22.3(кыр)
А 79

Б.Арапов, Т.Б.Арапов

КВАНТТЫК МЕХАНИКАНЫН НЕГИЗДЕРИ

Ош - 2006

УДК 530.1
ББК 22.314
А 79

Ош мамлекеттик университетинин Окумуштуулар Кеңешинин чечими менен басмага сунушталган

Р е ц е н з е н т т е р – Физика-математика илимдеринин доктору, профессор Ташполотов И., Ош мамлекеттик университетинин эксперименталдык жана теориялык физика кадфедрасы (кафедра башчысы физика-математика илимдеринин кандидаты, доцент Усаров А.С.) жана жалпы физика жана физиканы окутуунун усулу кафедрасы (кафедра башчысы физика-математика илимдеринин кандидаты, доцент Эгембердиев Ж.).

Арапов Б., Арапов Т.Б.
А79 Кванттык физиканын негиздери: Окуу куралы/ОшМУ - Ош: "Билим", 2006. - 148 б.

ISBN 9967-03-335-5

Окуу куралында теориялык физика курсунун кванттык механика бөлүгүнүн эксперименталдык негиздери, кванттык механиканын математикалык апараты жана Шредингердин теңдемелеринин айрым бир физикалык процесстеринде колдонулушу каралган.

Окуу куралы университеттин "физика", "физика жана астрономия", "физика жана информатика", "электроника жана микроэлектроника", ж.б. адистиктеринин жогорку курстарынын студенттерине, аспиранттарга, изденүүчүлөргө жана окумуштууларга сунуш кылынат.

А1604030000-06 УДК 530.1
ISBN 9967-03-335-5 ББК 22.314

© Б. Арапов, Т.Б. Арапов, 2006.
© ОшМУ: "Билим", 2006.

МАЗМУНУ

Киришүү 5

I глава. МИКРООБЬЕКТТЕРДИН АБАЛЫНЫН ӨЗГӨЧӨЛҮКТӨРҮ **8**

§ 1. Жылуулук нурдануусу. Ультрафиолеттик катастрофа. Планктын гипотезасы 8

§2. Фотоэффект кубулушу. Эйнштейндин гипотезасы 12

§3. Рентген нурлары.. 17

§4. Комптон эффекти. Рентген нурунун чачыроосу............ 20

§5. Атомдун нурдануу спектрлери............................ 23

§6. Нур жутуу.. 25

II глава. МИКРОБӨЛҮКЧӨЛӨРДҮН ТОЛКУНДУК КАСИЕТИ.. **27**

III глава. АТОМДОРДУН ТҮЗҮЛҮШҮ 35

§1. Атомдун моделдери. Резерфорддун тажрыйбасы............ 35

§2. Бордун жарым кванттык теориясы........................ 38

IV глава. КВАНТТЫК МЕХАНИКАДАГЫ АБАЛДАР ЖАНА БАЙКАЛУУЧУ ЧОҢДУКТАР.................................. **41**

V глава. КВАНТТЫК МЕХАНИКАНЫН МАТЕМАТИКАЛЫК АППАРАТЫ.. **46**

§1. Сызыктуу өзүн-өзү камтыган операторлор................ 46

§2. Кванттык механиканын негизги операторлору............. 49

§3. Кванттык механиканын операторлорунун жалпы өздүк функциялары.. 56

§4. Физикалык чоңдуктардын орточо маанилери Гейзенбергдин аныксыздыгы.............................. 58

VI глава. ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕЛЕРИ..................... **63**

§1. Шредингердин убакыттан көз каранды болбогон стационардык теңдемеси.. 63

§2. Шредингердин убакыттан көз каранды болгон жалпы теңдемеси.. 64

§3. Эркин бөлүкчө үчүн Шредингердин теңдемеси............ 65

§4. Толук энергиянын жана импульстун операторлорунун өздүк функциясы.. 67

VII глава. ПОТЕНЦИАЛДЫК ТОСМОДОГУ МИКРО - БӨЛҮКЧӨ ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ.................................... **69**

VIII глава. ПОТЕНЦИАЛДЫК ЧУНКУР ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ.......................... **75**

IX глава. СЫЗЫКТУУ ГАРМОНИКАЛЫК ОСЦИЛЛЯТОР...... **79**

X глава. БОРБОРДУК СИММЕТРИЯЛЫК ТАЛААДАГЫ ЭЛЕКТРОН ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ. СУУТЕКТИН АТОМУ ЖАНА СУУТЕКСЫМАЛ АТОМДОР...... **85**

§1. Симметриялык талаадагы кыймыл......................... 85

§2. Шредингердин радиалдык теңдемеси…………………………… 88
§3. Суутектин атомунун нурдануусу………………………………… 92

XI глава. ЖЕГИЧ МЕТАЛЛДАРДЫН АТОМУ ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ…………………… 96
§1. Шредингердин теңдемеси жана анын чечими……………………… 96
§2. Жегич металлдардын атомунун нурдануу спектрлери…………… 100

XII глава. МАГНИТ ТАЛААСЫНДАГЫ АТОМДОР ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ. ЗЕЕМАНДЫН НОРМАЛДЫК ЭФФЕКТИ…………………… 102
§1. Магнит талаасындагы атомдун электронунун потенциалдык энергиясы…………………………………………… 102
§2. Магнит талаасындагы суутектин атому үчүн Шредингердин теңдемеси…………………………………………… 103
§3. Магнит талаасындагы жегич металлдардын атому үчүн Шредингердин теңдемеси…………………………………………… 107

XIII глава. ЭЛЕКТРОНДУН СПИНИ…………………………… 110
§1. Электрондун спинге ээ экендигин көрсөткөн эксперименталдык далилдер…………………………………………… 110
§2. Электрондун спини же өздүк моменти………………………… 112
§3. Электрондун толук механикалык моменти…………………… 113
§4. Спектралдык сызыктардын "ничке" түзүлүшүн түшүндүрүү……….. 115
§5. Штерн-Герлахтын тажрыйбасы……………………………… 117
§6. Зеемандын аномалдык эффектин түшүндүрүү………………… 121

XIV глава. КӨП МИКРОБӨЛҮКЧӨЛӨРДҮН СИСТЕМАСЫ ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ…………………….. 125

XV глава. ГЕЛИЙДИН АТОМУ ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ…………………………… 129
§1. Киришүү…………………………………………………… 129
§2. Нөлдүк жакындаштыруу…………………………………… 130
§3. Биринчи жакындаштыруу…………………………………… 132

XVI глава. МЕНДЕЛЕЕВДИН МЕЗГИЛДИК СИСТЕМАСЫ……………………………………………… 142
§1. Электрондордун конфигурациясы жана электрондук катмарларды толтуруунун идеалдык схемасы…………………………… 142
§2. Менделеевдин мезгилдик системасы. Реалдык схема…………… 144

АДАБИЯТТАР ………………………………………………… 148

Киришүү

Физикалык процесстер жана кубулуштар өзгөчөлүгү боюнча ар түрдүү классификацияланышы мүмкүн. Алардын ичинен негизгилери болуп өлчөмдөрү (R) жана ылдамдыктары ϑ (же энергиясы E) боюнча бөлүнүшү эсептелет.

Өлчөмү $R \geq 10^{-4}$ м болгон телолор макродүйнөнү түзүшөт, ал эми өлчөмү $R \leq 10^{-10}$ м болсо, анда биз микродүйнөнүн бөлүкчөлөрү менен иш алып барабыз.

Ушундай эле бөлүштүрүү башкачараак түрдө болушу мүнкүн. Макродүйнөгө эң көп сандагы элементардык бөлүкчөлөрдөн турган ($N >> 1$) телолор мисал болушат. Ал эми микродүйнөгө аз сандагы элементардык бөлүкчөлөрдөн турган ($N \sim 1$) обьекттер кирет.

Каралган классификациялык өзгөчөлүк өздүк фундаменталдык турактуулукка ээ. Бул турактуулук Планктын турактуулугу (ħ). Микродүйнөдө физикалык чоңдуктардын өлчөмү Планктын турактуулугуна жакын чоңдуктар болушу керек.

Алды менен ал чоңдуктарга телолордун импульсунун моменти же аракети тиешелүү, б.а. $L \sim \hbar$ жана $S \sim \hbar$.

Кванттык механика физикалык жактан ээн боштукта пайда болгон эмес. Ал классикалык физиканын чордонунан келип чыккан. Классикалык физика түшүндүрө албай калган көп сандаган физикалык өзгөчөлүктөрдү жана закон ченемдүүлүктөрдү түшүндүрүү үчүн классикалык физиканын көз карашынан айырмаланган жаңы көз караш, жаңы физика керек болгон.

Микродүйнөнүн бир түрү болгон жарык нурларын (ошондой эле рентген, гамма нурларын да) окуп үйрөнүү, алардын толкундук касиети менен бирге корпускулярдык касиетке ээ экендигин көрсөттү. Ошондой эле микрообьектин экинчи түрү болгон микробөлүкчөлөр корпускулярдык-бөлүкчөлүк касиети менен бирге толкундук да касиетке ээ экендиги аныкталды. Ал эми микрообьектерди мүнөздөөчү физикалык чоңдуктар дискреттик маанилерди алышат.

Микробөлүкчөлөрдүн толкундук касиетинен алардын координатын так аныктоого мүмкүн эместиги келип чыгат. Координатын аныктоого мүмкүн болбогондук микробөлүкчөнүн кыймылынын траекториясын аныктоо мүмкүн эместигине алып келет. Мына ошондуктан мындай өзгөчөлүккө ээ болгон микробөлүкчөнүн абалын аныктоо үчүн классикалык физиканын негизи болгон Ньютондун теңдемелерин пайдаланууга мүмкүн эмес. Ньютондун теңдемелеринин чечими негизинен физикалык чоңдуктардын үзгүлтүксүз маанисине алып келет, ал эми микродүйнөнү мүнөздөөчү физикалык чоңдуктар дискреттүү

мааниге ээ. Ошондой эле Ньютондун теңдемеси микробөлүкчөлөрдүн толкундук касиетин эске албайт.

Мына ошондуктан микродүйнөнүн өзгөчөлүктөрүн окуп үйрөнүү үчүн физика илиминин жаңы тармагы болгон кванттык физика же кванттык механика пайда болгон.

Кванттык механиканын негизги теңдемеси болуп Шредингердин теңдемеси эсептелет. Шредингердин теңдемесинин чечиминен аныкталгандай микробөлүкчөлөрдү мүнөздөөчү физикалык чоңдуктар дискреттүү маанилерге ээ болушат.

Ошондой эле Шредингердин теңдемесинин чечиминен белгилүү болгондой мейкиндиктин берилген көлөмүндө жана убакыттын берилген моментинде микробөлүкчөнүн координатын так аныктоого мүмкүн эмес.

Бул касиет макробөлүкчөлөрдөн айырмаланып микробөлүкчөлөргө гана таандык болгон касиет. Мына ошондуктан макрообьектер үчүн аныкталган физикалык закон ченемдүүлүктөрдү толугу менен микрообьектер үчүн пайдаланууга мүмкүн эмес. Аларды пайдалануу Гейзенбергдин аныксыздыктарынын пайда болушуна алып келет.

Университеттик окуу программасы боюнча "кванттык механика" курсу 7 - жана 8 - семестрлерде окулат.

Окуу программасына коюлган талап боюнча студенттер кванттык механиканын негизги түшүнүктөрү менен тааныш болушу керек. Микродүйнөнүн кубулуштарын кванттык механиканын көз карашынын негизинде түшүндүрүү үчүн студенттердин ой жүгүртүүсү калыптанышы керек. Бирок, бүгүнкү күндө мындай талапка жооп берген кыргыз тилинде жазылган окуу куралы жок.

Азыркы учурдагы илимий-техникалык революциянын шартында окуу куралынын көлөмү да студенттердин реалдык убактына шайкеш келиши керек.

Каралган окуу куралында кванттык механиканын физикалык негизин ушул аталган талапты эске алуу менен сунушталды.

Бул окуу куралы авторлордун Ош мамлекеттик университетинин физика-математика факультетинде физика адистигиндеги студенттерге көп жылдардан бери окулган лекциялык курсунун негизинде даярдалды.

Аталган окуу куралынын даярдалышында буга чейин кыргыз тилинде жарыяланган окуу куралдарынын алгылыктуу жактары да эске алынды.

Окуу куралынын сапатын жогорулатуу боюнча сунушталган окурмандардын ой-пикирлерин авторлор жылуу сезим менен кабыл алышын билдиребиз.

Бул окуу куралынын пайда болушуна Ош мамлекеттик университетинин эксперименталдык жана теориялык физика жана жалпы физика жана физиканы окутуунун усулу кафедраларынын жалпы жамааты, өзгөчө физика-математика илимдеринин кандидаты, доцент Ж. Эгембердиевдин салымдарын баса белгилөө менен терең ыраазычылыгыбызды билдиребиз.

Китептин материалдарын басмага даярдоодо көрсөткөн жардамдары үчүн Б. Садиевага жана Н. Эралиевага терең ыраазычылыкта экенибизди билдиребиз.

мааниге ээ. Ошондой эле Ньютондун теңдемеси микробөлүкчөлөрдүн толкундук касиетин эске албайт.

Мына ошондуктан микродүйнөнүн өзгөчөлүктөрүн окуп үйрөнүү үчүн физика илиминин жаңы тармагы болгон кванттык физика же кванттык механика пайда болгон.

Кванттык механиканын негизги теңдемеси болуп Шредингердин теңдемеси эсептелет. Шредингердин теңдемесинин чечиминен аныкталгандай микробөлүкчөлөрдү мүнөздөөчү физикалык чоңдуктар дискреттүү маанилерге ээ болушат.

Ошондой эле Шредингердин теңдемесинин чечиминен белгилүү болгондой мейкиндиктин берилген көлөмүндө жана убакыттын берилген моментинде микробөлүкчөнүн координатын так аныктоого мүмкүн эмес.

Бул касиет макробөлүкчөлөрдөн айырмаланып микробөлүкчөлөргө гана таандык болгон касиет. Мына ошондуктан макрообьектер үчүн аныкталган физикалык закон ченемдүүлүктөрдү толугу менен микрообьектер үчүн пайдаланууга мүмкүн эмес. Аларды пайдалануу Гейзенбергдин аныксыздыктарынын пайда болушуна алып келет.

Университеттик окуу программасы боюнча "кванттык механика" курсу 7 - жана 8 - семестрлерде окулат.

Окуу программасына коюлган талап боюнча студенттер кванттык механиканын негизги түшүнүктөрү менен тааныш болушу керек. Микродүйнөнүн кубулуштарын кванттык механиканын көз карашынын негизинде түшүндүрүү үчүн студенттердин ой жүгүртүүсү калыптанышы керек. Бирок, бүгүнкү күндө мындай талапка жооп берген кыргыз тилинде жазылган окуу куралы жок.

Азыркы учурдагы илимий-техникалык революциянын шартында окуу куралынын көлөмү да студенттердин реалдык убактына шайкеш келиши керек.

Каралган окуу куралында кванттык механиканын физикалык негизин ушул аталган талапты эске алуу менен сунушталды.

Бул окуу куралы авторлордун Ош мамлекеттик университетинин физика-математика факультетинде физика адистигиндеги студенттерге көп жылдардан бери окулган лекциялык курсунун негизинде даярдалды.

Аталган окуу куралынын даярдалышында буга чейин кыргыз тилинде жарыяланган окуу куралдарынын алгылыктуу жактары да эске алынды.

Окуу куралынын сапатын жогорулатуу боюнча сунушталган окурмандардын ой-пикирлерин авторлор жылуу сезим менен кабыл алышын билдиребиз.

Бул окуу куралынын пайда болушуна Ош мамлекеттик университетинин эксперименталдык жана теориялык физика жана жалпы физика жана физиканы окутуунун усулу кафедраларынын жалпы жамааты, өзгөчө физика-математика илимдеринин кандидаты, доцент Ж. Эгембердиевдин салымдарын баса белгилөө менен терең ыраазычылыгыбызды билдиребиз.

Китептин материалдарын басмага даярдоодо көрсөткөн жардамдары үчүн Б. Садиевага жана Н. Эралиевага терең ыраазычылыкта экенибизди билдиребиз.

I глава. МИКРООБЬЕКТТЕРДИН АБАЛЫНЫН ӨЗГӨЧӨЛҮКТӨРҮ

§ 1. Жылуулук нурдануусу. Ультрафиолеттик катастрофа. Планктын гипотезасы.

Ар кандай заттар белгилүү бир температурада өзүнөн энергияны болуп чыгарышы бизге белгилүү. Ошондой эле ар кандай затка белгилүү бир энергиядагы электромагниттик толкун келип түшсө, ал энергиянын бир бөлүгүн жутат.

Заттардын жылуулук нурдануусунда заттын жылуулук кыймылынын энергиясы нурданган электромагниттик толкундун энергиясына айланат. Ал эми тескерисинче зат жарык нурларын жуткан кезде жарык нурларынын энергиясы заттын жылуулук энергиясына айланат.

Бул эки учурда тең, б.а. заттардын жылуулук менен жарык энергияларынын бири-бирине айланышы ал заттарды түзгөн майда бөлүкчөлөрдүн (осцилляторлордун) термелүүсү аркылуу аткарылат.

Мына ошондуктан, заттардын нур чыгаруу жөндөмдүүлүгү менен нур жутуу жөндөмдүүлүгү өз ара бири-бири менен байланышкан. Немец физиги Г.Р.Кирхгоф (1860) бул байланышты аныктаган.

Берилген температурада ар кандай заттын нур чыгаруу жөндөмдүүлүгүнүн $e_{\lambda T}$ анын нур жутуу жөндөмдүүлүгүнө $a_{\lambda T}$ болг· : катышы туруктуу чоңдук болот жана ал температурадагы абсолюттук кара заттын нур чыгаруу жөндөмдүүлүгүнө барабар.

$$\frac{e_{\lambda T1}}{a_{\lambda T1}} = \frac{e_{\lambda T2}}{a_{\lambda T2}} = const \,. \qquad (1.1.1).$$

Эгерде абсолюттук кара заттын нур чыгаруу жөндөмдүүлүгүн $E_{\lambda T}$, ал эми нур жутуу жөндөмдүүлүгүн $A_{\lambda T}$ деп белгилесек, анда $A_{\lambda T} \approx 1$ болгондуктан

$$\frac{e_{\lambda T}}{a_{\lambda T}} = \frac{E_{\lambda T}}{A_{\lambda T}} = E_{\lambda T} = const \,,$$

$$e_{\lambda T} = a_{\lambda T} E_{\lambda T}. \qquad (1.1.2).$$

Коюлган маселени жөнөкөйлөтүү үчүн Г.Р.Кирхгоф “абсолюттук кара зат” деген түшүнүктү кийирген. Ал келип түшкөн ар кандай толкун узундуктагы жарык нурларын өзүнө жутат. Жаратылышта “абсолюттук кара зат” жок. Бирок ага жакындашкан заттар бар.

Практикалык жактан абсолюттук кара заттын модели болуп, кичинекей жылчыкчалуу туюк идиштеги көңдөйчө эсептелет.

Мындай кызытылган туюк идиштин жылчыкчасынан чыккан нурдануунун энергиясы абсолюттук кара заттын энергиясына жакын болот.

Эгерде нурдануу толкундук жаратылышка ээ деп эсептесек, анда абсолюттук кара заттын нурдануусун ал затты түзгөн *гармоникалык осциллятордун* сызыктуу термелүүсүнүн натыйжасы катарында кароого мүмкүн.

Мына ошентип, ар кандай заттын нур чыгаруу жөндөмдүүлүгүн изилдөө абсолюттук кара заттын нур чыгаруу жөндөмдүүлүгүн изилдөөгө алып келген.

Мына ушундай көз караштын негизинде абсолюттук кара заттын нурдануусунун жалпы интегралдык энергиясынын температурадан көз карандылыгын эксперименталдык жол менен Стефан (1878), ал эми теориялык түрдө Больцман (1884) келтирип чыгарышкан:

$$E_T=\sigma T^4, \qquad (1.1.4).$$

Мында σ - Стефан-Больцмандын турактуулугу.

Немец физиги Вин нурдануу процессин термодинамикалык тең салмактуулукта карап, нурдануу энергиясын толкун узундугунун 5-чи даражасына тескери пропорциялаш экендигин көрсөткөн:

$$E_{\lambda T}=\frac{f(\lambda T)}{\lambda^5}. \qquad (1.1.5).$$

Мында $f(\lambda T)$ функция бул толкун узундук менен абсолюттук температурасынын көбөйтүндүсүнүн функциясы.

Бул функциянын маанисин Вин төмөнкүдөй аныктаган:

$$f(\lambda T)=\alpha e^{-\frac{\beta}{\lambda T}}. \qquad (1.1.6).$$

Анда, (1.1.5) формуласынан

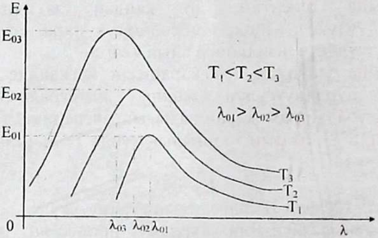
$$E_{\lambda T}=\frac{\alpha}{\lambda^5}e^{-\frac{\beta}{\lambda T}}. \qquad (1.1.7).$$

Бул формулада α жана β айрым турактуу сандар. Виндин (1.1.7) теңдемеси α жана β нын белгилүү маанилеринде кыска толкундар үчүн эксперименталдык жол менен алынган нурдануунун энергиясынын маанилери менен дал келген. Бул формуладан көрүнгөндөй заттын нур чыгаруу жөндөмдүүлүгүнүн максимумуна туура келген толкун узундук λ_0 заттын абсолюттук температурасы T менен төмөнкүдөй байланышкан:

$$\lambda_0 T=в. \qquad (1.1.8).$$

Бул формулада *в*- Виндин турактуулугу, λ_0 - энергиянын максимум маанисине туура келген толкун узундугу.

Бул формуладан көрүнгөндөй нурдануу энергиясынын максималдык маанисине туура келген толкун узундугунун ал заттын температурасына болгон көбөйтүндүсү туруктуу чоңдук болот. Заттын температурасын жогорулаткан учурда энергиянын максималдык маанисине туура келген толкун узундук кыска толкун жакка карай жылат. Бул закон *Виндин жылыш закону* деп аталат. Виндин жылыш закону график түрүндө 1.1.1-сүрөттө келтирилген.



1.1.1 – сүрөт

Англиялык физиктер Рэлей жана Джинс классикалык электродинамиканын жана статистикалык физиканын закондоруна таянып, жогорку (1.1.5) формуладагы $f(\lambda T)$ функциянын маанисин келтирип чыгарышкан:

$$f(\lambda T)=2\pi ck\lambda T. \qquad (1.1.9).$$

Анда (1.1.5) формуласынан төмөнкү формула алынат.

$$E_{\lambda T}=\frac{2\pi ck\mathrm{T}}{\lambda^4}. \qquad (1.1.10).$$

Рэлей-Джинстин формуласындагы алынган теориялык маанилери эксперименталдык график менен узун толкундар үчүн гана дал келген. Бирок бул закондун негизинде алынган жыйынтык нурдануунун энергиясы $\lambda\to 0$ болгондо кескин жогорулап, чексизге чейин умтулат. Чындыгында тажрыйбадан аныкталгандай абсолюттук кара зат бирдик убакыттын ичинде чектүү сандагы энергияны гана чыгарат, б.а. кыска толкундар үчүн тажрыйба менен классикалык теориянын ажырымы байкалат (1.1.2-сүрөттү караңыз).

Кыска толкундар үчүн теория менен эксперименттин дал келбестиги физикада *"ультрафиолеттик катастрофа"* деген ат менен белгилүү болгон жана ал жарыктын толкундук жаратылышы жөнүндөгү теориянын кемчиликке ээ экендигин көрсөткөн.

Бул карама-каршылыктан чыгуунун жолун М.Планк (1900) сунуш кылган.

1.1.2 – сүрөт

Планктын гипотезасы боюнча затты түзгөн гармоникалык осцилляторлор жарык нурларын үзгүлтүксүз энергияга ээ болгон электромагниттик толкун катарында эмес, дискреттүү энергияга ээ болгон квант катарында чыгарышат. Ар бир кванттын энергиясы

$$\varepsilon = \hbar\omega = \frac{h}{2\pi}\cdot 2\pi\nu = h\nu \qquad (1.1.11).$$

Бул формуладагы $\hbar$ - Планктын турактуулугу.

$$\hbar=1{,}05\cdot10^{-34}\ Дж\cdot С=1{,}05\cdot10^{-27}\ эрг\cdot С.$$

Анын бирдигин чыгарсак

$$[h]=\frac{[\varepsilon]}{[\nu]}=Дж\cdot C \,. \qquad (1.1.12).$$

Мындай өлчөмдүн чоңдугу "убакыт-аракет" деген атты алган жана ал аракеттин бирдиги болот, ал эми $\hbar$ - аракеттин кванты.

Мына ушул гипотезанын негизинде Планк абсолюттук кара заттын нурдануу энергиясынын $E_{\lambda T}$ толкун узундугуна карата бөлүштүрүлүшүн теориялык түрдө келтирип чыгарган:

$$E_{\lambda T}=\frac{2\pi\hbar c^2}{\lambda^5}\cdot\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1} \,. \qquad (1.1.13).$$

Бул формулада экспоненциалдык мүчөнүн бөлчөктүн бөлүмүндө болушу $\lambda\to0$ болгон учурда энергиянын нөлгө умтулушуна алып келет. Планктын формуласы тажрыйбалык жол менен алынган жыйынтык менен дал келген (1.1.2-сүрөт) жана абсолюттук кара зат дискреттүү энергияга ээ болгон жарык кванттарын нурданта тургандыгын көрсөткөн.

(1.1.13) формуланын негизинде Стефан-Больцмандын, Виндин жана Рэлей-Джинстин формулалары алынат. Мына ошентип, Планктын гипотезасы классикалык физикадагы көз караштан

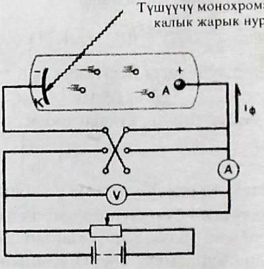
айырмаланган жана кванттык механиканын ачылышына алып келген алгачкы гипотеза жана кванттык теориянын башталышы болгон.

Классикалык физика боюнча бардык чоңдуктар - энергия, импульс, аракет үзгүлтүксүз өзгөрөт.

§2. Фотоэффект кубулушу. Эйнштейндин гипотезасы.

1. *Фотоэффект кубулушу.* 1887-жылы Г.Герц Максвеллдин электромагниттик талаалар теориясынын негизинде электромагниттик толкундарды изилдеп жатып, кокусунан *фотоэлектрдик эффектти* ачкан. Электромагниттик нурдануунун таасиринин натыйжасында заттан терс заряддалган бөлүкчөлөрдүн (электрондордун) бөлүнүп чыгышы *фотоэффект кубулушу* деп аталган.

1.2.1 – сүрөттө жарык нурларынын таасиринин натыйжасында байкалган фотоэффект кубулушун изилдөөчү куралдын схемасы көрсөтүлгөн.



1.2.1 - сүрөт

Фотоэффект кубулушун алгачкы изилдөөчүлөр болуп, германиялык окумуштуу Ф. Лежандр, орус окумуштуусу А.Г. Столетов эсептелет. А.Г. Столетов фотоэффект кубулушунун төмөнкүдөй закон ченемдүүлүктөрүн ачкан:

1) Убакыт бирдигинин ичинде бөлүнүп чыккан фотоэлектрондордун саны жарыктын интенсивдүүлүгүнө түз пропорциялаш, б.а.

$$i_{Ф.Н.} = кФ_\lambda. \quad (1.2.1).$$

Фототоктун каныккан мааниси жарыктын агымына түз пропорциялаш.

2) Фотоэлектрондордун кинетикалык энергиясы жарыктын интенсивдүүлүгүнөн эмес, анын жыштыгынан көз каранды.

3) Ар кандай зат үчүн белгилүү бир толкун узундуктан жогору болгон толкун узундуктагы жарык нурлары менен нурдантуу фотоэффект кубулушунун пайда болушуна алып келбейт, б.а. фотоэффект кубулушу кызыл чекке ээ.

4) Фотоэффект кубулушу инерциалдуу эмес, б.а. жарык нуру металлга келип түшөр замат эле фотондор металлдан бөлүнүп чыгат.

Алгачкы учурда классикалык физиканын закон ченемдүүлүгүнүн негизинде фотоэффект кубулушун төмөндөгүчө түшүндүрүүгө аракет кылышкан.

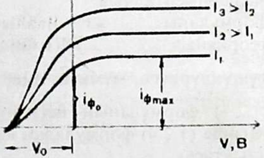
Бизге белгилүү ар кандай электромагниттик толкун электрдик жана магниттик түзүүчүгө ээ. Белгилүү бир жыштыктагы электромагниттик толкун металлга келип түшкөндө ал металлдагы электронду "термелүү" кыймылына келтирет. Термелүү резонанстык мааниге жеткенде электрон сыртка бөлүнүп чыгат, б.а. фотоэффект кубулушу байкалат. Жарык агымынын интенсивдүүлүгү канчалык чоң болсо, бирдик убакыттын ичинде металлдан бөлүнүп чыккан электрондордун саны дагы ошончолук көп болот. Классикалык физиканын закон ченемдүүлүгүнүн негизинде фотоэффект кубулушунун пайда болушу мына ошентип түшүндүрүлгөн. Бирок фотоэффект кубулушунун закон ченемдүүлүктөрүн классикалык физиканын негизинде толук, так түшүндүрүүгө мүмкүн эмес.

Толкундук көз караштын негизинде электрондордун аргасыз термелүүсүнүн амплитудасы (А) келип түшкөн электромагниттик толкундун электр талаасынын чыңалышына (Е) түз пропорциялаш, б.а. $A \sim E$. Ал эми экинчи жактан жарык агымынын интеңсивдүүлүгү электромагниттик талаанын чыңалышынын квадратына түз пропорциялаш, б.а. $I \sim E^2$.

Анда толкундук теориянын негизинде жарык агымынын интеңсивдүүлүгүнүн жогорулашы менен учуп чыккан электрондордун ылдамдыгы (кинетикалык энергиясы) жогорулашы керек.

Тажрыйбада аныкталгандай фотоэлектрондордун ылдамдыгы, (кинетикалык энергиясы) келип түшкөн нурдун интенсивдүүлүгүнөн эмес, анын жыштыгынан көз каранды.

2. Фотоэффект кубулушундагы фототоктун вольтампердик мүнөздөмөсү. Баштапкы пластинкага чыңалуу бербеген учурда дагы чынжырда фототок жүрөт. Бул учур белгилүү бир кинетикалык энергияга ээ болгон электрондор алгачкы мезгилде эле пайда боло тургандыгын көрсөтөт. Чынжырдагы чыңалууну көбөйтө



1.2.2 – сүрөт

баштасак фототок да жогорулайт да, белгилүү бир мааниге жеткенде чыңалууну андан ары жогорулатуу фототоктун көбөйүшүнө алып келбейт, б.а. *фототок каныгуу* абалына келет (1.2.2-сүрөт). Бул учурда металлдан (катоддон) бөлүнүп чыккан бардык электрондор анодко (А) жетет. Чынжырдагы фототоктун маанисин көбөйтүү үчүн жарыктын интеңсивдүүлүгүн көбөйтүү керек (1.2.2 – сүрөттү караңыз).

Түшкөн нурдун интенсивдүүлүгүн жогорулаткан кезде *каныгуу тогу* жогорулайт (электрондордун саны жогорулайт). Ал эми *электрондордун кинетикалык энергиясы* өзгөрүлбөйт.

Тескерисинче, чынжырдагы фототокту жок кылуу үчүн чынжырга тескери потеңциал (чыңалуу) беришибиз керек.

Бул учурда электрондордун кинетикалык энергиясы

$$\frac{m\vartheta^2}{2} = eU_{\acute{k}} \qquad (1.2.2).$$

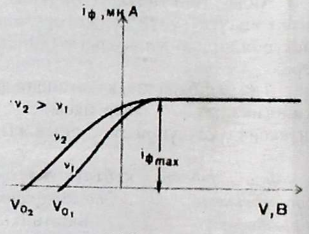
Тажрыйбадан белгилүү кармоочу потеңциалдын мааниси $U_к$ жарыктын жыштыгынан төмөнкүдөй көз каранды

$$U_к = к\nu - U_0 \qquad (1.2.3).$$

Мында к - бардык материалдар үчүн бирдей болгон турактуу сан, ал эми U_0 - ар кандай материалдар үчүн ар түрдүү мааниге ээ болгон чоңдук. Анда электрондун кинетикалык энергиясы

$$\frac{m\vartheta^2}{2} = ek\nu - eU_0 \qquad (1.2.4).$$

Эгерде түшкөн нурдун интенсивдүүлүгүн турактуу кармап, анын жыштыгын өзгөртсөк, *учуп чыккан электрондордун саны* өзгөрүлбөйт, алардын *кинетикалык энергиясы* жогорулайт, б.а. кармоочу потенциалдын мааниси өсөт. Мындай учур 1.2.3 – сүрөттө көрсөтүлгөн.



1.2.3 – сүрөт

Мына ушул эксперименталдык формуланы классикалык теориянын негизинде түшүндүрүүгө мүмкүн эмес. Качан гана $\frac{m\vartheta^2}{2} \geq 0$ болгон учурда (1.2.4) формуланын негизинде фотоэффект кубулушу байкалат. Мында (1.2.4) формуладан $ke\nu - eU_0 \geq 0$ болот. Жарыктын жыштыгын аныктасак,

$$\nu \geq \frac{U_0}{k} \text{ же } \nu_0 = \frac{U_0}{k}. \qquad (1.2.5).$$

Жарыктын жыштыгы менен ага туура келген толкун узундук λ_0 арасындагы байланыштын негизинде

$$\lambda_0 = \frac{\hbar c}{U_0}. \qquad (1.2.6).$$

(1.2.5) жана (1.2.6) формулаларындагы ν_0 жана λ_0 - фотоэффект кубулушунун "кызыл чегинин" маанилери болушат.

Фотоэффект кубулушунун "кызыл чеги" ар кандай металлдар үчүн ар кандай мааниге ээ.

М:	Цезий	272 нм.	Цинк	372 нм.
	Натрий	540 нм.	Күмүш	270 нм.
	Алтын	265 нм.		

Ал эми классикалык теория боюнча фотоэффект кубулушу кызыл чекке ээ болушу мүмкүн эмес.

Ошондой эле фотоэффект кубулушунун инерциалдуу эмес экендигин да классикалык физиканын негизинде түшүндүрүүгө мүмкүн эмес. Классикалык көз караштын негизинде аныкталган фотоэффект кубулушунун кечигүүсүнүн мааниси эксперименттеги аныкталган эн чоң мааниден бир кыйла чоң.

