм ҳәр бир матрицаның квадратының бирге тең болатуғынлығын сақлайды). Бундай жағдайда сыртқы кеңисликтиң бурылыўларында (би-) спинорлардың қураўшылары пүткиллий өзгермейди.

**Теңлемени шешиў**. Еркин бөлекше болған жағдайда теңлемени шешиў ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19) |

спинорлары қолланылады. спиноры жоқары қараған спинге, ал спиноры төменге қараған спинге сәйкес келеди. Антибөлекше ушын оның кериси дурыс:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20) |

Усының менен бирге Паули матрицаларын да киргиземиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21) |

Еркин бөлекше ушын Дирак теңлемесиниң шешими былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (22) |

Бул теңликте - әдеттеги үш өлшемли вектор, ал менен болса 4-векторлар болып табылады.

биспиноры момент пенен спинниң функциясы болып табылады

|  |  |
| --- | --- |
|  | (23) |

Анти бөлекшелер ушын (22)- ҳәм (23)-аңлатпаларды былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (24) |

ҳәм биспинорлары ушын толықлық қатнаслары былайынша жазылады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (25) |

Бул аңлатпаларда ( шамасының анықламасын кейинирек беремиз).

**Энергияның спектри**. Дирак гамильтонианының энергиясының меншикли мәнислерин табыў пайдалы. Оның ушын биз мынадай стационар теңлемени шешиўимиз керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26) |

Бул аңлатпада арқалы толқын функциясының ўақыттан ғәрезсиз болған бөлими белгиленген.

Шешимди тегис толқынлар түринде излеймиз. Қолайлы болыўы ушын қозғалыс көшери сыпатында z көшерин сайлап аламыз. Сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27) |

аңлатпасына ийе боламыз. (27)-теңликте - турақлы төрт қураўшыға ийе спинор ҳәм - бөлекшениң импульси. Дирак көринисинде ушын теңлеме меншикли мәнислер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28) |

теңлемесиниң меншикли мәнисине алып келинеди. ның ҳәр бир мәнисине меншикли мәнислердиң еки дана еки өлшемли кеңисликлер бар болады. Меншикли мәнислердиң бир кеңислиги оң меншикли мәнислерге, ал қалған екеўи төмендегидей терис меншикли мәнислерге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (29) |

Оң меншикли мәнислерге ийе болған кеңислик

|  |  |
| --- | --- |
|  | (30) |

меншикли мәнислери тәрепинен, ал терис меншикли мәнислерге ийе болған кеңислик

|  |  |
| --- | --- |
|  | (31) |

меншикли мәнислери тәрепинен туўылады. Бул аңлатпаларда .

Ҳәр бир меншикли кеңисликте биринши туўдыратуғын меншикли ҳал спинниң көшерине түсирилген оң проекциясына ("спин жоқарыға"), ал екинши меншикли ҳалды қарама-қарсы тәрепке қарай бағытланған спин ийе болады ("спин төменге қараған").

Релятивистлик емес шекте спинордың ε-қураўшысы бөлекшениң кинетикалық энергиясына шекем киширейеди, ал кинетикалық энергияның өзи болса ға салыстырғанда есапқа алмас дәрежеде киши:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (32) |

Бундай шекте төрт қураўшыға ийе толқын функциясын салыстырмалы амплитуда сыпатында былайынша интерпретациялаў мүмкин:

(i) спин жоқарыға қарай бағытланған оң энергиялы,

(ii) спин төменге қарай бағытланған оң энергиялы,

(iii) спин жоқарыға қарай бағытланған белгиси терис энергиялы,

(iv) спин төменге қарай бағытланған белгиси терис энергиялы.

Релятивистлик жағдайда бул тәрийиплеў дәл емес, бундай жағдайда спинордың ноллик емес қураўшыларының шамасы да тап сондай тәртипке ийе.

**§ 74. Электронның релятивистлик теориясы**

Әдетте, квантлық механикада релятивистлик емес жағдайларды қарайды. Бундай жағдайда бир лоренцлик есаплаў системасында жумыс ислейди ҳәм мәселелер классикалық релятивистлик емес болған динамикада қабыл етилген усыллардың тийкарында шешиледи. Ал релятивистлик теория арнаўлы салыстырмалық принципин қанаатландырыўы ушын Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант болыўы шәрт. Бул тезлиги үлкен болған бөлекшелерди тәрийиплеў ушын зәрүр. Биз ҳәзир гәп етейин деп атырған теорияны улыўмалық салыстырмалық теориясына сәйкес етип дүзиўдиң қәжети жоқ. Себеби улыўмалық салыстырмалық теориясы тек гравитациялық тәсирлесиўди қараған жағдайда ғана керек, ал атомлық қубылысларда тартылыс күшлери ҳеш қандай әҳмийетке ийе емес.

Енди квантлық механиканың тийкарғы принциплерин кеңислик-ўақыттың төрт өлшемин бирдей деп есаплайтуғын релятивистлик көз-қарасқа қалайынша ийкемлестириўге болатуғынлығын қараймыз. Квантлық механиканың тийкарында туратуғын ҳаллардың суперпозициясы принципи релятивистлик принцип болып табылады. Себеби оны салыстырмалық принципине сәйкес келетуғын кеңислик-ўақытлық түсиниўдеги "ҳалларға" қолланыўға болады. Бирақ, бақланатуғын ўақыя деп аталатуғын улыўмалық түсиник салыстырмалық теориясына сәйкес келмейди. Себеби бақланатуғын ўақыя бир биринен қашықлатылған ноқатлардағы бир ўақыт моментиндеги физикалық объектлер менен байланысқан болыўы мүмкин. Усыған сәйкес, егер қандай да бир коммутацияланатуғын бақланатуғын шамалардың қандай да бир жыйнағы менен ис алып баратуғын болсақ, онда теорияда кеңисликтеги ўақыттың релятивистлик симметрияның пайда болыўы мүмкин емес. Релятивистлик квантлық механикада усындай симметрия жүзеге келетуғын тек бир көринис пенен ис алып барыўға туўры келеди. Буннан кейин, егер айқын есаплаўлар өткериў ушын зәрүрли болатуғын болса, онда дара лоренцлик есаплаў системасына киретуғын басқа көриниске өтиўге болады.

Бир бөлекшениң қозғалысы мәселесинде кеңислик пенен ўақыттың арасындағы симметрияның көриниўи ушын Шредингерлик көринистен пайдаланыўға болады. Бизлер координаталарының орнына , , ал ның орнына ди пайдаланамыз. Ўақыттан ғәрезли болған толқын функциясы , түрине ийе болады ҳәм барлық төрт ты бирдей етип қараўға тийкар жаратып береди.

Бизлер төрт шаманы түринде жазып, релятивистлик белгилеўлерди пайдаланамыз. Лоренц түрлендириўлеринде төрт шамасындай болып түрленетуғын төрт қураўшыға ийе болған кеңисликлик-ўақытлық векторы төменде грек индекси болған ҳәрип пенен белгилеймиз (мысалы, ). Индексти

|  |  |
| --- | --- |
|  | (33) |

қағыйдасы бойынша көтериўге болады. шамаларын векторының контравариантлы қураўшылары, ал шамаларын векторының ковариантлық қураўшылары деп атайды. Еки вектор скаляр көбеймеге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (34) |

Эйнштейн тәрепинен усынылған қағыйда бойынша еки рет қайталанатуғын индекслер бойынша суммалаў нәзерде тутылады. Бул скаляр көбейме Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариант. Енди фундаменталлық тензорды

|  |  |
| --- | --- |
|  | (35) |

теңлигиниң жәрдеминде анықлаймыз. Оны пайдаланып, контрвариантлы ҳәм ковариантлы қураўшыларды байланыстыратуғын (33)-қағыйданы былайынша жазамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (36) |

Шредингерлик көринисте қураўшыларын , ҳәм тиң орнына , ҳәм арқалы белгиленетуғын импульс

|  |  |
| --- | --- |
|  | (37) |

түринде жазылады. Екинши тәрептен, төрт операторы контравариантлық қураўшылары түрине ийе болған төрт өлшемли вектордың ковариантлық қураўшыларын пайда етеди. (37)-аңлатпаны релятивистлик теорияға өткериў ушын биз дәслеп бул қатнасты сәйкеслендирилген индекси менен жазыўымыз керек ҳәм оннан кейин оны төрт өлшемли

|  |  |
| --- | --- |
|  | (38) |

теңлемеге шекем толықтырыўымыз керек. Демек, операторы бар болған жаңа динамикалық өзгериўшини киргизиў керек болады деп жуўмақ шығарамыз. импульси менен комбинацияда бул өзгериўши төрт өлшемли векторды пайда ететуғын болғанлықтан, ол бөлекшениң энергиясы бөлинген жақтылықтың тезлиги мәнисине ийе болады. Енди биз төрт шамасы шамасындай болып теңдей ҳуқыққа ийе теорияны дүзиўге кирисе аламыз.

Төменде келтирип шығарылатуғын электронның теориясында электронның ишки қозғалысын тәрийиплейтуғын жаңа еркинлик дәрежелерин киргизиўге туўры келеди. Демек, толқын функциясы шамалары менен бир қатарда жаңа өзгериўшилепрге де ийе болыўы керек.

**§ 75. Электронлар ушын толқын теңлемеси**

Дәслеп электромагнит майданы жоқ болған жағдай ушын электронның қозғалысын қараймыз, яғный еркин бөлекше ҳаққындағы мәселени таллаймыз. Бирақ усының менен бир қатарда ишки еркинлик дәрежелерин қосыўдың мүмкиншилигин де излеп көремиз. Биз қарап атырған система ушын классикалық механика беретуғын Гамильтонның релятивистлик функциясы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (39) |

теңлемесиниң жәрдеминде бериледи ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (40) |

түриндеги толқын теңлемесине алып келеди. Бул теңлемеде шамаларын (38)-теңлемеге сәйкес операторлар деп түсиниў керек. (40)-теңлеме импульс пенен энергияның арасындағы релятивистлик қатнасқа ийе болса да, релятивистлик теорияның көз-қараслары бойынша қанаатландырарлық емес. Ол менен басқа ларға салыстырғанда симметриялы емес. Сонлықтан оны майдан бар болғандағы жағдай ушын релятивистлик түрде улыўмаластырыўға болмайды. Сонлықтан, биз басқа теңлемени излеўимиз керек.

Егер (40)-теңлемени шеп тәрептен

операторына көбейтсек, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (41) |

теңлемеси алынады. Ол релятивистлик инвариант ҳәм релятивистлик теорияны дөретиў ушын жүдә қолайлы. (41)-теңлеме (40)-теңлемеге толық эквивалент емес. Себеби ең болмағанда ҳәр бир (40)-шешим (41)-теңлемениң шешими болса да, оның кериси дурыс емес. (41)-теңлемениң тек диң оң мәнислерине сәйкес келетуғын шешимлери ғана (40)-теңлемениң шешимлери де болып табылады.