3. Эйнштейндин гипотезасы. Фотоэффект кубулушунун закон ченемдүүлүктөрүн түшүндүрүү үчүн Эйнштейн классикалык физиканын көз карашынан айырмалуу болгон *жарыктын кванттык түзүлүшү жөнүндөгү гипотезаны* сунуш кылган.

Эйнштейндин гипотезасы боюнча металлдарга келип түшкөн жарык нурлары электромагниттик толкун түрүндө үзгүлтүксүз эмес дискреттүү энергияга ээ болгон квант түрүндө жутулат. Ар бир кванттын же фотондун энергиясы

$$E_\Phi = \hbar\omega = h\nu. \qquad (1.2.7).$$

Бул формулада ħ - Планктын турактуулугу бизге белгилүү $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, ал эми $\omega = 2\pi\nu$ болот.

Эйнштейндин гипотезасынын жардамында фотоэффект кубулушу төмөндөгүчө түшүндүрүлөт. Жарык фотону металлдагы электрон менен кагылышканда ага өзүнүн энергиясын толук берет. Эгерде берилген энергия жетишерлик чоң болсо, бул энергиянын бир бөлүгү металлдан электронду бөлүп чыгаруу үчүн сарп кылынат, ал эми экинчи бөлүгү бөлүнүп чыккан электронго кинетикалык энергияны берүү үчүн сарп кылынат. Мына ошентип, фотоэффект кубулушу үчүн энергиянын сакталуу закону аткарылат.

$$\hbar\omega = h\nu = A + \frac{m\vartheta^2}{2} \qquad (1.2.8).$$

(1.2.7) жана (1.2.8) формулалар фотоэффект кубулушунун негизги формулалары. (1.2.8.) – формуласынан электрондун кинетикалык энергиясын аныктасак,

$$\frac{m\vartheta^2}{2} = h\nu - A \qquad (1.2.9).$$

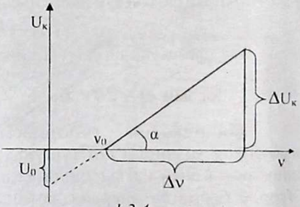
Бул формуладан көрүнгөндөй фотоэлектрондордун кинетикалык энергиясы жарыктын жыштыгынан көз каранды болот жана ал (1.2.4) - эксперименталдык формула менен дал келет. Ушундай эле жол менен фотоэффект кубулушунун кызыл чегин түшүндүрүүгө болот. (1.2.9)-формуладан $\frac{m\vartheta^2}{2} \geq 0$ болсо, анда $h\nu - A \geq 0$ же $\nu \geq \frac{A}{h}$ болот. Бул формуладан $\nu_0 = \frac{A}{h}$ *же* $\lambda_0 = \frac{hc}{A}$.

Бул алынган теориялык формула жогоруда алынган эксперименталдык (1.2.6) формуласы менен дал келет.

Ошондой эле фотоэффект кубулушунун инерциалдуу эмес экендигин дагы жарыктын кванттык түзүлүшүнүн негизинде түшүндүрүүгө болот. Фотоэффект кубулушунун кечигүү убактысы кванттык гипотеза боюнча фотон менен электрондун кагылышуусунун натыйжасында электрондун металлдын бетине чыкканга чейинки убакытка барабар. Бул убакыт өтө кичинекей жана эксперимент менен дал келген.

4. Эйнштейндин гипотезасынын эксперименталдык далили.

Эйнштейндин гипотезасын тажрыйба жүзүндө Милликен (1914-ж.) жана орус физиктери Прилежаев жана Лукирский (1949-ж.) текшеришкен. Алар токтотуучу потенциалдын металлга келип түшкөн нурдун жыштыгынан көз карандылыгын аныкташкан. (1.2.4-сүрөттөн караңыз).



1.2.4 – сүрөт

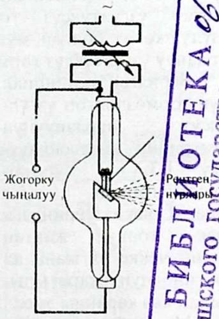
Бул көз карандылык төмөнкүдөй өзгөчөлүктөргө ээ. Биринчиден, токтотуучу потенциал түшкөн нурдун жыштыгынан сызыктуу көз каранды. Экинчиден, ар башка металлдар үчүн бул көз карандылык бири-биринен айырмаланышат, бирок өз ара параллель жайланышат.

$U_з=f(\nu)$, $U_0=\frac{A}{e}$ - электрондун чыгуу жумушу.

Алынган графиктен көрүнгөндөй бурчтун тангенсин аныктасак $\frac{\Delta\nu}{\Delta U_3}=tg\alpha$ болот. Ал эми экинчи жактан жогоруда теориялык жол менен аныктагандай $tg\alpha=\kappa$. Анда $\frac{h}{e}=\kappa$ же $h=e\kappa$ болот. Бул эксперименталдык жол менен аныкталган h чоңдугунун мааниси Планктын турактуулугу менен дал келет.

§3. Рентген нурлары.

Рентген нурлары өтө кыска толкундуу электромагниттик нурдануу болуп эсептелет. 1.3.1 – сүрөттө рентген түтүкчөсүнүн схематикалык сүрөттөлүшү көрсөтүлгөн. Мында кызыган катоддон термоэлектрондор бөлүнүп чыгып, катод менен аноддун арасына коюлган жогорку чыңалуудагы потенциалдын айырмасынын натыйжасында жогорку ылдамдыкка чейин күчөтүлөт. Мындай жогорку ылдамдыктагы электрондор анодко келип тийгенде алардын ылдамдыгы кескин төмөндөйт.



1.3.1 – сүрөт

Ядронун кулондук талаасы менен электрондордун аракет этүүсүнүн натыйжасында алардын ылдамдыгынын кескин төмөндөшү 1.3.2 – сүрөттө көрсөтүлгөн. Классикалык электродинамикалык теориянын натыйжасында ылдамдыгы кескин төмөндөгөн заряддалган бөлүкчө (электрон) тескери ылдамданууга ээ болуп, өзүнөн кыска толкундагы электромагниттик нурларды, б.а. рентген нурларын бөлүп чыгарышы керек.

1.3.2 – сүрөт

Мындай жогорку ылдамдыктагы электрондор

БИБЛИОТЕКА Ошского государственного университета ИНВ № 894724

БИБЛИОТЕКА Ошского государственного университета ИНВ № 884657

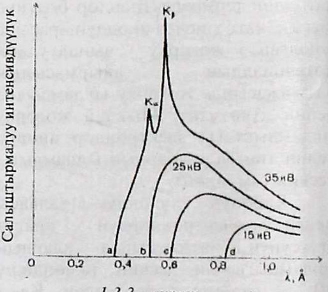
тормоздолгон кезде пайда болгон нурдануу *тормоздук нурдануу* деген атты алган. Электрон тормоздолгон кезде кинетикалык энергиянын өзгөрүлүшүнүн натыйжасында пайда болгон энергия рентген нурларынын (фотондун) энергиясына айланат, б.а.

$$h\nu = E_1 - E_2 \qquad (1.3.1).$$

Мында E_1 жана E_2 – электрондун баштапкы жана акыркы кинетикалык энергиялары.

Электромагниттик теориянын негизинде электрон тормоздолгон мезгилде *үзгүлтүксүз* нурданууну пайда кылышы керек. Ал эми кванттык теориянын негизинде ар бир кагылышуу мезгилинде $h\nu$ энергияга ээ болгон бир гана фотон пайда болушу керек жана ар бир кагылышууда пайда болгон фотондор бири-биринен айырмаланышат.

1.3.3 – сүрөттө рентген нурларынын спектри берилген. Бул сүрөттөн көрүнгөндөй электрондордун белгилүү бир энергиясынан баштап үзгүлтүксүз тормоздук нурдануудан башка кескин түзүлүшкө ээ болгон мүнөздөөчү нурдануу да пайда болот. Бул нурдануу үзгүлтүксүз тормоздук нурданууга кошулат.



1.3.3 – сүрөт

Берилген потенциал үчүн тормоздолгон үзгүлтүксүз нурдануунун спектринин интенсивдүүлүгү 1.3.3 – сүрөттө көрсөтүлгөндөй а,б,с жана d чекитттериндеги кыска толкун жактан кескин чекке ээ жана ал чек аноддун жаратылышынан көз каранды эмес.

Мындай тажрыйбада аныкталган тормоздук нурдануудагы кескин чектин пайда болушун классикалык теория түшүндүрө албайт. Планктын кванттык гипотезасынын негизинде энергиянын төмөндөшү каалагандай өзгөрүлбөй энергетикалык чоңдугу $h\nu$ болгон квант түрүндө төмөндөшү керек. Бирок мындай ар бир кванттын максималдык энергиясы жогорку ылдамдыктагы электрондордун энергиясынан чоң болушу мүмкүн эмес, б.а.

$$h\nu_{max} = E_{max} = eU \qquad (1.3.2).$$

Мында E_{max} – электрондун максималдык кинетикалык энергиясы, U – электрондорду күчөтүүчү потенциалдар айырмасы.

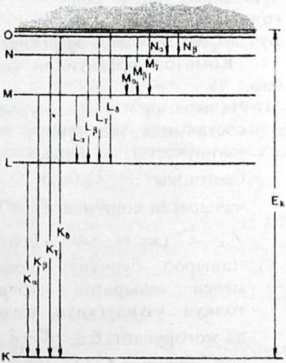
Бизге белгилүү $\nu = \frac{c}{\lambda}$ экендигин эске алсак, анда (1.3.2) формуладан төмөнкү алынат:

$$\frac{hc}{\lambda_{min}} = eU \quad (1.3.3).$$

Чектик жыштык (толкун узундук) эксперименталдык жол менен так аныкталгандыктан бул жол Планктын турактуулугун (h) эксперименталдык метод менен аныктоонун эң ыңгайлуу жолу болуп эсептелет.

Мүнөздөөчү сызыктуу спектрдин пайда болушу жана жайланышы аноддун жаратылышынан көз каранды. Бул спектрдин пайда болушу анод жасалган материалдын атомдорунун ички түзүлүшү менен байланышкан. Атомдогу электрондор ядронун айланасында белгилүү бир катмарларда жайланышкан. Ядрого жакын жайланышкан К катмарындагы электрондор ядро менен бекем байланышкан. Кийинки L, M, N ж.б. катмарлардагы электрондор да ядро менен белгилүү бир деңгээлде байланышып, өзүнчө электрондук катмарларды түзүшөт.

Жогорку ылдамдыктагы электрондор анодко келип тийип, атомдун ички К катмарындагы электронду сүрүп чыгарса, бул катмардагы бош орунга сырткы L же M катмарларынан электрон өтөт. Мындай электрондук өтүүдө пайда болгон энергия мүнөздөөчү рентген нурунун энергиясы болот. Ошондой эле спектралдык өтүүлөр башка катмарлардын арасында да болушу мүмкүн (1.3.4 – сүрөттү караңыз). Мына ошентип рентген нурунун K, L, M – сериялары пайда болот.



1.3.4. – сүрөт

Жогоруда аныкталгандай тормоздук жана мүнөздөөчү рентген нурларынын өзгөчөлүктөрүн классикалык теориянын негизде түшүндүрүүгө мүмкүн эмес. Бул өзгөчөлүктөрдү классикалык теориядан айырмаланган рентген нурларынын кванттык (фотондук) теориясынын негизинде гана түшүндүрүүгө мүмкүн.

§4. Комптон эффекти. Рентген нурунун чачыроосу.

Фотоэффект кубулушунда жарык нурланынын энергиясы дискреттүү кванттык мүнөзгө ээ болуп, фотон түрүндө байкалса, рентген нурлары да ушундай эле дискреттүү энергияга жана испульска ээ болуп, корпускулярдык фотондук касиетке ээ экендигин немец физиги Комптон (1923-ж.) байкаган.

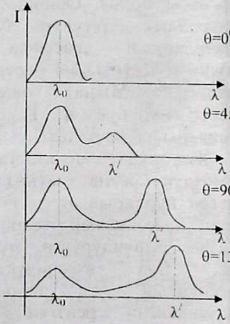
Жыштыгы ω_0 болгон рентген нурлары кристаллдарга келип түшкөндө, ал нурлар белгилүү бурч боюнча чачырашат.

Түшкөн нурдун толкун узундугу λ_0 (жыштыгы ω_0) болсо, анда кристаллдык заттан өткөндөн кийинки чачыраган нурлардын составында толкун узундуктары λ' (жыштыктары ω') болгон нурлардын пайда болгондугу аныкталган. Бул эффект *Комптон эффекти* деген атты алган.

1.4.1 – сүрөт

Комптон эффектинин төмөндөгүдөй закон ченемдүүлүктөрү бар:

1) Чачыраган нурлардын составында эки түрдүү толкун узундуктагы нурлар бар, баштапкы $\lambda_0 (\omega_0)$ жана чачыраган кошумча $\lambda' (\omega')$ жана $\lambda_0 < \lambda'$ (же $\omega' > \omega_0$) болот.
2) Чачыроо бурчунун чоңоюшу менен чачыраган нурлардын толкун узундугунун өзгөрүшү да жогорулайт, б.а. $\lambda' - \lambda_0 = \Delta\lambda$ чоң мааниге ($\Delta\lambda \to max$) $\theta = \pi$ болгондо жетет.
3) Чачыроо бурчунун чоңоюшу менен чачыраган нурдун интенсивдүүлүгү жогорулайт, ал эми баштапкы нурдун интенсивдүүлүгү төмөндөйт.



1.4.2 – сүрөт

Рентген нурунун чачыроо мезгилинде толкун узундуктун өзгөрүлүш чоңдугу $\lambda' - \lambda_0 = \Delta\lambda$ менен чачыроо бурчу θ нын арасындагы байланыш тажрыйба жүзүндө төмөнкүдөй экендиги аныкталган:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0 = \Lambda \cdot \sin^2 \frac{\theta}{2} ; \qquad (1.4.1).$$

Λ - Комптон турактуулугу.

Классикалык физиканын закон ченемдуулуктөрүнүн негизинде Комптон эффекттин жана анын закондорун түшүндүрүүгө мүмкүн эмес. Ал көз караш боюнча ар кандай затка белгилүү бир ω_0 жыштыктагы электромагниттик толкун келип түшсө, анда ал заттагы "бош" электрондорду ушундай эле жыштыктагы термелүүгө алып келүүсү керек. Ал эми термелген электрондор жыштыгы термелүү жыштыгына барабар болгон электромагниттик толкунду бөлүп чыгарышы керек. Мына ошондуктан чачыраган нурдун жыштыгы дагы келип түшкөн нурдун жыштыгындай эле ω_0 болушу керек.

Бирок тажрыйбада аныкталган нурлардын жыштыктары ар түрдүү жана чачыроо бурчунун өзгөрүлүшү менен чачыраган нурлардын жыштыгы да өзгөрүлүп турат.

Комптон эффектин жана анын закондорун рентген нурунун кванттык түзүлүшү жөнүндөгү гипотезанын негизинде гана түшүндүрүүгө мүмкүн.

Комтондун гипотезасы боюнча *рентген нурлары* – ар кандай бөлүкчөлөрдөй эле *белгилүү бир энергияга жана импульска ээ болгон фотондордун агымы.* Рентген фотондору электрон менен серпилгичтүү кагылышуусунун натыйжасында таралуу багытын өзгөртүп чачырайт.

Рентген фотонунун энергиясы:

$$E_ф = \hbar\omega = h\nu . \qquad (1.4.2).$$

Салыштырмалуулуктун теориясынын негизинде фотондун энергиясы:

$$E_ф = m_ф c^2 . \qquad (1.4.3).$$

Фотондун импульсун аныктай турган болсок,

$P_ф = m_ф \cdot c = \frac{\hbar\omega}{c}; \quad \overline{P_ф} = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar\overline{K},$ мында $\overline{K} = 2\pi/\lambda$ - толкундук вектор. Анда фотондун импульсу

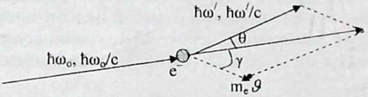
$$\overline{P_ф} = \hbar\overline{K} . \qquad (1.4.4).$$

Энергиясы $\hbar\omega_0$ жана импульсу $P_ф = \frac{\hbar\omega_0}{c}$ болгон фотон кристаллга келип түшкөндө, андай фотондор заттын атомдорунун "сырткы"

электрондору менен кагылышып өзүнүн энергиясынын жана импульсунун бир бөлүгүн бош электронго берет да, баштапкы таралуу багытын өзгөртөт. Бул учурда электрон релятивисттик импульска ээ болот. Рентген нуру электрон менен кагылышканда чачыроо багытын гана өзгөртпөстөн, энергиясын жана жыштыгын да өзгөртөт. Фотондун баштапкы энергиясы $\hbar\omega_0$, ал эми жыштыгы ω_0 болсо, кагылышкандан кийинки энергиясы $\hbar\omega'$, жыштыгы ω' болуп, энергиясы жана импульсу төмөндөйт, б.а.

$$\hbar\omega_0 > \hbar\omega' \quad \text{жана} \quad \frac{\hbar\omega_0}{c} > \frac{\hbar\omega'}{c} \tag{1.4.6}$$

Чачыроо бурчу канчалык чоң болсо, электрон алган импульс ошончолук чоң болот. Мына ошондуктан жыштыктын өзгөрүшү дагы ошончолук чоң болот.



1.4.3 - сүрөт

Энергиянын жана импульстун сакталуу законунун негизинде чачыроо жыштыгынын өзгөрүшүнүн (толкун узундугунун өзгөрүшүнүн) чачыроо бурчунан көз карандылыгы теориялык түрдө келтирилип чыгарылган. Ал көз карандылык төмөнкүдөй:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0 = 2\frac{\hbar}{m_0 c}\cdot\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{1.4.7}$$

Бул теориялык жол менен аныкталган формула, эксперименталдык жол менен аныкталган (1.4.1) формула менен дал келет. (1.4.1) жана (1.4.7) формулаларын салыштырып, $\Lambda = \dfrac{2\hbar}{m_0 c}$ экендигин көрөбүз жана ал *комптон толкуну* деп аталат.

Комптон чачыроосунда чачыраган нурлардын составында жыштыгы ω_0 болгон баштапкы толкун узундуктагы нурлардын байкалышы төмөндөгүчө түшүндүрүлөт.

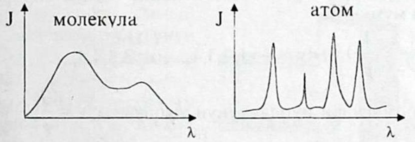
Бул учурда рентген фотондору сырткы "бош электрондор" менен кагылышпастан, ядро менен байланышкан ички электрон менен кагылышат. Кагылышуу серпилгичтүү болгондуктан фотон ички электронго (атомго) өзүнүн энергиясынын бир бөлүгүн бербейт. Анда (1.4.7) формуладагы m_0 - атомдун массасынын ролун аткарат. Атомдун массасы электрондордун массасынан миңдеген эсе чоң болгондуктан кагылышуу учурунда фотондун толкун узундугунун өзгөрүүсү $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_0$ өтө кичинекей болот. Чачыраган

нурлардын толкун узундугу бул учурда түшкөн нурлардын узундуктары менен дээрлик дал келет.

Кагылышуунун натыйжасында белгилүү бир импульсту алган “бош электрондор” релятивисттик кыймылга ээ болот. Мындай кыймылга ээ болгон электрондорду “серпилген электрондор” (электроны отдачи) деп аташат. Тажрыйба жүзүндө рентген фотондору менен электрон кагылышкан учурда серпилген электрондордун пайда болушун америкалык физиктер Боте жана Вильсон, орус физиги Скобельцин Вильсондун камерасында байкашкан. Ошондой эле Боте жана Гейгер чачыраган фотон жана серпилген электрондун бир мезгилде пайда боло тургандыгын далилдешкен.

§5. Атомдун нурдануу спектрлери

Атомдордун жана молекулалардын нурдануу спектрлерин изилдөө алардын бири-биринен айырмачылыгын көрсөткөн. Молекулалардын спектри кескин бир чекке ээ болбогон тилкелерден турат. Ал эми атомдордун нурдануу спектри кескин сызыктардан турат (1.5.1 – сүрөттү караңыз).



1.5.1 – сүрөт

Мына ошондуктан молекулалардын спектрлерин *тилкелүү спектрлер*, ал эми атомдордун спектрлерин *сызыктуу спектрлер* деп аташат. Ар бир элементтердин атому өздөрүнө таандык болгон спектрге ээ. Мын ошондуктан спектрлери боюнча атомдорду бири-биринен ажыратууга мүмкүн. Ар бир атомдогу спектралдык сызыктарынын жайланышы бири-биринен айырмаланган, бирок белгилүү бир закон ченемдуулуккө ээ экендигин тажрыйба жүзүндө швецариялык физиктер аныкташкан. Алар суутектин атомунун нурдануу спектрлерин кеңири изилдешкен. 1885-жылы И.Бальмер суутектин атомунун нурдануусун изилдеп, спектралдык сызыктарынын көзгө көрүнгөн бөлүгү төмөнкүдөй жөнөкөй формула менен аныктала тургандыгын көрсөткөн.

$$\nu_{n2} = R(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}) \quad n=3,4,5,... \qquad (1.5.1).$$

Ал эми 1906-жылы Лайман суутектин нурдануусундагы ультракызыл бөлүгүн изилдеп, төмөнкүдөй закон ченемдүүлүктү аныктаган

$$\nu_{n1} = R(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}) \quad n=2,3,4,5,... \qquad (1.5.2).$$

Ошондой эле 1908 жылы Пашен нурдануунун инфракызыл бөлүгү үчүн төмөнкүдөй спектралдык серияны аныктаган:

$$\nu_{n3} = R(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}) \quad n=4,5,6,... \qquad (1.5.3).$$

Андан кийин нурдануунун алыскы инфракызыл бөлүктөрүндө Брэкет (1911-ж.) жана Пфунд (1913-ж.) төмөнкүдөй спектралдык серияларды аныкташкан.

$$\nu_{n4} = R(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}) \quad n=5,6,... \qquad (1.5.4).$$

$$\nu_{n5} = R(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}) \quad n=6,7,... \qquad (1.5.5).$$

Бул спектралдык серияларды төмөнкү жалпы бир формулага бириктирүүгө мүмкүн.

$$\nu = R(\frac{1}{\ell^2} - \frac{1}{n^2}) \quad \ell<n \quad \ell=1,2,3,4,..., \; n=2,3,4,5,... \qquad (1.5.6).$$

(1.5.6)-формуладан нурдануунун жыштыгы $\nu = \frac{R}{\ell^2} - \frac{R}{n^2}$ болуп эки бүтүн сандардын айырмасы катарында кароого мүмкүн. Бул бүтүн сандар $T(n) = \frac{R}{n^2}$ *жана* $T(\ell) = \frac{R}{\ell^2}$, суутектин атомунун *спектралдык терми* деп аталат. Анда суутектин атомдорунун нурдануусунун жыштыгын ар кандай бүтүн сандардын айырмасы катарында кароого мүмкүн.

$$\nu = T(\ell) - T(n) \qquad (1.5.7).$$

Атомдун нурдануусундагы бардык нурдануу жыштыктарын спектралдык термдердин комбинациясы катарында кароо *Ритцтин комбинациялык принциби* деген атты алган. Комбинациялоо принциби боюнча атомдун спектриндеги бардык сызыктар спектралдык термдердин ар кандай комбинациясынын негизинде алынышы мүмкүн. Бирок тажрыйбада комбинациялык

принциптин негизинде аныкталган бардык сызыктар жок. Себеби спектралдык термдердин айрым комбинациясына тандоо эрежесинин (правила отбора) негизинде тыюу салынган.

Спектралдык сериялардын пайда болушун жана анын закон ченемдүүлүктөрүн классикалык физиканын көз карашынын негизинде түшүндүрүүгө мүмкүн эмес. Ал үчүн жаңы көз караш, жаңы теория керек.

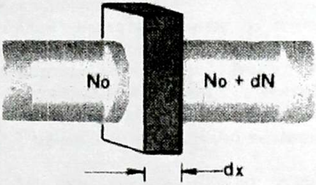
§6. Нур жутуу

Бизге белгилүү электромагниттик нурдануунун интенсивдүүлүгү төмөнкүдөй аныкталат:

$$I = N \cdot \hbar\omega = Nh\nu \qquad (1.6.1).$$

мында ħω же hν – фотондун энергиясы, $N = \frac{n}{S_{\perp} t}$ - фотондордун агымы (n – фотондордун саны, $S_{\perp}$ - нурдануунун таралуу багытына перпендикулярдуу аянт, t – убакыт).

Нурдануунун интенсивдүүлүгүнүн төмөндөшү жарык нурларынын чачыроосунун негизинде жана заттын нурду жутуусунун натыйжасында аткарылат. Жутуу коэффициенти (μ) чөйрөнүн нурдануу агымын азайтуу жөндөмдүүлүгүнүн өлчөмү катарында аныкталат.



1.6.1 – сүрөт

1.6.1-сүрөттө жутуу коэффициенти μ га болгон заттын жутуучу катмарына түшүүчү N_0 фотондордун агымы сүрөттөлгөн. Калыңдыгы dx болгон заттын катмарынан жарык агымын өтүү мезгилинде жарыктын интенсивдүүлүгүнүн төмөндөшү (фотондордун агымынын азайышы) (dN) жутуу катмарынын калыңдыгына жана түшкөн нурдун интенсивдүүлүгүнө (түшкөн фотондордун санына) түз пропорциялаш. Демек, агымдын өзгөрүшү төмөнкүдөй болот:

$$dN = -\mu N dx \qquad (1.6.2).$$

мында μ - пропорционалдуулук коэффициенти (жутуу коэффициенти). Эки жагын тең интегралдасак:

$$N = N_0 e^{-\mu x} \qquad (1.6.3).$$

N_0 – затка түшкөн нурдун интенсивдүүлүгү (түшкөн фотондордун саны).

Заттын белгилүү катмарынан өткөн нурдун интенсивдүүлүгү түшкөн нурдун интенсивдүүлүгүнө (I_0) түз пропорциялаш, анда:

$$I=I_0 e^{-\mu x} \qquad (1.6.4).$$

мында $I_0=N_0 h\nu$.

Жутуу коэффициенти (μ) жуткан заттын түзүлүшүнөн жана ошондой эле түшкөн нурдун жыштыгынан (ν) көз каранды.

Жогоруда каралган комптон-эффект, фотоэффект жана электрон-позитрондук түгөйдүн пайда болуу кубулуштарында нур жутуу процесси негизги ролду ойнойт.

Ак жарыкты бир атомдуу газ, мисалы суутек аркылуу өткөрсөк, анда *жутулуу спектри* пайда болот. Бул учурда спектрограммадагы жарык фонунда кара сызыктардан турган спектр, *жутулуу спектри* келип чыгат. Бул спектралдык сызыктардын жайланышы суутектин атомундагы нурдануу спектрлеринин спектралдык сызыктарынын жайланышы менен дал келет.

Атомдордун жутулуу спектрлеринин дискреттүүлүгүн классикалык физиканын закон ченемдүүлүктөрүн негизинде түшүндүрүүгө мүмкүн эмес. Бул өзгөчөлүктөрдү түшүндүрүү үчүн жаңы көз караш, жаңы теория керек болгон.

II глава. МИКРОБӨЛҮКЧӨЛӨРДҮН ТОЛКУНДУК КАСИЕТИ

1. Де Бройлдун гипотезасы

Жогоруда биз электромагниттик нурлардын бир эле мезгилде толкундук жана кванттык касиетине ээ экендигин аныктаганбыз, б.а. айрым кубулуштарда жарыктын толкундук касиети байкалса, ал эми айрым кубулуштарда жарыктын кванттык-фотондук касиети байкалат.

Мына ошентип микродүйнөнүн бир обьекти болгон электромагниттик (жарык, ренгтен, γ) нурлары корпускулярдык-толкундук эки илтиктүүлүккө (дуализмге) ээ.

Жарык нурлары үчүн толкундук жана корпускулярдык касиеттеринин байланышы төмөнкүдөй:

$$\varepsilon = \hbar\omega = \hbar\nu \qquad (2.1.1).$$

Фотондун импульсу

$$P_\Phi = \frac{\hbar\nu}{c} \quad \text{же} \quad P_\Phi = \frac{\hbar}{\lambda_\Phi} \qquad (2.1.2).$$

Мында $\lambda_\Phi = \frac{c}{\nu}$ - жарыктын толкун узундугу.

Экинчи бир микрообьект болгон микробөлүкчөлөр дагы толкундук касиетке ээ болуп жүрбөсүн деген божомолду биринчи жолу француз физиги Де-Бройль койуп, электрондун толкундук касиети жөнүндөгү гипотезаны сунуш кылган.

Материалдык бөлүкчөлөрдүн кванттык жана толкундук касиеттерин байланыштырган теңдемени келтирип чыгаралы. Ал теңдемелер релятивисттик инварианттык теңдемелер болушат.

Салыштырмалуулуктун теориясынан бизге белгилүү материалдык бөлүкчөнүн кыймылынын абалы төрт өлчөмдүү энергия – импульс вектору ($\vec{P}_\alpha$) менен мүнөздөлөт. Ал вектордун түзүүчүлөрү $(P_x, P_y, P_z, i\frac{E}{c})$. Ал эми экинчи жактан жалпак толкунду мүнөздөөчү төрт өлчөмдүү вектор $\vec{K}_\alpha$, анын түзүүчүлөрү $\left(\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z, i\frac{\omega}{c}\right)$ болот.

Бул эки вектордун арасындагы релятивдик-инварианттык байланыш төмөнкүдөй:

$$\frac{\vec{P}_\alpha}{\vec{\kappa}_\alpha} = \frac{P_x}{\kappa_x} = \frac{P_y}{\kappa_y} = \frac{P_z}{\kappa_z} = \frac{E}{\omega} = \hbar' \qquad (2.1.3).$$

мында $\hbar'$ - турактуу сан. Бул байланыштан төмөнкүдөй барабардыктарды алабыз:

$$\vec{P} = \hbar'\vec{K} \qquad (2.1.4).$$

$$E = \hbar'\omega \qquad (2.1.5).$$

Де-Бройль $\hbar'$-турактуу санын Планктын турактуулугуна барабар деп сунуш кылган, б.а. $\hbar' = \hbar$. Кийинки тажрыйбалар бул барабардыктын туура экендигин көрсөткөн.

Анда микробөлүкчөлөрдүн толкундук жана кванттык касиетинин байланыштырган формулалар төмөнкүдөй болот:

$$E_\delta = \hbar\omega = h\nu \qquad (2.1.6).$$

$$P_\delta = \hbar\kappa \quad \text{же} \quad P_\delta = h/\lambda_\delta \qquad (2.1.7).$$

Мында $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ - Планктын турактуулугу, ал эми $\omega = 2\pi\nu$ - айланма жыштык.

Ал эми экинчи жактан бөлүкчөнүн импульсу $P_\delta = m_\delta \vartheta_\delta$ болсо, анда

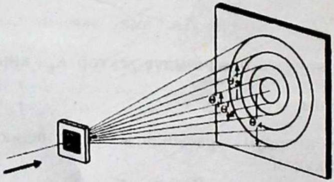
$$\lambda_\delta = \frac{\hbar}{m_\delta \vartheta_\delta} \qquad (2.1.8).$$

Мына ошентип алынган (2.1.6)-(2.1.8) – теңдемелер де-Бройлдун теңдемелери деп аталат. Бул теңдемелер бөлүкчөлөрдүн толкундук касиети менен корпускулярдык касиетинин байланышын көрсөтөт.

2. Девиссон жана Джермердин тажрыйбасы

Ал эми америкалык физиктер Х.А.Девиссон жана Л.Х.Джермер (1927-ж.) тажрыйбанын негизинде бөлүкчөлөр (электрондор) толкундук касиетке ээ экендигин далилдешкен. Алар төмөнкүдөй эки методду пайдаланышып, кристаллдардан чагылган электрондордун дифракция кубулушуна ээ экендигин байкашкан.

Биринчи методдо монокристаллга белгилүү энергиядагы

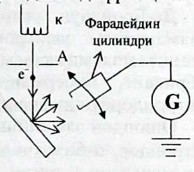


2.1.1 – сүрөт

электрондордун агымы жиберилген. Андан кийин кристаллдан чачыраган электрондор үчүн дифракциялык бурчту аныкташкан. Мындай чачыраган электрондор үчүн рентген нурунун дифракция

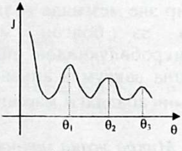
кубулушундагы Вульф-Бреггдердин формуласын пайдаланып электрондун толкун узундугун аныкташкан (2.1.1-сүрөт).

Бул тажрыйба анчалык ишенээрлик болгон эмес. Себеби, жогорку ылдамдыктагы электрондор никелдик кристаллдык торчого келип тийгенде, алардын ылдамдыгы төмөндөйт да рентген нурун пайда кылышы мүмкүн. Ал эми экрандагы дифракциялык сүрөттөлүш бул пайда болгон рентген нурунун натыйжасы болушу мүмкүн деген ойлор болгон. Бирок Девиссон-Джермердин тажрыйбасынын экинчи вариантында электрондорду кабыл алгыч катарында Фарадейдин цилиндрин колдонушкан. Фарадейдин цилиндри заряддалган электрондорду гана кабыл алат (2.1.2-сүрөт).



2.1.2 – сүрөт

Бул тажрыйбанын негизинде электрондордун дифракциялык кубулушу так аныкталган. Дифракциялык бурчтун белгилүү бир маанилеринде чынжырдагы ток максимумга ээ болгон. Бул бурчтун маанилерин рентген нурлары үчүн Вульф-Бреггдердин формуласына коюп, электрондун толкун узундугу аныкталган (2.1.3 – сүрөт).



2.1.3 – сүрөт

$$2d\sin\theta = k\lambda \qquad (2.1.9).$$

Никель кристаллынын торчосунун турактуулугу d=0,91Å, ал эми к=1 деп алып чачыроо бурчу $\theta=50^0$ болгондо, чачыраган электрондордун толкун узундугу λ_e=1,67Å болгон.

Де-Бройльдун гипотезасынын негизинде электрондун толкун узундугу

$$\lambda_e = \frac{\hbar}{m_e \vartheta_e} \qquad (2.1.10).$$

Электрондун ылдамдыгы жетишээрик чоң болбогон учурда $m_e \approx m_{oe}$ деп алууга мүмкүн. Анда электрондун кинетикалык энергиясы $\frac{m_{oe}\vartheta^2}{2} = eU$. Мында $\vartheta = \sqrt{\frac{2eU}{m_{oe}}}$

$$\lambda_e = \frac{\hbar}{m_{oe}\vartheta} = \frac{\hbar}{m_{oe}\sqrt{\frac{2eU}{m_{oe}}}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2em_{oe}}}\frac{1}{\sqrt{U}}$$

$$\lambda_e = \frac{12{,}6\,\overset{o}{A}}{\sqrt{U}} \qquad (2.1.11).$$

Эгерде U=50В болсо, λ_e=1,6Å болуп, теориялык гипотезанын негизинде аныкталган электрондун толкун узундугу λ_e мааниси тажрыйбада аныкталган λ_e маани менен дал келет.