(41)-толқын теңлемесиниң түри квантлық теорияның улыўмалық қағыйдаларына сәйкес келмейди. Себеби ол t ға қарата квадратлық, ал улыўмалық көз-қараслар бойынша толқын теңлемеси ға ямаса ге қарата сызықлы болыўы керек. Басқа сөз бенен айтқанда теңлеме әдеттеги Шрёдингер теңлемесиниң түриндей, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (42) |

түрине ийе болыўы керек. Сонлықтан, биз ге қарата сызықлы ҳәм улыўма белгилери бойынша (41)-теңлемеге эквивалент болған теңлемени излеймиз. Табылған теңлемениң Лоренц түрлендириўлеринде әпиўайы түрде түрлениўи ушын оны рационаллы ҳәм ҳәм лерге қарата сызықлы болатуғындай етип излеймиз. Басқа сөз бенен айтқанда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (43) |

теңлемеси орын алады деп болжаймыз. Бул теңлемедеги α менен β шамалары дан ғәрезли емес. Биз майдан болмаған жағдайды қарап атырмыз. Сонлықтан кеңислик-ўақыттың барлық ноқатлары тең ҳуқықлы болыўы, демек, толқын теңлемесиндеги оператордың да шамасына ийе болмаўы шәрт. Усының менен бирге α менен β шамалары да x тан ғәрезли болмаўы ҳәм сонлықтан олардың ҳәм шамалары менен коммутацияланыўы керек. Сонлықтан α ҳәм β шамалары электронның ишки қозғалысына сәйкес келетуғын базы бир жаңа еркинлик дәрежелерин тәрийиплейди. Биз кейинирек олардың электронның спинин киргизиўге мүмкиншилик беретуғынлығын көремиз. (43)-теңлемени шеп тәрептен

ға көбейтип, биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (44) |

теңлемесине ийе боламыз. Бул теңлемеде суммасы 1, 2, 3 индекслерин цикллы түрде қойыў арқалы алынады.

Егер α менен β шамалары

қатнасларын және усыннан келип шығатуғын 1, 2, 3 индекслериниң орынларын цикллық алмастырып қойыў қанаатландыратуғын болса, онда соңғы қатнас (41)-қатнасқа сәйкес келеди. Егер

теңлиги орынлы болса, онда бул қатнаслардың барлығы бир қатнасқа бириктириледи:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (45) |

Төрт α шамасы бир бири менен антикоммтацияланады ҳәм олардың квадратлары 1 ге тең.

Солай етип, α ҳәм β шамаларына сәйкес қәсийетлерди бериў арқалы (43)-теңлемени (41)-теңлемеге эквивалент етиўге болады екен (егер мәселе пүтин электрон ҳаққында қойылатуғын болса). Енди биз (43)-теңлемени майдан болмаған жағдай ушын электронның қозғалысы ушын дурыс релятивистлик толқын функциясы деп болжай аламыз. Бирақ, бул жағдай (41)-теңлеме сыяқлы (43)-теңлемениң (40)-теңлемеге дәл эквивалент екенлигин аңғартпайды. Бирақ, бул теңлеме тек оң мәнисли ушын ғана емес, ал терис мәнисли ушын да шешимлерди береди. Терис мәнисли , әлбетте, электронның қандай да бир ҳақыйқый қозғалысына сәйкес келмейди. Биз ҳәзирше тек оң энергияға сәйкес келетуғын шешимлерди ғана қараймыз ҳәм энергияның терис мәниси менен байланыслы болған шешимлерди таллаўды кейинге қалдырамыз.

Төрт α шамасы ушын көринислер аңсат алынады ҳәм олардың еки қатар менен еки бағанаға ийе болған матрицалар түринде жазылатуғынлығы да белгили. Төрт антикоммутацияланатуғын шамалар ушын көринислерди алыў ушын төрт қатарлы матрицаларға өтиўимиз керек. Дәслеп α шамаларын σ шамалары ҳәм квадраты бирге тең болған α лерден ғәрезли болмаған және олар менен коммутацияланатуғын басқа үш антикоммутацияланатуғын ҳәм өзгериўшилериниң жыйнағы түринде аңлатамыз. Мысалы, мынадай

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46) |

шамаларды алыўға болатуғынлығын ҳәм α шамасының (45)-барлық қатнасларды қанаатландыратуғын көриўге болады. Егер пенен деп болжасақ, онда биз матрицалардың төмендегидей схемасын аламыз:

Жоқарыда көринип турғынандай, ρ ҳәм σ матрицалары эрмитлик матрицалар болып табылады. Сонлықтан α матрицалары да эрмитлик матрицалар болып табылады.

Төрт қатарға ҳәм төрт бағанаға сәйкес, ψ толқын функциясы төрт мәниске ийе болатуғын өзгериўшиге ийе болады. Сонлықтан оны матрицаға көбейтиўге болады. Басқа сөз бенен айтқанда, толқын функциясын төрт қураўшылы деп есаплаўға болады. Соның менен бирге ҳәр бир қураўшы төрт шамасының функциясына айланады. Квантлық механикада спинниң еки қураўшыға ийе болатуғын толқын функциясын талап ететуғынлығын билемиз. Биз қарап атырған теория төрт қураўшыға ийе толқын функциясын беретуғын болғанлықтан, (43)-толқын теңлемеси еки есе көп болған шешимлерге ийе ҳәм олардың екеўи терис мәниске ийе болған ҳалларға сәйкес келеди.

(46) ның жәрдеминде (43)-теңлемени үш өлшемли векторлық белгилеўлерде былайынша жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (47) |

Бул теңлемени электромагнитлик майдан болған жағдайға улыўмаластырыў ушын биз классикалық қағыйдаға сәйкес менен ны ҳәм шамалары менен алмастырамыз. Бул аңлатпаларда менен электрон жайласқан ноқаттағы майданның скаляр ҳәм векторлық потенциаллары. Бул бизге электронның релятивистлик теориясының тийкарғы толқын теңлемеси деп аталады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (48) |

Биз (46)- ҳәм (47)-теңлемелердиң Дирак тәрепинен алынғанын ҳәм Дирак теңлемеси деп аталатуғынлығын ескертип өтемиз. Төрт қатарлы β (соның менен бирге ҳәм ) матрицаларын Дирак матрицалары деп атайды. Бул теңлемелердиң электромагнитлик майдан бар болған жағдай ушын улыўмаластырылыўы да биринши рет Дирак тәрепинен орынланды.

Бир бағанаға ийе болған матрицаның алыныўы ушын (47)- ямаса (48)-теңлемедеги толқын функциясы ψ диң төрт қураўшысын бириниң астына бирин жазыў керек. Бундай жағдайда квадратлық ρ ҳәм σ матрицалары ψ диң бағанасына көбейтиледи ҳәм бундай жағдайдағы көбеймелер бир бағанаға ийе болған матрицалар болып табылады. Бра-вектор болып табылатуғын комплексли-түйинлес толқын функциясын бир қатарға ийе болған матрицаның алыныўы ушын биринен соң бири жазылған төрт қураўшы сыпатында жазыў керек болады. Бир қатарға ийе болған матрица менен сүўретленетуғын комплексли-түйинлес толқын функциясын матрицаның транспонирленгенлигин белгилеў ушын (яғный қатарды бағана менен алмастырыў ушын) + белгисин пайдаланып арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда (48)-теңлемеге қатнасы бойынша комплексли-түйинлес теңлеме мынадай түрге ийе болады:

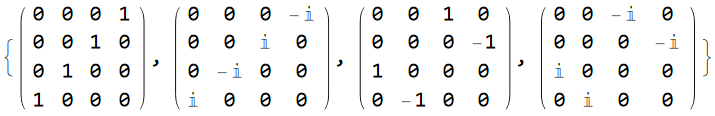
|  |  |
| --- | --- |
|  | (49) |

Бул теңлемеде операторлары шеп тәрепте турған толқын функциясына тәсир етеди.

Параграфтың арқырында биз Wolfram Mathematica пакетиниң жәрдеминде Дирак матрицаларын (Дирактың гамма-матрицаларын) әпиўайы түрде есаплаўдың мүмкин екенлигин қарап өтемиз. Бул пакеттиң жәрдеминде  командасының жәрдеминде α3 матрицасын есаплаўға болады. Квадрат қаўсырмадағы санды өзгертиў 1 ден 4 ке шекем өзгертиў жолы менен α1 - α4 матрицаларын табыў мүмкин. Оның ушын



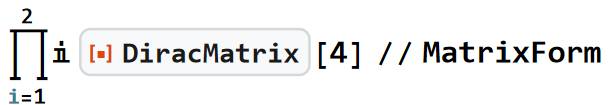
командасының жәрдеминде



түриндеги нәтийжелерди аламыз.

Анықлама бойынша бесинши гамма-матрица

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул формула бойынша есаплаўларды жүргизиў ушын



түриндеги аңлатпаны жазыўымыз керек. Бундай жағдайда компьютер

түриндеги матрицаны береди ҳәм бул бесинши матрица әдебиятта берилген матрицаға сәйкес келеди. Солай етип Mathematica компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде Дирак матрицаларының алгебрасына тийисли болған барлық математикалық операцияларды ислей алады екенбиз.

**§ 76. Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлық**

(48)-(49) теңлемелердиң физикалық нәтийжелерин таллаўға өтпестен бурын биз қарап атырылған теорияның Лоренц түрлендириўлерине қарата ҳақыйқатында да инвариантлы екенлигин, яғный биз қарап атырған теорияның алып келетуғын физикалық нәтийжелериниң пайдаланылып атырған лоренцлик есаплаў системасынан ғәрезсиз екенлигин көремиз. Бирақ, бундай жағдайдың ҳақыйқатында да орын алатуғынлығы бирден көзге түспейди. Егер толқын теңлемесин басқа лоренцлик системада жазған жағдайда усы жаңа теңлемениң шешими дәслепки лоренцлик есаплаў системадағыдай бир ҳалды бир мәнисли түрде тәрийиплейтуғынлығын көрсетиў керек. Усы лоренцлик системалардың ҳәр қайсысы ушын төрт қураўшы бойынша қосылған толқын функциясының модулиниң квадраты берилген лоренцлик системаның белгили болған ноқатындағы көлем бирлигинде электронды табыўдың итималлығын береди. Әдетте, бул шаманы итималлықтың тығызлығы деп атайды. Ҳәр қыйлы лоренцлик системаларда сол системаға сәйкес келетуғын толқын функциялары бир бири менен базы бир төрт өлшемли вектордың ўақытлық қураўшыларыдай болып байланысқан болыўы керек. Буннан кейин бул вектордың төрт өлшемли дивергенциясының жоғалыўы керек. Бул электронның сақланыўын аңғартады (яғный базы бир көлемдеги электрон шегара арқалы өтпесе жоғалмайды).

Қысқалық ушын α0 = 1 белгилениўин киргизген ҳәм αμ (μ = 0, 1, 2, 3) индекслерин (33)-қағыйда бойынша көтериўге болады болжаймыз (усы төрт αμ шамалары төрт өлшемли вектордың қураўшыларын пайда етпейтуғын болса да). Енди (48)-теңлемени

|  |  |
| --- | --- |
|  | (50) |

түринде жазыўға болады. Төрт шамасы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (51) |

қатнасларын қанаатландырады. Бул аңлатпада шамасы (35)-аңлатпада анықланды. Бул жағдайды μ менен ν шамаларының екеўи де нолге тең болған жағдайды өз алдына қараў жолы менен тексерип көриўге болады.

Лоренцтиң шексиз киши түрлендириўин қараймыз ҳәм жаңа системаға тийисли болған шамаларды жулдызша менен белгилеймиз. Төрт өлшемли векторының қураўшылары

|  |  |
| --- | --- |
|  | (52) |

түриндеги теңлемеге сәйкес түрленеди. Бул теңлемедеги кишилиги бойынша биринши тәртипли шама болып табылады. Кишилиги бойынша екинши тәртипли ҳәм бойынша квадрат болған шамаларды есапқа алмаймыз. Лоренц түрлендириўиниң орын алыўы ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (52) |

шәртиниң орынланыўы керек. Буннан

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

қатнасының орынлы екенлиги келип шығады, ал бул қатнас өз гезегинде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (53) |

теңлигин береди. қураўшылары да тап усындай нызам бойынша түрленеди, сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (54) |

теңлиги орынлы болады. Усыған сәйкес (50)-толқын теңлемеси

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55) |

түрине енеди.

Мынадай шаманы киргиземиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56) |

Бундай жағдайда (51)-қатнастан (53)-аңлатпаның жәрдеминде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (57) |

аңлатпасын ҳәм соған сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (58) |

(56) ны шеп тәрептен шамасына көбейтип

|  |  |
| --- | --- |
|  | (59) |

теңлемесине ийе боламыз.