Бул формуладан көрүнгөндөй электрон үчүн де-Бройль толкун узундугу λ_e= 0,1Å÷10Å интервалда жайланышкан жана ренгтен нурунун толкун узундугунун өзгөрүү интервалы менен дал келет.

Де-Бройлдун гипотезасы Томсон тарабынан жогорку ылдамдыктагы электрондор үчүн, Л.С.Тартаковский тарабынан төмөнкү ылдамдыктагы электрондор үчүн текшерилген. Ал эми Фабрикант, Биберман жана Сушкин (1949), ар бир айрым электрондордун дифракциялык касиетке ээ экендигин байкашкан.

Ошондой эле кийинчерээк дифракциялык касиетке протондор, нейтрондор, α-бөлүкчөлөр, атомдор, ж.б. микробөлүкчөлөр дагын ээ экендиги аныкталган.

Мына ошентип, толкундук касиетке бардык микробөлүкчөлөр ээ. Бул касиеттери боюнча микробөлүкчөлөр менен фотондун принципиалдык айырмасы жок. Мында бөлүкчөлөр да, фотон да бир эле мезгилде толкундук касиетке да, корпускулярдык касиетке да ээ болгон микрообьекттер болушат. Бирок, фотон микробөлүкчөдөн айырмаланып тынч абалдагы массага ээ эмес жана вакуумда анын ылдамдыгы $\vartheta_{\Phi} = c$, ал эми микробөлүкчөлөр тынч абалдагы массага ээ жана ылдамдыктары ар түрдүү болушат.

3. Микро жана макробөлүкчөлөрдүн толкундук касиети

Жаратылыштын закон ченемдүүлүктөрүнөн белгилүү болгондой микро- менен макрообьекттердин арасында да принципиалдык айырма жок, микро- жана макрообьекттер материянын бир түрү. Анда эмне себептен биз макрообьекттин (ыргытылган таштын, ж.б.) толкундук касиетин байкабайбыз.

Оптикадан бизге белгилүү болгондой жарык нурлары, анын толкун узундугу менен өлчөмү бирдей болгон тосколдон өткөндө гана толкундук касиети байкалат. Эгерде толкун узундугу тосколдун өлчөмүнөн бир канча кичинекей же чоң болгон учурда жарыктын толкундук касиети байкалбайт.

Мына ошондуктан геометриялык оптикада жарыктын толкундук касиети эске алынбайт. Геометриялык оптика толкундук оптиканын пределдик учуру болот.

Мына ошондой эле классикалык механика да кванттык механиканын пределдик учуру. Эгерде бөлүкчөнүн толкун узундугу анын өлчөмүнөн бир канча кичинекей болсо, кванттык механиканын кереги жок, жогоруда толкундук оптика геометриялык оптика менен алмашылгандай, кванттык механика да классикалык механика менен алмаштырылат.

Девиссон-Джермердин тажрыйбасындагы электрондун толкун узундугу кристаллдык торчонун турактуулугу менен чамалаш, мына ошондуктан дифракциялык сүрөттөлүш так байкалат.

Микробөлүкчөнүн энергиясы чоңойгондо, анын толкун узундугу кыскарат. Энергиясы 1 ГэВ чейин ылдамдатылган электрондун толкун узундугу 10^{-15}м барабар. Мындай электрондор үчүн $d>>\lambda_e$ болгондуктан, алар кристаллдык торчо аркылуу өткөндө дифракция кубулушу байкалбайт. Бирок, өлчөмү 10^{-15}м болгон обьекттерден чачыраганда бул электрондордун толкундук касиети байкалат. Мына ошондуктан ядронун структурасын изилдөө үчүн ($R\cong10^{-15}$м) жогорку ылдамдыктагы электрондор пайдаланылат.

Эми кандайдыр бир макрообьект үчүн Де-Бройль толкун узундугун аныктайлы.

М.: массасы m=1мг болгон чаңдын бөлүкчөсү $\vartheta=1$ см/с ылдамдыгы менен кыймылда болсо, анда

$$\lambda_\delta=\frac{\hbar}{m_\delta\vartheta_\delta}=\frac{6,6\cdot10^{-27}}{10^{-3}\cdot10^{-2}}=6,6\cdot10^{-18}\ см \text{ болот.}$$

Бул эсептөөдөн көрүнгөндөй эң кичинекей макрообьект болгон чаңдын бөлүкчөсү үчүн аныкталган толкун узундук анын өлчөмүнөн бир канча эсе кичинекей ($\lambda_\sigma<<d$). Мына ошондуктан мындай макробөлүкчөнүн толкундук касиетин байкоого мүмкүн эмес.

4. Де Бройль толкунунун касиети

Микробөлүкчөлөрдүн толкундук да, корпускулярдык да касиетке ээ болгон эки илтиктүүлүгү (дуализм) микродүйнө жөнүндөгү түшүнүктү түп тамырынан бери өзгөртүүгө алып келди. Бул касиет микрообьекттердин өздөрүнө таандык болгон касиет болуп эсептелет. Мына ошондуктан аларды классикалык физикада каралгандай же бөлүкчө, же толкун түрүндө кароого болбойт.

Микробөлүкчөлөр үчүн материянын толкундук же бөлүкчөлүк касиеттерин өз-өзүнчө карабастан, тескерисинче, бири-бирин толуктап турган касиет катарында кароо максатка ылайык. Мындай теория кванттык (толкундук) механика деп аталып, ал теориянын негизи болуп, де-Бройлдун көз карашы эсептелет да, микросистеманын касиетин мүнөздөөчү негизги чоңдук болуп толкундук функция эсептелет.

Оптикадан белгилүү болгондой бурчтук жыштыгы ω жана толкундук вектору $\bar{k}$ болгон жарык нурунун таралышы төмөнкү жалпак толкун менен аныкталат:

$$\psi(\vec{r},t)=Ae^{-i(\omega t-\bar{k}\bar{r})} \qquad (2.1.12).$$

Микробөлүкчөлөрдүн таралышы дагы ушундай толкун менен аныкталса, жогорку (2.1.5) – формуланы эске алып, төмөнкүнү алабыз:

$$\psi(\vec{r},t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})} \qquad (2.1.13).$$

Бул функция *толкундук функция же Де-Бройлдун жалпак толкуну* деп аталат. Кванттык механикада толкундук функцияны көбүнчө "пси-функция" деп аташат.

Микрообьекттердин абалын толкундук функция аркылуу сүрөттөө статистикалык, б.а. ыктымалдуулук мүнөзгө ээ. Толкундук функциянын квадраты толкундук функцияга көз каранды болгон чоңдуктардын ыктымалдуулугунун тыгыздыгын мүнөздөйт. Мисалы, толкундук функция убакыттан жана координаттан көз каранды болсо $\psi = \psi(x,y,z,t)$, анда $|\psi|^2 = |\psi(x,y,z,t)|^2$ бөлүкчөнүн убакыттын t моментинде мейкиндиктин x,y,z координаттары менен мүнөздөлүүчү чекитинде болуу ыктымалдуулугунун тыгыздыгын аныктайт.

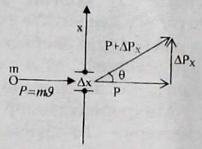
5. *Гейзенбергдин аныксыздыгы*

Микробөлүкчөнүн толкундук касиети бир убакытта бөлүкчөнүн координатын жана импульсунун ошол координат боюнча түзүүчүсүн так аныктоого мүмкүн эмес экендигине алып келет.

Мисалы: x, P_x; же y, P_y; же z,P_z

Бул чоңдуктарды бир учурда аныктаган мезгилде координаттын (Δx) жана импульстун аныксыздыгы (ΔP_x) келип чыгат жана алар өз ара бири-бири менен байланышкан.

Микробөлүкчөнүн координаты менен импульсунун аныксыздыктарынын байланышын микробөлүкчөнүн дифракция кубулушунун негизинде келтирип чыгаралы (2.1.4 – сүрөт).



2.1.4 – сүрөт

Микробөлүкчөнүн мейкиндиктеги абалын, ал бөлүкчөлөрдү жылчыкча (щель) аркылуу өткөрүү менен аныктоого мүмкүн. Анда микробөлүкчөнүн координатын, жылчыкчанын кеңдиги болгон $2\Delta x$ тактыкка чейин аныктайбыз.

Эгерде бөлүкчөнүн импульсу $P = m\vartheta$ болсо, анда бөлүкчө жылчыкчадан өткөндөн кийин жылчыкчанын чеги менен аракет этүүсүнүн негизинде анын импульсу $P+\Delta P_x$ болот. Жылчыкчанын өлчөмү канчалык кичинекей болсо, бөлүкчөнүн координатын ошончолук так аныктайбыз. Бирок бул учурда бөлүкчөнүн жылчыкчанын чети менен аракет этүүсү жогорулайт. Ал

импульстун аныксыздыгынын жогорулашына алып келет. Мына ошентип микробөлүкчөнүн координатын так аныктаган учурда, анын импульсун так аныктай албайбыз.

θ-дифракциялык бурч болсо, анда дифракциялык минимумдун негизинде $2\Delta x \sin\theta = \kappa\lambda$, $\kappa = 1,2,3,\ldots$.

Экинчи жактан $\lambda = \frac{h}{P}$, анда $\kappa\frac{\lambda}{\Delta x} = \sin\theta \cong tg\theta$ (эгерде θ кичинекей бурч болсо). Сүрөттөн $tg\theta = \frac{\Delta P_x}{P}$, анда $2\Delta x\frac{\Delta P_x}{P} = \kappa\frac{h}{P}$ же

$$\Delta x \Delta P_x = \kappa\frac{h}{2} \qquad (2.1.14).$$

Эгерде к=1 болсо, $\Delta x \Delta P_x = h/2$ - минималдык абал. Ал эми жалпы учурда $\Delta x \Delta P_x \geq h/2$. Бул формула *Гейзенбергдин аныксыздыгы* деп аталат. Бул байланыштан көрүнгөндөй $\Delta x \to 0$ болсо $\Delta P_X \to \infty$ умтулат жана тескерисинче $\Delta P_X \to 0$ болсо $\Delta x \to \infty$ умтулат.

Ушундай эле жол менен $\Delta y \Delta P_y \geq h/2$, $\Delta z \Delta P_z \geq h/2$ боло тургандыгын көрөбүз.

Алынган формулаларды жалпылап жазсак ал төмөнкүдөй болот.

$$\left.\begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta P_X &\geq \frac{h}{2} \\ \Delta y \cdot \Delta P y &\geq \frac{h}{2} \\ \Delta z \cdot \Delta P_z &\geq \frac{h}{2} \end{aligned}\right\} \qquad (2.1.15).$$

Мына ошентип микробөлүкчөнүн координатын канчалык так аныктасак, анын импульсун аныктоодо ошончолук ката кетебиз жана тескерисинче бөлүкчөнүн импульсун канчалык так аныктасак, анын координатын аныктоодо ошончолук ката кетебиз.

Бул касиет микродүйнөгө таандык болгон касиет жана ал макродүйнөнүн касиетинен айырмаланат. Ошондуктан макродүйнөнүн физикалык закон ченемдүүлүгүн толугу менен микродүйнөгө которууга мүмкүн эмес.

Нильс Бор толкун-бөлүкчө карама-каршылыгын чечүү үчүн *кошумчалык принцибин (принцип дополнительности)* киргизген. Бул принциптин негизинде толкундун да, микробөлүкчөнүн да, бир эле *тажрыйбада толкундук да, корпускулярдык да* касиеттерин аныктоого мүмкүн эмес. Микрообьекттердин толкундук жана корпускулярдык касиеттерин аныктоо үчүн эки түрдүү тажрыйба жүргүзүү керек. Биринчи түрдөгү тажрыйбаларда микрообьекттерин толкундук касиети аныкталса, экинчи түрдөгү тажрыйбаларда анын корпускулярдык касиети аныкталат.

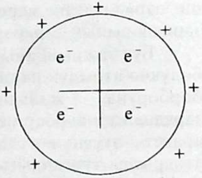
Ошол эле мезгилде жарыктын жана электрондордун агымын толук түшүндүрүү үчүн алардын толкундук да, корпускулярдык да моделин пайдалунуу керек, бирок бул моделдердин ар бирин өзүнчө пайдалануу зарыл.

III глава. АТОМДОРДУН ТҮЗҮЛҮШҮ

§1. Атомдун моделдери. Резерфорддун тажрыйбасы.

Классикалык физиканын көз карашы боюнча бардык заттар эң майда бөлүкчөлөр болгон атомдордон турат. Атом жөнөкөй түзүлүшкө ээ жана бөлүнбөйт. Бирок XX - кылымдын башталышында жүргүзүлгөн бир топ тажрыйбалардын негизинде атомдун татаал түзүлүшкө ээ экендиги аныкталды. Алар электрондун ачылышы, радиоактивдүүлүк кубулушунун ачылышы, рентген нурунун ачылышы, атомдордун нурдануу спектрлериндеги спектралдык сызыктардан пайда болушу ж.б. Бул кубулуштарды атомдун бөлүнбөстүгү жөнүндөгү классикалык физиканын көз карашынын негизинде түшүндүрүүгө мүмкүн эмес. Бул кубулуштарды түшүндүрүү үчүн атомдун түзүлүшүн так аныктоо керек болду. Мына ошондуктан атомдун түзүлүшү жөнүндө атомдун классикалык моделинен айырмаланган жаңы моделдер сунуш кылынган.

1) *Томсондун модели*: 1903-жылы англиялык физик Дж. Томсон атомдун алгачкы моделин сунуш кылган. Томсондун бул моделин "көмөч мейизи менен" ("пудинг с изюмом") деген атты алган. Ал модель боюнча атом оң заряддалган шардан турат (көмөч), ал эми анын ичинде терс заряддалган электрондор (мейиз) сүзүп жүрүшөт (3.1.1-сүрөттү караңыз).

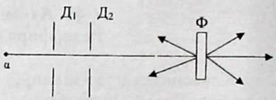


3.1.1. – сүрөт

Бул модел айрым эксперименталдык фактыларды түшүндүргөнү менен, бир топ эксперименталдык фактыларды (Мисалы: Менделеевдин мезгилдик системасындагы атомдордун мезгилдүү касиетин, атомдордун нурдануу спектрлериндеги сызыктуу спектрлердин пайда болушун, ж.б.) түшүндүрө алган эмес. Мына ошондуктан атомдун түзүлүш структурасы жөнүндөгү суроо ачык бойдон калган. Бул суроого жооп берүү үчүн жаңы тажрыйбалар жана жаңы идеялар керек эле.

Мына ушундай тажрыйбаны 1911-жылы Э.Резерфорд өзүнүн окуучулары Г.Гейгер жана Э.Марстен менен жүргүзүшкөн. Ал тажрыйба физикада *α-бөлүкчөлөрдүн чачыроосу* деген ат менен белгилүү (α - бөлүкчө гелийдин эки жолу иондошкон атому).

Мына ушундай α - бөлүкчө менен жука алтын фольгасын нурданткан мезгилде α-бөлүкчөлөрдүн көпчүлүгү кичинекей $2 \div 3^0$ бурч боюнча чачыраган. Ал эми бул бөлүкчөлөрдүн айрым бир бөлүгү 180^0 чейинки бурч менен чачырагандыгы байкалган (3.1.2 - сүрөт). Эмне себептен мындай чоң бурч менен чачыраган деген суроо коюлган.

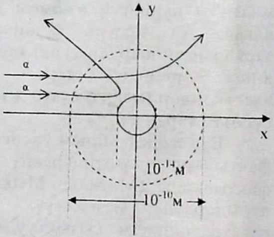


3.1.2. – сүрөт

Резерфорд α-бөлүкчөлөрүнүн чоң бурч менен чачырагандыгын атомдогу эн чоң массага ээ болгон, бирок кичинекей көлөмдү ээлеген оң заряддалган бөлүгү менен Кулондун закону боюнча аракет этүүсүнүн натыйжасы экендигин көрсөткөн.

Резерфорддун тажрыйбасы Томсондун моделинин так эмес экендигин көрсөткөн. Атом диаметри 10^{-14}м болгон эң кичинекей көлөмдү ээлеген оң заряддалган жана атомдун негизги массасын түзгөн ядрого ээ. Ал эми терс заряддалган электрондор анын айланасында айланып жүрөт. Атомдун өлчөмү 10^{-10}м болгондуктан, атомдо көпчүлүк мейкиндик "бош" жана атомдун нейтралдуулугу оң заряддалган ядро менен терс заряддалган электрондордун заряддарынын барабардыгы менен аныкталат.

Бул тажрыйбанын негизинде α-бөлүкчө атомдун ичине кирип, анын борборуна жайланышкан оң заряддалган ядросу менен Кулондук аракет этүүнүн натыйжасында аткарыла тургандыгы аныкталган (3.1.3-сүрөттү караңыз).



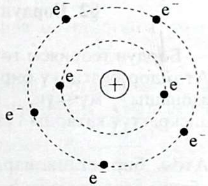
3.1.3. – сүрөт

Бул тажрыйбанын негизинде Резерфорд атомдун планетардык моделин сунуш кылган. Атомдо анын негизги массасын түзгөн жана оң зарядка ээ болгон ядросу бар.

Атом нейтралдуу болгондуктан атомдун ядросу $+ze$ оң зарядка ээ болсо, анда ядронун айланасында z -терс заряддалган электрондор күндүн айланасында планеталар айланып жүргөндөй, ядронун айланасында айланып жүрөт. Мына ошентип, атомдун планетардык модели сунуш кылынган (3.1.4.-сүрөттү караңыз).

Резерфорддун модели атомдун түзүлүшүн окуп үйрөнүүдө негизги кадам болгон.

Белгилүү бир орбита боюнча ядронун айланасында айланган электронго Кулондук күчтөн башка Ньютондук борбордон четтөөчү күч дагы аракет этет.



3.1.4. – сүрөт

Кулондук куч $$f_к = \frac{ze \cdot e}{r^2} \qquad (3.1.1).$$

Ньютондук куч $$f_н = \frac{m\vartheta^2}{r} \qquad (3.1.2).$$

Мына ушул эки күчтүн тең салмактуулугунун натыйжасында электрон ядронун айланасында кармалып турат.

$$\frac{m\vartheta^2}{r} = \frac{ze \cdot e}{r^2} \qquad (3.1.3).$$

Бул система динамикалык жактан тен салмактуу болгону менен эки чоң кемчиликке ээ.

1) Бул формулада эки белгисиз чоңдук бар, алар r жана ϑ. Аныктоодон көрүнгөндөй ядродон ар кандай аралыкта жайланышкан сансыз көп орбитанын болушу мүмкүн жана r дин ар бир маанисине анык бир ϑ же кинетикалык энергия E туура келет.

Резерфорддун моделинин негизинде r, ϑ, E чоңдуктары үзгүлтүксүз өзгөрүшү мүмкүн. Мына ошондуктан электрон бир орбитадан экинчи орбитага өткөн учурда атом үзгүлтүксүз нур чыгарышы керек, ал эми тажрыйбада атомдордун нурдануу спектри сызыктуу. Резерфорддун модели ошондуктан сызыктуу спектрлердин пайда болушун түшүндүрө албайт.

2) Ошондой эле (3.1.3) формула мехникалык жактан туруктуу болгону менен классикалык электродинамиканын законунун негизинде туруктуу эмес, себеби айланма орбита боюнча кыймылда болгон электрон ылдамданууга ээ болот. Ал эми классикалык электродинамиканын закону боюнча, б.а. Максвеллдин теориясы боюнча, ар кандай ылдамданууга ээ болгон заряд электромагниттик энергияны бөлүп чыгарышы керек. Анда электрондун энергиясы кескин төмөндөйт да, электрон ядрого түшүшү керек. Бул модел боюнча атом секунданын миллиондон бир үлүшүнө чейин гана жашашы керек. Бирок, бизге белгилүү атом туруктуу.

§2. Бордун жарым кванттык теориясы

Бордун теориясы төмөнкү эки постулатка негизделген.

1) Атомдор белгилүү бир стационардык абалда гана узак убакытка жашашы мүмкүн. Стационардык абалдардын энергиясы дискреттүү катарды түзөт.

$$E_1,\ E_2,\ E_3,\ldots,E_n \qquad (3.2.1).$$

2) Атом бир стационардык абалдан экинчи бир стационардык абалга өткөндө гана hν энергиясын жутат же hν энергиясын бөлүп чыгарат.

$$\hbar\omega = h\nu = E_n - E_\ell \qquad (3.2.2).$$

Атомдогу электрон энергиянын жогорку стационардык абалынан төмөнкү стационардык абалга өткөндө атом нур бөлүп чыгарат. Ал эми төмөнкү абалдан жогорку абалга өткөндө нур жутат.

Мына ушул эки постулат классикалык физиканын закон ченемдүүлүктөрүнө карама-каршы келет. Бордун сунушу боюнча атомдордогу электрон мүмкүн болгон бардык электрондук орбиталарда айланма кыймылда болбостон, энергиясы белгилүү бир дискреттүү маанини алган орбиталарда гана айланма кыймылда болот, б.а. электрондун механикалык моменти кванталган болот.

$$m\vartheta\cdot r = n\hbar \qquad n=1,2,3,4,..... \qquad (3.2.3).$$

Бул формула Бордун тең салмактуулугунун шарты. Ал эми бул стационардык абалдын энергиясынын мааниси *кванттоо эрежеси* деп аталат.

Кванттоо эрежеси боюнча суутектин жана суутексымал атомдордун энергиясын жана орбиталарынын радиусун аныктоого мүмкүн. Ал үчүн ϑ-ны (3.2.3) формуладан аныктайлы жана (3.1.3) формулага коелу:

$$\vartheta = \frac{n\hbar}{mr}; \quad \text{анда} \quad \frac{mn^2\hbar^2}{m^2r^2} = \frac{ze^2}{r} \quad \text{же} \quad \frac{n^2\hbar^2}{mr} = ze^2;$$

$$r_n = n^2\,\frac{\hbar^2}{ze^2m}, \qquad (3.2.4).$$

Мында n=1,2,3,4,... болуп, дискреттүү маанилерди алган кванттык сан, ал эми r_n - электрондун орбиталарынын радиустарынын маанилери. Радиус r_n кванттык сан n-ден гана көз каранды.

Бул формуладан n=1 болгондо атомдун стационардык учурун алабыз. Бул учурда аныкталган радиустун мааниси

$r_o = \frac{\hbar^2}{ze^2 m} = 0{,}56 \cdot 10^{-10}\,м$ болот да тажрыйбада аныкталган атомдун өлчөмү менен дал келет.

Электрондун толук энергиясын аныктай турган болсок, ал кинетикалык жана потенциалдык энергиялардын суммасынан турат. Электрондордун кинетикалык энергиясы $E_к = \frac{m\vartheta^2}{2}$, ал эми потенциалдык энергиясы $E_п = -\frac{ze^2}{r}$. Анда толук энергия

$$E = \frac{m\vartheta^2}{2} - \frac{ze^2}{r} \qquad (3.2.5).$$

Ал эми (3.1.3)-формуласынын эки жагын тең экиге бөлсөк, төмөнкүнү алабыз: $\frac{m\vartheta^2}{2} = \frac{ze^2}{2r}$

Бул формуланы жана (3.2.5)-формуладан пайдаланып, толук энергиянын маанисин аныктасак, төмөнкүнү алабыз:

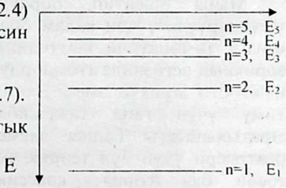
$$E = \frac{ze^2}{2r} - \frac{ze^2}{r} = -\frac{ze^2}{2r}$$

$$E = -\frac{ze^2}{2r} \qquad (3.2.6).$$

Аныкталган (3.2.6.) - формулага (3.2.4) – формуладагы радиустун маанисин койсок,

$$E_n = -\frac{1}{n^2}\frac{z^2e^4 \cdot m}{2\hbar^2} \qquad (3.2.7).$$

n=1,2,3,4,... Бул формуладан кванттык сандан башка баардык чоңдуктар турактуу болгондуктан, энергия дискреттүү мааниге ээ. Эгерде графикте көрсөтө турган болсок, ал төмөнкүдөй болот (3.1.4 – сүрөттү караңыз):



3.1.4. – сүрөт

$$E_1, E_2, E_3, \ldots, E_n \qquad (3.2.8).$$

Кванттык сан n=1 болгондогу энергиянын эң кичине маанисине туура келген абал *негизги стационардык абал* деп аталат.

Суутектин атомдорунун нурдануу спектрин карайлы.

Кванттык сандар n жана ℓ - маанилерин алгандагы энергиянын стационардык маанилери E_n жана E_ℓ болсун дейли. Анда $E_n = -\frac{1}{n^2}\frac{z^2e^4 \cdot m}{2\hbar^2}$ жана $E_\ell = -\frac{1}{\ell^2}\frac{z^2e^4 \cdot m}{2\hbar^2}$ болот.

Анда энергиянын бул маанилерин (3.2.2) – формулага койсок жана нурдануунун жыштыгын аныктасак, ал төмөнкүдөй болот:

$$\nu = \frac{4\pi^3 z^2 e^4 m}{h^3}\left(\frac{1}{\ell^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (3.2.9).$$

$R_n = \dfrac{2\pi^2 e^4 \cdot m}{h^3}$ - Ридбергдин турактуулугу.

Анда (3.2.9) дан төмөнкүнү алабыз:

$$\nu = z^2 R\left(\frac{1}{\ell^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (3.2.10).$$

Суутектин атому үчүн z=1 болгондуктан, (3.2.10) формуладан төмөнкүнү алабыз:

$$\nu = R\left(\frac{1}{\ell^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (3.2.11).$$

Бул теориялык жол менен алынган формула суутектин атому үчүн аныкталган эксперименталдык формулалар менен дал келет. Бордун жарым кванттык теориясынын негизинде алынган суутектин атомунун нурдануу спектрлери эксперименталдык жол менен алынган спектралдык сериялар менен дал келет. Эгерде $\ell=1$, n=2,3,4,5,... болсо, Лаймандын сериясын, $\ell=2$, n=3,4,5,... болсо, Бальмердин сериясын, ал эми $\ell=3$, n=4,5,6,... болсо, Пашендин сериясын алабыз.

Мына ошентип, Бордун теориясы атомдун түзүлүшүн түшүндүрүүдөгү чоң кадам болгон, бирок Бордун теориясы дагы негизги төмөнкүдөй кемчиликтерге ээ болгон. Биринчиден, бул теориянын негизинде атомдордун нурдануусунун интенсивдүүлүгүн аныктоого мүмкүн эмес. Экинчиден Бордун теориясы суутектин атому үчүн гана тажрыйба менен дал келген, ал эми жаратылыштагы башка элементтердин атомдорунун нурдануу спектрлери үчүн бул теория эксперимент менен дал келген эмес, себеби, бул теория классикалык механика менен кванттык механиканын арасындагы жарым кванттык теория болгон.

IV глава. КВАНТТЫК МЕХАНИКАДАГЫ АБАЛДАР ЖАНА БАЙКАЛУУЧУ ЧОҢДУКТАР

Жогоруда биз микрообьекттердин (жарык нурлары, микробөлүкчөлөр) бир эле мезгилде толкундук да, кванттык да касиетке ээ экендигин көрдүк. Жарык нурларын окуп үйрөнүүдө аны мүнөздөөчү айрым физикалык чоңдуктар дискреттүү маанилерге ээ болушу керек экендигин аныктадык, ал эми экинчи жактан микробөлүкчөлөрдүн дагы бир өзгөчөлөнгөн касиеттеринен бизге белгилүү болгондой алардын координатын так аныктасак, импульсун так аныктай албайбыз. Ал эми бул координатын так аныктай албастыгыбыз, анын траекториясын так аныктай албастыгыбызга алып келет. Мына ошондуктан микрообьекттердин өзгөчөлүктөрүн аныктоо үчүн классикалык физиканын негизги теңдемелерин колдонууга мүмкүн эмес, себеби ал теңдеменин чечими физикалык чоңдуктардын үзгүлтүксүз маанисине алып келет, ал эми микробөлүкчөлөрдүн абалын аныктоо үчүн чоңдуктар дискреттүү мааниге ээ болушу керек. Ошондой эле Ньютондун теңдемеси микробөлүкчөлөрдүн толкундук касиетин да эске албайт. Классикалык механикада бөлүкчөнүн кыймылы анын траекториясы аркылуу туюнтулат. Мына ошондуктан микробөлүкчөлөрдүн кыймылын аныктоо үчүн жаңы механика — *кванттык механика* керек. Эгерде микробөлүкчөнүн ылдамдыгы $\vartheta_\delta << c$ болсо, анда бул бөлүкчөнүн кыймылын жазган механика *релятивистик эмес механика* деп аталат. Ал эми микробөлүкчөнүн ылдамдыгы жарыктын ылдамдыгы менен бирдей же ага жакын болсо, анда бул бөлүкчөнүн кыймылын аныктаган механика *релятивистик кванттык механика* деп аталат, ал эми тынч абалында массага ээ болбогон бөлүкчөнүн кыймылын жазган кванттык механиканын бөлүгү *кванттык электродинамика* деп аталат.

Биз негизинен релятивистик эмес кванттык механиканы карайбыз. Релятивистик эмес кванттык механика төмөнкү негизги абалга ээ.

1) Микробөлүкчөлөрдүн абалы жана кыймылы. Микробөлүкчөлөрдүн абалы жана кыймылы ψ функция менен аныкталат.

$\psi = \psi(\bar{z}, t)$ - бул функция толкундук функция деп аталат. ψ функциянын модулунун квадраты микробөлүкчөнүн берилген абалда болуу ыктымалдуулугунун тыгыздыгын мүнөздөйт. Микробөлүкчөлөрдүн абалын (энергиясын, импульсун, координатын ж.б.) биз так аныктай албайбыз. Алардын белгилүү

бир маанилерге ээ болушунун ыктымалдуулугун гана аныктай алабыз.

Мисалы: микробөлүкчөнүн мейкиндиктин $d\tau$ (түзүүчүлөрү $d\tau = dx \cdot dy \cdot dz$) көлөмүндө боло тургандыгын карайлы. Мына ушул кичинекей көлөмдө микробөлүкчөнүн болуу ыктымалдуулугу dw болсун. Анда ыктымалдуулуктун көлөмгө болгон катышы ыктымалдуулуктун тыгыздыгын берет.

$$\frac{dw}{d\tau} = |\psi|^2 \qquad (4.1.1).$$

ψ функциянын жардамында микробөлүкчөнүн $d\tau$ көлөмүнүн кайсыл чекитинде боло тургандыгын так аныктай албайбыз, анын ошол $d\tau$ көлөмдө болуу ыктымалдуулугун гана аныкташыбыз мүмкүн. Бирок микробөлүкчө сөзсүз түрдө берилген көлөмдүн кандайдыр бир чекитинде болот. Бөлүкчөнүн абалынын ыктымалдуулугу

$$W = \int_{\tau} dw = \int |\psi|^2 d\tau \qquad (4.1.2).$$

Микробөлүкчөнүн көлөмдүн берилген $d\tau$ элементинде болуу ыктымалдуулугунун шарты төмөнкүдөй жазылат:

$$\int_{\tau} |\psi|^2 d\tau = 1 \qquad (4.1.3).$$

Бул шарт кванттык механикада нормалаштыруу шарты деп аталат. Ал эми ψ - функция экинчи тартиптеги дифференциалдык теңдеменин чечими болгондуктан ал функцияга төмөнкүдөй шарттар коюлат: функция үзгүлтүксүз, бир тектүү жана чектелген болушу керек.

Биринчиден, эгерде потенциалдык энергия үзүлүшкө ээ болсо, анда толкундук функция жана анын биринчи туундусу үзгүлтүксүз бойдон калышы керек. Экинчиден, берилген мейкиндиктин $d\tau$ элементинде потенциалдык энергия чексизге айланса, анда толкундук функция нөлгө барабар болушу керек.

Мына ошентип, ψ толкундук функция төмөнкүдөй экинчи тартиптеги дифференциалдык теңдеменин чечими болушу керек:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{1}{\vartheta^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}. \qquad (4.1.4).$$

Анда бул теңдеменин чечими төмөнкүдөй болот:

$$\psi = Ae^{-\frac{2\pi}{\lambda}(r-\vartheta t)}. \qquad (4.1.5).$$

Бул функция де-Бройль толкунунун полиному болгондуктан анын таралуу ылдамдыгы төмөнкүдөй болот:

$$\vartheta = \frac{\lambda}{T} = \frac{1}{\frac{T}{\lambda}} = \frac{1}{T\frac{1}{\lambda}} = \frac{\nu}{\kappa}. \quad (4.1.6).$$

Мында ν - толкундун жыштыгы, ал эми к – толкундук сан.

Де-Бройль толкуну $\lambda = \frac{\hbar}{p}$; $p = \frac{\hbar}{\lambda} = \hbar\kappa$. (4.1.7).

$\hbar\kappa$ - бөлүкчөнүн импульсу болуп эсептелет. Мына ушул маанилерди (4.1.5) койсок, анда де-Бройль толкунун алабыз, ал

$$\psi(\bar{r},t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\bar{P}\bar{r})}. \quad (4.1.8).$$

Мына ушундай формада толкундук функция бөлүкчөлөрдүн абалын мүнөздөйт. Функциянын ар бир маанисине энергиянын дискреттүү маанилери туура келет.

$E_1, E_2, E_3, \ldots, E_n$.

Ал эми өздүк мааниге туура келген функциянын төмөнкү маанилери $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots, \psi_n$ өздүк функция деп аталат. Энергиянын мүмкүн болгон маанилери энергетикалык катарды түзөт.

Эгерде бөлүкчө эркин кыймылда болсо, башкача айтканда бөлүкчөнүн кыймылы чектелбеген болсо, анда анын энергетикалык спектри *үзгүлтүксүз* болот. Ал эми бөлүкчөнүн кыймылы чектелген болсо, анда анын энергетикалык спектри *дискреттүү катарды* түзөт.

Ар кандай өздүк мааниге ээ болгон өздүк функциялардын эки мааниси бири-бирине ортогоналдуу болушат, башкача айтканда, бир функциянын экинчи функцияга болгон көбөйтүндүсүнүн бардык мейкиндик боюнча интегралы нөлгө барабар болот.

$$\int U \cdot \vartheta d\tau = 0 \quad (4.1.9).$$

2) Физикалык чоңдуктардын орточо мааниси. Физикалык чоңдуктардын орточо мааниси ψ - функциянын жардамында төмөнкүдөй алынат:

$$\bar{\chi} = \int_{\tau} \hat{\chi}|\psi|^2 d\tau \quad (4.1.10).$$

3) Суперпозиция принциби.

Эгерде микробөлүкчөнүн абалы $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots, \psi_n$ функциялары менен аныкталса, анда ал микробөлүкчөнүн абалы

$$\Psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_{21} + c_3\psi_3 + \ldots + c_n\psi_n \quad (4.1.11).$$

болгон функция менен дагы аныкталат. Мында $c_1, c_2, c_3, \ldots c_n$ сандары турактуу коэффициенттер. Бул коэффициенттин мааниси ψ функциянын нормалдаштыруу шартынан алынат. Бул суперпозиция принциби кванттык механикадагы негизги принциптердин бири. Ал классикалык физикадагы суперпозиция принцибинен бир топ айырмаланат.

4) Операторлор

Классикалык физикада ар кандай физикалык чоңдуктарды мейкиндиктик координаттар жана убакыттын мааниси менен мүнөздөөгө мүмкүн. Мисал үчүн убакыттын кандайдыр бир маанисинде ылдамдыктын мааниси белгилүү бир чоңдуктагы ылдамдык ϑ болсо, ал ϑ_x, ϑ_y, ϑ_z деген түзүүчүлөрү менен аныкталат. Мына ошентип, классикалык физикада ар кандай физикалык чоңдуктар убакыт менен координаттын функциялары катарында аныкталат. Классикалык физиканын негизги максаты бул физикалык чоңдуктардын өз ара функционалдык көз карандылыгын аныктоо болуп саналат.

Ал эми кванттык механикада физикалык чоңдуктар белгилүү бир сан маанилери менен мүнөздөлбөйт. Мисал үчүн бөлүкчөнүн мейкиндиктин бир областында болуу абалын мүнөздөгөн чоңдуктарды карайлы. Классикалык механикада бөлүкчөнүн убакыттын ар кандай моментинде мейкиндиктин берилген чекитинде болуу абалы үч сан — мейкиндиктин координаталары менен мүнөздөлөт жана координаталардын убакыттан көз карандылыгын аныктоо жетиштүү. Ал эми кванттык механикада мейкиндиктин каралган бөлүгүндө микробөлүкчөнүн болуусунун ыктымалдуулугу толкундук функциянын жардамында аныкталат. Бирок толкундук функция бөлүкчөнүн координатын убакыттын функциясы катарында аныктоого мүмкүндүк бербейт. Ошондуктан кванттык механикада бөлүкчөнүн координаталарынын ыктымалдуулугун же орточо маанисин гана аныктайбыз. Физикалык чоңдуктарды аныктоодо ал процесстин ыктымалдуулугун көрсөткөн математикалык операция бар. Мындай математикалык операция операторлор деп аталат. Операторлор кванттык механикада негизги математикалык аппарат болуп эсептелет. Мына ошентип кванттык механикада физикалык чоңдуктар ал чоңдуктардын сан мааниси менен эмес ал чоңдуктарды мүнөздөгөн операторлор менен алмаштырылат. Бизге белгилүү функция бир сан менен экинчи санды байланыштырат, ал эми оператор болсо бир функция менен экинчи функцияны байланыштырат.

Оператор деп, кандайдыр бир функциянын көптүгүнүн ар бир функциясына ал көптүктөгү же башка көптүктөгү функцияны туура келтирген эрежени айтабыз жана “^” белгиленет.

Классикалык физикада импульс P болсо, кванттык механикада анын оператору $\hat{P}$, ал эми кинетикалык энергия T болсо, анын оператору $\hat{T}$ менен белгиленет.

Классикалык механикада бөлүкчөнүн импульсу менен кинетикалык энергиясы арасындагы байланыш $T = \frac{P^2}{2m}$, ал эми кванттык механикада алардын операторлорунун арасындагы байланыш төмөнкүдөй түрдө жазылат: $\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m}$.

Физикалык чоңдуктардын сан маанилери кванттык механикада ошол чоңдуктардын операторлорунун толкундук функцияга жасаган аракети менен аныкталат.

$$\hat{P}\psi = P\psi \qquad (4.1.12).$$

Импульстун өздүк маанисин аныктоодо $|\psi|^2$ импульстун ушул маанини алуусунун ыктымалдуугун көрсөтөт.

V глава. КВАНТТЫК МЕХАНИКАНЫН МАТЕМАТИКАЛЫК АППАРАТЫ

§1. Сызыктуу өзүн-өзү камтыган операторлор

Классикалык физикада ар кандай физикалык чоңдуктарды мейкиндиктик координаттар жана убакыттын мааниси менен мүнөздөөгө мүмкүн.

Мисалы үчүн убакыттын кандайдыр бир моментинде ылдамдык белгилүү бир сандар ϑ_x, ϑ_y, ϑ_z менен аныкталат.

Мына ошентип классикалык физикада ар кандай физикалык чоңдуктар убакыт менен координаттын функциялары катарында аныкталат. Классикалык физиканын максаты ар кандай физикалык чоңдуктардын өз ара функционалдык көз карандылыгын аныктоо.

Кванттык механикада физикалык чоңдуктар ал чоңдуктардын сан мааниси менен эмес, ал чоңдуктарды мүнөздөгөн операторлор менен алмаштырылат. Бизге белгилүү функция бир сан менен экинчи санды байланыштырса, ал эми оператор болсо бир функция менен экинчи функцияны байланыштырат.

Оператор деп кандайдыр бир функциянын көптүгүнүн ар бир функциясына, ал көптүктүн же башка көптүктүн функциясын туура келтирген эрежени айтабыз. Оператор символикалык түрдө "∧" менен белгиленет. Мисалы: $\hat{L}$, $\hat{M}$, $\hat{H}$ ж.б.

Операторлорго мисал болуп $\frac{d}{dx}$; $\frac{d^2}{dx^2}$; $\sqrt{\ }$; sin, cos... ж.б. кирет.

Мисалы: $\hat{L}$ - оператору берилип, ал оператордун жардамында U – функциясынан ϑ – функциясынын алына тургандыгы төмөнкүдөй жазылат.

$\vartheta = \hat{L}U$

Эгерде $\hat{L} = \frac{d}{dx}$ болсо, анда $\vartheta = \frac{d}{dx}U = U'$.

Кванттык механикада абалдын суперпозицияланыш принцибин канааттандыруу үчүн сызыктуу операторлор колдонулат. *Сызыктуу операторлор* деп төмөнкү шарттарды канааттандырган операторлорду айтабыз:

1. *Функциялардын суммасына аракет кылган сызыктуу операторлор, ал функциялардын операторлорунун суммасындай болушу керек*

$$\hat{L}(\vartheta + U) = \hat{L}\vartheta + \hat{L}U \qquad (5.1.1).$$

2. *Туруктуу санды оператордун сыртына чыгарууга мүмкүн.*

$$\hat{L}(C \cdot U) = C\hat{L} \cdot U \text{, мында } C=\text{const} \qquad (5.1.2).$$

$\frac{d}{dx}, \frac{d^2}{dx^2}$ - сызыктуу операторлор болушат. Ал эми $\sqrt{\ }$, sin, cos - сызыктуу операторлор болушпайт. Себеби $\sqrt{\vartheta + U} \neq \sqrt{\vartheta} + \sqrt{U}$, $\sin(U + \vartheta) \neq \sin U + \sin \vartheta$.

3. *Эми операторлордун көбөйтүндүсүн карайлы.*

Бизге $\hat{L}$ жана $\hat{E}$ берилсин жана $\hat{M} = \hat{L} \cdot \hat{F}$ болсун.

Эгерде $\hat{M}U = \hat{L}(\hat{F} \cdot U)$ болсо, анда бул операторлор коммутативдүү же антикоммутативдүү болушу мүмкүн. Бул учурда $\hat{M}$ - оператору $\hat{L}$ жана $\hat{F}$ операторлорунун удаалаш аракетинин натыйжасы болот. Бул удаалаш аракет этүүлөр алмашылса, натыйжа өзгөрүлөт, б.а. $\hat{L} \cdot \hat{F} \neq \hat{F} \cdot \hat{L}$.

Мисалы: $\hat{L} = x$, ал эми $\hat{F} = \frac{d}{dx}$ болсун. Анда $\hat{L}(\hat{F} \cdot U) = x\frac{dU}{dx}$ болот. Ал эми $\hat{F}(\hat{L} \cdot U) = \frac{d(xU)}{dx} = x\frac{dU}{dx} + U$ болот.

$$x\frac{dU}{dx} \neq x\frac{dU}{dx} + U.$$

Мына ошентип операторлордун көбөйтүү касиети алгебралык сандардын көбөйтүү касиетинен айырмаланат.

Эгерде операторлордун көбөйтүндүсү бири-бирине барабар болсо $\hat{L} \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot \hat{L}$, анда ал операторлор коммутативдүү операторлор болушат.

Ал эми $\hat{L} \cdot \hat{F} = -\hat{F} \cdot \hat{L}$ болсо, анда бул операторлор антикоммутативдүү операторлор болушат.

4. *Операторлордун суммасы жана айырмасын карайлы.*

Эгерде $\hat{M}$ оператору $\hat{M}U = (\hat{L} + \hat{\zeta})U = \hat{L}U + \hat{\zeta}U$ болсо, анда $\hat{M}$ оператору $\hat{L}$ жана $\hat{\zeta}$ операторунун суммасы болушат. Ал эми $\hat{M}U = (\hat{L} - \hat{\zeta})U = \hat{L}U - \hat{\zeta}U$ болсо, анда $\hat{M}$ оператору $\hat{L}$ жана $\hat{\zeta}$ операторунун айырмасы болот.

Операторлордун суммасы жана айырмасы алгебралык сандардын суммасына жана айырмасына окшош.

5. *Сызыктуу операторлордун өзүн-өзү камтышы (самосопряжонность линейного оператора).*

Эгерде $\hat{F}$ оператору төмөнкү шартты канааттандырса, анда мындай операторлор *өзүн-өзү камтыган оператор* болушат:

$$\int U^* \hat{F} \vartheta dx_1 dx_2 ... dx_n = \int (\hat{F} U)^* \vartheta dx_1 dx_2 ... dx_n \quad (5.1.3).$$

Бул учурдагы $U^*(x_1, x_2, ..., x_n)$ жана $\vartheta(x_1, x_2, ..., x_n)$ функциялары стандарттуулук шартты канааттандырат.

6. *Операторлордун өздүк функциясы жана өздүк мааниси.*

Сызыктуу өзүн-өзү камтыган операторлордун өздүк функциясынын жана өздүк маанисинин төмөнкүдөй касиеттери бар.

а) Өзүн-өзү камтыган $\hat{F}$ операторунун өздүк мааниси λ чыныгы сан болот.

Далилдейли: Мейли $\hat{F}$ оператору сызыктуу жана өзүн-өзү камтыган оператор болсун дейли. $\hat{F}U = \lambda U$

$$\int U^* \hat{F} \vartheta dx = \int (\hat{F} U)^* \vartheta dx \quad (5.1.4).$$

λ санын чыныгы сан экенин далилдейли. U жана ϑ функциялары теңдеш функциялар болсун. Анда жогорку теңдештиктин сол жагы өзүн-өзү камтыгандыктын шартынын негизинде

$$\int U^* \hat{F} U dx = \int U^* \lambda U dx = \lambda \int U^* U dx .$$

Оң жагын төмөнкүдөй өзгөртөлү:

$$\int (\hat{F} U)^* U dx = \int (\lambda U)^* U dx = \int \lambda^* U^* U dx = \lambda^* \int U^* U dx;$$

$$\lambda \int U^* U dx = \lambda^* \int U^* U dx ,$$

анда $\lambda = \lambda^*$ (5.1.5).

Өзүн-өзү камтыган сандар качан гана чыныгы сандар болушса, анда алар бири-бирине барабар болушат.

Мына ошентип эгерде физикалык чоңдуктар чыныгы сандар болушса, анда ал физикалык чоңдуктардын операторлору сызыктуу жана өзүн-өзү камтыган операторлор болушат.

б) Сызыктуу өзүн-өзү камтыган операторлордун өздүк функциялары ортогоналдуу болушат.

Функциянын ортогоналдуулугу векторлордун ортогоналдуулугун жалпылоонун негизинде алынат.

Мисалы $\vec{a} \perp \vec{b}$ болсо, анда $(\vec{a} \cdot \vec{b}) = 0$, мында $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$; $\vec{b} = (b_x, b_y, b_z)$. Анда алардын көбөйтүндүлөрү $\vec{a} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = 0$ болот.

Эгерде бул көбөйтүндүлөрдүн ордунда эки үзгүлтүксүз маанилерди алган U_m^*, U_n функциялары болсо, анда сумманы интеграл менен алмаштыруу керек.

Анда ортогоналдуулуктун шарты төмөнкүдөй болот:

$$\int U_m^* \cdot U_n dx = 0 \qquad \text{мында } m \neq n \qquad (5.1.6).$$

Далилдейли: U_m, U_n функциялары төмөнкү теңдемелерди канааттандырат:

$$\hat{F} U_m^* = \lambda_m U_m^*, \; \hat{F} U_n = \lambda_n U_n$$

Операторлордун өзүн-өзү камтыгандык шартынын негизинде

$$\int U_m^* \hat{F} U_n dx = \int U_n (\hat{F} U_m)^* dx \text{ же } \int U_m^* \lambda_n U_n dx = \int U_n \lambda_m^* U_m^* dx$$

$$(\lambda_n - \lambda_m^*) \int U_m^* U_n dx = 0$$

Бул барабардыкта $\lambda_n \neq \lambda_m^*$ болгондуктан $\lambda_n - \lambda_m^* \neq 0$ болот. Анда жогорку барабардык аткарылсын үчүн $\int U_m^* U_n dx = 0$ болушу керек.

§2. Кванттык механиканын негизги операторлору

1. *Координаттын оператору же көз каранды эмес өзгөрүлмөнүн оператору.*

Классикалык физикада мейкиндикте бөлүкчөлөрдүн абалы алардын координаталары (x,y,z) менен аныкталат. Ал эми кванттык механикада координаттык өзгөрүлмөнүн операторлору колдонулат. Ал операторлор төмөнкүдөй белгиленет: $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$.

Бул операторлордун өздүк функциясы катарында ψ - функция болсо, анда бул операторлордун өздүк маанилеринин теңдемеси төмөнкүдөй жазылат:

$$\left.\begin{aligned} \hat{x}\psi &= x\psi \\ \hat{y}\psi &= y\psi \\ \hat{z}\psi &= z\psi \end{aligned}\right\} \qquad (5.2.1).$$

Бул теңдемелерди чечүү менен x,y,z маанилерин $|\psi|^2$ ыктымалдуулуктун тыгыздыгында аныктоо мүмкүн.

2. Потенциалдык энергиянын оператору

Классикалык механикада потенциалдык энергия $U(x,y,z)$ координаттан көз каранды, ал эми кванттык механикада потенциалдык энергиянын оператору $\hat{U}(x,y,z)$. Потенциалдык энергиянын оператору көбөйтүү, бөлүү, кошуу жана кемитүү операцияларын өзүнө камтыйт. Ал эми интегралдоо жана дифференциалдоо операцияларын өзүнө камтыбайт.

Эгерде ψ - функция бул оператордун өздүк функциясы болсо, анда анын өздүк маанисинин теңдемеси төмөнкүдөй болот:

$$\hat{U}(x,y,z)\psi = U(x,y,z)\psi \qquad (5.2.2).$$

3. Кыймыл санынын же импульстун оператору

Классикалык механикада бөлүкчөнүн кыймыл саны P, ал эми аны түзүүчүлөрү P_x, P_y, P_z – болсо, анда $P = m\vartheta$ болгонуктан, анын түзүүчүлөрү $P_x = m\vartheta_x$; $P_y = m\vartheta_y$; $P_z = m\vartheta_z$.

Кванттык механикада бөлүкчөлөрдүн кыймыл санын мүнөздөө үчүн кыймыл санынын оператору колдонулат $\hat{P}$. Импульстун түзүүчүлөрүнүн операторлору $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$. Бул операторлорду аныктоо үчүн де-Бройль толкунунан пайдаланабыз.

$$\psi = A_o e^{i\frac{1}{\hbar}(\vec{P}\vec{r}-Et)} = A_o e^{i\frac{1}{\hbar}(P_x x + P_y y + P_z z - Et)}$$

Импульстун операторлорунун теңдемелерин жазалы, б.а.

$$\hat{P}_x\psi = P_x\psi;$$
$$\hat{P}_y\psi = P_y\psi;$$
$$\hat{P}_z\psi = P_z\psi.$$

Бул теңдемелерден көрүнгөндөй P_x, P_y, P_z – маанилерин аныктоо үчүн ψ - функцияны x,y,z боюнча дифференциалдоо керек.

Анда операторлор:

$$\left.\begin{aligned} \hat{P}_x &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{P}_y &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{P}_z &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}\right\} \qquad (5.2.3).$$

болот.

Вектордук түрдө импульстун оператору төмөнкүдөй болот:

$$\vec{\hat{P}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}\right). \qquad (5.2.4).$$

Микробөлүкчөнүн импульсунун түзүүчүлөрүн аныктоо үчүн, бул операторлор менен ψ функциясына аракет этүү керек. Бул

учурда алынган сандар ыктымалдуулуктун тыгыздыгы $|\psi|^2$ менен аныкталган өздүк маанилери болушат.

$$\left.\begin{aligned} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x} &= P_x\psi \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial y} &= P_y\psi \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial z} &= P_z\psi\,. \end{aligned}\right\} \qquad (5.2.5).$$

4. Кинетикалык энергиянын оператору.

Классикалык физика боюнча бөлүкчөнүн кинетикалык энергиясы менен импульстун арасындагы байланыш $T_к = \frac{m\vartheta^2}{2} = \frac{P^2}{2m}$. Кванттык механикада да микробөлүкчөнүн кинетикалык энергиясынын оператору менен импульсунун операторлорунун арасындагы байланыш төмөнкүдөй болот:

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m} \qquad (5.2.6).$$

Ал эми импульстун квадраты менен анын түзүүчүлөрүнүн арасындагы байланыш $P^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$ болгондуктан, алардын операторлорунун арасындагы байланыш да төмөнкүдөй болот: $\hat{P}^2 = \hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2$.

Анда $\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m} = \frac{\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \qquad (5.2.7).$$

Бул оператор кинетикалык энергиянын оператору.

5. Толук энергиянын оператору же Гамильтондун оператору.

Классикалык физикада толук энергия кинетикалык жана потенциалдык энергиялардын суммасынан турат.

$$H = T + U \qquad (5.2.8).$$

Кванттык механикада да толук энергиянын оператору кинетикалык жана потенциалдык энергиянын операторлорунун суммасынан турат

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} \qquad (5.2.9).$$

Жогорку (5.1.2) жана (5.1.7) теңдемелердин маанилерин эске алсак, анда

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(x,y,z) \qquad (5.2.10).$$

Бул толук энергиянын оператору же Гамильтондун оператору деп аталат.

6. Кыймыл санынын моментинин оператору

Классикалык физикада бөлүкчөнүн кыймыл санынын моменти

$$\vec{L} = [\vec{r} \cdot \vec{p}].$$

Ал эми бул векторлордун түзүүчүлөрү аркылуу аныктасак

$$\vec{L} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ P_x & P_y & P_z \end{vmatrix} \qquad (5.2.11).$$

Анда кванттык механикада микробөлүкчөнүн кыймыл санынын моментинин оператору

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{P}_x & \hat{P}_y & \hat{P}_z \end{vmatrix} \qquad (5.2.12).$$

Мындан $\hat{L}$ операторунун түзүүчүлөрүн аныктасак,

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y$$

$$\hat{L}_y = \hat{x}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_x$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x.$$

Бул операторлордун маанилерин ордуна койсок,

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}_x &= \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ \hat{L}_y &= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right) \\ \hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{aligned}\right\} \qquad (5.2.13).$$

Бул операторлор микробөлүкчөнүн кыймыл санынын моментинин түзүүчүлөрүнүн оператору болушат.

Эгерде кыймыл санынын моментинин түзүүчүлөрүн аныктай турган болсок, анда анын өзүн да аныктай алабыз.

Классикалык механикада $\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ болгондуктан, кванттык механикада алардын операторлору $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ болот. Кыймыл санынын моментинин түзүүчүлөрүнүн сферикалык координат системасында карайлы жана ар бир түзүүчүсүн квадратка көтөрүп, аларды суммалайлы, анда

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} \qquad (5.2.14).$$

Бул оператор кыймыл санын моментинин квадратынын оператору. Бул оператордун өздүк маанисин аныктоо үчүн ψ - функцияга аракет этип анын теңдемесин жазуу керек. Жазылган теңдемеден өздүк функциясынын маанисин аныктоо мүмкүн

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi \qquad (5.2.15).$$

(5.2.14) формуладагы $\hat{L}^2$ оператору Лежандрдын операторуна окшош. Бизге белгилүү Лежандрдын оператору

$$\hat{\Lambda} = -\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} \qquad (5.2.16).$$

Анда (5.2.14) жана (5.2.16) формулаларды салыштырсак, төмөнкүнү алабыз:

$$\hat{L}^2 = \hbar^2\hat{\Lambda} \qquad (5.2.17).$$

Эгерде биз Лежандрдын операторунун өздүк маанисин аныктасак, анда биз $\hat{L}^2$ операторунун да өздүк маанисин аныктай алабыз.

Лежандрдын операторунун өздүк маанисин аныктайлы. Ал үчүн

$$\hat{\Lambda}\psi = \Lambda\psi \text{ же } \left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\cdot\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right\} + \Lambda\psi = 0 \qquad (5.2.18).$$

Бул теңдеменин чечимин төмөнкүдөй функция катарында изилдейли.

$$\psi = У(\theta,\varphi) \qquad (5.2.19).$$

Бул чечимди берилген функциянын ордуна коелу.

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\cdot\frac{\partial У(\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 У(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}\right\} + \Lambda У(\theta,\varphi) = 0 \qquad (5.2.20).$$

Λ - аныктоо үчүн төмөнкүдөй кошумча теңдемени пайдаланабыз:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left\{r^2\frac{\partial U}{\partial r}\right\} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\cdot\frac{\partial U}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 U}{\partial\varphi^2} = 0$$

Теңдеменин U функциясына карата чечимин төмөнкүдөй түрдө изилдейли: $U = r^{\ell}\cdot У(\theta\cdot\varphi) \quad \ell = 0,1,2,3,...$

ℓ - азмуталдык кванттык сан деп аталат жана ал дискреттүү маанилерди алат. Бул теңдеменин чечимин жогорку теңдемеге коебуз. Ал үчүн бул чечимден r боюнча туунду алабыз.

$$\frac{dU}{dr} = У(\theta\cdot\varphi)\cdot\ell\cdot r^{\ell-1}$$

Бул теңдеменин эки жагын тең r^2 көбөйтөлү, анда $r^2\frac{dU}{dr}=У(\theta\cdot\varphi)\cdot\ell\cdot r^{\ell+1}$. Бул теңдемени дагы бир жолу r боюнча дифференциалдайлы, анда $\frac{d}{dr}\left\{r^2\frac{dU}{dr}\right\}=У(\theta\cdot\varphi)\cdot\ell(\ell+1)\cdot r^{\ell}$;

Жогорку чечимди θ жана φ боюнча дифференциалдасак,

$$\frac{dU}{d\theta}=r^{\ell}\frac{\partial У(\theta\cdot\varphi)}{\partial\theta}$$

$$\frac{d^2U}{d\varphi^2}=r^{\ell}\frac{\partial^2 У(\theta\cdot\varphi)}{\partial\varphi^2}.$$

Бул алынган дифференциалдарды ордуна койсок, төмөнкүнү алабыз:

$$У(\theta,\varphi)\ell(\ell+!)r^{\ell}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\cdot r^{\ell}\frac{\partial У(\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{r^{\ell}\partial^2 У(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}=0 \qquad (5.2.21).$$

Бул (5.2.21) теңдемени (5.2.20) теңдеме менен салыштырып $\Lambda=\ell(\ell+1)$ экендигин көрөбүз. Бул Лежандрдын операторунун өздүк мааниси. Анда кыймыл санынын моментинин квадратынын операторунун өздүк мааниси

$$L^2=\hbar^2\ell(\ell+1)$$

$$L=\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \quad \ell=0,1,2,3,4 \qquad (5.2.22).$$

Бул (5.2.22) формуладан көрүнгөндөй микробөлүкчөнүн кыймыл санынын моменти дискреттүү маанилерди алат.

$\ell=0\ \ L_o=0$ $\qquad \ell=2\ \ L_2=\sqrt{6}\cdot\hbar$ $\qquad \ell=4\ \ L_4=\sqrt{20}\cdot\hbar$.

$\ell=1\ \ L_1=\sqrt{2}\cdot\hbar$ $\qquad \ell=3\ \ L_3=\sqrt{12}\cdot\hbar$

Мына ошентип, кыймыл санынын моментинин дискреттүү мааниси кванттык механиканын натыйжасы болот. Ал үчүн эч кандай кошумча Бордун постулатынын кереги жок.

Микробөлүкчөнүн кыймыл санынын моментинин мааниси азимуталдык кванттык сандын мааниси менен аныкталат.

Кыймыл санынын моменти вектордук чоңдук. Бул вектордун багытын аныктоо керек, ал үчүн бул вектордун кандайдыр бир түзүүчүсүн аныктоо керек. Мисалы L_z түзүүчүсүн аныктайлы. L_z аныктоо үчүн бул оператордун өздүк маанисинин теңдемесин жазабыз жана анын чечимин аныктайбыз.

$$\hat{L}_z\psi=L_z\psi \qquad (5.2.23).$$

Сфералык координат системасына өтөлү, анда $\hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\varphi}$. Бул операторду (5.2.23) – теңдемеге койсок,

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{d\varphi}=L_z\psi \qquad (5.2.24).$$

Бул теңдеме бөлүктөлгөн өзгөрүлмөлүү теңдеме, аны өзгөртүп түзөлү, анда $\frac{d\psi}{\psi}=\frac{i}{\hbar}L_z d\varphi$.

Бул теңдемени логарифмаласак $\ln\psi=\frac{i}{\hbar}L_z\varphi+C$. Мында $C=\ln A$ деп алсак, анда $\ln\frac{\psi}{A}=\frac{i}{\hbar}L_z\varphi$. Алынган теңдемеден төмөнкүдөй функциянын маанисин алабыз:

$$\psi=Ae^{\frac{i}{\hbar}L_z\varphi} \qquad (5.2.25).$$

L_z аныктоо үчүн бул функциянын касиетин аныктайлы. Бул функция мезгилдүү жана анын мезгили 2π болгондо функциянын мааниси бири-бирине дал келет.

$Ae^{\frac{i}{\hbar}L_z\varphi}=Ae^{\frac{i}{\hbar}L_z(\varphi+2\pi)}$, башкача айтканда $e^{\frac{i}{\hbar}L_z 2\pi}=1$ же $e^{\frac{i}{\hbar}4\pi L_z}=1$.

Мезгилдик функция 1 барабар жана бул барабардык аткарылсын үчүн функциянын аргументи 2π мезгилине эселенген болуу керек.

$$\frac{1}{\hbar}L_z=m. \qquad L_z=m\hbar, \qquad m=0, \pm1, \pm2,\ldots \qquad (5.2.26).$$

Мында m –магниттик кванттык сан деп аталат.

Бул аныктоодон көрүнгөндөй микробөлүкчөнүн кыймыл санынын моментинин түзүүчүсү да кванталган болот жана ал магниттик кванттык сандан көз каранды.

Эгерде $m=0 \quad L_z=0$

$m=1 \quad L_z=\hbar \qquad m=2 \quad L_z=2\hbar$

$m=-1 \quad L_z=-\hbar \qquad m=-2 \quad L_z=-2\hbar$

Биз L жана L_z – аныктасак $\vec{L}$ векторунун багытын да аныктай алабыз.

Аны түзөлү: $L=\sqrt{\ell(\ell+1)}\cdot\hbar$: $\ell=0,1,2,3,\ldots$

$$L_z=m\cdot\hbar \qquad m=0, \pm1, \pm2,\ldots$$

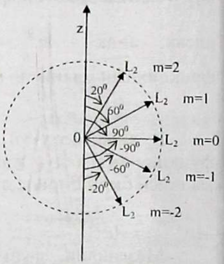
(5.2.1) – сүрөттөн бизге белгилүү $L_z=L\cdot\cos\varphi$

$$\cos\varphi=\frac{L_z}{L}=\frac{m}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} \qquad (5.2.27).$$

Бул формуладагы m жана ℓ кванттык сандар дискреттүү маанилерди алгандыктан cosφ дагы дискреттүү маанилерди алат, б.а. микробөлүкчөнүн кыймыл санынын вектору мейкиндикте квантталган болот.

Мисалы ℓ=2 болсун дейли. Анда $L = \sqrt{\ell(\ell+1)} \cdot \hbar$ болгондуктан $L_2 = \sqrt{6} \cdot \hbar$.

1. $m = 0 \quad \cos\varphi_o = 0 \quad \varphi_o = 90^0 \quad L_z = 0$
2. $m = 1 \quad \cos\varphi_1 = \dfrac{m}{\sqrt{\ell(\ell+1)}} = \dfrac{1}{\sqrt{6}} \approx 0{,}4 \quad \varphi_o = 60^0$
3. $m = -1 \quad \cos\varphi_{-1} = -\dfrac{1}{\sqrt{6}} \approx -0{,}4 \quad \varphi_o = -60^0$
4. $m = 2 \quad \cos\varphi_2 = \dfrac{2}{\sqrt{6}} = 0{,}8 \quad \varphi_o = 20^0$
5. $m = -2 \quad \cos\varphi_{-2} = -\dfrac{2}{\sqrt{6}} = -0{,}8 \quad \varphi_o = -20^0$



5.2.2 – *сүрөт*

Бул мисалдан көрүнгөндөй m эң чоң мааниси ℓ барабар болот.

Бул алынган маанилердин графикте жайланышы 5.2.2 – сүрөттө көрсөтүлгөн.

§3. Кванттык механиканын операторлорунун жалпы өздүк функциялары

Жогоруда биз кванттык механикада бир оператордун бир канча өздүк функцияга ээ экендигин көрдүк. Ошондой эле кванттык механикада бир эле өздүк функцияга ээ болгон бир канча операторлордун болушу мүмкүн. Мындай өздүк функция жалпы өздүк функция деп аталат.

$\hat{F}$, $\hat{\zeta}$ операторлордун жалпы өздүк функциясы ψ болсун, б.а.

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi \quad \text{жана} \quad \zeta\psi = \mu\psi \qquad (5.3.1).$$

Бул теңдемелерди чечүү менен бир эле абал үчүн λ жана μ аныктоого мүмкүн. Эгерде кандайдыр бир чоңдуктардын операторлору жалпы өздүк функцияга ээ болсо, анда микробөлүкчөнүн бир эле абалы үчүн бул физикалык чоңдуктарды аныктоого мүмкүн. Эгерде эки оператор жалпы өздүк функцияга ээ болсо, анда ал оператордун өздүк маанисин аныктоо үчүн төмөнкүдөй теоремадан пайдаланабыз:

1. Жалпы өздүк функцияга ээ болгон операторлор коммутативдүү болушат.

2. Коммутативдүү операторлор жалпы өздүк функцияга ээ болушат.

1 – далилдейли:

1-теорема боюнча өздүк функцияга ээ болгон $\hat{F}$ жана $\hat{\zeta}$ операторлору берилсин. Бул операторлордун коммутативдүү экендигин далилдейли, б.а.

$$\hat{F}\cdot\hat{\zeta}=\hat{\zeta}\cdot\hat{F} \quad (5.3.2).$$

Анда (5.3.1) теңдемеден пайдалансак, $\hat{F}\psi=\lambda\psi$ жана $\hat{\zeta}\psi=\mu\psi$,

$$\hat{F}\left(\hat{\zeta}\psi\right)=\hat{F}(\mu\psi)=\mu\hat{F}\psi=\mu\lambda\psi$$

$$\hat{\zeta}\left(\hat{F}\psi\right)=\hat{\zeta}(\lambda\psi)=\lambda\hat{\zeta}\psi=\lambda\mu\psi$$

Ал эми λ жана μ сандары алгебралык сандар болгондуктан, ал коммутативдүүлүк касиетке ээ, б.а. $\mu\lambda\psi=\lambda\mu\psi$. Анда $\hat{F}\cdot\left(\hat{\zeta}\psi\right)=\hat{\zeta}\cdot\left(\hat{F}\psi\right)$ же $\hat{F}\cdot\hat{\zeta}=\hat{\zeta}\cdot\hat{F}$.

Кванттык механиканын операторлорунун коммутативдүүлүгүн карайлы.

Төмөнкү операторлордун ($\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ жана $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$) өз ара коммутативдүүлүгүн аныктайлы.

а) $\hat{P}_x$ *жана* $\hat{P}_y$ операторлорун карайлы, анда

$$\hat{P}_x\cdot\hat{P}_y=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}=\hat{P}_y\cdot\hat{P}_x.$$

Бул аныктоодон көрүнгөндөй $\hat{P}_x\cdot\hat{P}_y=\hat{P}_y\cdot\hat{P}_x$ болот. Б.а. бул операторлор коммутативдик операторлор жана жалпы өздүк функцияга ээ болушат. Ошондуктан микробөлүкчөнүн бир эле абалы үчүн бул операторлордун жалпы өздүк функцияларынын теңдемесин жазып, ал операторлордун өз маанилерин аныктоого мүмкүн:

$$\hat{P}_x\cdot\psi=P_x$$

$$\hat{P}_y\cdot\psi=P_y$$

Ушундай эле жол менен $\hat{P}_x\cdot\hat{P}_z$ жана $\hat{P}_y\cdot\hat{P}_z$ операторлорунун да өз ара коммутативдүү экенин көрсөтүүгө мүмкүн. Анда микробөлүкчөнүн бир эле абалы үчүн бул операторлордун өздүк маанилерин аныктоого мүмкүн экендигин көрөбүз.

б) $\hat{P}_x$ жана $\hat{y}$ операторлорун карайлы. Анда бул операторлор үчүн $\hat{P}_x\cdot\hat{y}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\cdot y=y\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}=\hat{y}\cdot\hat{P}_x$

$$\hat{P}_x\cdot\hat{y}=\hat{y}\cdot\hat{P}_x$$

Мына ошентип $\hat{P}_x$ *жана* $\hat{y}$ операторлору да өз ара коммутативдүү, ошондуктан жалпы өздүк функцияга ээ болушат жана микробөлүкчөнүн бир эле абалы үчүн бул операторлордун өздүк маанилерин аныктоо мүмкүн. Ушундай эле жол менен, $\hat{P}_y \cdot \hat{x}$; $\hat{P}_z \cdot \hat{x}$; $\hat{P}_x \cdot \hat{z}$; $\hat{P}_y \cdot \hat{z}$; $\hat{P}_z \cdot \hat{y}$ операторлору үчүн дагы ушундай жыйынтыкка келебиз.