Солай етип, егер биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (60) |

деп болжасақ, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (61) |

теңлемесин аламыз. Бул теңлеме (50)-теңлемениң түриндей түрге ийе [(50)-теңлемедеги ҳәм ψ лерге жулдызшалар қойылған]. Нәтийжеде, егер ψ толқын функциясы (60)-қағыйда бойынша түрленетуғын жағдайда (50)-теңлемениң Лоренцтиң шексиз киши түрлендириўлерине қарата инвариант екенлигин көрсетеди. Лоренцтиң шекли түрлендириўин шексиз киши түрлендириўлерден қурыўға болады ҳәм, сонлықтан, (50)-теңлеме Лоренцтиң шекли түрлендириўлерине қарата инвариант болып табылады. матрицаларының пүткиллий өзгермейтуғынлығын аңғарыў мүмкин.

Жоқарыда дәлилленген инвариантлық басланғыш (50)-теңлемениң шешими ψ диң жаңа (61)-теңлемениң шешимлери менен бир бирине салыстырғанда бир мәнисли сәйкесликте туратуғынлығын көрсетеди. Усының үстине сәйкес шешимлер (60)-қатнас арқалы байланысқан. Биз сәйкес шешимлерди бир физикалық ҳалды көрсетеди деп болжаймыз. Енди ҳәр қайсысы өзиниң лоренцлик системасына тийисли болған сәйкес шешимлердиң физикалық интерпретацияларының бир бири менен сәйкес келетуғынлығына исениў керек. диң басланғыш системадағы итималлықтың тығызлығын, ал диң жаңа системаға тийисли болған итималлықтың тығызлығын бериўи керек. Усы шамалардың арасындағы қатнасты табамыз. символы нени аңғартатуғын болса, символы да соны аңғартады ҳәм бир бири менен бирликте қаралыўы керек болған төрт шаманың бири болып табылады.

(56)- ҳәм (53)-теңлемелер шамасының таза жормал шама екенлигин көрсетеди. Демек, (60)-теңлемеге түйинлес болған теңлеме

|  |  |
| --- | --- |
|  | (62) |

түрине ийе болады. Буннан, (58)-теңлемени есапқа алып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63) |

теңлемесине ийе боламыз. Бул (53)-аңлатпаның жәрдеминде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (64) |

қатнасына алып келеди. Егер бул аңлатпада μ индексин түсиретуғын болсақ, онда (29)-теңлемедей теңлеме алынады. Буннан төрт шамасының төрт өлшемли вектордың ковариантлық қураўшыларындай болып түрленетуғынлығы көринип тур. Демек, төрт өлшемли вектордың ўақытлық қураўшысындай болып түрленеди екен. Ал бул жағдай итималлықтың тығызлығы ушын дурыс нызам болып табылады. Төрт өлшемли вектордың кеңисликлик қураўшылары, атап айтқанда шамасы, ға көбейтилгеннен кейин итималлықтың ағысын ямаса электронның бир бирлик майдан арқалы ўақыт бирлигинде өтиўиниң итималлығын береди.

шамасының

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65) |

теңлигиниң орын алатуғынлығына байланыслы стандарт болатуғынлығы атап өтиў керек.

Ең ақырында

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66) |

дивергенциясының нолге айланатуғынлығынан ибарат болған сақланыў нызамының орынланатуғынлығын тексериў керек. Бундай тексериўди орынлаў ушын (50)-аңлатпаны шеп тәрептен ке көбейтиў керек. Нәтийжеде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67) |

теңлемесин аламыз. Түйинлес теңлеме

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68) |

түрине ийе болады. Биринен бирин алып ҳәм қа бөлип мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (69) |

Бул теңлик (66)-аңлатпаның нолге айланатуғынлығын аңғартады. Солай етип, биз теорияның қандай есаплаў системасында қолланылғанлығынан ғәрезсиз бирдей нәтийжелерди беретуғынлығын дәлиллеўди жуўмақладық.

**§ 77. Еркин электронның қозғалысы**

Еркин электронның қозғалысын гейзенберглик картинада қараған ҳәм қозғалыстың гейзенберглик теңлемесин изертлеў қызықлы. Сонлықтан дәслеп қозғалыс теңлемесиниң гейзенберглик формасы менен танысамыз.

Әдетте, ҳәтте көпшилик жағдайларда квантлық механикада сырттан тәсирлер болмаған жағдайлардағы системаның қозғалыс ҳалының көргизбели түрдеги сүўретин алады. Усындай ҳәр бир ҳалды өзгермели ҳал векторы менен тәрийиплеўге болады. Сонлықтан, системаның ўақыттың ҳәр бир моментиндеги ҳалы усы ҳал векторының мәниси менен тәрийипленеди. Системаның қозғалысының усындай болып сүўретлениўин Шрёдингерлик картина деп атаймыз. Бизиң ҳәр бир кет векторларымыздың үстинен усындай унитарлық түрлендириў өткеремиз ҳәм нәтийжеде мынадай теңлик алынады.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (70) |

(70)-түрдендириўди ҳал векторларының барлық кеңислигиниң үзликсиз қозғалысы деп қараўға болады (айланыў ҳәм бир текли деформация). Дәслеп турақлы болған (яғный ўақыттан ғәрезсиз болған) векторы өзгериўши векторға айланады, оның өзгериси (70)-формуланың жәрдеминде анықланады. Екинши тәрептен, егер сыртқы уйытқыўлар болмаған жағдайда ҳалдың өзгерисин тәрийиплейтуғын векторды алсақ, онда бул вектор түрлендириўден кейин турақлы шамаға айланады. Сонлықтан (70)-формуладағы ның орнына векторын алатуғын болсақ, онда дан ғәрезсиз болған векторын аламыз. Солай етип, сырттан тәсирлер болмаған жағдайларда системаның қозғалыс ҳалын тәрийиплейтуғын ўақыттан ғәрезли болған векторларды түрлендириў қозғалмайтуғын векторлардың пайда болыўына алып келеди екен.

Ҳәр қыйлы шамалар арасындағы теңлемелердиң инвариант болыўы ушын бра-векторлар менен сызықлы операторлардың үстинен де усы унитарлық түрлендириўди әмелге асырыўға болады. Бра-векторларды түрлендириў (70)-формулаға түйинлес болған формуланың жәрдеминде, ал операторлардың түрлендириў (мысалы U операторын түрлендириў)

|  |  |
| --- | --- |
|  | (71) |

формуласының жәрдеминде әмелге асырылады. Биз қарап атырған жағдайда дың орнына ди қойыў керек. Бундай жағдайда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (72) |

теңлигине ийе боламыз. Дәслеп турақлы болған сызықлы оператор түрлендириўден кейин, улыўма айтқанда, ўақыттан ғәрезли шамаға айланады. Бирақ, динамикалық өзгериўшиге дәслеп түрлендириўге шекем ўақытқа ийе болмаған оператор сәйкес келди. Сонлықтан, түрлендириўден кейин бул өзгериўшиге ўақыттан ғәрезли болған сызықлы оператор сәйкес келеди. Солай етип, түрлендириў қозғалыстың жаңа көринисине алып келеди. Бул көринисте ҳаллар қозғалмайтуғын векторлар менен, ал динамикалық өзгериўшилер ўақыттан ғәрезли болған сызықлы операторлар менен тәрийипленеди. Биз бул жағдайда қозғалыстың гейзенберглик картинасы деп атаймыз. Солай етип, биз еркин электронның қозғалысын гейзенберглик картинада изертлеймиз ҳәм гейзенберглик қозғалыс теңлемесин изертлеймиз. Бул теңлемелерди дәл шешиўге болады (бул мәселени биринши рет Шрёдингер шешти). Аңлатпалардың қысқа жазылыўы ушын Гейзенберглик картинада ўақыт бойынша өзгеретуғын динамикалық өзгериўшиге жазылатуғын индексин таслап кетемиз.

Гамильтон операторы сыпатында (47)-теңлемени қанаатландыратуғын ψ ге тәсир етип операторын беретуғын аңлатпаны алыў керек. Бул аңлатпа

|  |  |
| --- | --- |
|  | (73) |

түрине ийе болады. Бул аңлатпадан импульстиң пенен коммутацияланатуғынлығын ҳәм соған сәйкес қозғалыс интегралы болатуғынлығын дәрҳәл көриўге болады. Буннан кейин көшерине түсирилген тезликтиң проекциясының

|  |  |
| --- | --- |
|  | (74) |

аңлатпасының жәрдеминде анықланатуғынлығын атап өтемиз. Тезлик пенен импульстиң арасындағы байланыстың классикалық физикаға сәйкес келмеўи пүткиллей күтилмеген бул нәтийже болып табылады. Бирақ ол итималлықтың ағысының қураўшысы болған аңлатпасына сәйкес келеди. (74)-аңлатпа беретуғын шама шамасының меншикли мәнислерине сәйкес меншикли мәнислерине ийе болады. Тап усындай нәтийже ҳәм ушын да алынатуғын болғанлықтан еркин электронның тезлигиниң проекциясын өлшеўдиң барлық ўақытта нәтийжесине алып келеди деп жуўмақ шығарамыз. Усындай нәтийжениң сыртқы майданлар бар болған жағдайларда да күшке ийе болатуғынлығына аңсат исениўге болады.

Әмелде бақланатуғын электронлардың тезлигиниң барлық ўақытта жақтылықтың тезлигинен әдеўир киши болатуғынлығынан биз жоқарыда келтирилген нәтийжелердиң экспериментлердиң нәтийжелерине сәйкес келмейтуғынлығын көремиз. Бирақ, бул ҳақыйқый қарама-қарсылық емес. Себеби келтирип шығарылған жуўмақтағы теориялық тезлик белгили ўақыт моментиндеги тезлик болып табылады. Ал бақланатуғын тезликлер болса ўақыттың базы бир шекли интервалындағы орташа тезлик болып табылады. Буннан кейинги таллаўларымыздың барысында биз қозғалыс теңлемелерин қарағанда тезликтиң пүткиллей турақлы болмайтуғынлығын, ал бақланатуғын шамаға сәйкес келетуғын орташа мәнисиниң дөгерегинде тез осцилляцияланатуғынлығын көремиз.

Анықсызлық принципин элементар түрде қолланыўдың нәтийжесинде релятивистлик теорияда тезликтиң проекциясын өлшеўдиң шамасын беретуғынлығына аңсат көз жеткериўге болады. Тезликти өлшеў ушын биз бир биринен айырмаға ийе ўақыт моментлериндеги координаталарды өлшеў ҳәм буннан кейин координатаның өзгерисин ўақыттың интервалына бөлиў керек (импульсти өлшеў менен тезликти импульс бойынша есаплаў дәртке аспайды, себеби бул жағдайда тезлик пенен импульс арасындағы әдеттеги қатнас дурыс емес). Бизлер тәрепинен өлшенген тезликтиң оның бир заматлық мәнисин анықлаў ушын жуўықлаў болыўы ушын координатаның еки өлшеўи арасындағы ўақыт интервалының жүдә киши болыўы керек ҳәм, усыған сәйкес бул өлшеўлердиң жүдә дәл болыўы керек. Анықсызлық принципине сәйкес, берилген ўақыт интервалындағы электронның координатасын анықлаўдағы үлкен дәллик импульстиң дерлик толық анықсызлығына алып келеди. Бул импульстиң дерлик барлық мәнислериниң итимал екенлигин аңғартады. Сонлықтан импульстиң мәниси шексиз үлкен болыўы да мүмкин. Бирақ бул процедура квантлық-механикалық мәнистеги тезликти өлшеўдиң процедурасы емес. Ҳақыйқатында да, бир тәрептен бул процедура тезликтиң ендиги мәнислерин өлшеў ушын болжаўларды бере алмайды, екинши тәрептен ол буннан бурынғы болжаўларды тексериўди де бере алмайды. Усының менен бирге, тезлик пенен импульстиң арасындағы әдеттеги байланысты бийкарлайтуғын болсақ, онда бул жерде анықсызлық принципин де, яғный Гейзенберг қатнасларын пайдаланыўға болмайды. Егер биз жоқарыда келтирген таллаўды Шрёдингердиң теориясына қолланатуғын болсақ, онда электронның тезлигиниң барлық ўақытта шексиз үлкен болатуғынлығын көриўге болады.