в) $\hat{P}_x$ *жана* $\hat{x}$ операторлордон коммутативдүүлүгүн карайлы.

$$\hat{P}_x \cdot \hat{x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \cdot x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial x}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \text{ жана } \hat{x} \cdot \hat{P}_x = x \cdot \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x};$$

Бул барабардыктардын оң жактары барабар эмес, ошондуктан сол жактары да барабар эмес болушат, б.а. $\hat{P}_x \cdot \hat{x} \neq \hat{x} \cdot \hat{P}_x$ болот. Демек, $\hat{P}_x, \hat{x}$ операторлору коммутативдүү эмес. Ошондуктан ал операторлор жалпы өздүк функцияга ээ болушпайт жана микробөлүкчөнүн бир эле абалы үчүн бул операторлордун өздүк маанилерин аныктоого мүмкүн эмес. Ушундай эле жол менен $\hat{P}_y, \hat{y}$, $\hat{P}_z, \hat{z}$ операторлорунун коммутативдүү эмес экендигин көрсөк болот.

Мына ошентип бир эле абал үчүн микробөлүкчөнүн координатын жана ошол координаталары боюнча импульстун түзүүчүсүн аныктоого мүмкүн эмес.

Ошондой эле жол менен $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ жана $\hat{L}^2$ операторлорунун дагы өз ара коммутативдүү эмес экендигин аныктоого мүмкүн. Ошондуктан бул операторлордун да өздүк маанисин микробөлүкчөнүн бир эле абалы үчүн аныктоого мүмкүн эмес.

Бир эле мезгилде микробөлүкчөнүн координаталарын жана координат боюнча импульсун аныктоого мүмкүн болбогондук микродүйнөнүн өзгөчөлүгүнө негизделген жана макродүйнөдөн айырмаланып ал толкундук касиетке ээ. Импульс, координата макробөлүкчөлөрдү мүнөздөөчү чоңдуктар. Бул физикалык чоңдуктарды микробөлүкчөлөрдүн абалдарын аныктоо үчүн пайдалансак, анда ал чоңдуктардын так маанисин бир мезгилде аныктоого мүмкүн эмес экендиги келип чыгат.

§4. Физикалык чоңдуктардын орточо маанилери. Гейзенбергдин аныксыздыгы.

Кванттык механиканын методдорунун негизинде физикалык чоңдуктардын так маанисин бир учурда аныктоого мүмкүн болбогон мезгилде ал чоңдуктардын орточо маанисин аныктоого мүмкүн.

$$\bar{x} = \int \hat{x}\psi\psi^* dx \qquad \bar{y} = \int \hat{y}\psi\psi^* dy$$

$$\overline{P_x} = \int \hat{P}_x\psi\psi^* dx \qquad \overline{P_y} = \int \hat{P}_y\psi\psi^* dy \qquad (5.4.1).$$

Эгерде кандайдыр бир физикалык чоңдуктун оператору өздүк функцияга ээ болсо, анда аныкталуучу чоңдуктун орточо мааниси ал чоңдуктун өздүк мааниси менен дал келет.

$\hat{P}_x\psi = P_x\psi$.

Эгерде ψ-функциясы жалпы өздүк функция болсо, анда

$\overline{P_x} = \int \hat{P}_x\psi\psi^* dx = \int P_x\psi\psi^* dx = P_x\int \psi\psi^* dx = P_x \cdot 1 = P_x$ болот, б.а. $\overline{P_x} = P_x$

Эгерде оператор өздүк функцияга ээ болбогон учурда кванттык механиканын методдору физикалык чоңдуктардын орточо маанисин жана анын өздүк маанисинен четтөөсүн аныктоого мүмкүндүк берет. Коммутативдүү операторлор үчүн бул орточо маанинин өздүк мааниден четтөсү Гейзенбергдин аныксыздыгы менен байланышкан жана орточо маанинин өздүк мааниден четтөөсү каалагандай кичинекей сан болуусу мүмкүн эмес.

Жогоруда биз карап көргөндөй $\hat{P}_x, \hat{x}$, $\hat{P}_y, \hat{y}$ жана $\hat{P}_z, \hat{z}$ операторлору өз ара коммутативдүү эмес жана ал операторлор жалпы өздүк функцияга ээ болушпайт. Мына ошондуктан ал микробөлүкчөнүн бир эле абалы үчүн бул операторлордун өздүк маанисин аныктоого мүмкүн эмес. Бирок бул операторлордун орточо маанисин жана орточо маанисинин өздүк мааниден четтөөсүн аныктоого мүмкүн. Эгерде кандайдыр бир x өзгөрүлмө берилсе, анда бул ө згөрүлмөнүн орточо маанисин жана орточо квадраттык четтөөсүн төмөндөгүдөй аныктоого мүмкүн.

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{\Delta x^2} \qquad (5.4.2).$$

Бул туюнтманы төмөнкүдөй өзгөртөлү:

$$\overline{\Delta x^2} = \overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{x^2} - 2\overline{x\bar{x}} + \bar{x}^2 = \overline{x^2} - 2\bar{x}^2 + \bar{x}^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2$$

$$\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \qquad (5.4.3).$$

Эсептөө системасын микробөлүкчөнүн тең салмактуулук абалы болгон координаттын башталышы менен дал келгендей кылып алсак, анда $\bar{x} = 0$ болот, анда

$$\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} \qquad (5.4.4).$$

Бул алынган жыйынтыкты төмөнкүдөй талкуулоого болот, б.а. кандайдыр бир чоңдуктун орточо квадраттык четтөөсү ал чоңдуктун орточо квадраттык мааниси менен дал келет, б.а. четтөө ошол чоңдуктун 100% түзөт.

Ал эми четтөөнүн кичинекей маанисинде, б.а. чоңдукту так аныктаган учурда $\overline{\Delta x^2} < \overline{x^2}$ болот.

Ушундай эле жол менен $\overline{\Delta P_x^2}$ үчүн да аныктоого мүмкүн.

Эми $\overline{\Delta x^2}$ жана $\overline{\Delta P_x^2}$, $\sqrt{\overline{\Delta x^2}}$ жана $\sqrt{\overline{\Delta P_x^2}}$, Δx жана ΔP_x өз ара байланышын карайлы.

Орточо маанилерди аныктоо эрежесин пайдалансак:

$$\left.\begin{aligned}\overline{\Delta x^2} &= \overline{x^2} = \int \hat{x}^2 \psi\psi^* dx \\ \overline{\Delta P_x^2} &= \overline{P_x^2} = \int \hat{P}_x^2 \psi\psi^* dx\end{aligned}\right\} \qquad (5.4.5).$$

$\overline{\Delta P_x^2}$ түрү бизге белгилүү болгондуктан жана ψ - функциянын өзүн-өзү камтыгандыгынан пайдалансак, анда төмөнкүнү алабыз,

$$\overline{\Delta P_x^2} = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx \qquad (5.4.6).$$

$\overline{x^2}$ жана $\overline{P_x^2}$ байланышын аныктоо үчүн төмөнкүдөй кошумча туюнтмадан пайдаланалы.

$$J(\alpha) = \int_x \left| \alpha x \psi + \beta \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2 dx \geq 0 \qquad (5.4.7).$$

Интеграл алдындагы функцияны өзгөртөлү, анда

$$\left(\alpha x \psi + \beta \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 = \left(\alpha x \psi + \beta \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \cdot \left(\alpha x \psi^* + \beta \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) =$$

$$= \alpha^2 x^2 \psi\psi^* + \alpha\beta x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) + \beta^2 \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} =$$

$$= \alpha^2 x^2 \psi\psi^* + \alpha\beta x \frac{d}{dx}\left(\psi^* \psi \right) + \beta^{2*} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Анда интеграл төмөнкүдөй түргө келет

$$\int_{(x)} \left(\alpha x \psi + \beta \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 dx = \alpha^2 \underbrace{\int_{(x)} x^2 \psi\psi^* dx}_{A} + \alpha\beta \underbrace{\int_{(x)} x \frac{d}{dx}\left(\psi\psi^* \right) dx}_{-B} + \beta^2 \underbrace{\int_{(x)} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx}_{C} \geq 0$$

Мындай белгилөөдөн кийин төмөнкүдөй барабарсыздыкты алабыз:

$$A\alpha^2 - B\alpha\beta + C\beta^2 \geq 0 \qquad (5.4.8).$$

Бул теңдеме α карата квадраттык теңдеме. Бул теңдеменин тамыры A>0 жана $4AC \geq B^2$ болгондо барабарсыздык аткарылат.

Анда белгиси A, B, C чоңдуктарынын маанисин аныктайлы. A – чоңдугун карайлы.

$A = \int_{(x)} x^2 \psi\psi^* dx = \overline{x^2}$, б.а. $A = \overline{x^2}$ болот.

Ал эми В – чоңдугун аныктасак, анда $B = -\int\limits_{(x)} x\frac{d}{dx}\left(\psi^{*}\psi\right)dx$.

Бул барабардыкты бөлүктөп интегралдасак,

$B = x\psi\psi^{*}\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int\limits_{(x)}\left(\psi\psi^{*}\right)dx = 0 + 1 = 1$ болот.

Ал эми С чоңдугунун мааниси төмөнкүдөй:

$C = \int\limits_{(x)}\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial x}dx.$

Бул интегралды да бөлүктөп интегралдасак, анда $C = \left(\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty} - \int\limits_{(x)}\psi^{*}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx = 0 - \int\limits_{(x)}\psi^{*}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx$ же $C = -\int\limits_{(x)}\psi^{*}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx$.

Бул барабардыктын эки жагын тең $\hbar^2$ көбөйтөлү.

$C\cdot\hbar^2 = -\hbar^2\int\limits_{(x)}\psi^{*}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx$. Бул барабардык оң жагы (5.4.6). формуласынан көрүнгөндөй $\overline{P_x^2}$ барабар, анда сол жагы да $\overline{P_x^2}$ барабар болушу керек же $\overline{P_x^2} = C\cdot\hbar^2$ (5.4.9).

Ал эми $\overline{x^2}$ жана $\overline{P_x^2}$ байланышын аныктайлы,

$\overline{x^2}\cdot\overline{P_x^2} = \hbar^2 A\cdot C$ болот. Бул барабардыктын эки жагын төрткө бөлүп жана көбөйтөлү, анда $\frac{\hbar^2}{4}4A\cdot C \geq \frac{\hbar^2}{4}B = \frac{\hbar^2}{4}$.

Б.а. $\overline{x^2}\cdot\overline{P_x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$ болот. Ал эми $\sqrt{\overline{\Delta x^2}}\cdot\sqrt{\overline{P_x^2}} \geq \frac{\hbar}{2}$. Орточо квадраттык четтөөгө өтсөк, анда $\Delta x\cdot\Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}$ болот.

Ушундай эле жол менен $\Delta y\cdot\Delta P_y \geq \frac{\hbar}{2}$ жана $\Delta z\cdot\Delta P_z \geq \frac{\hbar}{2}$ экендигин аныктоого болот.

Жалпы учурда

$$\left.\begin{aligned}\Delta x\cdot\Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}\\ \Delta y\cdot\Delta P_y \geq \frac{\hbar}{2}\\ \Delta z\cdot\Delta P_z \geq \frac{\hbar}{2}\end{aligned}\right\} \qquad (5.4.10).$$

Бул барабарсыздык бизге белгилүү Гейзенбергдин аныксыздыктарынын байланышы болот.

Гейзембергдин аныксыздыктарынын байланышы классикалык физиканын законченемдүүлүктөрүн толугу менен микробөлүкчөнүн абалын аныктоо үчүн пайдаланууга мүмкүн эмес.

Мына ошентип бөлүкчөнүн координатын жана импульсун бир эле мезгилде так аныктоого мүнкүн эмес. Бөлүкчөнүн координатын жана импульсун так аныктоо үчүн эки бөлөк тажрыйба жүргүзүүнүн зарылчылыгы келип чыгат. Мындай эки түрдүү тажрыйбаларды жүргүзүүнүн зарылчылыгы *Бордун кошумчалык принциби* деп аталат. Ал эми Гейзембергдин аныксыздыктарынын байланышы Бордун кошумчалык принцибинин математикалык туюнтмасы болот.

VI глава. ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕЛЕРИ

§1. Шредингердин убакыттан көз каранды болбогон стационардык теңдемеси

Микробөлүкчөлөрдүн кыймылын жазуучу теңдеме ал бөлүкчөнүн корпускулярдык касиетин да, толкундук касиетин да көрсөткөн болуусу керек.

Кванттык механикада физикалык чоңдуктардын маанилери жогорудан бизге белгилүү болгондой өздүк операторлордун өздүк маанилери менен аныкталышат. Микробөлүкчөнүн толук энергиясынын аныктоо үчүн толук энергиянын операторунун өздүк маанисин аныктоо керек.

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\hat{U}(x,y,z) \qquad (6.1.1).$$

Бул оператордун өздүк маанисин аныктоо үчүн теңдемени түзүү жана аны чечүү керек.

Ал теңдеме $\hat{H}\psi=E\psi$ (6.1.2).

$\hat{H}$ операторунун маанилерин ордуна койсок,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\hat{U}_{\psi}=E\psi \qquad (6.1.3).$$

же төмөнкүдөй өзгөртүп түзсөк

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+(E-U)\psi=0 \qquad (6.1.4).$$

же

$$\nabla^2\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0 \qquad (6.1.5).$$

(6.1.2)÷(6.1.5) – теңдемелер Шредингердин стационардык теңдемелери деп аталат. Бул теңдемелер релятивистик эмес кванттык механиканын негизги теңдемелери болушат. Шредингердин теңдемелеринин чечими Е менен ψ-функцияны аныктоого алып келет.

Бул теңдемелер микробөлүкчөлөрдүн стационардык абалын (убакыттан көз каранды болбогон абалын) аныктоодо колдонулат.

§2. Шредингердин убакыттан көз каранды болгон жалпы теңдемеси

Ал үчүн де-Бройль толкунунан пайдаланабыз.

$$\psi = e^{i\frac{1}{\hbar}(\vec{P}\vec{r} - Et)} \qquad (6.2.1).$$

Бул функцияны убакыт боюнча дифференциалдасак $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\frac{1}{\hbar}E\psi$. Мындан $E \cdot \psi$ аныктайлы, анда $E\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t}$; Бул маанини Шредингердин стационардык теңдемеси (6.1.3) койсок

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \hat{U}\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (6.2.2).$$

Бул теңдеме убакыттан көз каранды болгон Шредингердин жалпы теңдемеси.

Шредингердин теңдемесинин физикалык маанисин карайлы. Ал үчүн классикалык физикадагы толкундун теңдемеси менен салыштыралы. Вакуумда с-ылдамдыгы менен таралган электромагниттик толкундун теңдемеси:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vartheta}{\partial t^2} = \Delta^2 \vartheta \qquad (6.2.3).$$

ϑ - электромагниттик толкундун электрдик же магниттик түзүүчүсү.

Бул формула чыныгы чечимге ээ, анын чечими

$$\vartheta = a\cos[(kr - \omega t) + \varphi_o] \qquad (6.2.4).$$

Ал эми Шредингердин теңдемеси мындай чыныгы чечимге ээ эмес, ал комплекстүү чечимге ээ.

Шредингердин теңдемесинин чечими мезгилдүү болот. Бул теңдемедеги ψ-функция толкундук функция деп аталат. Анын физикалык маанисин аныктоо үчүн микробөлүкчөлөрдүн толкундук жана корпускулярдык касиетин эске алуу керек. Толкундук функцияны (де-Бройль толкунун) мейкиндикте таралган чыныгы толкун катарында кароого болбойт. Ал микробөлүкчөлөрдүн толкундук касиетин гана мүнөздөйт. Толкундук функциянын жардамында микробөлүкчөнүн кыймылынын ыктымалдуулугун аныктоого мүмкүн, б.а. убакыттын белгилүү моментинде мейкиндиктин белгилүү көлөмүндө болуу ыктымалдуулугун гана аныктай алабыз.

Ал эми $|\psi|^2$ бөлүкчөнүн аныкталуу ыктымалдуулугунун тыгыздыгы деп аталат. Эгерде ыктымалдуулуктун тыгыздыгы $|\psi|^2$ мейкиндиктин берилген областында ($d\tau = dx \cdot dy \cdot dz$) нөлдөн айырмаланса, анда микробөлүкчө мейкиндиктин ошол бөлүгүндө

сөзсүз болот, бирок анын кайсыл бир чекитинде болуусун так аныктоого мүмкүн эмес.

Бөлүкчөнүн берилген көлөмдө болуу ыктымалдуулугу математикалык түрдө төмөнкүдөй жазылат.

$$\int\limits_{d\tau} |\psi|^2 \, d\tau = 1 \qquad (6.2.5).$$

Бул шарт кванттык механикада нормалдаштыруу шарты деп аталат.

ψ-функция экинчи тартиптеги дифференциалдык теңдеменин чечими болгондуктан, үзгүлтүксүз, бир тектүү жана чектелген болуу керек. Бул *стандарттуулук* шарты деп аталат. Биринчиден, эгерде потенциалдык энергия U беттик үзүлүшкө ээ болсо, анда бул бетте толкундук функция жана анын биринчи туундусу үзгүлтүксүз бойдон калуусу керек. Экинчиден, мейкиндиктин берилген областында потенциалдык энергия U чексизге айланса, анда бул областта толкундук функция нөлгө барабар болуусу керек. Үчүнчүдөн, ψ-функциянын үзгүлтүксүздүгү бул областтын чегинде ψ-функция нөлгө айланышын талап кылат.

Бул шарттарды канааттандырган Шредингердин теңдемеси E-нин ар кандай маанисинде эмес, айрым бир белгилүү $E_1, E_2, E_3, ..., E_n$ маанилеринде гана чечимге ээ болот. Шредингердин теңдемеси чечимге ээ болгон E-нин бул маанилери, б.а. $E_1, E_2, E_3, ..., E_n$ маанилери, энергиянын өздүк маанилери деп аталышат. Ал эми бул өздүк маанилерине туура келген теңдеменин чечими болгон функциянын $\psi_1, \psi_2, \psi_3, ..., \psi_n$ маанилери өздүк функциялар деп аталат. Энергиянын бул маанилери дискреттүү катарды түзөт. Ал эми бөлүкчөнүн кыймылы чектелбеген болбосо, анда анын энергетикалык спектри үзгүлтүксүз болот.

§3. Эркин бөлүкчө үчүн Шредингердин теңдемеси

Бизге белгилүү стационардык Шредингердин теңдемесинин жалпы түрү төмөндөгүдөй

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad (6.3.1).$$

Эркин кыймылда болгон микробөлүкчөнүн кыймылы oX огунун багыты боюнча болсо, анда байланыш операторунун y жана z түзүүчүлөрү нөлгө барабар болот, б.а.

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Микробөлүкчөгө сырттан таасир жок болгондуктан потенциалдык энергия U=U(x)=0 болот. Ал эми жалпы энергияны $E=E_X$ деп белгилейли. Анда Шредингердин теңдемеси oX багыты боюнча кыймылда болгон эркин бөлүкчө үчүн төмөнкүдөй болот.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_x \cdot \psi = 0 \qquad (6.3.2).$$

Бул теңдемени чечүү керек жана E_x менен ψ(x)-тин маанилерин аныктоо керек.

Ал үчүн (6.3.2) теңдеменин чечимин төмөнкүдөй түрдө изилдейли. $\psi(x)=ae^{\alpha x}$ (6.3.3.) Бул теңдемеде α-чоңдугу белгисиз. Ал чоңдукту аныктоо үчүн Шредингердин теңдемесинен пайдаланабыз.

(6.1.3) – чечимди диференцияласак жана анын маанисин (6.3.2)-ге койсок,

$$a\alpha^2 e^{\alpha x} = -\frac{2m}{\hbar^2} E_x a e^{\alpha x}.$$

Бул формуладан α^2-ты аныктасак,

$$\alpha^2 = -\frac{2mE_x}{\hbar^2} \quad \text{же} \quad \alpha = \pm\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE_x} \qquad (6.3.4).$$

Бул маанисин (6.3.3) функциясына койсок

$$\psi(x) = ae^{\pm\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x} \qquad (6.3.5).$$

Бул функция (6.3.2)-теңдеменин чечими болот. (6.3.5)-формулада i болгондуктан ψ(x) функциясы мезгилдүү болот.

Мейкиндиктин координаты X болгон ар кайсыл чекиттеринде микробөлүкчөлөрдүн болуу ыктымалдуулугунун тыгыздыгын аныктыйлы, б.а. $|\psi|^2$-ты аныктайлы.

$|\psi|^2 = a^2(e^{+\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x})(e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x}) = \alpha^2$. Себеби математикада $e^{+i\beta}\cdot e^{-i\beta}=1$.

Анда

$$|\psi|^2 = \alpha^2 \qquad (6.3.6).$$

Эркин кыймылда болгон микробөлүкчө үчүн ыктымалдуулуктун тыгыздыгынын туруктуулугу жана нөлдөн айырмаланышы мейкиндиктин белгилүү бир бөлүгүндө локализацияланган эмес экендигин, ал координаты X болгон мейкиндиктин баардык көлөмү боюнча камтылгандыгын көрсөтөт.

Энергиянын (E_x) маанисин ψ-функциянын стандарттуулук шартынан аныктайбыз. Стандарттуулук шарты боюнча $E_x>0$ болгон бардык маанилери үчүн ψ-функция мезгилдүү жана чектелген. Ал эми эркин бөлүкчө үчүн энергиянын $E_x>0$ болгон мааниси үзгүлтүксүз болот.

§4. Толук энергиянын жана импульстун операторлорунун өздүк функциясы

Эгерде микробөлүкчө оХ огу боюнча эркин кыймылда болсо, анда толук энергиясынын оператору

$$\hat{H}_x = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad (6.4.1).$$

Ал эми микробөлүкчөнүн импульсунун оператору

$$\hat{P}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad (6.4.2).$$

Анда ψ-функция импульстун операторунун өздүк функциясы экендигин төмөнкүдөй текшерели.

$$\hat{P}_x\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[ae^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x}\right] = \frac{\hbar}{i}ae^{i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}}\cdot\frac{i}{\hbar}\sqrt{2mE_x} = \sqrt{2mE_x}\cdot\psi;$$

$$\hat{P}_x\psi = \sqrt{2mE_x}\cdot\psi \qquad (6.4.3).$$

Эгерде $P_x = \sqrt{2mE_x}$ өздүк маани болсо, анда ψ өздүк функция болот.

$$P_x = \sqrt{2mE_x} = \sqrt{2m\frac{P_x^{\,2}}{2m}} = P_x \qquad (6.4.4).$$

Мындан биз ψ(x) функциясы $\hat{P}_x$-операторунун өздүк функциясы экендигин көрдүк.

Суперпозиция принциби боюнча эгерде бөлүкчө ψ_1 жана ψ_2 абалында болсо, анда ал $\Psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2$ абалында да болот.

$$\left.\begin{aligned}\psi_1 &= a_1 e^{+i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot\chi}\\ \psi_2 &= a_2 e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot\chi}\end{aligned}\right\} \qquad (6.4.5).$$

c_1 жана c_2 каалагандай турактуу сандар болгондуктан $c_1=c_2=1/2$ деп алсак, анда

$$\Psi = \frac{a_2}{2}e^{+i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x} + \frac{a_2}{2}e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x} \qquad (6.4.6).$$

Бул формула математикада Эйлердин формуласына окшош. Ал эми Эйлердин формуласы $e^{+i\varphi}+e^{-i\varphi}=\cos\varphi+i\sin\varphi+\cos\varphi-i\sin\varphi=2\cos\varphi$. Мына ошондуктан $\Psi(x)=a\cos\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x$ деп алууга болот. Эгерде бөлүкчө бул абалда боло алса, анда ψ-функция толук энергиянын операторунун өздүк функциясы болушу керек. Аны теңдемеден көрөлү.

$$\hat{H}_x \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(a\cos\frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE_x \cdot x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{h}\sqrt{2mE_x})^2 a \cdot \cos\frac{1}{h}\sqrt{2mE_x} \cdot x =$$

$$= E_x \Psi(x) \cdot \hat{H}_x \Psi(x) = E_x \Psi(x)$$

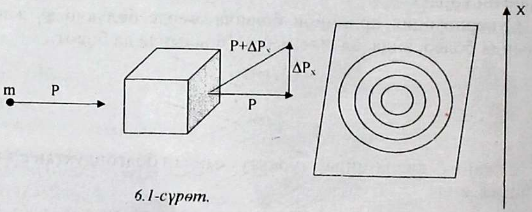
Мына ошентип E_x, $\hat{H}$ оператордун өздүк мааниси, ал эми $\Psi(x)$ өздүк функциясы экен.

Суперпозиция принцибинин негизинде алынган $\Psi(x)=c_1\psi_1+c_2\psi_2$ функциясы эркин бөлүкчөнүн импульсунун операторунун өздүк функциясы болбойт. Аны текшерип көрөлү.

$$\hat{P}_x \Psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(\alpha\cos\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x} \cdot X) = \frac{\hbar}{i}\left(-a\sin\frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE_x} \cdot X\right) \cdot \frac{\pi}{\hbar}\sqrt{2mE_x} \cdot 1 \neq P_x \Psi$$

Бул алынган Ψ-функция кандай учурга туура келе түргандыгын карап көрөлү.

$\Psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2$ абалын ψ_1 жана ψ_2 кошулгандан кийинки интерференциялык абал катарында карайлы. Анда ψ_1 жана ψ_2 абалдарды эркин микробөлүкчөлөрдүн тоскоолдуктар аркылуу өткөн мезгилиндеги дифракциясынын негизинде алууга мүмкүн. $\Psi(x)$ функция P_x- тин өздүк функциясы болбогондуктан микробөлүкчөнүн дифракциясынан кийин, алардын импульсун P_x так аныктоого мүмкүн эмес. Чындыгында эле микробөлүкчө дифракцияланганда кийин экрандын ар кандай бөлүгүндө түшүшү мүмкүн жана импульстун мааниси ар кандай (разброс) болушу мүмкүн (6.1-сүрөттү караңыз).



6.1-сүрөт.

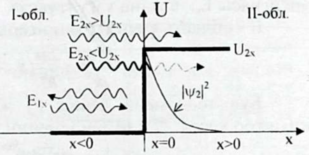
Мына ошентип эркин микробөлүкчө үчүн Шредингердин теңдемеси чындыгында тажрыйбада байкалган эффекти, кристаллдагы микробөлүкчөлөрдүн дифракциясын сүрөттөйт.

VII глава. ПОТЕНЦИАЛДЫК ТОСМОДОГУ МИКРОБӨЛҮКЧӨ ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ

Бизге белгилүү жалпы учур үчүн Шредингердин стационардык теңдемеси

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = O \qquad (7.1.1).$$

Бөлүкчөнун кыймылы оX огунун багыты боюнча, ал эми ордината болсо U боюнча болсун дейли. Анда $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, ал эми потенциалдык энергия $U=U_x$, толук энергия $E=E_x$ болот, (7.1-сүрөттү караңыз).



7.1 – сүрөт

Анда берилген учур үчүн Шредингердин теңдемеси:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{h^2}(E_x - U_x)\psi = O \qquad (7.1.2).$$

Бул теңдемени чечип E_x менен ψ-функциянын маанисин аныктоо керек.

Потенциалдык тосмону эки областка бөлөлү: I – область потенциалдык тосмого чейинки область, ал эми II – область потенциалдык тосмонун областы.

I-чи область үчүн $U_{x1}=0$ болгондуктан, (7.1.2) теңдеме төмөнкүдөй түргө келет.

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_x\psi = O \qquad (7.1.3).$$

Бул теңдеме X огу боюнча эркин кыймылда болгон бөлүкчө үчүн Шредингердин теңдемесине окшош.

Анын чечими мурда бизге белгилүү болгондой төмөнкүдөй түрдө аныкталат.

$$\psi(x) = ae^{+i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x} \qquad (7.1.4).$$

Эгерде микробөлүкчө эркин кыймылда болсо, анда ал үчүн “+” жана “-” белгиси менен алынган чечим айырмаланган болот жана ал учур микробөлүкчөнүн солдон оңго карай жана оңдон солго карай болгон кыймылына туура келет. Ал эми азыркы учурда потенциалдык тосмонун I - областы үчүн бул чечимдер бирге жашайт жана бул учурлар келип түшкөн жана чагылган толкунга туура келет.

Бул толкундар өз ара бири-бири менен аракет эткенде туруучу (стоячая) толкун пайда болот.

$$\psi_1 = a_1 e^{+i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x} + a_2 e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_x}\cdot x} \qquad (7.1.5).$$

Бул ψ_1- функция I область үчүн толкундук функция болот. ψ_1 функциясы үчүн стандарттуулук шартынан пайдаланып, энергия E_{x1} маанисин аныктайлы. ψ_1- функциясы мезгилдүү болсо, $E_{x1}>0$ болгон учурда ал стандарттуу болот.

Мына ошондуктан I – областтагы микробөлүкчөлөрдүн энергиясы $E_{x1}>0$ жана үзгүлтүксүз.

II - область үчүн Шредингердин теңдемесин карайлы,

$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_x-U_{2x})\psi_2=0 \qquad (7.1.6).$$

Бул теңдемени чечип E_x жана ψ функциясынын маанисин аныктоо керек. (7.1.6) теңдеменин чечимин төмөнкүдөй изилдейли.

$$\psi_2=a_2e^{ikx} \qquad (7.1.7).$$

Бул функциядан биринчи жана экинчи дифференциалын алып, аларды Шредингердин теңдемесине коелу.

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-a_2k_1e^{ikx}$$

$$-a_2k^2e^{ikx}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_x-U_{2x})a_2e^{ik_1x}=0$$

$$k^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E_x-U_{2x})$$

$$k_1=\pm\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E_x-U_{2x})}$$

$$\psi_2=\alpha_2e^{\pm i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E_x-U_{2x})}\cdot x} \qquad (7.1.8).$$

а) $E_x>U_{2x}$, б.а. бөлүкчө потенциалдык тосмонун үстүндө болгон учур.

Анда II - область үчүн ψ_2-функция оң болот, ошондой эле E_x-тин бул маанилери үчүн ψ_2-функциянын мезгилдүүлүгү сакталат жана функция стандарттуу болот.

Потенциалдык тосмонун үстүндө бөлүкчө энергиясы E_x-U_{2x} болгон эркин бөлүкчөдөй кыймылда болот.

б) $E_x<U_{2x}$ болгон учурду карайлы.

Бул учур макробөлүкчөлөр үчүн аткарылбайт, б.а. эч убакта макробөлүкчөлөр үчүн жалпы энергия потенциалдык энергиядан кичинекей болушу мүмкүн эмес. Ал эми микробөлүкчөлөр үчүн мындай абал болушу мүмкүн. Бул учурда $\psi_2=\alpha_2e^{-i\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_{2x}-E_x)}\cdot x}\neq 0$.

ул учур үчүн даражада + белгиси функцияны стандарттуулук артын канааттандырбайт. Мына ошондуктан ал учур физикалык ааниге ээ болбойт.

Бул абал үчүн ыктымалдуулуктун тыгыздыгын аныктайлы.

$$|\psi|^2 = \alpha_2{}^2 e^{-2kx} \text{ же } |\psi_2| = \alpha_2{}^2 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_{2x}-E_x)}\cdot x} \quad (7.1.9).$$

Бул жыйынтыктан көрүнгөндөй микробөлүкчөнүн отенциалдык тосмонун ичинде болуу ыктымалдуулугу нөлдөн йырмаланат, б.а. микробөлүкчө потенциалдык тосмонун ичинде олушу мүмкүн.

Потенциалдык тосмонун калыңдыгынын жогорулашы менен, .а. x-тин өсүшү менен (7.1.9) көрүнгөндөй $|\psi_2|^2$-тын мааниси кспоненциалдык закон боюнча төмөндөйт, бирок ал нөлдөн йырмаланат. Микробөлүкчө, макробөлүкчөлөр үчүн "тыюу" алынган зонага өтөт. Бул кубулуш *туннелдик эффект* деген ат ненен белгилүү.

Туннелдик эффекттин чоңдугун аныктайлы.

Мисалы электрондордун агымы үчүн карайлы.

U_{2x}-E_x=1эВ=$1{,}6\cdot10^{-12}$эрг., $m_{oe}=9\cdot10^{-31}$кг. Ал эми тосмонун калыңдыгы =1Å=10^{-10}м.

$$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_{2x}-E_x)}\cdot x = \frac{4\cdot3}{6\cdot10^{-27}}\sqrt{2\cdot9\cdot10^{-28}\cdot1{,}6\cdot10^{-12}}\cdot10^{-8} = 1{,}045$$

$$|\psi_2|^2 = a^2{}_2 e^{-1{,}045} = 0{,}3\cdot a_2{}^2 = 30\%\cdot a_2{}^2$$

$$|\psi_2|^2 = 30\%\cdot a_2{}^2$$

Мына ошентип тосмого келген электрондордун 30% тосмодон Å аралыкка өтүшү мүмкүн, б.а. эгерде потенциалдык тосмонун калыңдыгы 1Å болсо, анда келип түшкөн электрондордун 30% бул госмо аркылуу өтүшөт.

Чектелген бийиктикке жана кеңдикке ээ болгон потенциалдык госмо металл менен вакуумдун чегинде болот. Металлдын ичинде кана металлдын сыртында электрон эркин кыймылда, б.а. "бош" болот.

Потенциалдык тосмо аркылуу микробөлүкчөлөрдүн өтүшү микробөлүкчөнүн толкундук касиетинин көрүнүшү болот. Туннелдик эффект металлдардын теориясында жана ядролук физикада өтө чоң мааниге ээ.

Мындай кубулуштарга, муздак эмиссия кубулушун (төмөнкү температурада металлдан электрондордун бөлүнүп чыгуу кубулушу), туннелдик рекомбинациялык люминесценция кубулушу, контактуу потенциалдар айырмасынын пайда болуусу жана ядролук физикада α-бөлүнүүнү келтирүүгө болот.

Муздак эмиссия кубулушундагы электрондордун жана α-бөлүнүү кезиндеги α-бөлүкчөнүн энергиялары потенциалдык тосмолордун энергиясынын төмөн. Мына ошондуктан классикалык физиканын закон ченемдүүлүктөрүнүн негизинде бул процесстердин аткарылышы мүмкүн эмес. Бирок, бул кубулуштар туннелдик эффекттин негизинде потенциалдык тосмонун ичинен туннелдик өтөт.

$|\psi_2|^2$-тын тосмонун калыңдыгы x тен көз карандылыгын карайлы. Мисалы тосмонун калыңдыгы x=5Å, ал эми $U_{2x}-E_x$=1эВ болсо, $\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_{2x}-E_x)}\cdot x = 5{,}225$ болот, да туннелдик эффектин ыктымалдуулугунун тыгыздыгы $|\psi_2|^2=a_2^2e^{-5{,}225}=0{,}0005a_2^2=0{,}5\%a_2^2$, б.а. өтө кичинекей. Ал эми x=10Å болсо, $|\psi_2|^2=5\cdot10^{-8}a_2^2$ болот да, андан да кичинекей мааниге ээ.

Потенциалдык тосмо аркылуу бөлүкчөнүн өтүүсү жана чагылышы өтүү коэффициенти Д жана чагылуу коэффициенти R менен аныкталат.

Бул коэффициенттер чагылган жана өткөн бөлүкчөлөрдүн тыгыздыгынын келип түшкөн бөлүкчөнүн тыгыздыгына болгон катышы менен аныкталат. Мына ошондуктан Д+R=1.

Өтүү коэффициенти $Д = e^{-2\kappa d} = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_{2x}-E_x)}\cdot d}$

Бул функциялардан өтүү коэффициенти Д тосмонун калыңдыгынан (d) өтө чоң көз каранды экендиги көрүнүп турат.

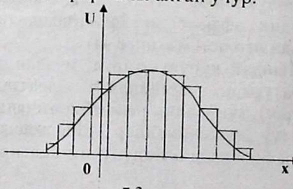
Мисалы электрон үчүн $\left(m_o = 9{,}1\cdot10^{-28}\,г\right)$ карай турган болсок,

$$d \le \frac{\hbar}{2\sqrt{2m_e(U_{2x}-E_x)}} \approx \frac{10^{-13}}{8{,}4}\frac{1}{\sqrt{U_{2x}-E_x}}\,см \qquad (7.1.10).$$

Эгерде $U_o - E_x \approx 1\,эВ \approx 1{,}6\cdot10^{-12}$ эрг жана $d\approx10^{-8}$см болсо, анда өтүү коэффициенти нөлдөн айырмаланат да электрон потенциалдык тосмодон өтөт. Макроскопиялык кубулуштар үчүн туннелдик эффект негизги ролду ойнобойт.

2. Потенциалдык тосмо каалагандай форманы алган учур.

Потенциалдык тосмо каалагандай форманы алса жакындатылган тик бурчтуу потенциалдык тосмолордун катары түрүндө кароого мүмкүн (7.2-сүрөттү караңыз). Бул учурда кандайдыр бир тосмодон өткөн бөлүкчөлөрдүн саны,



7.2 – сүрөт.

экинчи тосмо үчүн бөлүкчөлөрдүн баштапкы саны болот. Жалпы өтүү коэффициенти ар бир тосмолордон өтүү коэффициенттеринин көбөйтүндүлөрүнө барабар.

Потенциалдык энергия жай өзгөрүлсө, жогорку формуладагы экспонентте сандык көбөйүүчү өтө акырын өзгөрүлөт. Мына ошентип потенциалдык тосмо U(x) каалагандай болсо, өтүү коэффициенти жакындатылган түрдө төмөнкүдөй болот:

$$D = D_0 \exp\left\{ -\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_0\left[U_{2x} - E_x\right]}dx \right\} \qquad (7.1.11).$$

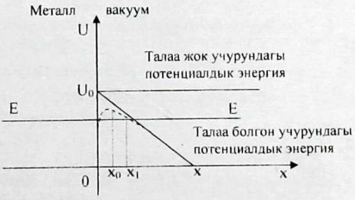
3. Металлдардан электрондордун төмөнкү температурада бөлүнүп чыгышы (муздак эмиссия кубулушу).

Электрон металлда кандайдыр бир потенциалдык күчтүн таасиринин натыйжасында кармалып турат. Мына ошондуктан электронду металлдан ажыратуу үчүн белгилүү энергияны сарп кылуу керек. Бул электрондун потенциалдык энергиясы металлдын ичинде анын сыртына караганда чоң. Ал эми металл-вакуум чегинде потенциалдык энергия кескин жогорулайт.

Металлдын ичинде электрондор эң төмөнкү энергетикалык денгээлди ээлейт. Ал эми металлдын бетине жакын аралыкта күчтүү 10^6В/см электр талаасын койсок, металлдын бетинен электрондор жулунуп чыга баштайт. Бул кубулуш *"муздак эмиссия" кубулушу* деп аталат.

Классикалык механиканын көз карашынын негизинде бул кубулушту түшүндүрүүгө мүмкүн эмес. Электр талаасы металлдын ичине кирбейт, металлдын сыртында анын потенциалдык энергиясы өзгөрүлөт. Металлдан электрон учуп чыгуу үчүн потенциалдык тосмодон өтүү керек. Бирок анын энергиясы потенциалдык тосмонун энергиясынан кичинекей.

Мына ошондуктан классикалык механиканын негизинде электрон металлдан чыга албайт. Сырткы электр талаасынын чыңалышы E болгон талаа металлга x-багыты боюнча коюлсун. Бул учурда потенциалдык энергия төмөндөгүдөй түрдү алат $U(x)=U_0-eEx$ (7.3-сүрөттү караңыз).



7.3 – сүрөт.

Муздак эмиссия кубулушу кванттык теориянын негизинде туннелдик эффект менен

түшүндүрүлөт. Өтүү коэффициенти $D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_1}\sqrt{2m_o[U(x)-E]}\,dx\right)$

Өтүү интегралы тосмонун бардык калындыгы боюнча x=0 чекиттен $x=x_1$ чекитине чейин болот. Ал төмөнкү шарттын негизинде аныкталат.

$U_0 - eEx_1 = E$, мындан $x_1 = \frac{U_0 - E}{eE}$, мында E-электр талаасынын чыңалышы.

$$\int_0^{x_1}\sqrt{U(x)-E}\,dx = \int_0^{x_1}\sqrt{U_0 - eEx - E}\,dx = \sqrt{eE}\int_0^{x_1}\sqrt{x_1 - x}\,dx = \frac{2}{3}\sqrt{eE}\,x_1\,\frac{3}{2}$$

D-ны аныктасак, $D = e^{-\frac{4}{3}\sqrt{2m_0}\cdot\frac{(U_0-E)^{\frac{3}{2}}}{eh\cdot E}} = e^{-\frac{\varepsilon_0}{E}}$. Мында $\varepsilon_0 = \frac{4}{3}\sqrt{2m_0}\cdot\frac{(U_0-E)^{\frac{3}{2}}}{eh}$ металлдын жаратылышынан жана андагы эркин электрондун энергиясынан көз каранды болгон чоңдук.

Муздак эмиссия учурунда пайда болгон ток өтүү коэффициентине (D) түз пропорциялаш.

$$I = I_0 D = I_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{E}};$$

Мындай муздак эмиссия тогунун сырткы электр талаасынын чыңалышынан (E) көз карандылыгы эксперименталдык жол менен аныкталган маани менен дал келген.

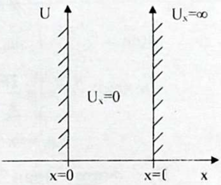
VIII глава. ПОТЕНЦИАЛДЫК ЧУНКУР ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТEҢДЕМЕСИ

Бизге белгилүү жалпы учур үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad (8.1.1).$$

Бөлүкчөнүн потенциалдык энергиясынын каралган учур үчүн координаттан көз карандылыгы жөнөкөй болсун үчүн бир өлчөмдүү координат системасында карайлы.

Координаттын $(0<x<\ell)$ интервалында потенциалдык энергия нөлгө барабар, б.а. $U=U_x=0$. Ал эми бул интервалдын сыртында ($x\leq 0$ жана $x\geq \ell$) потенциалдык энергия чексиз чоң, б.а. $U=U_x=\infty$ (8.1-сүрөттү караңыз).



8.1 – сүрөт

Мына ошондуктан бөлүкчө өзүнүн кыймылында $(0,\ell)$ интервалынан сыртка чыга албайт, б.а. ал потенциалдык чункурда жайланышкан.

Бөлүкчөнүн потенциалдык чункурдун сыртта болуу ыктымалдуулугу нөлгө барабар болгондуктан $(0,\ell)$ интервалынын сыртында ψ-функция нөлгө барабар болот. Функциянын үзгүлтүксүздүк шартынын негизинде $x=o$, жана $x=\ell$ чекиттеринде да $\psi=0$ болушу керек, б.а. $\psi(0)=\psi(\ell)=0$.

Потенциалдык энергия $U_x=0$ болгон потенциалдык чуңкурдун ичиндеги бөлүкчө үчүн Шредингердин теңдемеси

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_x\psi = o \quad \text{же} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = o \qquad (8.1.2).$$

Бул учурда $\alpha^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}E_x$

Бул теңдеменин жалпы чечимин төмөнкүдөй түрдө изилдейли:

$$\psi(x) = \mathrm{A}\cdot Sin(\alpha\cdot x) + \mathrm{B}\cdot Cos(\alpha\cdot x) \qquad (8.1.3).$$

Чектик шарттын негизинде x=0 чекиттинде $\psi(0)=0$ болушу керек. Ал үчүн $Cos\cdot 0 \neq 0$ болгондуктан ψ-функция стандарттуулук шартты канааттандырсын үчүн B=0 болушу керек.

Анда $$\psi(x) = \mathrm{A}\cdot Sin(\alpha\cdot x) \qquad (8.1.4).$$

Ал эми $\alpha=\ell$ чекитинде $\psi(\ell)=0$ болсун үчүн α-чоңдугу төмөнкүдөй маанилерди алышы керек.

$\alpha\cdot\ell=n\cdot\pi$, $\alpha_n=n(\pi/\ell)$, $n=0,1,2,3,...$ (8.1.5).

Анда α-нын маанилерин (8.1.4) формулага койсок, ψ(x)=A·sin(n(π/ℓ)·x). Бул формуладан көрүнгөндөй потенциалдык чункурда бөлүкчөнүн кыймылы кванттталат. ψ-функция чуңкурдун ичиндеги ар кандай чекиттерде нөлгө айланбайт.

Потенциалдык чункурдагы бөлүкчөнүн энергиясын аныктайлы. Ал үчүн жогорку (8.1.6)-формулада берилген функциядан эки жолу туунду алабыз

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx} = -n^2\frac{\pi^2}{\ell^2}A\cdot\sin(n\frac{\pi}{\ell}\cdot x)$$

ψ(x) жана $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ маанилерин Шредингердин (8.1.2) теңдемесине коелу.

Анда $-\frac{n^2\pi^2}{\ell^2}A\cdot\sin(n\pi\frac{x}{\ell}) + \frac{2m}{\hbar^2}E_x\cdot A\cdot\sin(n\pi\frac{x}{\ell}) = 0$.

Мындан $\frac{n^2\pi^2}{\ell^2} = \frac{2m}{\hbar^2}E_x$.

$$E_{xn} = n^2\frac{\hbar^2}{2m\ell^2} \qquad n=0,1,2,3,... \qquad (8.1.6).$$

Бул формуладан көрүнгөндөй микробөлүкчөнүн энергиясы дискреттүү маанилерди алат, б.а. потенциалдык чуңкурда бөлүкчөнүн энергиясы кванттталат.

n=0	$E_{xo}=0$	n=3	$E_{x3} = 9\frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell^2}$
n=1	$E_{x1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell^2}$	n=4	$E_{x4} = 16\frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell^2}$
n=2	$E_{x2} = 4\frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell^2}$	n=5	$E_{x5} = 25\frac{\hbar^2\pi^2}{2m\ell^2}$

Жогорку (8.1.6) формуладан көрүнгөндөй чуңкурдун сызыктуу өлчөмү (ℓ) кичирейгенде энергиянын минималдык мааниси чоңоет. Анын физикалык мааниси төмөнкүдөй. Чункурдун сызыктуу өлчөмүн кичирейтүү менен Де-Бройль толкунунун узундугу да кыскарат. Ал эми толкун узундуктун кыскарышы энергиянын чоңоюшуна алып келет.

Бул учурда энергетикалык спектр дискреттүү болгондуктан нормалдаштыруу шарты боюнча

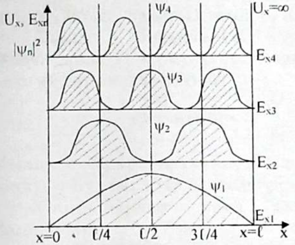
$$\int_0^{\ell}\psi^*\psi dx = A^2\int_0^{\ell}\sin^2(n\frac{\pi}{\ell}x)dx = A^2\frac{\ell}{2} = 1$$

Мындан $A = \sqrt{\frac{2}{\ell}}$; - нормалдаштыруучу чоңдуктун мааниси.

Мына ошентип жалпы учурда функция

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cdot \sin(n\pi \frac{x}{\ell}) \qquad (8.1.7).$$

Бул алынган жыйынтыктар график түрүндө 8.2-сүрөттө көрсөтүлгөн.



8.2 – сүрөт

$\psi_n(x)$ - функция белгилуу болсо ыктымалдуулуктун тыгыздыгын микробөлүкчөнүн ар кандай абалы үчүн жана потенциалдык чуңкурдун ар түрдүү бөлүктөрү үчүн аныктайлы.

1) n=0 болгондо $E_{xo}=0$; $|\psi_0|^2=0$ энергиясы $E_{xo}=0$ болгон абалда ыктымалдуулуктун тыгыздыгы нөлгө барабар, б.а. бул абалда бөлүкчө болбойт.

2) n=1; $E_x=E_{x1}$ жана $|\psi_1|^2 = A^2 \cdot \sin^2 \frac{\pi}{\ell} x$.

а) Эгерде x=0 жана x=ℓ болсо $|\psi_1|^2=0$ болот, б.а. бөлүкчө потенциалдык чункурдун четинде болбойт.

б) x=ℓ/2 болгондо, $E_x=E_{2x}$ жана $|\psi_1|^2=A^2$ максималдык мааниге ээ болот, б.а. бөлүкчөнүн чуңкурдун ортосунда болуу ыктымалдуулугу максималдуу.

Мына ошентип Шредингердин теңдемесин чечүү менен бөлүкчөнүн энергиясын жана анын чуңкурдун белгилүү участогунда болуу ыктымалдуулугун аныктоого мүмкүн.

3) n=2 болгондо, $|\psi_2|^2=A^2 \cdot \sin 2\pi(x/\ell)$ болот. Аныктоодон көрүнгөндөй x=0 жана x=ℓ чекиттеринде $|\psi_2|^2=0$, ал эми x=ℓ/4 жана x=3ℓ/4 чекиттеринде $|\psi_2|^2=A^2$ болот.

Анда потенциалдык чуңкурда x=ℓ/4 жана x=3ℓ/4 чекиттеринде микробөлүкчөнүн болуу ыктымалдуулугу жогору, ал эми x=0, x=ℓ/2 жана x=ℓ чекиттеринде микробөлүкчөнүн болуу ыктымалдуулугу нөл болгондуктан, потенциалдык чуңкурдун бул бөлүктөрүндө микробөлүкчө болбойт.

4) Ушундай эле жол менен n=3 учур үчүн $E_x=E_{3x}$ жана $|\psi_3|^2=A^2 \cdot \sin 3\pi(x/\ell)$ болот да, төмөнкүлөрдү алабыз:

x=0	$|\psi_3|^2=0$	x=ℓ/6	$|\psi_3|^2=A^2$
x=ℓ	$|\psi_3|^2=0$	x=ℓ/2	$|\psi_3|^2=A^2$
x=ℓ/3	$|\psi_3|^2=0$	$x = \frac{5}{6}\ell$	$|\psi_3|^2=A^2$

$x=2/3 \quad |\psi_3|^2=0$

Мына ошентип потенциалдык чуңкурда микробөлүкчөлөр массасына (энергиясына) карата өз алдынча сорттолуп, чуңкурдун ар кандай бөлүгүндө жайланышат, б.а. энергетикалык абалдарына карата квантталган болот.

IX глава. СЫЗЫКТУУ ГАРМОНИКАЛЫК ОСЦИЛЛЯТОР

Эгерде бөлүкчө тең салмактуулук абалынын айланасында гармоникалык термелүүгө ээ болсо, бул бөлүкчөнү *гармоникалык осциллятор* деп аташат. Мисалы үчүн кристаллдык торчодогу иондор, молекуладагы атомдор, ж.б.

Эгерде бөлүкчөнүн тең салмактуулук абалынын айланасындагы термелүүсү кичинекей болсо, анда потенциалдык энергия төмөнкүдөй болот:

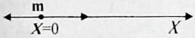
$$U(x)=U(0)+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)x^2+\frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 U}{\partial x^3}\right)x^3+\ldots \qquad (9.1.1).$$

Мында x микробөлүкчөнүн тең салмактуулук абалынан четтөө чоңдугу. Бул барабардыктын биринчи эки мүчөсү менен чектейли.

Стационардык учур үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй:

$$\nabla^2\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0 \qquad (9.1.2).$$

Эгерде микробөлүкчө тең салмактуу абалда 9.1-сүрөттө көрсөтүлгөндөй бир өлчөмдүү координат системасында термелүүгө ээ болсо, оператор төмөнкүдөй болот:



9.1-сүрөт

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

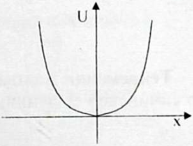
Потенциалдык энергиянын маанисин аныктайлы.

Микробөлүкчөнүн термелүүсү f = -κx, квазисерпилгичтүү күчтүн таасиринде болгондуктан, потенциалдык энергиянын мааниси төмөнкүдөй болот: $U=-\int_0^x f dx=\int_0^x \kappa x dx=\frac{\kappa x^2}{2}$; мында к – серпилгичтүүлүк коэффициенти.

$\omega^2=\frac{\kappa}{m}$; ω – бурчтук жыштык

$$\kappa=m\omega^2$$

$$U=\frac{m\omega^2}{2}x^2 \qquad (9.1.3).$$



9.2 – сүрөт

Анда потенциалдык энергия көрүнүшү боюнча потенциалдык чуңкурга окшош (9.2-сүрөттү караңыз).

Кванттык теорияда осциллятор үчүн Гамильтондун операторун колдонсок, ал төмөнкүдөй болот.

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m_0} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \qquad (9.1.4).$$

Анда осциллятор үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй жазылат:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{m\omega^2}{2}x^2)\psi = 0 \qquad (9.1.5).$$

Кийинки эсептөөлөр оңой болсун үчүн өлчөмсүз өзгөрүлмө ξ-ге өтөлү.

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \quad \text{же} \quad \xi^2 = \frac{m\omega}{\hbar}x^2$$

ξ - боюнча функциянын туундусун штрих менен белгилесек

$$\psi'' + (\lambda - \xi^2)\psi = 0 \text{ мында } \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (9.1.6).$$

Бул теңдемени чечип ψ-функциянын маанисин аныктоо керек. (9.1.6) – теңдеме экинчи тартиптеги дифференциалдык теңдеме болгондуктан, анын чечимин аныктоо үчүн асимптотикалык учурдан пайдаланалы.

Бул ψ-функциянын чексизде асимптотикалык абалын аныктоодо $\xi^2 >> \lambda$ болсо, анда

$$\psi''_{ac} - \xi^2\psi_{ac} \approx 0 \qquad (9.1.7).$$

Бул теңдеменин чечими төмөнкүдөй функция түрүндө болсун дейли.

$$\psi_{ac} \approx c_1 e^{+\frac{\xi^2}{2}} + c_2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} \qquad (9.1.8).$$

Бул чечимдеги экспоненттердин "+" мааниси функциянын чектелгендик шартын канаатандырбайт. Мына ошондуктан $c_1=0$ деп алуу керек. Ал эми ψ - функция нормалдашпагандыктан $c_2=1$ деп алуу керек. Анда ψ_{ac} - толкундук функция төмөнкүдөй түргө келет:

$$\psi_{ac} = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \qquad (9.1.9).$$

Теңдеменин жалпы чечими анын жекече чечиминен кандайдыр бир кичинекей ϑ функциясына айырмалансын дейли. Анда

$$\psi = \vartheta \cdot \psi_{ac} = \vartheta \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} \qquad (9.1.10).$$

ψ - функция чектелген бойдон калсын үчүн ϑ чексизге ψ_{ac} караганда жай өсүшү керек. Анда ϑ - функциясы үчүн төмөнкүдөй теңдемени алабыз:

$$\vartheta'' - 2\xi\vartheta' + (\lambda - 1)\vartheta = 0 \qquad (9.1.11).$$

Бул теңдеме да Шредингердин теңдемесине окшош. Бирок бул теңдемеде ϑ функциясы ψ_{ac} – функциясына караганда жай өсөт. Жогорку теңдеменин чечимин катар тибинде изилдейли, б.а.

$$\vartheta(x) = a_o + a_1\xi + a_2\xi^2 + ... + a_n\xi^n + ... = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\xi^n \qquad (9.1.12).$$

Бул катардан биринчи жана экинчи тартиптеги туундусун алып аны жогорку дифференциалдык теңдемеге койсок жана бүтүн даражадагы ξ-ди топтоштурсак, анда биз төмөнкүдөй барабардыкты алабыз:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \xi^n \left[(n+2)(n+1)a_{n+2} - a_n(2n+\lambda-1)\right] = 0 \qquad (9.1.13).$$

Качан гана көз каранды болбогон өзгөрүлмөнүн бардык даражаларынын коэффициенти нөлгө барабар болгондо чексиз даражалык катардын суммасы нөлгө теңдеш барабар болот.

Бирдей даражадагы коэффициенттердин суммасын нөлгө барабарлап a_n коэффициентти аныктоо үчүн төмөнкүдөй рекуренттик теңдештикти алабыз.

$$(n+2)(n+1)a_{n+2} - (2n+\lambda-1)a_n = 0$$

мындан
$$a_{n+2} = a_n \frac{2n+\lambda-1}{(n+2)(n+1)} \qquad (9.1.14).$$

Жогорку (9.1.12) – формулада аныкталган ϑ(x)-функциясы чексиз сумма катарында болсо, ал стандарттуулук шартты канааттандырбайт. Себеби ал чектелген эмес. Мына ошондуктан бул функция осциллятордун термелүү абалындагы ыктымалдуулуктун тыгыздыгын мүнөздөй албайт.

Ал үчүн ϑ(x) – катардык функция үзүлүүгө ээ болушу керек. Бул катарды n номерден баштап үзөлү, б.а. $a_n \neq 0$, анда сумма n+1 катарынан баштап үзүлөт, анда $a_{n+2} = 0$ болот. Анда $a_{n+2} = a_n \frac{2n+\lambda-1}{(n+2)(n+1)} = 0$ болот. Бул барабардык аткарылсын үчүн 2n-λ+1=0 болушу керек. Мындан λ=2n+1.

Ал эми (9.1.6) – формулада $\lambda = \frac{2E_x}{h\nu_o}$ болгондуктан, $2n+1 = \frac{E_x}{\hbar\omega}$ болот. Мындан

$$E_{xn} = \hbar\omega(n+1/2), \qquad n = 0,1,2,... \qquad (9.1.15).$$

Мына ошентип сызыктуу гармоникалык осциллятордун энергиясы кванттталат жана дискреттүү маанилерди алат.

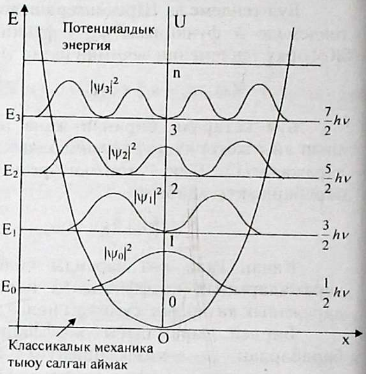
$n=0 \quad E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega=\frac{1}{2}h\nu$

$n=1 \quad E_{x1}=\frac{3}{2}\hbar\omega=\frac{3}{2}h\nu$

$n=2 \quad E_{x2}=\frac{5}{2}\hbar\omega=\frac{5}{2}h\nu$

$n=3 \quad E_{x3}=\frac{7}{2}\hbar\omega=\frac{7}{2}h\nu$

………………………….



9.3 – сүрөт

Мындан көрүнгөндөй бир абалдан экинчи абалга өткөндө осциллятордун энергиясы $nh\nu_0$ өзгөрүлөт. Алынган E_n дин маанилери Планктын гипотезасынан $\frac{1}{2}\hbar\omega=\frac{1}{2}h\nu$ айырмаланат. Планктын гипотезасы боюнча эң кичинекей энергия $E_o=0$, ал эми азыркы учурда эң кичинекей энергия $E_o=\frac{1}{2}\hbar\omega$ барабар.

Нөлдүк энергия. Бул формуладан n=0 болсо, осциллятордун минималдык энергиясын алабыз.

$$E_o=\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{9.1.16}$$

Бул осциллятордун минималдык энергиясынын нөлгө барабар эместиги жана системанын кванттык касиети өзгөчө болушу Гейзенбергдин аныксыздыктар байланышы менен байланышкан.

Эгерде бөлүкчөнүн энергиясы нөлгө барабар болсо, анда бөлүкчө кыймылсыз болот да, бир убакытта бөлүкчөнүн координаттын жана импульстун аныктоого мүмкүн болушу керек. Бул Гейзенбергдин аныксыздыктар байланышына карама-каршы келет.

Осциллятордун минималдык энергиясы нөлгө барабар эмес экендигин эксперименталдык тажрыйбада текшерүүгө мүмкүн. Ал үчүн температураны төмөндөткөндө кристаллдан жарык нурларынын чачырашын изилдөө керек.

Жарыктын чачырашы кристаллдагы атомдун термелүүсүнө негизделген. Температураны төмөндөткөндө атомдун термелүүсү акырындайт. Классикалык механика боюнча термелүүнүн амплитудасы нөлгө умтулат, мына ошондуктан төмөнкү

температурада жарыктын чачырашы жок болушу керек. Ал эми кванттык механика боюнча температура төмөндөгөндө термелүүнүн амплитудасы нөлгө эмес, кандайдыр бир пределдик мааниге умтулат. Тажрыйба жүзүндө кристаллдан жарыктын чачырашы температура төмөндөгөндө кандайдыр бир пределдик мааниге умтулгандыгы аныкталган.

Сызыктуу гармоникалык осциллятор үчүн ψ - функциянын маанисин аныктайлы. Эгерде $a_{n+2}=0$ болсо, анда бардык калган мүчөлөрү да нөлгө барабар болот. Анда биз

$$\psi_n = e^{-\frac{\xi^2}{2}}(a_n\xi^n + a_{n+1}\xi^{n+1}) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}\xi^n(a_n + a_{n+1}\xi) \qquad (9.1.16).$$

Ал эми $\xi^2 = \frac{m\omega}{\hbar}x^2$ же $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$ болгондуктан

$$\psi_n = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right)^n\left(a_n + a_{n+1}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right) \qquad (9.1.17).$$

Алынган ψ_n - функцияны n-дин ар кандай мааниси үчүн карайлы.

Эгерде n=0 болгондо, ψ_o-функция жана анын квадраты төмөнкүдөй болот:

$$\psi_0 = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\left(a_0 + a_1\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right) \quad \text{жана} \quad |\psi_0|^2 = e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\left(a_0 + a_1\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right)^2.$$

Мындан эгерде x=0 болгондо, $|\psi_o|^2 = a_o^2$ болуп максималдык маанини алат. Бул алынган жыйынтык график түрүндө 9.3-сүрөттөн көрсөтүлгөн. Ал эми n=1 болгондо, ψ_1 – функциянын жана анын квадратын карасак:

$$\psi_1 = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\left(a_1 + a_2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right); \quad |\psi_1|^2 = e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\left(a_1 + a_2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right)^2$$

Бул алынган $|\psi_1|^2$ маанисинен x=0 болгондо $|\psi_1|^2=0$ болгондугун көрөбүз (9.3-сүрөттөн карайбыз). Мында a_1 жана a_2 - коэффициенттери нормалдаштыруу шартынан аныкталат.
9.3-сүрөттө n кванттык сандын калган маанилери үчүн да алынган $|\psi_1|^2$-өзгөрүлүшү берилген. Ал сүрөттөн көрүнгөндөй $|\psi_1|^2$ максималдык учуру x-тин ар кандай маанилеринде болот, б.а. осцилятор энергиясы боюнча сорттолот.

Толкундук функция. Рекуренттик катыштын негизинде $\vartheta(x)$ - функциянын жуп (четность) n – санынын жуп мааниси менен дал келет.

Мына ошондуктан

$$\vartheta_n(x) = a_n\xi^n + a_{n-2}\xi^{n-2} + ... + \begin{cases} a_o, n - жуп\ болгондо \\ a_1\xi,\ n - так\ болгондо \end{cases}$$

$a_n = 2^n$ - деп, рекуренттик функциянын негизинде калган коэффициенттерин аныктайлы $\lambda=2n+1$. a_κ коэффициенттери үчүн

$$a_\kappa(\lambda - 1 - 2\kappa) = a_\kappa(2n - 2\kappa) = -a_{\kappa+2}(\kappa+2)(\kappa+1)$$

же $a_{n-2} = -a_n \dfrac{n(n-1)}{2\cdot 2} = -2^{n-2}\dfrac{n(n-2)}{1!}$

$$a_{n-4} = -a_{n-2}\frac{(n-2)(n-3)}{2\cdot 4} = 2^{n-4}\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}.$$

W_n-дин өздүк маанисине туура келген ψ_n-толкундук функция төмөнкүдөй түрдө болот:

$\psi_n(x) = c_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$, мында $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\dfrac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)$.

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

Нормировкалык коэффициенттер c_n нормировкалоо шартынын негизинде аныктайбыз.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^2 dx = c_n^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n^2(\xi)d\xi = 1$$

Ал эми $H_n = (-1)^n e^{\xi^2}\dfrac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)$ болгондуктан, акыркы интегралды төмөнкүдөй формага келтирүүгө мүмкүн.

$$\frac{1}{c_n^2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n^2(\xi)d\xi = (-1)^n\int_{-\infty}^{\infty} H_n \frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)d\xi.$$

Ал эми $\dfrac{d^n H_n}{d\xi^n} = 2^n \cdot n!$ жана $\int_{-\infty}^{\infty}\left(e^{-\xi^2}\right)d\xi = \sqrt{\pi}$ эске алып нормировкалоочу коэффициенти эске алсак,

$$c_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}.$$

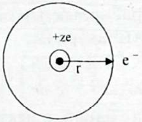
X глава. БОРБОРДУК СИММЕТРИЯЛЫК ТАЛААДАГЫ ЭЛЕКТРОН ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ. СУУТЕКТИН АТОМУ ЖАНА СУУТЕКСЫМАЛ АТОМДОР

§1. Симметриялык талаадагы кыймыл

Шредингердин стационардык теңдемеси:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad (10.1.1).$$

Борбордук симметриялык талаада электрондун потенциалдык энергиясы $U = \frac{ze}{r}(-e) = -\frac{ze^2}{r}$. Бул учурга мисал болуп, атомдун ядросунун симметриялык талаасындагы электрондун кыймылы эсептелет (10.1.1-сүрөттү караңыз). Анда борбордук талаадагы электрон үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй болот:



10.1.1 – сүрөт

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{ze^2}{r})\psi = 0 \qquad (10.1.2).$$

Бул теңдемени чечип Е жана ψ - аныктоо керек. Төмөнкүдөй белгилөөлөрдү кийирели:

$$\lambda = \frac{2m}{\hbar^2}E \quad \text{жана} \quad \alpha = \frac{2m}{\hbar^2}ze^2$$

Анда
$$\nabla^2\psi + (\lambda + \frac{2\alpha}{r})\psi = 0 \qquad (10.1.3).$$

Сферикалык координата системасына өтөлү. Сферикалык координата системасында (10.1.3) – теңдеме төмөнкүдөй түргө келет:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{dr}) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial\psi}{d\theta}) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + (\lambda + \frac{2\alpha}{r})\psi = 0 \qquad (10.1.4).$$

Бул теңдеменин чечимин төмөнкүдөй түрдө изилдейли

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot Y(\theta,\varphi)$$

Мында R(r) – радиалдык толкундук функция,
Y(θ,φ) – бурчтук толкундук функция.

Бул чечимди Шредингердин теңдемесине койсок,

$$Y(\theta,\varphi)\left(\frac{\partial^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr}\right) + \frac{R(r)}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{d\theta}\right) + \frac{R(r)}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{d\varphi^2} + \left(\lambda + \frac{2\alpha}{r}\right)R(r)Y(\theta,\varphi) = 0 \qquad (10.1.5).$$

(10.1.5) теңдеменин биринчи мүчөсү R(r), ал эми экинчи мүчөсү Y(θ,φ) – ден көз каранды болгондой кылып өзгөртөлү. Ал үчүн бул теңдеменин эки жагын тең $\frac{r^2}{R(r)Y(\theta,\varphi)}$ көбөйтөлү.

$$\frac{r^2}{R(r)}\left(\frac{\partial^2 R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr}\right)+\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{d\theta}\right)+$$

$$\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{d\varphi^2}+\left(\lambda+\frac{2\alpha}{r}\right)r^2=0. \qquad (10.1.6).$$

Барабардыктын оң жагына R(r), ал эми сол жагына Y(θ,φ) мүчөлөрүн топтоштуралы.

$$\frac{r^2}{R(r)}\left(\frac{\partial^2 R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr}\right)+\left(\lambda+\frac{2\alpha}{r}\right)r^2=-\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{d\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{d\varphi^2}\right]$$

Бул барабардыктагы r, φ, θ өзгөрүлмөлөр бири-биринен көз каранды болбогон өзгөрүлмөлөр, мына ошондуктан булардын ар кандай функциялары да бири-биринен көз каранды болушбайт.

Мына ошондуктан жогорку барабардык аткарылсын үчүн, ар бир туюнтма өз алдынча турактуу жана бирдей санга барабар болушу керек, б.а.

$$\frac{r^2}{R(r)}\left(\frac{\partial^2 R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr}\right)+\left(\lambda+\frac{2\alpha}{r}\right)r^2=\beta$$

$$-\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{d\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{d\varphi^2}\right]=\beta$$

Мына ошентип Шредингердин эки теңдемесин алдык:

$$\frac{\partial^2 R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr}+\left(\lambda+\frac{2\alpha}{r}-\frac{\beta}{r^2}\right)R=0 \qquad (10.1.7).$$

(10.1.7) – теңдеме Шредингердин радиалдык теңдемеси,

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{d\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{d\varphi^2}+\beta Y=0 \qquad (10.1.8).$$

(10.1.8) – теңдеме Шредингердин бурчтук теңдемеси;

Бул теңдемелерди чечип, турактуу сан β - маанисин аныктоо керек.