Енди ўақыттың өтиўи менен электронның тезлигиниң қалайынша өзгеретуғынлығын көремиз. Жоқарыда келтирилген мағлыўматлар бойынша

|  |  |
| --- | --- |
|  | (75) |

операторы операторындағы барлық ағзалар менен антикоммутацияланатуғын болғанлықтан ( ди есапқа алмағанда)

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76) |

ҳәм, усыған сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (77) |

теңликлерине ийе боламыз. пенен шамалары турақлы болғанлықтан, онда (77)-аңлатпадағы биринши теңлемеден

|  |  |
| --- | --- |
|  | (78) |

теңлиги келип шығады. шамасына қарата жазылған бул дифференциаллық теңлемени дәрҳәл интеграллаўға болады. Нәтийже мынадай түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (79) |

Бул аңлатпада арқалы ўақыт моментиндеги диң мәниси белгиленген. (79) дағы көбейтиўшиси ның оң тәрепинде турыўы керек, себеби (78)-аңлатпада шамасы ның оң тәрепинде турыпты. Тап сондай түрде (77)-теңлеме мынадай нәтийжени береди

|  |  |
| --- | --- |
|  | (80) |

Енди ушын қозғалыс теңлемесин интеграллаўды жеңил түрде жуўмақлаўға болады. (79)-теңлемеден ҳәм (77)-теңлемениң бириншисинен мынаған ийе боламыз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (81) |

ҳәм усыған сәйкес (74)-теңлемеден ўақыт бойынша интегралдың

|  |  |
| --- | --- |
|  | (82) |

түрине ийе болатуғынлығын көремиз. Бул формулада арқалы турақлы шама белгиленген.

(81)-теңлемеден шамасы ге тең болған көшерине түсирилген тезликтиң проекциясының еки бөлимнен туратуғынлығын көриўге болады: бириншиси импульстиң классикалық релятивистлик формула менен байланыслы болған шамасы ға тең турақлы бөлим, екиншиси

аңлатпасы менен тәрийипленетуғын осцилляциялантуғын бөлим. Оның жийилиги шамасына тең ҳәм үлкен. Себеби бул шама кеминде қа тең. Тек турақлы бөлим ғана тезликти өлшегенде бақлана алады. Себеби бундай өлшеў шамасынан әдеўир үлкен болған ўақыт интервалының ишиндеги орташа тезликти береди. Ал осцилляцияланатуғын бөлим болса бир заматлық тезликтиң меншикли мәниске ийе болатуғынлығына алып келеди.

координататың осцилляцияланатуғын бөлими киши. Ҳақыйқатында да, (82)-аңлатпаға сәйкес оның мәниси

|  |  |
| --- | --- |
|  | (83) |

шамасына тең. Бул мәнис шамасы менен салыстыралықтай, себеби шамасының мәниси 1 ге барабар.

**§ 78. Спинниң келип шығыўы**

Электромагнит майданы болмаған жағдайлардағы электронның толқын теңлемесиниң, атап айтқанда (43)- ямаса (47)-теңлемелердиң классикалық теорияның тийкарында келип шыққан (41)-теңлемеге эквивалент екенлигин көриўге болады. Майдан болған жағдайда бул эквивалентлик жоғалады. Классикалық теория менен аналогиядан бул жағдайда теңлемениң

|  |  |
| --- | --- |
|  | (83) |

түрине ийе болатуғынлығын күтиўге болады. Бул жерде оператор Гамильтонның классикалық релятивистлик функциясына дәл сәйкес келеди.

Екинши тәрептен, (83)-теңлеме менен жақын уқсаслыққа ийе болыўы ушын (48)-теңлемени базы бир көбейтиўшиге, атап айтқанда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (84) |

көбейтиўшисине көбейтиў керек. Бундай жағдайда биз мынаған ийе боламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85) |

Енди σ менен коммутацияланатуғын ҳәм векторлары ушын еки үш өлшемли векторлар ушын орынлы болған улыўмалық формуланы пайдаланамыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (86) |

Бул аңлатпада сумма 1, 2, 3 индекслериниң орынларын цикллық өзгертиў жолы менен алынады. Бул формуланы былайынша да жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (87) |

деп болжап ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (88) |

теңлигин нәзерде тутып ( арқалы магнит майданы белгиленген) биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (89) |

теңлемесине ийе боламыз. Соның менен бирге

|  |  |
| --- | --- |
|  | (90) |

Бул теңлемеде арқалы электр майданы белгиленген. Демек, (85)-теңлеме мынадай түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (91) |

түрине ийе болады. Бул теңлеме (30)-теңлемеден оператордағы еки қосымша ағза менен айрылады. Бул қосымша ағзалар базы бир жаңа физикалық эффектлерди жүзеге келтиреди. Бирақ олар затлық болмағанлықтан, олардың өзи дәрҳәл физикалық интерпретацияға алып келмейди.

(91)- ҳәм (83)-теңлемелердиң айырмаға ийе болыўына байланыслы қандай физикалық қәсийетлердиң сәўлеленетуғынлығын түсиниў ушын мәселени гейзенберглик картинада қараған қолайлы. Гейзенберглик картинаның классикалық ҳәм квантлық механикаларды салыстырыў ушын қолайлырақ екенлигин еслетип өтемиз. Гейзенберглик теңлеме Гамильтон операторы бойынша анықланады

|  |  |
| --- | --- |
|  | (92) |

Бул оператор майдан бар болған жағдайдағы (73)-аңлатпаның улыўмаластырылыўы болып табылады. (89)-аңлатпаны есапқа алған жағдайда (92)-теңлемеден

|  |  |
| --- | --- |
|  | (93) |

теңлемелерин аламыз. Биз бул жерде (91)-теңлемедеги қосымша ағзалардың затлық бөлимине ийе болдық ҳәм олар таза-жормал бөлимге ийе болмай пайда болды. Киши тезликлер менен қозғалатуғын электрон ушын (яғный киши импульстеги) гейзенберглик теңлемелер түриндеги Гамильтониан операторы менен анықланады деп күтиўге болады ( шамасы шамасына салыстырғанда киши). (93)-формуладағы деп болжап ҳәм шамасын ҳәм қатнасатуғын басқа да ағзаларды есапқа алмай және шамасына бөлип төмендегини аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (94) |

(94)-формула бойынша анықланатуғын Гамильтон операторы өзиниң түри бойынша ҳәм ағзасын есапқа алмағанда тезликлердиң киши мәнисиндеги Гамильтонның классикалық функциясына сәйкес келеди. Бул ағзаны квантлық теория бойынша киши тезлик пенен қозғалатуғын электрон ийелейтуғын қосымша потенциаллық энергия сыпатында қараўға болады. Сол қосымша ағза бойынша электрон шамасы ге тең магнит моментине ийе деп есаплаўға болады. Бул, мысалы Зееман эффектин бақлағанда тәжирийбелердиң нәтийжелерине сәйкес келетуғын электронның спинлик моменти болып табылады.

Қозғалыс муғдарының спинлик моменти (ендигиден былай меншикли момент деп те атаймыз) ҳеш қандай потенциаллық энергияны бермейди. Усындай меншикли моменттиң бар екенлигин көрсетиўдиң ең әпиўайы жолы еркин электронның орайлық күш майданындағы қозғалысын қараўдан ҳәм импульс моментиниң интегралын анықлаўдан ибарат. Бундай жағдайда ҳәм шамасы радиус диң функциясы болған (73)-аңлатпа түринде жазылған Гамильтон операторын алыў керек, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (95) |

түриндеги аңлатпаны алып, буннан кейин Гейзенбергтиң қозғалыс теңлемесин импульс моменти ушын жазыў керек. Гамильтонның сол ямаса басқа түрде жазылған операторы бойынша импульс моменти ушын пайдаланылатуғын орын алмастырыў қатнасларының жәрдеминде орбиталық қозғалыс муғдарының өзгериў тезлигиниң көшерине түсирилген проекциясы ушын, яғный ушын маныдай аңлатпаны аламыз[[27]](#footnote-27)

|  |  |
| --- | --- |
|  | (96) |

Солай етип, ҳәмТаким образом, т} =/= 0 и орбитальный момент количества движения не является интегралом движения. Бул нәтийжени (82)-қозғалыс теңлемесин интеграллаўдың тийкарында болжаўға болатуғын еди. Себеби бул теңлемеде қозғалыстың осцилляцияланатуғын бөлими табылады, ал ол өз гезегинде қозғалыс муғдарының моментиндеги осцилляцияланатуғын ағзаның пайда болыўына алып келеди.

Биз шамасы қа тең болған қозғалыс муғдарының моменти ди қарағанда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (97) |

түринде қараўдың қолайлы екенлигин еске түсиремиз. векторының қураўшыларының квантлық механикадан белгили болған

|  |  |
| --- | --- |
|  | (98) |

қатнасларын қанаатландыратуғынлығы белгили. ямаса шамалары шамасының меншикли мәнислери болып табылады. Сонлықтан, тиң меншикли мәнислери +1 ямаса -1 ге ҳәм шамасы тек 1 ге тең болады. Усыған сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (99) |

теңликлерине ийе боламыз. Буннан, өз гезегинде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (100) |

теңликлерин береди. Усы теңликлердиң жәрдеминде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (101) |

аңлатпасына ийе боламыз. Демек,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (102) |

ҳәм сонлықтан векторы қозғалыс интегралы болып табылады. Бул нәтийжени электронларда мәниси шамасына тең болған қозғалыс муғдарының спинлик моментиниң бар болыўы деп түсиниў керек. Қозғалыс интегралын алыў ушын оны орбиталық момент ге қосыў керек.

Бир векторы спинлик магнит моментиниң бағытын да, спинлик моменттиң бағытын да анықлайды. Егер электрон берилген спинлик ҳалда берилген бағытта шамасына тең спинлик моментке ийе болса, онда ол сол бағытта магнит моментине де ийе болады.

Биз квантлық теория менен салыстырмалық теориясының улыўмалық принциплериниң тийкарында электронның спини ушын шамасын алдық. Тап усындай көз-қарасларды элементар бөлекшелердиң басқа да түрлерине қолланыўға болады ҳәм бундай жағдайда спинлик моменттиң кванттың ярымына тең болатуғынлығын алған болар едик. Буны протон ҳәм нейтрон ушын пайдаланыўға болады. Бирақ, тәжирийбелер спини шамасынан өзгеше болған элементар бөлекшелердиң типлериниң бар екенлигин көрсетеди (мысалы, фотонлар ҳәм мезонлардың базы бир түрлери). Сонлықтан, биз талланған теория менен эксперимент арасындағы қарама-қарсылықтың бар екенлигин көремиз.

Жуўапты биз есапқа алмаған бил жағдайдан излеў керек. Егер бөлекшениң жайласқан орны бақланатуғын шама болса, онда бизиң көз-қарасларымыз күшке ийе. Егер усындай болжаў дурыс болса, онда бөлекшениң кванттың ярымына тең спинге ийе болыўы керек. Ал, басқа шамадағы спинге ийе болған бөлекшелер ушын бул болжаў ҳақыйқатлыққа сәйкес келмейди. Бөлекшени тәрийиплеў ушын киргизилетуғын қәлеген динамикалық өзгериўшиси улыўмалық теорияның көз-қарасы бойынша бақланатуғын шамалар болып табылмайды. Бундай бөлекшелер ушын ҳақыйқый Шрёдингерлик көринис жоқ. Егер, динамикалық өзгериўшилерине ийе болған квазитолқынлық функцияны киргизиў мүмкин болатуғын болса, онда ол толқын функциясының модулиниң квадраты итималлықтың тығызлығын береди деген дурыс физикалық интерпретацияны бере алмайды. Бундай бөлекшелер ушын импульслик көринис бар болып, әмелий мақсетлер ушын ол жеткиликли болады.