(10.1.7) – теңдеме потенциалдык энергиядан көз каранды. Мына ошондуктан радиалдык функциянын түрү жана энергиянын өздүк мааниси бөлүкчө кыймылда болгон симметриялык талаанын түрү менен аныкталат.

Ал эми (10.1.8) – теңдеме симметриялык талаанын түрүнөн көз каранды эмес. Мына ошондуктан ал бардык сфералык талаалар үчүн бирдей болушат.

Радиалдык теңдеме

$$\frac{\partial^2 R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr}+\left(\lambda+\frac{2\alpha}{r}-\frac{\beta}{r^2}\right)R=0 \qquad (10.1.9).$$

Мында $\lambda=\frac{2m}{\hbar^2}E,\ \alpha=\frac{m}{\hbar^2}ze^2$.

(10.1.8) – теңдеме менен аныкталган оператор Лежандрдын операторуна окшош. Лежандрдын операторунун өздүк мааниси $\Lambda=\beta=\ell(\ell+1)$ болот. Мында $\ell=0,1,2,3,\ldots$

Ордуна койсок, анда Шредингердин радиалдык теңдемеси

$$\frac{\partial^2 R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr}+\left(\lambda+\frac{2\alpha}{r}-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R=0 \qquad (10.1.10).$$

$\ell=0,1,2,3,\ldots$

же

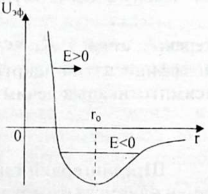
$$\frac{\partial^2 R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{ze^2}{r}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R=0 \qquad (10.1.11).$$

Бул теңдеме бир өлчөмдө кандайдыр бир $U_{эф}$ эффективдүү потенциалдык талаадагы микробөлүкчөнүн кыймылынын теңдемеси болот.

$$U_{эф}=-\frac{ze^2}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \qquad (10.1.12).$$

1) Бул формуладан $r\to\infty$ болгондо, экинчи мүчө өтө кичинекей болот да $U_{эф}$ негизинен биринчи мүчө менен аныкталат жана $U_{эф}<0$ болот.
2) Ал эми $r\to 0$ болгондо биринчи мүчө кичинекей болгондо $U_{эф}$ негизинен экинчи мүчө менен аныкталат жана бул учурда $U_{эф}>0$ болот.

Мына ошондуктан ийрининин формасы потенциалдык чуңкурга окшош болот (10.1.2-сүрөттү караңыз). Мындай потенциалдык чуңкурда бөлүкчөнүн кыймылы мезгилдүү, ал эми энергиянын мааниси кванттталган болот.



10.1.2 – сүрөт

Ал эми E>0 болгон маанисинде абсисса огуна параллель жүргүзгөн түз потенциалдык ийрини бир эле жерден кесип өтөт. Бул учур кыймылдын бир жагынан гана чектеген потенциалдык тосмо учуруна дал келет.

Бул учурда чексизден башталып оңдон солго карай кыймылда болгон бөлүкчө "потенциалдык тосмодон" чагылат да кайра чексизге кетет жана бөлүкчөнүн энергиясы E>0 жана кванттталган болбойт.

Мындан ары E<0 болгон учурун гана карайбыз. $U_{эф}$ – мааниси ℓ-ден көз каранды болгондуктан, тең салмактуу абалдын орду r_0 дагы ℓ-ден көз каранды болот.

§2. Шредингердин радиалдык теңдемеси

Борбордук симметриялык талаада электрондун туруктуу абалы Шредингердин радиалдык теңдемесинен келип чыгат. Шредингердин радиалдык теңдемесин чечип E жана R-дин маанилерин аныктоо керек. λ - параметри аралыктын квадратынын тескери чоңдугунун өлчөмүн алгандыктан, аны $\lambda = -\frac{1}{r_0^2}$ деп белгилейли.

$$\frac{\partial^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R}{dr} + \left(-\frac{1}{r_0^2} - \frac{2\alpha}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R = 0 \qquad (10.2.1).$$

Асимптотикалык учур үчүн r өтө чоң болгондуктан теңдемедеги 1/r жана $1/r^2$ мүчөлөрү өтө кичинекей болот. Анда $\frac{\partial^2 R_{ac}}{dr^2} - \frac{1}{r_0^2}R_{ac} = 0$ алабыз. Бул теңдеменин чечимин $R_{ac} = c_1 e^{-\frac{r}{r_0}} + c_2 e^{\frac{r}{r_0}}$ түрүндө изилдейли. Толкундун теңдемесинин чектелгендигинин негизинде теңдеменин оң чечими алынбайт, себеби $r \to \infty$ болгондо ал чексизге өсөт. Функция чектелген болсун үчүн $c_2=0$ деп алуу керек, анда $R_{ac} = c_1 e^{-\frac{r}{r_0}}$ болот. Жалпы нормировкалоочу коэффициенттин шартынын негизинде $c_1=1$ болушу керек. Анда асимптотикалык чечим

$$R_{ac} = e^{-\frac{r}{r_0}} \qquad (10.2.2).$$

Шредингердин теңдемесинин жалпы чечимин аныктоо үчүн ρ - деген өлчөмсүз өзгөрүлмөнү кийирели:

$$\rho = 2\cdot\frac{r}{r_o} = 2r\frac{1}{r_o} = 2r\sqrt{-\lambda} \qquad (10.2.3).$$

r – боюнча туундуларды ρ - боюнча туундулар менен алмаштыралы $\frac{d}{dr} = \frac{d}{d\rho}\cdot\frac{d\rho}{dr} = \frac{2}{r_o}\frac{d}{d\rho}$ же $\frac{d^2}{dr^2} = \frac{d}{d\rho}\left(\frac{2}{r_o}\frac{d}{d\rho}\right)\frac{d\rho}{dr} = \frac{4}{r_o^2}\frac{d^2}{d\rho^2}$.

Бул өзгөрүлмөнү кийирүү менен жана $\frac{r_o^2}{4}$ көбөйтүп төмөнкү теңдемени алабыз:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\partial R}{\partial\rho}+\left(-\frac{1}{\rho}+\frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}}\frac{1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)R=0 \qquad (10.2.4).$$

(10.2.4) теңдеменин чечимин $R(\rho)=e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)$ түрүндө изилдейбиз, б.а. ал асимптотикалык чечимден кандайдыр бир $f(\rho)$ функцияга айырмалансын.

Бул чечимди жогорку функцияга коебуз. Ал үчүн функцияны эки жолу дифференциалдайлы,

$$\frac{dR}{d\rho}=\left(\frac{df}{d\rho}-\frac{1}{2}f\right)e^{-\frac{\rho}{2}} \quad \text{жана} \quad \frac{d^2R}{d\rho^2}=\left(\frac{d^2f}{d\rho^2}-\frac{df}{d\rho}+\frac{1}{4}f\right)e^{-\frac{\rho}{2}}$$

Дифференциалдын бул маанилерин теңдемеге койсок,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial\rho^2}+\left(\frac{2}{\rho}-1\right)\frac{\partial R}{\partial\rho}+\left(\left(\frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}}-1\right)\frac{1}{\rho}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)f=0 \qquad (10.2.5).$$

(10.2.5) теңдеменин чечимин төмөнкүдөй катар тибинде изилдейли:

$$f(\rho)=\rho^{\gamma}(a_o+a_1\rho+a_2\rho^2+...)\equiv\rho^{\gamma}\sum_{\nu=0}^{\infty}a_{\nu}\rho^{\nu}=\sum_{\nu=0}^{\infty}a_{\nu}\rho^{\nu+\gamma} \qquad (10.2.6).$$

(10.2.6) функциядан ρ - боюнча 1 жана 2 жолу туунду алып, Шредингердин теңдемесине койсок,

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}\left[(\gamma+\nu)(\gamma+\nu+1)-\ell(\ell+1)\right]a_{\nu}\rho^{\gamma+\nu-2}=\sum_{\nu=0}^{\infty}\left[\gamma+\nu+1-\frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}}\right]a_{\nu}\rho^{\gamma+\nu-1} \qquad (10.2.7).$$

Бул туюнтма теңдеш болгондуктан бирдей даражадагы ρ нун коэффициенттери да бири-бирине барабар болушу керек. Анда $\nu=0$ болгондо барабардыктын сол жагында $\rho^{\gamma-2}$, ал эми оң жагында $\rho^{\gamma-1}$ болот.

Барабардык туюнтманын оң жагында $\rho^{\gamma-2}$ мүчө жок болгондуктан, анын сол жагында да болушу мүмкүн эмес. Мына ошондуктан $\rho^{\gamma-2}$ мүчөнүн коэффициенти дагын нөлгө барабар болушу керек, б.а. $[(\gamma+\nu)(\gamma+\nu+1)-\ell(\ell+1)]a_{\nu}=0$ болушу керек. Мындан $a_{\nu}\neq0$. Теңдеш барабардыкта $\nu=0$ болгондуктан ал теңдештиктен $\gamma(\gamma+1)-\ell(\ell+1)=0$ же $\gamma(\gamma+1)=\ell(\ell+1)$. Мындан $\gamma=\ell$.

Мына ошентип $f(\rho)$ функциянын чечиминде γ дагын ℓ - орбиталдык кванттык сандай мааниге ээ. $f(\rho)$ – функциясы чексиз, мына ошондуктан ал толкундук функция боло албайт.

Чектүү функцияны алуу үчүн сумманы кандайдыр бир мүчөсүнөн үзүү керек. Ал үчүн белгилүү бир мүчөнүн коэффициентин нөлгө барабар деп алуу керек. Бул шартты аныктайлы. Анда (10.2.7) оң жана сол жактарындагы ρ функциянын даражасы ν-нун бирдей маанисинде барабар эмес. Оң жагындагы даража көрсөткүч бирге чоң. Оң жана сол жактарында ρ-нун

даража көрсөткүчү бирдей болгон мүчөлөрдү алуу үчүн, туюнтманын сол жагындагы мүчөлөрдү катар номерине караганда бирге чоң кылып алуу керек, б.а. солдо ν=к+1, оңдо ν=к болушу керек. Анда бирдей даражага ээ болгон мүчөлөрдүн коэффициенттери дагын бирдей болушат.

$$\{[\ell+(\kappa+1)][\ell+(\kappa+1)+1]-\ell(\ell+1)\}a_{\kappa+1}=\left[(\ell+\kappa+1-\frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}}\right]a_{\kappa} \qquad (10.2.8).$$

f(ρ) – катардын суммасынын к-мүчөсүнөн кийин үзөлү, б.а. $a_к \neq 0$, ал эми $a_{к+1}=0$. Бул барабардык аткарылсын үчүн $\ell+\kappa+1-\frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}}=0$ болушу керек. Анда $\ell+\kappa+1=\frac{\alpha}{\sqrt{-\lambda}}$ болот. $\sqrt{-\lambda}=\frac{\alpha}{\ell+\kappa+1}$ же $-\lambda=\frac{\alpha^2}{(\ell+\kappa+1)^2}$:

$к=n_r$ – деп белгилейли жана ал радиалдык кванттык сан деп аталат. $-\lambda=\frac{\alpha^2}{(\ell+n_r+1)^2}$. Ал эми $\lambda=\frac{2m}{\hbar^2}E$; $\alpha=\frac{m}{\hbar^2}ze^2$ болгодуктан, алардын маанилерин койсок, анда $-\frac{2mE}{\hbar^2}=\frac{m^2z^2e^4}{2(\ell+n_r+1)^2\hbar^4}$ болот. Мындан

$$E=-\frac{mz^2e^4}{2(\ell+n_r+1)^2\hbar^2},\ \ell=0,1,2,\ldots,\ n_r=0,1,2,\ldots \qquad (10.2.9).$$

Мындан $\ell+n_r+1=n$ деп белгилесек, анда

$$E=-\frac{mz^2e^4}{2n^2\hbar^2} \qquad (10.2.10).$$

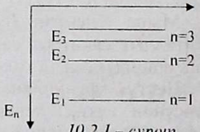
Мында n=1,2,3,... болгон дискреттүү маанилерди алат жана ал *негизги кванттык сан* деп аталат.

Мына ошондуктан электрондун энергиясы негизги кванттык сандан көз каранды жана дискреттүү мааниге ээ.

Эгерде n=1 болгондо $E_1=-\frac{mz^2e^4}{2\hbar^2}$;

n=2 болгондо $E_2=-\frac{mz^2e^4}{8\hbar^2}$;

n=3 болгондо $E_3=-\frac{mz^2e^4}{18\hbar^2}$.



10.2.1 – сүрөт

Бул алынган маанилерди графикте көрүнүшү 10.2.1 – сүрөттө көрсөтүлгөн.

Бул энергия – бальмердик энергетикалык деңгээлдердин энергиясы. Ал эч кандай кошумча жаңы гипотеза кийирбестен, Шредингердин теңдемесинин чечиминен аныкталды. Энергия бир гана негизги кванттык сандын маанисинен көз каранды.

Берилген n –дин маанисинен ℓ_{max} аныктайлы.

$n=\ell+n_r+1$ болгондуктан $n_r=0$ болгондо $\ell+1=n$ болот. Анда $\ell_{max}=n-1$ болот. Мына ошондуктан n-дин берилген маанисинде $\ell=0,1,2,\ldots,n-1$ болгон дискреттүү маанилерди алат.

ℓ-орбиталдык кванттык сан борбордук талаадагы электрондун кыймыл санынын моментинин сан маанисин аныктайт.

$$L=\sqrt{\ell(\ell+1)}\;\hbar \qquad (10.2.11).$$

Ар бир n-дин мааниси үчүн ℓ кванттык сандын жалпы мааниси n барабар болгондуктан, бир эле E_n энергияга ээ болгон абалда электрон n кыймыл санынын моментине ээ болот.

Кыймыл санынын моментинин проекциясы дагы квантталган, б.а.

$$L_z=m\hbar \qquad m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\ell. \qquad (10.2.12).$$

Мында m кванттык саны *магниттик кванттык сан* деп аталат.

Радиалдык толкундук функцияны аныктайлы:

$$R(r)=e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)=e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^{\ell}(a_o+a_1\rho+a_2\rho^2+\ldots+a_{n_r}\rho^{n_r}) \qquad (10.2.13).$$

$n=\ell+n_r+1$ же $n-\ell-1=n_r$ болсо, анда

$$R(r)=e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)=e^{-\frac{r}{r_o}}\left(\frac{2r}{r_o}\right)^{\ell}\left[(a_o+a_1\left(\frac{2r}{r_o}\right)+a_2\left(\frac{2r}{r_o}\right)^2+\ldots+a_{n-\ell-1}\left(\frac{2r}{r_o}\right)^{n-\ell-1}\right] \qquad (10.2.14).$$

Мына ошентип, Шредингердин радиалдык теңдемеси жана анын чечими төмөнкүдөй болот:

$$\nabla_r^2R+\frac{8\pi^2m}{\hbar^2}\left\{E+\frac{z^2e^4}{r}-\frac{\hbar}{9\pi^2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right\}R=0 \qquad (10.2.15).$$

$$E_n=-\frac{2\pi^2mz^2e^4}{n^2\hbar^2} \qquad n=1,2,3,\ldots \qquad (10.2.16).$$

$$R_{n,\ell}(r)=\left(\frac{2r}{r_o}\right)^{\ell}e^{-\frac{r}{r_o}}\left[(a_o+a_1\left(\frac{2r}{r_o}\right)+a_2\left(\frac{2r}{r_o}\right)^2+\ldots+a_{n-\ell-1}\left(\frac{2r}{r_o}\right)^{n-\ell-1}\right] \qquad (10.2.17).$$

$\ell=0,1,2,\ldots,n-1$.

Практикада борбордук талаадагы электрондун абалы жогоруда каралган кванттык сандар менен мүнөздөлөт: n,ℓ,m.

n – негизги кванттык сан, n=1,2,3…

ℓ - орбиталдык кванттык сан, $\ell=0,1,2,\ldots,n-1$.

m – магниттик кванттык сан, $m=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\ell$.

Бул кванттык сандардын ар кандай маанилеринде карайлы.

1) n=1, ℓ=0, n-ℓ-1=0. Анда электрондун энергиясы

$$E_1 = -\frac{mz^2e^4}{2\hbar^2}.$$

Радиалдык толкундук функция болсо төмөнкүдөй түргө келет: $R_{1,0}(r) = 2a_o e^{-\frac{r}{r_o}}$; ал эми толкундук функциянын квадраты $\left|R_{1,0}(r)\right|^2 = 4a_0^2 e^{-\frac{2r}{r_o}}$.

2а) n=2, ℓ=0, n-ℓ-1=1. Анда энергия $E_2 = -\frac{mz^2e^4}{2\hbar^2 2^2} = -\frac{mz^2e^4}{8\hbar^2}$. Ал эми толкундук функция жана анын квадраты төмөнкүдөй болот: $R_{2,0}(r) = (a_o + a_1\frac{2r}{r_o})e^{-\frac{r}{r_o}}$; $\left|R_{2,0}(r)\right|^2 = (a_0 + a_1\frac{2r}{r_o})^2 e^{-\frac{2r}{r_o}}$

2б) n=2, ℓ=1, n-ℓ-1=0. Бул учурда энергиянын мааниси өзгөрүлбөйт. Ал эми толкундук функция жана анын квадраты: $R_{2,1}(r) = a_o(\frac{2r}{r_o})e^{-\frac{r}{r_o}}$; $\left|R_{2,1}(r)\right|^2 = a_0^2(\frac{2r}{r_o})^2 e^{-\frac{2r}{r_o}}$

§3. Суутектин атомунун нурдануусу

Суутекке окшош атомдордун ар кандай абалдары үч кванттык сандын жардамында аныкталат (n, ℓ, m).

Эң төмөнкү катмар n=1, ℓ=0, m=0 болгон катмардан башка, бардык катмарлар бир канча төмөнкү абалдардан (подсостояние) турушат.

Төмөнкү абалдардын майдаланылышын (степень вырождения) төмөнкүдөй аныктоого мүмкүн:

Берилген n-дин маанисинде ℓ кванттык сан 0-дөн баштап n-1 маанини алгандыктан (ℓ=0,1,2,…,n-1) жалпы саны n болот. Ал эми m-кванттык сан дагын (m=0, ±1, ±2,…,±ℓ) болуп, 2ℓ+1 мааниге ээ болот.

Мына ошентип ар бир n кванттык сандын мааниси үчүн, б.а. энергиянын ар бир мааниси үчүн төмөнкүдөй өздүк функциянын мааниси туура келет:

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = 1+3+5+...+(2n-1) = n^2 \qquad (10.3.1).$$

Башкача айтканда, ар бир энергиянын деңгээли n^2 майдаланган катмарга ээ болот. Бизге белгилүү ар бир абал өзүнчө символ менен белгиленет.

Кванттык сан n туура келген абалды сан мааниси менен, ал эми кванттык сан ℓ мааниси латын тамгалары менен белгиленет.

Мисалы: 2s, 1d,…

$\ell=0$	s-абал
$\ell=1$	p-абал
$\ell=2$	d-абал
$\ell=3$	f-абал
$\ell=4$	g-абал

Мисалы:
а) n=1, $\ell=0$, m=0 s-абал, 1-ничке абалга ээ.
б) n=2, $\ell=0$, m=0 2s-абал, 1-ничке абалга ээ.
в) n=2, $\ell=1$, m=0; m=+1; m=-1 } 2p –абал, 3-ничке абалга ээ.
г) n=3, $\ell=0$, m=0 3s-абал, 1-ничке абалга ээ.
$\ell=1$, m=0; m=1; m=-1 } 3p –абал, 3-ничке абалга ээ.

$\ell=2$, m=0; m=1; m=-1; m=2; m=-2 } 3d –абал, 5-ничке абалга ээ.

Суутектин атомун карайлы

$$E_n = -\frac{mz^2e^4}{n^2 2\hbar^2} \qquad n = 1,2,3,... \qquad (10.3.2).$$

Негизги абал үчүн n-дин маанисин аныктайлы. Тажрыйбада аныкталгандай дүүлүктүрүлгөн суутектин атому үчүн байланыш энергиясы E_n=-13,6 эВ

$$n^2 = -\frac{2\pi^2 e^4}{\hbar^2 13,6\,эВ} = -\frac{2\cdot 10\cdot(4,8\cdot 10^{-10})^4\cdot 9\cdot 10^{-28}}{2\cdot 40\cdot 10^{-34}\cdot 13,16\cdot 10^{-12}} = 1 \qquad (10.3.3).$$

n=1, анда $\ell=0$, m=0 болот. 1s абал. (n=-1 учур мааниге ээ эмес).

Нормалдык абалда суутектин атомундагы электрон 1s абалда жайланышкан. Эгерде суутектин атому энергияны жутса, анда электрон кийинки жогорку дүүлүктүрүлгөн абалдарга өтөт.

2s жана 2p абалдарында магниттик кванттык сан m жана орбиталдык кванттык сан ℓ электрондун энергиясына таасирин тийгизбейт.

Аныкталган энергетикалык деңгээлдердин энергиясы E_n боюнча суутектин атомундагы спектралдык сызыктардын сериясынын пайда болушун түшүндүрүүгө мүмкүн.

Эгерде нурдануунун энергиясы $h\nu = \hbar\omega = E_n - E_\kappa$ болсо, ал эми n-абалдын энергиясын E_n жана к-абалынын энергиясын E_κ деп белгилесек, анда

$$E_n = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2};\ E_\kappa = -\frac{me^4}{2\kappa^2\hbar^2};$$

$$\hbar\omega = \frac{me^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{\kappa^2} - \frac{1}{n^2}\right); \qquad (10.3.4).$$

Мында $\frac{me^4}{2\hbar^3} = R$ деп белгилесек, анда

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{\kappa^2} - \frac{1}{n^2}\right) = \frac{R}{\kappa^2} - \frac{R}{n^2} \quad \text{же} \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{R}{\kappa^2} - \frac{R}{n^2} \qquad (10.3.5).$$

$\frac{R}{\kappa^2}$ *жана* $\frac{R}{n^2}$ - сандар суутексымал атомдордун спектралдык сызыктарынын терми деп аталат.

1) Эгерде к=1, ал эми n=2,3,4,5,… болгондо $\frac{1}{\lambda} = \frac{R}{1^2} - \frac{R}{n^2}$. Бул учурда электрондор np абалдардан 1s абалга өтүшөт, б.а. np→1s n≥2 – Лаймандын сериясы алынат. Электрон бир абалдан экинчи абалга өткөн учурда энергия гана өзгөрүлбөстөн, кыймыл санынын моменти дагы өзгөрөт. Мына ошондуктан электрондук өтүүдө ℓ-дагы өзгөрүлөт.

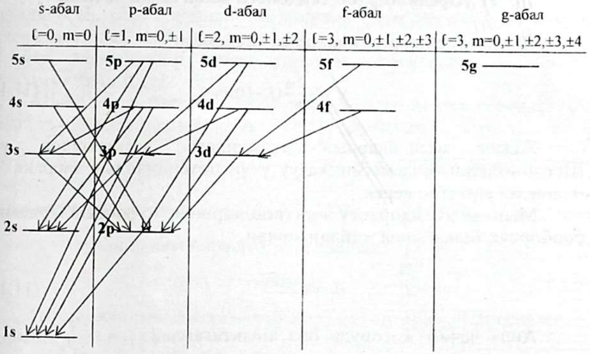
2) к=2, n=3,4,5,… $\frac{1}{\lambda} = \frac{R}{2^2} - \frac{R}{n^2}$ - Бальмердин сериясы.

np→2s n≥3
ns→2p n≥3

3) к=3, n=4,5,… $\frac{1}{\lambda} = \frac{R}{3^2} - \frac{R}{n^2}$ - Пашендин сериясы.

np→3s n≥4
ns→3p n≥4
np→3d n≥4
nf→3d n≥4
nd→3p n≥4

Бул алынган электрондук өтүүлөрдөн пайда болгон спектралдык сериялар 10.3.1 – сүрөттө көрсөтүлгөн.



10.3.1 – сүрөт

2p абалдан электрон бир гана 1s абалга өтөт. 2p→1s өтүүдөгү нурдануунун энергиясы 1s→2p өтүүдөгү нур жутуунун энергиясы менен өз ара дал келишет. Мына ошондуктан бул өтүүнү *резонанстык өтүү* деп аташат.

Спектралдык сериялар пайда болгон учурда эки энергетикалык деңгээл катышат. Бирок кош деңгээлдердин санынын жыйындысы байкалган спектралдык сызыктарга караганда көп. Мындан биз айрым деңгээлдердин арасында электрондук өтүү болбой тургандыгын көрөбүз. Электрондук өтүүлөрдү кароо төмөнкүдөй тандоо эрежесине (правила отбора) алып келген.

$$\left.\begin{aligned} \Delta n &= 1,2,3,\ldots \\ \Delta \ell &= \pm 1 \\ \Delta m &= 0, \pm 1, \pm 2 \end{aligned}\right\} \qquad (10.3.6).$$

Глава XI. ЖЕГИЧ МЕТАЛЛДАРДЫН АТОМУ ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ

§1. Шредингердин теңдемеси жана анын чечими

Шредингердин стационардык теңдемеси:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad (11.1.1).$$

Жегич металлдардын атомундагы электрондор үчүн Шредингердин теңдемесин жазуу үчүн потенциалдык энергия U(r) маанисин аныктоо керек.

Мындан атомдордогу электрон ядронун точканын зарядынын борбордук талаасында жайланышкан.

$$U(r) = -\frac{ze^2}{r} \qquad (11.1.2).$$

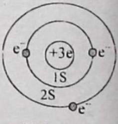
Анда чечим жогоруда биз аныктагандай $E_n = -\frac{z^2e^4m}{2n^2\hbar^2}$ болушу керек.

Суутек үчүн $ze = e$. Электрон 1s абалда жайланышкан (n=1, ℓ= 0). Бул учурда алынган теориялык жыйынтык тажрыйба менен дал келет.

Гелий үчүн ze=2e. Эки электрон тең 1s абалда жайланышкан деп эсептейли жана $1s^2$ деп белгилейли (n=1, ℓ=0). Анда $E_{1S}^{He} = 4E_{1S}^{H}$ болот. Тажрыйбада да $E_{1S}^{He} > E_{1S}^{H}$ экендиги аныкталган.

Литий үчүн (Li) ze=3e. Эгерде жогорку аныктоо боюнча үч электрон тең 1s абалда жайланышкан деп эсептесек, анда $E_{1S}^{Li} = 9E_{1S}^{H}$ - болушу керек. Бирок тажрыйбада тескерисинче $E_{1S}^{Li} < E_{1S}^{H}$ болгон. Эгерде бардык электрондор үчүн n=2, б.а. 2s абалда жайланышкан десек, анда $E_{1S}^{Li} = \frac{9}{4}E_{1S}^{H}$ болот да, бул учурда да тажрыйба менен дал келбейт.

Эгерде эки электрон $1s^2$ абалда, ал эми бир электрон $2s^1$ абалда жайланышкан деп эсептесек тажрыйбага жакындашкан жыйынтык алынган (11.1-сүрөттү караңыз). Бул учурда $E_{2S}^{Li} < E_{1S}^{H}$. Ушундай абалда жайланышкан эки электрон ядронун зарядын, үчүнчү электрон үчүн тосот. Анда бул электрон үчүн ядронун эффективдүү заряды +e болот, б.а. $z_{эф} \cdot e = +e$



11.1 - сүрөт

Мына ошентип 2s[1] электрон +e заряддагы ядронун талаасында кыймылда болот жана $E_{2s}^{Li} = \frac{1}{4} E_{1s}^{H}$. Мындай учур тажрыйбада далилденген. Сан жагынан так эсептөө үчүн эки $1s^2$ электрондор түзгөн талаасын эске алуу керек.

$1s^2$ электрондор менен ядронун эффективдүү заряды +e диполду түзүшөт.

Мына ошентип литийдин атомундагы 2s[1] электрон татаал талаада жайланышкан. Ал +e заряддын талаасы анын потенциалдык энергиясы $U_1(r) = -\frac{e^2}{r}$ жана диполдун талаасы, анын потенциалдык энергиясы $U_2(r) = -\frac{e^2}{r^2}a$ болот. Мында $\alpha-$ диполдун + жана – заряддарынын арасындагы аралык.

$$U(r) = U_1(r) + U_2(r) = -\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r^2}a \qquad (11.1.3).$$

Потенциалдык энергиялардын маанилерин Шредингердин теңдемесине койсок

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r^2}a)\psi = 0 \qquad (11.1.4).$$

Бул теңдемени чечип E жана ψ - аныктоо керек.

Сферикалык координата системасына өтөлү.

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r^2}a\right)\psi = 0 \qquad (11.1.5).$$

Теңдеменин чечимин $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$ түрүндө изилдейли.

Анда (11.1.5) теңдемеге функциянын маанисин коюп, Шредингердин радиалдык жана бурчтук теңдемесин алабыз.

$$\frac{Y}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{R}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{R}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r^2}a\right)RY = 0 \qquad (11.1.6).$$

алынган теңдеменин эки жагын тең $\frac{r^2}{RY}$ көбөйтөлү жана барабардыктын сол жагына r чоңдугунан көз каранды болгон туюнтмаларды, ал эми оң жагына θ, φ чоңдуктарынан көз каранды болгон туюнтмаларды топтойлу.

$$\frac{r^2}{R(r)}\left(\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r^2}a\right)r^2 = -\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right] \qquad (11.1.7).$$

Бул учурда алынган r, θ, φ өзгөрүлмөлөрү бири-биринен көз каранды болбогон өзгөрүлмөлөр, анда алардын функциялары да бири-биринен көз каранды болушпайт жана бул барабардык качан гана турактуу жана жалпы бир санга барабар болгондо аткарылат. Жалпы санды β деп белгилейли.

$$\frac{r^2}{R(r)}\left(\frac{\partial^2 R}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}+\frac{e^2}{r^2}a\right)r^2=\beta \qquad (11.1.8).$$

$$-\frac{1}{Y}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right]=\beta \qquad (11.1.9).$$

Биринчисин $\frac{R(r)}{r^2}$, ал эми экинчисин Y (ϑ,φ) көбөйтөлү.

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+\beta Y=0 \qquad (11.1.10).$$

Бул Шредингердин бурчтук теңдемеси жана ал Лежандрдын теңдемесине окшош.

Жогоруда биз аныктагандай Лежандрдын операторунун өздүк мааниси $\Lambda=\ell(\ell+1)$ болгондуктан, $\beta=\ell(\ell+1)$, $\ell=0,1,2,3,\ldots$, Мында ℓ - орбиталдык кванттык сан.

Алынган β - нын маанисин радиалдык теңдемеге койсок

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{\partial r}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}+\frac{e^2}{r^2}a-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R=0 \qquad (11.1.11).$$

Бул алынган теңдеме суутектин атому үчүн Шредингердин теңдемесинен $\frac{e^2}{r^2}a$ мүчө менен айырмаланат.

Бул теңдемени суутектин атому үчүн Шредингердин теңдемесине окшош түргө келтирели. Ал үчүн төмөнкүдөй белгилөөнү кийирели:

$$\frac{e^2}{r^2}a-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2} \qquad (11.1.12).$$

Бул барабардыктагы ℓ' - эффективдүү орбиталдык кванттык сан деп аталат.

Бул туюнтманын биринчи бөлүгүн өзгөртөлү.

Эффективдүү орбиталдык кванттык сан аркылуу Шредингердин радиалдык теңдемеси суутектин атому үчүн Шредингердин теңдемесине окшош түргө айланат.

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial R}{\partial r}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{e^2}{r}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell'(\ell'+1)}{r^2}\right)R=0 \qquad (11.1.13).$$

Жогорудан биз мурда көргөндөй бул теңдеменин чечими Е-ни аныктасак,

$$E=\frac{me^4}{2\hbar^2(\ell'+n_r+1)} \qquad (11.1.14).$$

Мында n_r – радиалдык кванттык сан.

$\ell'+n_r+1=n'$ - эффективдүү негизги кванттык сан.

$$E_{n'}=-\frac{me^4}{2\hbar^2 n'^2}; \quad n'=1,2,3,\ldots \qquad (11.1.15).$$

ℓ' ти ℓ менен, ал эми n' ти n менен туюнтабыз.

$$\frac{e^2}{r^2}a-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\ell(\ell+1)-\frac{2m}{\hbar^2}\right]=0 \qquad (11.1.16).$$

Бул эки туюнтманы салыштырсак, анда чарчы кашаанын ичиндеги туюнтма эффективдүү орбиталдык кванттык сан менен аныкталат.

$$\ell'(\ell'+1)=\left[\ell(\ell+1)-\frac{2me^2}{\hbar^2}a\right]$$

$$\ell'^2+\ell'-\left[\ell(\ell+1)-\frac{2me^2}{\hbar^2}a\right]=0 \qquad (11.1.17).$$

Бул теңдеме $x^2+x+q=0$ болгон келтирилген квадраттык теңдемеге окшош.

Анда мындай теңдеменин чечими $x=-\frac{1}{2}\pm\sqrt{\frac{1}{4}-q}$, болгондуктан (11.1.16) теңдеменин чечими

$$\ell'=-\frac{1}{2}\pm\sqrt{\frac{1}{4}+\left[\ell(\ell+1)-\frac{2me^2}{\hbar^2}a\right]}=0 \text{ болот.}$$

$$\ell'=-\frac{1}{2}\pm\sqrt{\frac{1}{4}+\ell^2+\ell-\frac{2me^2}{\hbar^2}a}=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{(2\ell+1)^2-\frac{8me^2}{\hbar^2}a}=$$

$$=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}(2\ell+1)\sqrt{1-\frac{8me^2}{\hbar^2(2\ell+1)^2}a}$$

Тамырдагы экинчи мүчө $<<1$ болсо, анда $\sqrt{1-в}\approx 1-\frac{в}{2}; в<<1$ эреженин негизинде төмөнкүгө барабар:

$$\ell'=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}(2\ell+1)\left[1-\frac{4me^2}{\hbar^2(2\ell+1)^2}a\right]=-\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}\left[(2\ell+1)-\frac{4me^2}{\hbar^2(2\ell+1)}a\right]$$

Туюнтманы (+) белгисин алуу керек, (-) маанисинде $\ell'<0$ болот да физикалык мааниге ээ болбойт. Анда $\ell'=-\frac{1}{2}+\ell+\frac{1}{2}-\frac{2me^2}{(2\ell+1)\hbar^2}a=\ell-\frac{2me^2}{2(\ell+1/2)\hbar^2}a$

$$\ell'=\ell-\frac{me^2}{(\ell+1/2)\hbar^2}a \qquad (11.1.17).$$

Бул функциядан $a=0$ болгондо, б.а. диполь жок болгондо $\ell'=\ell$ болот.