**§ 79. Сфералық координаталарға өтиў**

Орайлық күш майданындағы Гамильтон операторы (95)-аңлатпа түринде жазылатуғын электронның қозғалысын буннан былай үйрениў ушын сфералық координаталарға өтиў мақсетке муўапық келеди (бизлер орайлық симметрияға ийе болған майдандағы және водород тәризли атомлардағы электронның қозғалысын үйрениў ушын сфералық координатаға өтиўдиң мақсетке муўапық болатуғынлығын билемиз). Бундай жағдайда ҳәм өзгериўшилерин киргизиўге болады. Бирақ, енди қозғалыс интегралы болып есапланбайтуғын орбиталық момент шамасының орнына толық момент шамасын киргизиў керек. Усы жағдайға байланыслы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (103) |

теңлиги орынланады деп болжаймыз. тиң меншикли мәнислери пүтин сан еселенген ℏ қа, ал тың меншикли мәнислери ге тең. Демек, тиң меншикли мәнислериниң тақ сан еселенген ℏ қа тең болыўы керек. Квантлық механикадан шамасының меншикли мәнислериниң оң шамалар екенлиги белгили.

Егер (87)-формулада деп болжасақ, онда

|  |  |
| --- | --- |
|  | (104) |

аңлатпасына ийе боламыз. Демек,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (105) |

теңлигиниң орынлы екенлигине көз жеткеремиз. Демек шамасы квадраты ға тең шама болады екен ҳәм сонлықтан (39)-теңлемеге сәйкес шамасын шамасына тең етип алыўымызға болады. Бирақ, бул ең мақсетке муўапық келетуғын анықлама болып табылмайды. Себеби сыпатында қозғалыс интегралына ийе болғымыз келеди, ал аңлатпасы қозғалыс интегралы емес. (32)-аңлатпа

|  |  |
| --- | --- |
|  | (106) |

ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (107) |

теңликлерин береди, сонлықтан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (108) |

ямаса

|  |  |
| --- | --- |
|  | (109) |

қатнасларының орын алатуғынлығын көремиз. Усыған сәйкес, шамасы ушын жазылған (38)-аңлатпадағы ағзалардың бири менен, атап айтқанда ағзасы менен антикоммутацияланады ҳәм басқа екеўи менен коммутацияланады. Буннан ағзасының тағы барлық үш ағза менен коммутацияланатуғынлығы ҳәм қозғалыс интегралы болатуғынлығын келип шығады. Бирақ, ағзасының квадраты шамасы болып табылады [(105)-аңлатпаға қараңыз]. Сонлықтан, биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (110) |

теңлигине ийе боламыз ҳәм ол (103) пенен сәйкес келетуғын шамасының қолайлы рационаллық анықламасын береди. Бул анықлама бойынша шамасы қозғалыс интегралына айланады ҳәм оның меншикли мәнислери болып барлық оң ҳәм терис пүтин санлар хызмет етеди (оларға нол кирмейди).

(87)-аңлатпаны және бир рет пайдаланып ҳәм (110) менен квантлық механикада орайлық майдандағы қозғалысты қарағанда пайдаланылатуғын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (111) |

қатнасының жәрдеминде киргизилетуғын динамикалық өзгериўшисин пайдаланып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (112) |

аңлатпасын аламыз. Буннан кейин

|  |  |
| --- | --- |
|  | (113) |

аңлатпасы менен анықланатуғын шамасын киргиземиз. ҳәм өзгериўшилери менен коммутацияланатуғын болғанлықтан ол шамасы мененен де коммутацияланады. Сонлықтан

ҳәм

теңликлерине ийе боламыз. Және операторы операторы менен коммутацияланады, ал ҳәм шамаларының арасында қозғалыс муғдарының моментине қарата симметрия болғанлықтан операторы да операторы менен коммутацияланыўы керек. Усыған сәйкес ε ҳәм операторлары коммутацияланады. Усының менен бирге ε операторы операторы менен де коммутацияланыўы керек. Соның менен бирге

теңлигиниң орын алыўына байланыслы биз

теңлигине ийе боламыз. Буннан

теңлиги келип шығады. (112)- ҳәм (113)-теңликлерден

ямаса

теңликлерин аламыз. Солай етип, (95)-аңлатпа мынадай түрге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (114) |

ҳәм бул аңлатпа сфералық координатада аңлатылған Гамильтон операторының аңлатпасы болып табылады. ε ҳәм операторларының Гамильтон операторында ушырасатуғын басқа барлық өзгериўшилер менен коммутацияланатуғынлығын ҳәм олардың бир бири менен антикоммутацияланатуғынлығын атап өтиў керек. Бул ε менен операторлары

|  |  |
| --- | --- |
|  | (115) |

матрицалары менен аңлатылатуғын көринисти алыўдың мүмкин екенлигин көрсетеди. Еге қаралып атырған көринисте өзгериўшиси де диагоналлық болса, онда ҳал векторының көриниси де еки қураўшыға ийе болады [мысалы, (115)-матрицаның еки қатары менен еки бағанасына тийисли болған ҳәм ].

**§ 80. Водородтың энергиясының қәддилериниң жуқа структурасы**

Биз водород атомлары ушын теңлигиниң орынланатуғын билемиз ҳәм усыған байланыслы операторының меншикли мәнислери менен анықланатуғын энергияларының қәддилерин табамыз. ε менен ρ (115)-матрицалар менен аңлатылатуғын жоқарыда қарап өтилген көринистеги теңлемеси мынадай түрге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (116) |
|  | (117) |

Егер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (118) |

белгилеўлерин қабыл етсек, онда жоқарыда келтирлген (116)-(117) теңлемелер мынадай түрге алып келинеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (119) |

Бул теңлемелердеги шамасы киши сан болып табылады. Бул теңлемелерди шешиў ушын квантлық механикада кеңнен пайдаланылатуғын усыллардың бирин пайдаланамыз ҳәм теңлемелер

|  |  |
| --- | --- |
|  | (120) |

түриндеги шешимлерге ийе деп болжаймыз. Бул шешимлерде пенен арқалы диң жаңа функциялары белгиленген ҳәм

|  |  |
| --- | --- |
|  | (121) |

белгилениўи киргизилген.

Енди (119)-теңлемелер мынадай түрге енеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (122) |

Шешимди пенен лар ушын дәрежели қатарлар түринде излеймиз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (123) |

Бул теңликлерде s тиң избе-из мәнислери барлық ўақытта пүтин болмаса да 1 шамасына айрылады. пенен лар ушын жазылған бул аңлатпаларды (122)-аңлатпаға қойып ҳәм шамаларының алдында турған коэффициентлерди жыйнап, биз мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (124) |

Бул теңлемелердиң бириншисин ге, ал екиншисин ге көбейтип ҳәм оларды бир биринен алып, биз олардан ди де, да де жоғалтамыз. Ал буннан теңлиги келип шығады. Усыған сәйкес тек

|  |  |
| --- | --- |
|  | (125) |

қатнасы ғана қалады. Бул қатнас штрихланған ҳәм штрихланбаған коэффициентлериниң арасындағы байланысты көрсетеди.

теңлиги орынланған жағдайлардағы шегаралық шәртлер шамасы нолге умтылғанда ҳәм шамаларының да нолге умтылатуғынлығы талап етеди. Сонлықтан, (12)-аңлатпадан шегинде пенен диң орын алатуғынлығы келип шығады. Солай етип, (123)-қатар киши лердиң тәрепинде үзилиўи керек. Егер ҳәм коэффициентлериниң екеўи де нолге тең болмайтуғын тиң мәнисин арқалы белгилесек, онда ҳәм теңликлери орын алады деп болжап, биз (124)-аңлатпадан

|  |  |
| --- | --- |
|  | (126) |

аңлатпалары келип шығады ҳәм буннан

теңлиги келип шығады. Шегаралық шәрт тиң минималлық мәнисиниң нолден үлкен болыўын талап ететуғын болғанлықтан, бизиң

теңлиги орынланады деп болжаўымыз керек.

(123)-қатардың жыйнақлығын изертлеў ушын биз тиң үлкен мәнислери ушын қатнасын анықлаймыз. (125)-теңлемеден ҳәм (126)-теңлемелердиң екиншисинен үлкен лер ушын жуўық түрде

ҳәм

буннан

қатнасын аламыз. Демек, (123)-қатар шамасына тең

қатарындай жыйнақлы болады екен. Бул нәтийжеден мынадай жуўмақларды шығара аламыз: егер шамасы таза жормал шама болса, яғный (121)-аңлатпаға сәйкес теңсизлиги орынланатуғын болса, онда ның барлық мәнислериниң қатнасыўы мүмкин. Егер теңсизлиги орынлы болса, онда шамасын оң мәниске ийе деп сайлап алып, (123)-қатар үлкен s лердиң тәрепинде үзилетуғын ниң мәнисиниң руқсат етилетуғынлығын табамыз.

Егер (123)-қатарлар пенен ағзаларында үзилетуғын болса (бундай жағдайда ), онда (124)-аңлатпадагы ди ке алмастырып

|  |  |
| --- | --- |
|  | (127) |

теңликлерин аламыз. (121)-аңлатпаға сәйкес бул еки теңлеме эквивалент. (125) пенен бириккен ҳалда ол мынаны береди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (128) |

қатнасын береди. Бул қатнас (118)-аңлатпаның жәрдеминде мынаған алып келинеди:

Буннан

теңлиги келип шығады. Оны квадратқа көтерип ҳәм (121)-аңлатпаны пайдаланып

теңлигине ийе боламыз. Демек,

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

теңлигиниң орынлы болатуғынлығын көремиз. Бул аңлатпадағы қатардағы ең ақырғы ағзаның индексин көрсететуғын шамасының ден базы бир терис болмаған санға үлкен болыўы керек. Бул санды арқалы белгилеп

теңлигине ийе боламыз ҳәм усыған сәйкес

|  |  |
| --- | --- |
|  | (129) |

Бул формула водород атомларының спектриндеги энергияның дискрет қәддилерин береди. Бул формула биринши рет 1916-жылы Зоммерфельд тәрепинен орбиталардың Бор теориясы тәрепинен алынды. (129)-формулада ҳәм арқалы белгиленген еки квант саны бар, бирақ шамасының киши екенлигине байланыслы (α ≈ 1/137) энергияның шамасы дерлик тек шамасынан ғәрезли. шамаларының бирдей мәнисин беретуғын менен шамалары бир бирине жақын жайласқан энергияның қәддилериниң системасына алып келеди. Егер олардан турақлы шаманы алып тасласа, онда шамасына сәйкес келетуғын релятивистлик емес квантлық механиканың (Шрёдингер теңлемесиниң ямаса Бор тәлиматының) тийкарында алынатуғын формуланың жәрдеминде есапланылатуғын энергияның қәддине жақын жайласады.

Биз (127)-теңлемелерди (125)-теңлеме менен комбинациялап пайдаландық. Бирақ, усының менен бирге (127)-теңлемелер толығы менен пайдаланылмады. Себеби (125) теги пенен коэффициентлериниң екеўи де нолге айланыўы мүмкин. Бул жағдайда биз биринши коэффициентти ге, ал екиншисин ға көбейтип ҳәм бир бирине қосып

теңлигине ийе боламыз. Солай етип, бул жағдайда коэффициентиниң терис болыўы керек. Буннан кейин (118)- ҳәм (121)-аңлатпалардан мынаны аламыз:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (130) |

Буннан

теңлиги келип шығады. шамасының оң болатуғынлығына байланыслы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (131) |

теңлигин аламыз. Бул болған жағдай ушын (127)-аңлатпаның жәрдеминде алынған ниң мәнисине сәйкес келеди. Сонлықтан, болған жағдай буннан кейинги изертлеўлерди өткериўге, атап айтқанда усы жағдайда (127)-шәрт қанаатландырыла ма? деген сораўға жуўап бериўге туўры келеди.

болған жағдайда s тиң ең үлкен мәниси ең киши мәниске сәйкес келеди. Сонлықтан s тиң орынына қойылған (127)-теңлеме (126)-теңлеме менен сәйкесликте болыўы керек. (118)- ҳәм (121)-теңлемелерге сәйкес (131)-теңлеме мынаны береди:

теңликлерин береди. Сонлықтан (127) деги шамасы бар биринши теңлеме тиң орнына мына түрге алып келинеди:

шамасы оң болған жағдайларда бул (126)-теңлемелердиң екиншисине сәйкес келеди. Солай етип, шешимлерге алып келмейди. Сонлықтан биз болған жағдайда шамасы оң болыўы керек деген жуўмаққа келемиз. Бирақ, ниң басқа мәнислеринде саны ноллик емес мәнистен басқа барлық пүтин мәнислерге ийе бола алады.

**§ 81. Дирак теңлемесиниң водород атомы ушын шешимлерин**

**демонстрациялаў мәселелери**

Дирак теңлемеси электронның, соның менен бирге спинлери ½ ге тең болған басқа да ноқатлық фермионлардың (мысалы кварклердиң) биспинорлық классикалық майданы ушын релятивистлик жақтан инвариант болған қозғалыс теңлемеси болып табылады. Бул теңлеме Максвелл теңлемелери менен биргеликте еркин электронлардың электромагнит майданы менен тәсирлесиўин, жақтылықтың электрондағы шашыраўын, фотон тәрепинен электрон-позитронлық жуптың пайда болыўын ҳәм басқа да көп санлы қубылысларды жеткиликли дәрежедеги дәлликте тәрийиплей алады.

Водород атомындағы электронның қозғалысы релятивистлик емес тезликлерге жуўап беретуғын болса да, энергияның қәддилерине релятивистлик дүзетиўлерди киргизиў барлық ўақытта да үлкен қызығыўшылықты пайда етеди. Ҳақыйқатында да, Бор тәлиматының тийкарында биринши стационар ҳалдағы электронның тезлиги ушын (бул водород атомындағы ең үлкен тезлик) шамасын аламыз. Бирақ, усындай жағдай орын алатуғын болса да, релятивистлик емес теория водородтың жуқа спектриниң жуқа структурасын түсиндире алмады.

Әдеттеги релятивистлик емес квантлық механикада водород атомларының энергиясының қәддилери тек бас квант санынан ғәрезли ҳәм жуўық болған эв аңлатпасының жәрдеминде есапланады (). Ал, экспериментлер болса қозған қәддилердиң бир бирине жақын жайласқан қәддилерге ажыралатуғынлығын көрсетеди. Бул жағдайда ядроның қозғалысын есапқа алыў да жәрдем бермейди. Тереңирек изертлеўлер атомда орын алатуғын спин-орбиталық тәсирлесиўдиң себебинен энергияның қәдди ушын алынатуғын шамалардың мәнислерин өзгертетуғынлығын ҳәм сонлықтан бундай өзгеристи есаплаў спин сыяқлы әҳмийетли физикалық шаманы өзиниң ишине алатуғын Дирак теңлемесин пайдаланыўдың зәрүрли екенлигин көрсетеди. Водород атомының стандарт машқаласы релятивистлик квантлық механиканың жәрдеминде дәл шешиледи.

Водород ҳәм водород тәризли атомлар ушын Дирак теңлемесин шешиўге арналған көп санлы жумысларды көрсетиў мүмкин. Бирақ, усындай жағдайға қарамастан, компьютерлик технологиялардың раўажланыўы ҳәм компьютерлик алгебра системаларды пайдаланыўдың кең мүмкиншиликлери мәселеге жаңаша қараўға ийтермелейди.

Бул жағдайда толық мүйешлик момент операторы Дирак гамильтонианы менен коммутацияланатуғын болса да, орбиталық мүйешлик момент операторы да, спин операторы да операторы менен коммутациябанбайтуғынлығын, соның менен бирге сфералық симметрияға ийе болған потенциалды қосыў жағдайды өзгертпейтуғынлығын есапқа алыў керек.

Әдетте

|  |  |
| --- | --- |
|  | (132) |

түринде жазыў мүмкин болған Дирак теңлемесин кулон майданындағы стационар қозғалыс ушын былайынша жазады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (133) |

Бул теңлемеде жақтылықтың вакуумдеги тезлиги, α менен β лар – операторлар, – электронның массасы, – толық энергия, – ядродан электронға шекемги қашықлық, – әдеттеги импульс операторы. Бирақ, бул жағдайда Дирак теңлемеси толық ҳәм спинлик моментлердиң бир биринен ғәрезсиз болған еки нызамына алып келмейди. Есаплаўлар тек релятивистлик емес жақынласыўда ғана орбиталық ҳәм спинлик моментлердиң турақлы мәнислери ҳаққында гәп етиўдиң мүмкин екенлигин көрсетеди.

Биз қарап атырған жағдайда толық энергия ушын төмендегидей теңлеме алынады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (134) |

Буннан кейин есаплаўларды сфералық координаталарда шешиў қолайлы ҳәм усындай жағдайға байланыслы толқын функциялары ушын төмендегидей теңлемелерди алыў мүмкин:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (135) |

Бул теңлемелерде арқалы Лежандрдың бириктирилген функцияларының жәрдеминде есапланатуғын сфералық функциялар белгиленген. Жоқарыдағы аңлатпада алыныўы керек болған төрт толқын функциясының барлығының бир радиаллық толқын функциясына байланыслы екенлиги көринип тур. Нәтийжеде радиаллық функциялар ушын аңсат интегралланатуғын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (136) |

түриндеги теңлемелер алынады. Бул теңлемелерде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (137) |

Бундай жағдайда энергияның ҳәм квант санларына сәйкес келетуғын қәддилери ушын

|  |  |
| --- | --- |
|  | (138) |

формуласы алынады. Бул аңлатпада эВ = 2,182700518·10-18 Дж Бор тәлиматы тийкарында алынатуғын тийкарғы ал ушын энергияның шамасы, μ – электрон ушын келтирилген масса.

Ядроның кулон майданы ушын үзликсиз ҳәм дискрет спектр ушын толқын функцияларын да алыў мүмкин. Дискрет спектр болған жағдайда ҳәм радиаллық функциялары ушын ең ақырғы аңлатпалар төмендегидей түрге ийе болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (139) |

Жоқарыда келтирилген теңлемелер менен олардың зәрүрли болған шешимлери Mathematica универсаллық компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде аңсат ҳәм көргизбели түрде демонстрацияланады ҳәм оның тийкарында ядроның дөгерегинде қозғалыўшы электронды табыўдың итималлығының тығызлығын, басқа сөз бенен айтқанда водород атомының (ямаса водород тәризли атомлардың) релятивистлик тийкарғы ҳалын ҳәм гамильтонианның меншикли мәнислерин аңсат табыўға болады. Әлбетте, бул жағдайда вакуумның тәсириндеги энергияның қәддилериниң өзгериске ушыраўы (яғный Лэмб жылжыўы) ҳаққында тиккелей гәп етиўдиң кереги болмайды.

1-сүўретте водородтың релятивистлик тийкарғы ҳалы ушын функциясының шамасынан ғәрезлиги көрсетилген ( – Бордың биринши радиусының мәниси).

|  |  |
| --- | --- |
|  | 1-сүўрет.  Mathematica компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде алынған  водородтың релятивистлик тийкарғы ҳалы ушын функциясының шамасынан ғәрезлиги |

Соның менен бирге Mathematica компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде энергиясының мәнислерин де аңсат түрде есаплаў ҳәм оны графикалық түрде көрсетиў мүмкин (2-сүўрет)..

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| 2-сүўрет. Бас квант саны ҳәм болған жағдайлар ушын энергия қәддиниң жақтылықтың тезлиги c ға байланыслы бир неше қәддилерге ажыралыўы. ( болған жағдайда қозғалыс муғдарының моментиниң нолге тең болыўына байланыслы энергия қәддилериниң ажыралыўы орын алмайды). | |

Жоқарыда келтирилген мағлыўматлардың барлығы Дирактың релятивистлик теориясы тийкарында водород атомының физикасын көрсетпели түрде үйретиўдиң мүмкин екенлигин көрсетеди. Соның менен бирге өткерилген изертлеў жумыслары усындай компьютерлик демонстрациялық экспериментлер тек ғана ақырғы нәтийжелердиң қандай болатуғынлығын көрсетип ғана қоймай, Дирак теңлемесиниң ҳәм оның шешимлериниң физикалық мәнислериниң, берилген Гамильтон операторының меншикли функциялары менен меншикли мәнислерин айқын түрде ашып беретуғынлығын көрсетти.

**§ 82. Позитронлар теориясы**

Жоқарыда электрон ушын жазылған толқын теңлемесиниң биз күткен жағдайға салыстырғанда еки есе көп болған шешимлерди беретуғынлығын көрдик. Олардың жартысы кинетикалық энергиясы терис болған ҳалларға сәйкес келеди. Бул қыйыншылық (40)-теңлемеден (41)-теңлемеге өтиўдиң салдарынан пайда болды ҳәм ол қәлеген релятивистлик теорияда орын алады. Бундай қыйыншылық классикалық релятивистлик теорияда да ушырасады, бирақ бундай теорияда ол аңсат шешиледи. Барлық классикалық динамикалық өзгериўшилердиң үзликсизлигиниң салдарынан егер кинетикалық энергиясы дәслеп оң болса (оның ушын оның шамасы шамасынан кем ямаса оған тең болыўы керек), онда ол терис мәниске ийе бола алмайды. Бирақ, квантлық теорияда секирмели тәризли өтиўлердиң орын алыўы мүмкин. Сонлықтан, егер электрон дәслеп оң кинетикалық энергияға ийе болған ҳалда жайласқан болса, онда ол терис кинетикалық энергияға ийе болған ҳалға өте алады. Сонлықтан, классикалық теориядағыдай, терис мәнисли энергияға ийе болған ҳалларға итибар бермеўге болмай қалады.

Усы жағдайға байланыслы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (140) |

теңлемесиниң терис энергияларға сәйкес шешимлерин қараймыз. Усындай мақсетлерде α-матрицасының барлық α1, α2 ҳәм α3 элементлери затлық, ал матрицасының барлық элементлери таза жормал ямаса ноль болған α матрицаларын пайдаланған қолайлы. Бундай көринисти, мысалы, (46)-аңлатпадағы менен ушын жазылған көринисте орынларын алмастырып қойыў менен алыўға болады. Егер (56)-теңлемени усы көринистеги матрицалық теңлеме түринде жазсақ ҳәм барлық орынларда ди ге алмастырсақ, онда биз

|  |  |
| --- | --- |
|  | (141) |

теңлемесин аламыз. Бул теңлемеде (38)-аңлатпадағы шамалардың i ге ийе екенлиги есапқа алынған. Солай етип, (140)-теңлемениң ҳәр бир ψ шешимине (141)-теңлемениң шешими болған комплексли-түйинлес шешиминиң сәйкес келетуғынлығын көремиз. Егер (140)-теңлемениң ψ шешими диң терис мәнисине сәйкес келетуғын болса, онда (141)-теңлемениң сәйкес шешими диң оң мәнисине сәйкес келеди. Бирақ (141)-теңлемедеги оператордың (140)-теңлемедеги оператордан шамасын шамасы менен алмастырыў жолы менен алыныўы мүмкин емес. Буннан (140)-теңлемениң терис энергияға ийе болған ҳәр бир шешими усы (140)-теңлемеден ни ге алмастырыў арқалы алынатуғын толқын теңлемесиниң оң мәнисли болған шешиминиң комплексли түйинлеси болатуғынлығы келип шығады. Соңғы шешим электромагнит майданда қозғалатуғын заряды болған (ал усы ўақытқа шекем деп есаплап келинген) электронды тәрийиплейди. Солай етип, (140)-теңлемениң бизге жағымлы болмаған шешими заряды болған электронның қозғалысы менен байланыслы (Ықтыярлы түрдеги электромагнит майданы бар болған жағдайда (140)-теңлемениң диң оң мәнисине тийисли болған шешимлери менен терис мәнисли энергияға ийе болған шешимлерин қатаң түрде айырыўға болмайтуғынлығы түсиникли. Ҳақыйқатында бундай айырыў бир түрден екинши түрге өтиўди мүмкин емес еткен болар еди. Сонлықтан, жоқарыда баянланған көз-қараслар усындай айырыў мүмкин болған жағдайларда жуўық мәниске ийе болады)

Солай етип, биз мынадай жуўмаққа келемиз: (140)-теңлемениң терис энергияларға ийе болған шешимлери массасы электронның массасындай, ал заряды қарама-қарсы болған бөлекшелердиң жаңа сортының қозғалысына тийисли. Бундай бөлекшелер экспериментте бақланды ҳәм оларды позитронлар деп атайды. Бирақ, әпиўайы түрде жоқарыда баянланған теориядан терис энергияға ийе болған шешимлердиң позитронларға тийисли деп тастыйықлай алмаймыз. Бундай тастыйықлаў барлық динамикалық қатнасларды дурыс емес еткен болар еди. Мысалы, позитронды терис мәниске ийе болған кинетикалық энергияға ийе болады деп айтыў пүткиллей дурыс болмаған болар еди. Сонлықтан, позитронның теориясын басқашарақ тийкарда дүзиўимиз керек.

Усы жағдайға байланыслы П.Дирак өз ўақытында терис энергияларға ийе болған барлық ҳаллар ийеленген, қала берсе, Паули принципине байланыслы ҳәр ҳалда тек бир электрон болады деп болжады. Бундай жағдайда оң энергияға ийе болған ийеленбеген ҳаллар оң энергияға ийе болған ҳаллардай болып көринеди. Оны жоқ етиў, яғный толтырыў ушын биз оған терис энергияға ийе болған электронды қосыўымыз керек. Терис энергиялы ийеленбеген ҳаллар позитронлар болып табылады.

Тилекке қарсы, бундай болжаў электронлардың барлық дүньядағы шексиз үлкен тығызлық пенен тарқалыўын талап етеди. Абсолют вакуум болса оң энергиялы барлық ҳаллар толтырылған, ал терис мәнисли энергияларға ийе барлық ҳаллар бос болған ҳалға сәйкес келеди. Әлбетте, абсолют вакуумда

түринде жазылатуғын Максвелл теңлемеси орынлы. Бул терис энергияға ийе болған электронлардың шексиз тарқалыўының электр майданына тәсир етпейтуғынлығын билдиреди. Тек вакуумдағы тарқалыўдан аўытқыў ғана Максвелл теңлемесиндеги электрдиң тығызлығы ге тәсир етеди

|  |  |
| --- | --- |
|  | (142) |

Оң энергияға ийе болған ҳәр бир ийеленген ҳал үлесин, ал терис энергияға ийе болған ҳәр бир ийеленбеген ҳал үлесин береди.

Паули принципине сәйкес оң энергияға ийе болған электрон әдетте терис энергияға ийе болған ҳалға өтиўден иркиледи. Бирақ усындай электронның терис энергияға ийе болған ийеленбеген ҳалға өтиўи мүмкин. Бундай жағдайда электрон менен позитронның нурланыў формасындағы энергияны нурландырыў менен бир ўақытта жоғалыўын көрген болар едик. Кери процесс электромагнит майданнан электрон менен позитронның туўылыўынан турған болар еди.

Фермионлардың ийеленген ҳәм ийеленбеген ҳалларының арасындағы симметриядан биз жоқарыда талланған теорияның позитрон менен электронға салыстырғанда симметриялы болатуғынлығын көрсетеди. Егер биз тийкарғы бөлекшелер (122)-теңлеме менен тәрийипленетуғын (бул теңлемеде ниң орнында турыпты) позитронлар болып есапланады ҳәм терис энергияға ийе болған барлық ҳалларды ийеленген деп есапласақ, онда эквивалент теорияға ийе болған болар едик. Бундай жағдайда терис энергияға ийе позитронлардың тарқалыўындағы тесик электрон сыпатында талланған болар еди. Бундай теорияны электронлар менен позитронларға қарата барлық физикалық нызамлар симметриялы деп есаплайтуғын гипотезаға сәйкес раўажландырыўға болады.

**Мәселе**. Дирак теңлемесин квадратлаў.

Ескертиў: биз төменде евклидлик метриканы ҳәм төртинши координатасын пайдаланамыз. Грек индекслери (мысалы μ) 1, 2, 3, 4 мәнислерин қабыл етеди, ал латын индекслери (мысалы, ) тек 1, 2 ҳәм 3 мәнислерине ийе бола алады.

Тийкарғы мәселе Дирак тегис толқынлары ушын релятивистлик дисперсия нызамының жәрдеминде γ операторлары қанаатландыратуғын коммутациялақ қатнасларды келтирип шығарыў ҳәм бул операторлар ушын матрицасы диагоналлық болған келтирилип шығарылмайтуғын матрицалық көринисти алыўдан ибарат. Бундай жағдайда еркин бөлекше ушын шешими тегис толқын болған еркин бөлекше ушын Дирак теңлемесин қараймыз.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (143) |

түринде жазылған Дирак теңлемесиниң шешими

|  |  |
| --- | --- |
|  | (144) |

түриндеги тегис толқын болсын. Бундай жағдайда γ шамалары мынадай алгебралық қатнасты қанаатландырыўы керек:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (145) |

Соның менен бирге олар шамаларын айқын түрде сайлап алыныўынан да ғәрезли. Бул шамаларын (145)-аңлатпадан тек

|  |  |
| --- | --- |
|  | (146) |

түринде жазылған релятивистлик дисперсия нызамының тийкарында жоқ етиўге ҳәм оны ( шамасын) (145)-аңлатпаны квадратқа көтериў арқалы алыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (147) |

Бул (147)-аңлатпа қос суммадағы тек сәйкес түрде нормировкаланған диагоналлық ағзалар нолге тең болған жағдайда ғана, яғный

|  |  |
| --- | --- |
|  | (148) |

теңлиги орынланғанда (146)-аңлатпа менен бирдей мәниске ийе болады. (143)-Дирак теңлемесине усыған усаған процедураны тиккелей пайдаланып ҳәм тегис толқынларды пайдаланбай мынадай түрдеги

аңлатпаға ийе боламыз. Бул аңлатпа (148)-антикоммутаторлардың мәнислерин есапқа алған жағдайда Клейн-Гордон теңлемесине өтеди:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (149) |

шамасы ушын төрт қатарлы матрицалар түриндеги келтирилип шығарылмайтуғын көринислерди дүзиўге болады. Егер усындай көринислердиң бири болса, онда қәлеген унитарлық түрлендириў базы бир басқа келтирилип шығарылмайтуғын көринисти туўдырады. Усындай себепке байланыслы матрицалардың бирин (мысалы матрицасын) диагоналлық деп болжаўға болады. теңлиги орынлататуғын болғанлықтан, бул матрицаның меншикли мәнислери +1 ҳәм -1 ге тең болыўы керек. Солай етип, матрицаларының жыйнағын конструкциялап, мыналарды жазыўға болады:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (150) |

Бул аңлатпалардағы жуўан ҳәриплер еки қатарлы матрицаларды билдиреди. Буннан кейин (148)-қатнаслардың жәрдеминде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (151) |
|  | (152) |

теңликлерине ийе боламыз.

Биринши үш матрицалары ушын (152)-аңлатпадан

теңликлериниң орынлы екенлигине исенемиз, ал (151)-қатнастан

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

қатнаслары келип шығады. Қарап атырылған еки қатарлы матрицалар ушын алынған коммутациялық қатнаслар оларды Паули матрицаларының жәрдеминде аңғартыўға мүмкиншилик береди (1-§ тиң басында келтирилди). Егер менен әдеттеги санлар болса, онда (153)-қатнасты

|  |  |
| --- | --- |
|  | (154) |

матрицалары қанаатландырады. Солай етип,

|  |  |
| --- | --- |
|  | (155) |

түриндеги қәлеген матрица (148) түриндеги коммутациялық қатнасларды қанаатландырыўы керек. теңлиги орынланғанда алынатуғын стандарт көринис мына түрге ийе:

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

Ескертиў: Егер теңликлери орынлы болса, онда үш матрицасының орнына бир

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |

матрицасы алынады. Олар матрицасы менен биргеликте тап сол коммутациялық қатнасларды қанаатландырады. Матрицалардың көрсетилген еки жыйнағы бир бири менен

қатнаслары бойынша байланысқан. α матрицасы Дирак гамильтонында пайдаланылады.

|  |  |
| --- | --- |
|  | () |

|  |  |
| --- | --- |
|  | () |

|  |  |
| --- | --- |
|  | () |

1. Бордың бул жумысының I бөлими 1913-жылы "On the Constitution of Atoms and Molecules" деп аталатуғын Phil. Mag. журналының 1-25 бетлеринде, II бөлими 476-502 бетлеринде, ал III бөлими 857-875 бетлеринде жарық көрди. [↑](#footnote-ref-1)
2. Рус тилиндеги әдебиятларда бундай жийиликти көпшилик жағдайда "дөңгелек жийилик" деп те атайды. Бирақ биз бундай атаманы пайдаланбаймыз. [↑](#footnote-ref-2)
3. Сызықлы алгебрада транспонирленген матрицалар оларды диагоналының дөгерегинде буратуғын, яғный қатарлары менен бағаналарының орнын алмастыратуғын матрицалар болып табылады. Демек A матрицасының бағаналары менен қатарларының орынларын алмастырыў арқалы AT матрицасын алады (басқа белгилеўлердиң орын алыўы да мүмкин). Мысалы, егер өлшемине ийе А матрицасы болатуғын болса, онда оның транспонирлениўи өлшеминдеги матрицаны береди.

   Сызықлы оператордың транспонирлениўи де тап сондай болып анықланады. Егер V векторлық кеңислигиндеги T сызықлы операторын W векторлық кеңислигине транспонирлеў болған T\* шамасы W менен V дан туратуғын сызықлы оператор болып табылады

   Сызықлы оператордың транспонирлениўин басланғыш оператордың "қарама-қарсысы" деп қараўға болады. Мысалы, егер T векторды шептен оңға қарай сәўлелердинетуғын болса, онда T\* векторды оңнан шепке қарай сәўлелендиреди.

   Сызықлы оператордың транспонирлениўин дәслепки операторды үйрениў ушын қолланады. Мысалы, сызықлы оператордың меншикли мәнислери менен меншикли векторлары оның транспонирлениўиниң меншикли мәнислери ҳәм меншикли векторларына сәйкес келеди. [↑](#footnote-ref-3)
4. Пүтин функция (пүтин санлы функция) деп аргумент сыпатында пүтин мәнислерди қабыл ететуғын функцияларға айтады. Квантлық механикаға келгенде бул аңлатпадағы операторларды бирлестиретуғын коэффициентлердиң пүтин санлар екенлигин аңғартады. [↑](#footnote-ref-4)
5. Бул теореманың (ҳәм оннан келип шығатуғын нәтийжелердиң), улыўма айтқанда, теппе-тең бөлекшелерден туратуғын системалар ушын орынланбайтуғынлығын атап өтемиз. [↑](#footnote-ref-5)
6. Биз бул параграфта қарап атырылған мәселеге байланыслы "потенциал текше" түсиниги менен бирге "потенциал барьер" түсинигин де пайдаланамыз. [↑](#footnote-ref-6)
7. Классикалық механикадағы гармоникалық осциллятор деп тең салмақлық ҳалдан шығарғанда аўысыў тың мәнисине пропорционал болған қайтарыўшы күши тәсир ететуғын системаға айтады: . арқалы турақлы коэффициент белгиленген. Егер системаға тәсир ететуғын бирден-бир күш болып табылатуғын болса, онда системаны әпиўайы ямаса консервативлик гармоникалық осциллятор деп атайды. Бундай системаның еркин тербелиси тең салмақлық орынның әтирапындағы дәўирлик қозғалыс болып табылады (гармоникалық тербелислер). Бундай жағдайда жийилик пенен амплитудалар турақлы шамалар болып, жийилик амплитудадан ғәрезли емес. [↑](#footnote-ref-7)
8. Биз компьютерлер менен программалаў тиллериниң раўажланыўына байланыслы Эрмит полиномлары сыяқлы математикалық көп ағзалыларды есаплаў процедураларының жүдә аңсатласқанлығын атап өтемиз. Мысалы Mathematica компьютерлик алгебра системасында Эрмит полиномы болған полиномын есаплаў ушын функциясын пайдаланады. [↑](#footnote-ref-8)
9. Бул жерге гәп тек "ядролық күшлер" атамасы менен белгили болған күшлер ҳаққында айтылып атырғанлығын ҳәм бул күшлерди тәбияттағы төрт фундаменталлық тәсирлесиў менен шатастырмаў керек екенлигин атап өтемиз. [↑](#footnote-ref-9)
10. Биз атом ядроларының өлшемлери ҳаққындағы 2023-жылдағы эксперименталлық мағлыўматларды келтире аламыз. Атом ядроларының радиусы ушын 10-13 см = 1 фм (ферми) бирлигиниң қолланылатуғын есапқа аламыз ҳәм ең үлкен шектиң 16 фм ге, ал ең киши шектиң 1 фм ге тең екенлигин атап өтемиз. Атом ядросының радиусын анықлаў ушын жуўық түрдеги формуласы қолланылады. Бул формулада фм, ал арқалы ядроның массалық саны белгиленген (протонлар менен нейтронлардың улыўмалық саны). [↑](#footnote-ref-10)
11. функциясы квантлық системаның толқын функциясын үш өлшемли кеңисликте көрсетиў ушын пайдаланылады. Биз толқын функциясының ҳақыйқый бөлиминиң бөлекшени кеңисликтиң белгили болған ноқатында табыўдың итималлығын, ал жормал бөлими толқын функциясының фазасын беретуғынлығын және бир рет еске саламыз.

    ";" белгиси толқын функциясының үш өзгериўшиниң функциясы екенлигин аңғартады (толқынлық сан , орын ҳәм ўақыт ). Белгидеги үтир (,) толқын функциясының ўақыттан ғәрезсиз менен тың функциясы екенлигин аңғартады. Бул жағдай болса толқын функциясын еки функцияның көбеймеси түринде көрсетиўге болатуғынлығын аңғартады. Олардың бириншиси дан, ал екиншиси тан ғәрезли. Бул толқын функциясының кеңисликлик ҳәм ўақытлық бөлимлерин айырып көрсетиўге мүмкиншилик береди. [↑](#footnote-ref-11)
12. Грин теоремасы туйық контур бойынша алынған иймек сызықлы интеграл менен усы контур менен шекленген бир байланыслы область бойынша қос интеграл арасындағы байланысты орнатады. Бул теорема улыўмарақ болған Сток теоремасының дара жағдайы болып табылады. Инглиз математиги Джордж Гринниң аты менен аталған. [↑](#footnote-ref-12)
13. Биз Mathematica компьютерлик алгебра системасы сыяқлы системалардың жәрдеминде (27.1)-түриндеги дифференциаллық теңлемелерди DSolve функциясының жәрдеминде аңсат есапланатуғынлығын атап өтемиз. [↑](#footnote-ref-13)
14. Моменттиң проекциясының меншикли мәнислерин арқалы белгилеў көпшилик тәрепинен қабыл етилген. Бирақ, бөлекшелердиң массасын да арқалы белгилеў кең тарқалған. Сонлықтан, моменттиң проекциясының меншикли мәнислери менен массаның белгилериниң қәтеликлерге алып келмеўине итибар бериў керек. [↑](#footnote-ref-14)
15. Mathematica компьютерлик алгебра системасында Лежандрдың бириктирилген полиномларын командасының жәрдеминде есаплайтуғынлығын атап өтемиз. [↑](#footnote-ref-15)
16. Биз электронның меншикли моментиниң бар екенлиги ҳаққындағы физикалық идеяның Уланбек (G. Uhlenbeck) ҳәм Гаудсмит (S. Goudsmit) тәрепинен 1925-жылы усынылған екенлигин атап өтемиз. Спин квантлық механикаға Паули (W. Pauli) тәрепинен 1927-жылы киргизилгенлигин атап өтемиз. [↑](#footnote-ref-16)
17. Гәп жоқары симметрияға ийе болған сыртқы тәсир ҳаққында айтылып атыр. Ҳақыйқатында сыртқы тәсирде жүзеге келетуғын симметриядағы өзгерислер кристаллофизикадағы Кюри принципине бағынады. Бул принцип бойынша тәбияттағы бирдей болмаған қубылыслар қосылған жағдайда усы қубылыслар ушын улыўмалық болған симметрия элементлери ғана сақланады. [↑](#footnote-ref-17)
18. Биз эквивалент электронлар ҳаққында айтқанда атомдағы бас квант саны () менен орбиталық квант саны () бирдей болған электронларды түсинемиз. Бул олардың бирдей энергия қәддине ҳәм орбиталға ийе, бирақ ҳәм қыйлы спин квант санларына ийе бола алатуғынлығын көрсетеди. Мысалы, углерод атомындағы -орбиталындағы еки электрон эквивалент электронлар болып табылады. Олардың екеўи де ҳәм квант санларына ийе, бирақ, тиң ҳәр қыйлы болған +1/2 ямаса -1/2 мәнислерине ийе бола алады. Эквивалент электронлар атомлық спектроскопияда үлкен әҳмийетке ийе, себеби олар энергияның бирдей қәддилерине ийе болады. Бул олардың бирдей толқын узынлығына ийе фотонларды жута ҳәм шығара алатуғынлығын көрсетеди. [↑](#footnote-ref-18)
19. тиң максималлық мәниске ийе болыў талабы былайынша тийкарланады: Мысал сыпатында еки электроннан туратуғын системаны қараймыз. Бул жағдайда ҳәм теңликлериниң орын алыўы мүмкин. 1 ге тең спинге антисимметриялы толқын функциясы сәйкес келеди. теңлиги орынланғанда толқын функциясы нолге айланады. Басқа сөз бенен айтқанда теңлиги орынлы болғанда бир электронды екинши электронға жақын қашықлықта табыўдың итималлығы киши. Бул олардың салыстырмалы киши электростатикалық ийтерисиўине, соған сәйкес киши энергияға алып келеди. Тап сол сыяқлы, бир неше электронлардан туратуғын система ушын ең үлкен спинге "ең антисимметриялы" болған координаталық толқын функция сәйкес келеди. [↑](#footnote-ref-19)
20. Биз операторы меншикли мәнислердиң дискрет спектрине ийе деп болжаймыз ҳәм қозғалаңлар теориясын меншикли мәнислердиң тутас спектри ушын да қолланыўға болатуғынлығын атап өтемиз. [↑](#footnote-ref-20)
21. Гелий атомы ушын Шрёдингер теңлемесиниң дәл шешимлериниң жоқ екенлиги улыўма түрде қабыл етилген. Оның себеби гелий атомы ушын Шрёдингер теңлемесиниң өзиниң ишине электрон менен электронның ийтерисиўин тәрийиплейтуғын ағзаға ийе екенлиги менен байланыслы. Бул ағза сызықлы емес ҳәм усы жағдай теңлемени дәл шешиўдиң мүмкин емес екенлигин аңғартады.

    Бирақ, гелий атомы ушын Шрёдингер теңлемесин жуўық түрдеги шешимлери бар. Бул шешимлер әдетте қозғалаң теориясын ямаса вариациялық усылларды пайдаланыўдың нәтийжесинде алынады. Қозғалаң теориясы Шрёдингер теңлемесин жуўық түрде шешиўден баслайтуғын, буннан кейин оған дүзетиўлерди қосатуғын усыл, ал вариациялық усыллар болса системаның энергиясын минималластырыў жолы менен Шрёдингер теңлемесиниң мүмкин болған ең жақсы жуўық шешимин табыўға тырысатуғын усыл болып табылады. [↑](#footnote-ref-21)
22. Биз болған жағдай ушын орайлық симметрияға ийе болған майданда қозғалатуғын бөлекше ушын улыўмалық теңлемениң былайынша жазылатуғынлығын еске түсиремиз: [↑](#footnote-ref-22)
23. (4)-теңлемеде толқын функциясы тек радиус-векторынан ғана ғәрезли емес, ал ўақыт *t* дан да ғәрезли. Бирақ оқыўшы толқын функциясының дан ғәрезли екенлигин өзи түсиниўи керек (мысалы теңлемеде ўақыт бойынша туўынды тур). Сонлықтан буннан былай менен арасындағы байланысты тек бул байланыс анық көринип турмаған жағдайда көрсетип өтемиз. [↑](#footnote-ref-23)
24. Классикалық жағдайда майдан бар болған жағдайда (1)-аңлатпаның орнына табамыз: ямаса . Бул жағдай (5)-оператордың киргизилиўине эквивалент. [↑](#footnote-ref-24)
25. Оскар Клейн (1894-1977), швед физиги, Вальтер Гордон (1893-1939), немис физик-теоретиги. [↑](#footnote-ref-25)
26. Поль Адриен Морис Дирак (инглизше Paul Adrien Maurice Dirac; 1902-жылы 8-август күни Бристоль қаласында туўылған ҳәм 1984-жылы 20-октябрь күни Таллахасси қаласында қайтыс болған) — англиялы физик-теоретик, квантлық механиканы дөретиўшилердиң бири. 1933-жылы Эрвин Шрёдингер менен биргеликте физика бойынша Нобель сыйлығын алыўға миясар болды.

    Дирактың жумыслары квантлық физикаға, элементар бөлекшелер физикасына, улыўмалық салыстырмалық теориясына бағышланған. Ол квантлық механика (түрлендириўлердиң улыўмалық теориясы), квантлық электродинамикада (екинши квантланыў усылы ҳәм көп ўақытлық формализм) ҳәм майданның квантлық теориясы (байланысқа ийе системалардың квантланыўы) бойынша тийкарғы мийнетлердиң авторы. Дирак тәрепинен усынылған электронның релятивистлик теңлемеси тәбийий түрде спинди түсиндириўге ҳәм антибөлекшелер ҳаққындағы көз-қараслардың пайда болыўына алып келди. Дирак алған басқа да белгили болған нәтийжелердиң қатарына фермионлар ушын статистикалық тарқалыў, магнит монополи концепциясы, үлкен санлар гипотезасы, гравитация теориясының гамильтонлық трактовкасы ҳ.б. киреди. [↑](#footnote-ref-26)
27. Биз , , арқалы импульс моментиниң үш қураўшысын белгилеп атырмыз. [↑](#footnote-ref-27)