Ошондой эле $n'=n$ менен туюнталы.

$$n'=\ell'+n_r+1=n'=\ell-\frac{me^2}{(\ell+1/2)\hbar^2}a+n_r+1=\ell+n_r+1-\frac{me^2}{(\ell+1/2)\hbar^2}a=n-\frac{me^2}{(\ell+1/2)\hbar^2}a$$

$n' = n - \frac{me^3}{(\ell + \frac{1}{2})\hbar^2}\alpha$ Бул алынган n' маанисин (11.1.15)-формуласына

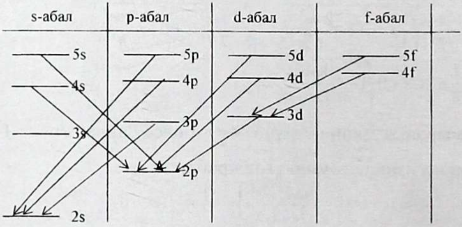
койсок төмөнкүнү алабыз $E_{n,\ell} = \frac{me^4}{2\left[n - \frac{me^2}{(\ell+1/2)\hbar^2}a\right]^2\hbar^2}$ (11.1.18).

Мында n = 1,2,3,… ℓ = 0,1,2,…,(n-1)

Бул формуладан төмөндөгүдөй жыйынтык чыгарылат:

1) Жегич металлдын атомунун энергиясы n жана ℓ кванттык сандары менен аныкталат.
2) Жегич металлдардын атомундагы электрондордун s жана p абалдары үчүн ℓ дин таасири чоң, ал эми d жана *f* абалдары үчүн таасири азыраак.
3) n кванттык сандын чоң маанилеринде ℓ кванттык сандын энергияга таасири кичинекей жана тескерисинче, n дин кичинекей маанисинде ℓ-дин энергияга таасири чоң.

Алынган энергиянын маанилерин графикте 11.2-сүрөттө көрсөтүлгөн.



11.2-сүрөт.

Мына ошентип жегич металлдардын атомунда ℓ кванттык саны энергетикалык деңгээлдердин жайланышына таасирин тийгизет.

§2. Жегич металлдардын атомунун нурдануу спектрлери

Бул энергетикалык деңгээлдердин жардамында жегич металлдардын атомдорунун нурдануу спектрин карайлы. Литийдин атомунда негизги абалда электрон минималдуу энергияга ээ болгон деңгээлде болот. Сырттан энергия жутканда ал жогорку

деңгээлдерге өтөт. Кайрадан электрон төмөнкү деңгээлге өткөндө атом нур чыгарат. Жегич металлдардын атомунун нурдануусунун спектралдык сызыктарынын төмөнкүдөй сериялары бар:

1. Негизги серия (p-серия)
2. Так серия (s-серия)
3. Диффузиялык серия (d-серия)
4. Фундаменталдык серия (f -серия)

Мына ошол сериялардын пайда болушу 11.2-сүрөттө көрсөтүлгөн.

Эгерде электрон n→к өткөндө нурдануу болсо, анда

$$\hbar\omega = E_{n,\ell} - E_{\kappa,\ell} = \frac{e^4 m}{2\hbar^2}\left[\frac{1}{(\kappa+\sigma_e)^2} - \frac{1}{(n+\sigma_e)^2}\right] \qquad (11.2.1).$$

$$\omega = \frac{e^4 m}{2\hbar^3}\left[\frac{1}{(\kappa+\sigma_e)^2} - \frac{1}{(n+\sigma_e)^2}\right];$$ Мында $\sigma_e = -\frac{me^2}{(\ell+\frac{1}{2})\hbar^2}\alpha$, $\frac{e^4 m}{2\hbar^3} = R$

$$\omega = \frac{R}{(\kappa+\sigma_e)^2} - \frac{R}{(n+\sigma_e)^2} \qquad (11.2.2).$$

к – кайсы абалга электрон келгендигин көрсөткөн негизги кванттык сан.

n – кайсы абалдан электрон келе тургандыгын көрсөткөн негизги кванттык сан.

Мына ошентип, нурдануунун жыштыгы ω (же толкундук саны $1/\lambda$) эки сандын айырмасы болот.

Бул сандар *суутексымал эмес термдер* деп аталат.

1. p – серия төмөндөгүдөй пайда болот: np→2s n≥3
2. s – серия төмөндөгүдөй пайда болот: ns→2p n≥3
3. d – серия төмөндөгүдөй пайда болот: nd→2p n≥3
4. f – серия төмөндөгүдөй пайда болот: nf→3d n≥4

2s→2p өтүүдө негизги кванттык сан өзгөрүлбөйт.

Мына ошентип 2s→2p өткөн учурдагы нурдануу энергиясы менен 2p→2s өткөндөгү нур чыгаруу энергиясы бирдей. Мына ошондуктан бул өтүүнү *резонанстык өтүү* деп аташат.

Реалдык учурда төмөнкүдөй тандоо эрежеси бар:

$\Delta n = 0,1,2,3,\ldots$

$\Delta\ell = \pm 1$

$\Delta m = 0,\pm 1.$

Ушундай эле жол менен калган Na, K, Rb, Cs элементтери үчүн да нурдануунун жыштыгын аныктоого болот.

XII глава. МАГНИТ ТАЛААСЫНДАГЫ АТОМДОР ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ. ЗЕЕМАНДЫН НОРМАЛДЫК ЭФФЕКТИ.

§1. Магнит тааласындагы атомдун электронунун потенциалдык энергиясы

Бизге белгилүү Шредингердин стационардык теңдемеси төмөнкүдөй:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad (12.1.1).$$

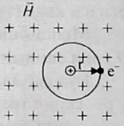
Бул теңдемени магнит талаасындагы атомдор үчүн пайдаланып, анын чечимин аныктайлы. Ал үчүн потенциалдык энергиянын маанисин аныктоо зарыл. Бул учурда потенциалдык энергия электрдик жана магниттик түзүүчүлөрдөн турат: $U=U_E+U_H$. Электрдик түзүүчү U_E – бизге белгилүү. Ал суутектин атому үчүн $U_E = -\frac{e^2}{r}$, ал эми жегич металлдардын атому үчүн

$$U_E = -\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r^2} \qquad (12.1.2).$$

Анда U_H – маанисин аныктайлы, анын мааниси магнит талаасында электронго аракет эткен күч менен аныкталат.

Эгерде сырткы магнит талаасынын чыңалышы $\vec{H}$ болсо, анда $U_H = -M_L\vec{H}$ болот (12.1.1 - сүрөттү караңыз). Электрондун орбиталдык магниттик моменти төмөнкүдөй болот:

$$M_L = \frac{J\cdot S}{c} = \frac{qv}{c}\cdot\pi r^2 = \frac{q\omega}{c2\pi}\cdot\pi\cdot r^2 \qquad (12.1.3).$$



12.1.1 – сүрөт

Эгерде q=-e болсо, б.а. электрон үчүн $M_L = -\frac{e}{2c}\cdot\omega\cdot r^2$.

Бул формуланы электрондун массасына (m_e) көбөйтөлү жана бөлөлү. Анда электрондун орбиталдык магниттик моменти

$$M_l = -\frac{e}{2m_e c}m_e r^2\omega = -\frac{e}{2m_e c}m_e r\vartheta = -\frac{e}{2m_e c}L_z \text{ болот.}$$

Ал эми L_z – атомдогу электрон үчүн бизге белгилүү төмөнкүдөй $L_z = m\hbar$. Мында m – магниттик кванттык сан.

Анда $M_L = -m\frac{e\hbar}{2m_e c}$; $\quad m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots, \pm l$ (12.1.4).

Бул аныктоодон көрүнгөндөй электрондун орбиталдык магниттик моменти дискреттүү мааниге ээ.

Мына ошентип атомдогу электрондун магниттик моменти, ал сырткы магнит талаасында болгон учурда квантталат жана ал магниттик кванттык сан m менен аныкталат.

Ошондой эле ал турактуу бир санга эселенген болот жана ал сан $M_{OL}=\frac{e\hbar}{2m_e c}$ - Бордун магнетону деп аталат.

Анда потенциалдык энергия

$$U_H=-M_L H_\perp \text{ т.е. } U_H=m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp \qquad (12.1.5).$$

Мында $\perp$ - белги магнит талаасынын күч сызыктарынын байкоо багытына перпендикуляр экендигин көрсөтөт.

Анда Шредингердин стационардык теңдемеси төмөнкүдөй болот.

$$\nabla^2\psi+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E-U_K-\frac{m_e\hbar}{2m_e c}H_\perp\right)\psi=0 \qquad (12.1.6).$$

Бул теңдемени изилденүүчү атомдор үчүн пайдаланып чечимин аныктоого мүмкүн.

§2. Магнит талаасындагы суутектин атому үчүн Шредингердин теңдемеси

Суутектин атому үчүн карайлы. Анда, магнит талаасындагы суутектин атому үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй түргө келет.

$$\nabla^2\psi+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}-\frac{m_e\hbar}{2m_e c}H_\perp\right)\psi=0 \qquad (12.2.1).$$

Бул теңдемени чечип E жана ψ - аныктоо керек. Ал үчүн бул теңдемени сырткы магнит талаасы жок болгон учурдагыдай түргө келтирүү керек. Төмөнкүдөй белгилөөлөрдү кийирели

$$E-m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp=E' \qquad (12.2.2).$$

Анда Шредингердин теңдемеси

$$\nabla^2\psi+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E'+\frac{e^2}{r}\right)\psi=0 \qquad (12.2.3).$$

Бул теңдеме сырткы көрүнүшү боюнча суутектин атому үчүн Шредингердин теңдемесине окшош жана анын чечими төмөнкүдөй болот

$$E'_n=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}; \qquad n=1,2,3,4,... \qquad (12.2.4).$$

Анда $$E_n = E_n' + m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp \qquad (12.2.5).$$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} + m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp \qquad (12.2.6).$$

Бул формуладан көрүнгөндөй магнит талаасындагы атомдун энергиясы, магнит талаасы жок болгон учурдагы энергиянын маанисинен $m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp$ чоңдукка айырмаланат.

Ал эми ψ функциянын мааниси сырткы магнит талаасы жок болгон учурдан айырмаланбайт.

Магнит талаасындагы атомдун ар кандай абалын карайлы.

Бизге белгилүү кванттык сандар төмөнкүдөй маанилерге ээ:

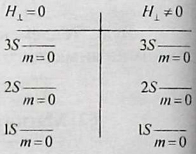
n = 1, 2, 3, 4, …

ℓ = 0, 1, 2, 3, …, (n-1);

m = 0, ±1, ±2, ±3,…, ±ℓ.

1) S – абалды карайлы (ℓ=0, m=0).

Анда энергия $E_{n,0}^{(s)} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}$.



12.2.1 – сүрөт

Суутектин атому S – абалда болгон учурда, анын энергетикалык абалына сырткы магнит талаасы таасирин тийгизбейт (12.2.1 – сүрөттү караңыз)

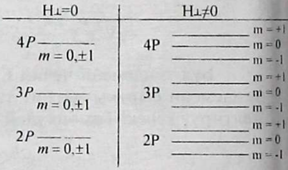
2) P – абалды карайлы (ℓ = 1, m = 0, ±1).

Анда энергия төмөнкүдөй үч мааниге ээ болот.

а) $m = 0 \qquad E_{n_1 0}^{(p)} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} \qquad L \perp H$

б) $m = +1 \qquad E_{n_1(+1)}^{(p)} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} + \frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp \qquad L\uparrow\downarrow H$

в) $m = -1 \qquad E_{n_1(-1)}^{(p)} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} - \frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp \qquad L\uparrow\uparrow H$

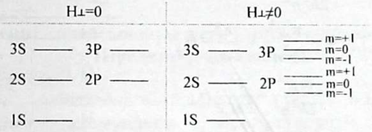


12.2.2 – сүрөт

Б.а. P - абалда атом сырткы магнит талаасында болгон учурда энергетикалык деңгээлдердин ар бири ничке үч деңгээлдерге ажырайт.

Ар бир ничке деңгээлдер бири-биринен барабар болгон $\pm\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp$ чоңдукка айырмаланат. Бул аныктоодон көрүнгөндөй $H_\perp$ - канчалык чоң болсо энергетикалык деңгээлдердин айырмачылыктары да ошончолук чоң болот.

S жана P энергетикалык деңгээлдердин магнит талаасынын таасиринин натыйжасында ничке деңгээлдерге ажырашын карайлы. Ал 12.2.3 – сүрөттө берилген.



12.2.3 – сүрөт

Мына ошентип, сырткы магнит талаасынын таасиринин натыйжасында P – деңгээл так сандагы ничке энергетикалык деңгээлдерге ажырайт. P – деңгээлдин так сандагы майда деңгээлдерге ажырашы спектралдык сызыктардын да так санга ажырашына алып келет.

Сырткы магнит талаасынын таасиринин натыйжасында спектралдык сызыктардын так санга ажырашы *Зеемандын нормалдык эффекти* деген атты алган.

Эгерде магнит талаасындагы суутектин атомунун нурдануусу электрондун n деңгээлден *i* деңгээлге өтүү мезгилинде аткарылса, анда нурдануунун энергиясы ħω (же hν) төмөнкүдөй болот:

$$h\nu = \hbar\omega = E_n - E_i \qquad (12.2.7).$$

Анда нурдануунун жыштыгы

$$\omega = \frac{E_n - E_i}{\hbar} = \frac{E_n' - E_i'}{\hbar} - \Delta m \frac{e}{2m_e c} H_\perp \qquad (12.2.8).$$

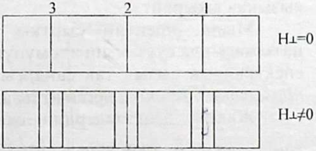
$$\omega = \omega_o - \Delta m \frac{e}{2m_e c} H_\perp \qquad (12.2.9).$$

Мында ω_o – магнит талаасы жок болгон учурдагы нурдун жыштыгы. Магниттик кванттык сан тандоо эрежесинин негизинде $\Delta m = 0,\ \pm 1$ болгондуктан магнит талаасынын таасиринин натыйжасында ар бир спектралдык сызык үч сызыкка ажырайт (12.2.4 – сүрөттү караңыз) жана алардын жыштыгы төмөнкүдөй болот:

а) $\omega_1 = \omega_o$,

б) $\omega_2 = \omega_o + \dfrac{e}{2m_e c} H_\perp$,

в) $\omega_3 = \omega_o - \dfrac{e}{2m_e c} H_\perp$



12.2.4 – сүрөт

3) Ушундай эле жол менен

d – абалды карайлы. Ал үчүн ℓ=2, m=0, ±1, ±2 болот.

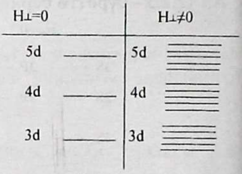
а) m=0; $E_{n,1,0} = -\dfrac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}$;

б) m=+1; $E_{n,1,+1} = -\dfrac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} + \dfrac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$

в) m=-1; $E_{n,1,-1} = -\dfrac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} - \dfrac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$

г) m=+2; $E_{n,1,+2} = -\dfrac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} + 2\dfrac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$

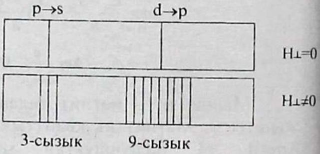
д) m=-2 ; $E_{n,1,-2} = -\dfrac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} - 2\dfrac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$



12.2.5 – сүрөт

12.2.5 – сүрөттө көрсөтүлгөндөй сырткы магнит талаасынын таасиринин натыйжасында d деңгээлдер 5 ничке деңгээлдерге ажырайт.

Нурдануу мезгилинде суутектин атомундагы электрон d – деңгээлден p – деңгээлге өткөн учурда пайда болгон спектралдык сызыктар да так санга ажырайт. Теориялык аныктоо боюнча спектралдык сызыктардын саны 5х3=15 болушу керек. Бирок тажрыйбада 9 спектралдык сызык аныкталган. Айрым энергетикалык деңгээлдердин арасында электрондук өтүү жок. Электрондук өтүүлөр тандоо эрежесинин негизинде Δm= 0,±1 өзгөрүүсүндө гана нурдануулар болот. Ал эми Δm маанилерден чоң болгон өзгөрүүлөрүндө электрондук өтүүлөр болбойт.



12.2.6 – сүрөт

Мына ошентип суутектин атомунун нурдануу спектриндеги спектралдык сызыктардын жайланышы төмөнкүдөй болот (12.2.6-сүрөттү караңыз). Б.а. ар бир спектралдык сызык p→s өтүүдө үч ничке сызыкка, ал эми d→p өтүү учурунда тогуз ничке сызыкка ажырайт.

Мына ошентип сырткы магнит талаасынын таасиринин натыжасында суутектин атомунун нурдануу спектрлериндеги ар бир спектралдык сызык так сандагы сызыктарга ажырашы *Зеемандын нормалдык эффекти* деген атты алган.

Жалпы деңгээлдердин саны 2ℓ+1 болот. Ар бир коңшу деңгээлдердин аралыгы бири биринен $\dfrac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$ чоңдукка

айырмаланат. Бул аралык n, ℓ кванттык сандардан көз каранды эмес, ал сырткы магнит талаасынын чоңдугунан $H_{\perp}$ көз каранды.

§3. Магнит талаасындагы жегич металлдардын атому үчүн Шредингердин теңдемеси

Жегич металлдардын атому үчүн карайлы. Жегич металлдардын атомундагы электрондордун потенциалдык энергиясынын электрдик U_E жана магниттик U_H түзүүчүлөрү

$$U_E = -\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r^2}a \quad \text{жана} \quad U_H = m\frac{e\hbar}{2m_o c}H_{\perp} \qquad (12.3.1).$$

Анда электрондун электрдик жана магниттик талаалардагы потенциалдык энергиясы

$$U = U_E + U_H = -\frac{e^2}{r} - \frac{e^2}{r^2}a + m\frac{e\hbar}{2m_o c}H_{\perp} \qquad (12.3.2).$$

Анда Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй түргө келет.

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r^2}a - m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_{\perp}\right)\psi = 0 \qquad (12.3.3).$$

Жогоруда карагандай сырткы магнит талаасы жок болгон учурга алып келүү керек, б.а. төмөнкүдөй белгилөөлөрдү кийирели:

$$E' = E - m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_{\perp} \qquad (12.3.4).$$

Анда Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй түргө келет:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E' + \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r^2}a\right)\psi = 0 \qquad (12.3.5).$$

Мындай типтеги Шредингердин теңдемеси бизге белгилүү, ал жегич металлдардын атому үчүн аныкталган теңдемеге окшош жана анын чечими төмөнкүдөй болот:

$$E'_{n,\ell} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2\left[n - \frac{m_e e^2}{\hbar^2(\ell+1\;2)}a\right]^2} \qquad (12.3.6).$$

Анда

$$E_{n,\ell} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2\left[n - \frac{m_e e^2}{\hbar^2(\ell+1\;2)}a\right]^2} + m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_{\perp} \qquad (12.3.7).$$

Бул теңдеме жегич металлдардын атому сырткы магнит талаасында болгон учурдагы электрондордун алган энергиясы. (12.3.7)-формуладан көрүнгөндөй энергия $E_{n,\ell,m}$ – мааниси n, ℓ, m кванттык сандардан көз каранды. Эгерде сырткы магнит талаасы жок

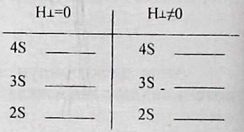
болгондо ($H_\perp=0$), энергиянын мааниси $E_{n,\ell}$ m кванттык сандан көз каранды болбойт.

Жогоруда көрүнгөндөй эле жегич металлдардын атомунун сырткы магнит талаасында болгон учурда энергетикалык деңгээлдеринин жана нурдануу спектрлеринин спектралдык сызыктарынын ажырашын карайлы.

1) S – абал. Бул абал үчүн $\ell=0$, m=0. Анда жегич металлдардын атомунун энергиясы

$$E_{n,0,0}=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2\left[n-\frac{m_e e^2}{\hbar^2(1/2)}a\right]^2} \quad (12.3.8)$$

Бул аныктоодон көрүнгөндөй атом S-абалында болгондо $E_{n,o,o}$ мааниси магнит талаасынын чоңдугунан көз каранды болбойт жана $H_\perp$- өзгөрүүсү энергияга $E_{n,o,o}$ таасирин тийгизбейт.

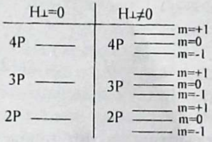


12.3.1 – сүрөт

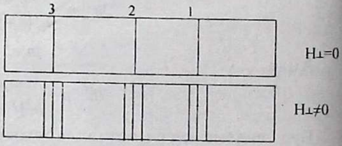
2) P – абалды карайлы. Бул абал үчүн $\ell=1$, m=0, ±1 болгондуктан энергия төмөнкүдөй үч мааниге ээ болот:

$$\left.\begin{aligned}
&\text{а) } m=0 \quad E_{n,1,0}=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2\left(n-\frac{m_e e^2}{\hbar^2 3/2}a\right)^2}; && L\perp H\\
&\text{б) } m=+1 \quad E_{n,1,+1}=E_{n,1,0}+\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp && L\uparrow\downarrow H\\
&\text{в) } m=-1 \quad E_{n,1,-1}=E_{n,1,0}-\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp && L\uparrow\uparrow H
\end{aligned}\right\} \quad (12.3.9)$$

Башкача айтканда p – абалда сырткы магнит талаасында болгон учурда энергетикалык деңгээлдердин ар бири ничке үч деңгээлдерге ажырайт жана ар бир ничке деңгээлдердин энергетикалык аралыгы магнит талаасы жок болгон учурдагы



12.3.2 – сүрөт



12.3.3 – сүрөт

деңгээлден $m\frac{e\hbar}{2m_e c}H_\perp$ чоңдукка айырмаланат (12.3.2-сүрөттү караңыз).

Мындай р-деңгээлдердин так ничке деңгээлдерге ажырашы спектралдык сызыктардын да так санга ажырашына алып келет (12.3.3-сүрөттү караңыз).

3) Ушундай эле жол менен d – деңгээлдерди да так сандарга ажырашын аныктоого болот. Ал үчүн ℓ=2, m=0, ±1, ±2 болот.

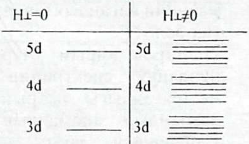
а) m=0; $E_{n,1,0}=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}$;

б) m=+1; $E_{n,1,+1}=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}+\frac{e\hbar}{2m_o c}H_\perp$

в) m=-1; $E_{n,1,-1}=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}-\frac{e\hbar}{2m_o c}H_\perp$

г) m=+2; $E_{n,1,+2}=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}+2\frac{e\hbar}{2m_o c}H_\perp$

д) m=-2 ; $E_{n,1,-2}=-\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}-2\frac{e\hbar}{2m_o c}H_\perp$



12.2.5 – сүрөт

Энергетикалык графикте ал 12.2.5 – сүрөттө көрсөтүлгөндөй сырткы магнит талаасынын таасиринин натыйжасында d деңгээлдер 5 ничке деңгээлдерге ажырайт.

Анда жегич металлдардын атомдорундагы энергетикалык деңгээлдерди так сандарга ажырашы нурдануу спектриндеги спектралдык сызыктардын да, так сандарга ажырашына алып келет. Эгерде нурдануунун энергиясы $\hbar\omega=E_n-E_i$ болсо, анда нурдануунун жыштыгы

$$\omega=\frac{E_n-E_i}{\hbar}=\frac{E'_n-E'_i}{\hbar}-\Delta m\frac{e}{2m_e c}H_\perp \qquad (12.3.10).$$

$$\omega=\omega_o-\Delta m\frac{e}{2m_e c}H_\perp \qquad (12.3.11).$$

Мында ω_o сырткы магнит талаасы жок болгон учурдагы нурдануунун жыштыгы.

Сырткы магнит талаасынын таасиринин натыйжасында ар бир спектралдык сызык так сандагы ничке сызыктарга ажырашы *Зеемандын нормалдык эффекти* деген атты алган.

XIII глава. ЭЛЕКТРОНДУН СПИНИ

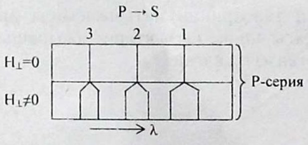
§1. Электрондун спинге ээ экендигин көрсөткөн эксперименталдык далилдер

Зеемандын нормалдык эффекти, б.а. сырткы магнит талаасында спектралдык сызыктардын так санга ажырашы энергетикалык деңгээлдердин да так санга ажырашынын натыйжасы болгон. Ал негизинен m кванттык сан менен аныкталат. ℓ - кванттык санынын берилген маанисинде m кванттык саны $2\ell+1$ маанини алгандыктан, ар дайым энергетикалык деңгээлдердин саны так болот.

1) Бирок айрым учурларда магнит талаасындагы атомдордун нурдануу спектринин спектралдык сызыктары жуп санга ажырагандыгы тажрыйбада байкалган. Бул жуп санга ажыроо Зеемандын аномалдык эффекти деп аталган. Бул эффектти түшүндүрүү дагы энергетикалык деңгээлдердин жуп санга ажырашын талап кылат. Бирок Шредингердин теңдемесин мүмкүн болгон ар кандай түргө келтирүү деңгээлдин жуп санга ажырашын бербейт. Себеби m кванттык сан эч убакта жуп мааниге ээ болбойт. Бул электрондук спининин ачылышына алып келген биринчи кыйынчылык болгон.

2) Жегич металлдардын спектрин изилдөө анын "ничке" түзүлүшүнө ээ экендигин көрсөттү, б.а. сырткы магнит талаасы жок болгон учурда да айрым атомдордун нурдануу спектриндеги спектралдык сызыктардын экиге ажырагандыгы байкалган. Мисал үчүн натрийдин (Na) сары сызыгы (Д-сызык) дублеттен турат. Алар (5889,953 Å жана 5895,930 Å). Ушундай эле бардык жегич металлдардын негизги сызыктары дублеттен турушат. Бул спектралдык сызыктын экиге ажырашы энергетикалык деңгээлдин да магнит талаасы жок болгон учурда экиге ажырашын талап кылат.

Спектралдык сызыктардын экиге ажырашы спектралдык сызыктын "ничке түзүлүшү" деген атты алган. Ар кандай сериялардын спектралдык сызыктарынын дублеттери бири-биринен айырмаланышат.



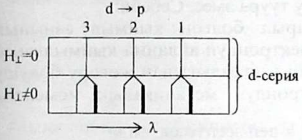
13.1-сүрөт.

1) Негизги серияда ($p \to s$) ажыроонун чоңдугу бирдей эмес. Биринчи сызык үчүн ал бир аз чоң, ал эми калган сызыктарда кичирейип кетет. (13.1-сүрөттү караңыз).

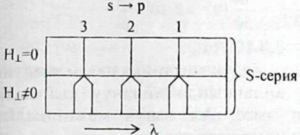
2) Диффузиялык сериянын сызыктары (d → p) үчүн ажыроонун чоңдугу бирдей. Бирок бул сериянын ар бир сызыктары бир жагынан бир аз жайылган. (13.2-сүрөттү караңыз).

3) Кескин сериянын сызыктары (s → p) үчүн ажыроонун чоңдугу баардык сызыктар үчүн бирдей жана так. (13.3-сүрөттү караңыз).

Бул ажыроолор анчалык чоң эмес. Мисалы үчүн натрийдин негизги сызыгы болгон сары сызык үчүн айырмачылык $\Delta\lambda=0,598$ нм барабар. Бул спектралдык сызыктардын “ничке” түзүлүшүн түшүндүрүүдөгү экинчи кыйынчылык.



13.2-сүрөт.



13.3-сүрөт.

Шредингердин теңдемесин ар кандай өркүндөтүү Зеемандын аномалдык эффектисинин келип чыгышын жана жегич металлдардын нурдануу спектринде “ничке” түзүлүштүн пайда болушун түшүндүрө алган эмес.

Мисалы, жегич металлдардын атомундагы S-электрондордун кыймылына электрдик талаадан башка ички электрондордун кыймылынын натыйжасы болгон магниттик талаа да таасир берип, анын энергиясын өзгөртүүсү мүмкүн деген божомолдор болгон. Бирок мындай түшүндүрүүнү Паули четке кагып, жегич металлдардын атомунун негизи механикалык жана магниттик моментке ээ эмес экендигин көрсөткөн. Жегич металлдардын атомундагы ички электрондордун моменттери өз ара компенсацияланышат. Себеби алар толук туюкталган электрондук катмарга ээ.

Спектралдык сызыктардын жука түзүлүшүндө дублеттик сызыктардын пайда болушу, б.а. бир энергетикалык деңгээлдин эки ничке деңгээлге ажырашы электрондун орбиталдык кыймылынын энергиясына ($E_{n,\ell}$) кандайдыр бир чоңдуктагы энергияны кошуп же кемиткендей мааниге ээ деген идеяны немецтик физик Паули сунуш кылган. Паулинин бул идеясын кийинчерээк Голландиялык физиктер Юленбек и Гаудисмит (1924) өнүктүрүшкөн. Алар электрондун мындай кошумча энергиясын анын өзүнүн огунун айлансында айлануусунун натыйжасы катарында карашкан. (to spin – айлануу – бир багыт жана ага карама-каршы багыт боюнча айлануу). Мындай

электрондун өзүнүн огунун айланасында айлануусу кошумча кыймыл санынын моментин, б.а. спинин пайда кылат.

Бирок электрондун өзүнүн огунун айланасында айлануусунун натыйжасы катарында спиндин маанисин аныктоо үчүн классикалык теорияны пайдалануу туура эмес. Себеби:

1) Биринчиден, электрондун зарыл болгон кыймыл санынын моментин же спинин алуу үчүн электрондун айланма кыймылынын ылдамдыгы вакуумдагы жарыктын ылдамдыгынан жогору болушу керек. $M_e = m_o \vartheta r_o$. Эгерде электрондун механикалык моментин тажрыйба талап кылгандай $M_e = \frac{1}{2}\hbar$ деп эсептесек, анда

$$\vartheta = \frac{\hbar}{2m_o r_o} = \frac{1{,}0\cdot 10^{-27}}{29\cdot 10^{-28}\cdot 2{,}8\cdot 10^{-13} m} = \frac{10^{-27}}{2\cdot 25\cdot 10^{-41}} = \frac{100}{50}10^{12} = 2\cdot 10^{12}\,\frac{см}{сек}$$

r_0 – электрондун өздүк радиусу; $r_0 = 2{,}8\cdot 10^{-13}$см.

Мына ошондуктан электрондун өздүк механикалык моментин же спинин анын өзүнүн огунун айлансында айлануу кыймылы менен байланыштырууга мүмкүн эмес. Ал өздүк механикалык моментин мүнөздөгөн электрондун ички касиети.

2) Экинчиден, эгерде электрондун спинин анын өздүк айланма кыймылы менен байланыштырсак, анда электрон чоң электромагниттик массага ээ болушу керек.

Чындыгында эле, электрон өзүнүн огунун айланасында айлануу менен токту пайда кылат, ал эми ток магнит талаасын пайда кылат. Электрондун магниттик энергиясы өтө чоң болгондуктан анын электромагниттик массасы да чоң болуп, протондун массасынан ашып түшүшү керек. Бирок электрондун массасы протондун массасынан кичинекей болгондуктан, электрондун спини жөнүндөгү түшүнүктү электрондун өзүнүн огунун айласындагы айлануу менен байланыштыруу туура эмес.

§2. Электрондун спини же өздүк моменти.

Электрондун спини анын заряды, массасы жана башка касиеттерине окшош электрондун өзүнө таандык болгон касиет, жана аны англис тилиндеги “spin” деген сөздүн баш тамгасы менен белгилешкен.

Электрондун спини, б.а. өздүк механикалык моменти электрондун орбиталдык механикалык моментине окшош.

Орбиталдык механикалык момент	Өздүк механикалык момент
$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\cdot\hbar$	$S = \sqrt{s(s+1)}\cdot\hbar$

ничке абалдардын жалпы саны ℓ-дин берилген маанисинде 2ℓ+1 барабар, б.а. берилген окко карата анын проекциясы 2ℓ+1 маанини алат.

Спиндин моменти экиге гана ажырагандыктан s-тин берилген маанисинде жалпы маани экиге барабар болушу керек, б.а. 2s+1 =2 болушу керек. Анда s бир гана маанини алат жана ал $\frac{1}{2}$ болот.

Мына ошентип s-спиндик кванттык сан бүтүн мааниге эмес, б.а s=1/2 болгон бөлчөк мааниге ээ.

Берилген z огу боюнча электрондун орбиталдык моментинин проекциясы

$$L_z = m\hbar$$

Мында m – орбиталдык магниттик кванттык сан, m = 0, ±1, ±2,…, ±ℓ болуп, жалпы саны 2ℓ+1 барабар.

Берилген z огу боюнча электрондун өздүк моментинин проекциясы

$$S_z = m_s\hbar$$

Мында m_s-спиндик магниттик кванттык сан, m_s = ± 1/2 болуп жалпы саны экиге барабар.

Көпчүлүк учурда спиндин проекциясын $\hbar$-бирдигинде аныкташат, анда ал ±1/2 барабар болот. Мына ошондуктан көпчүлүк учурда электрондук спин ±1/2 барабар деп айтышат. Бирок чындыгында ±1/2 мааниге спиндик магниттик кванттык сан ээ.

§3. Электрондун толук механикалык моменти

Электрондун толук механикалык моменти анын өздүк механикалык моменти менен орбиталдык механикалык моменттеринин вектордук суммасына барабар.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{13.3.1}$$

Электрондун толук механикалык моменти $\vec{J}$, өздүк механикалык моменти $\vec{S}$ жана орбиталдык механикалык моменти $\vec{L}$ - дей эле кванттык сан менен аныкталат.

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar, \quad j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots, \left(\ell \pm \frac{1}{2}\right), \; j = (\ell \pm s) \tag{13.3.2}$$

j – электрондун толук механикалык моментин мүнөздөгөн кванттык сан.

Эгерде $\ell=0$ болгондо j=s болот, себеби $\ell=0$ учурунда s-ти кошуп же кемите турган эч нерсе жок.

Берилген z огу боюнча электрондун толук механикалык моментинин проекциясын J_z десек, анда

$$J_z = m_j\hbar, \qquad m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, ..., \pm j \qquad (13.3.3).$$

m_j – толук кыймыл саны үчүн магниттик кванттык сан.

Ал j – кванттык сандын берилген маанисинде m_j кванттык саны 2j+1 барабар болот.

j – кванттык сандын мүмкүн болгон маанилерин карайлы.

n=1 болгон учурда:

а) $\ell = 0,\ 1s-абал;\ j = \ell + s = 0 + \frac{1}{2};$ $\qquad s_j \rightarrow s_{1/2}.$

n=2 болгон учурда:

а) $\ell = 0,\ 2s-абал;\ j = \ell \pm s = 0 \pm s = s = \frac{1}{2};$ $\qquad s_j \rightarrow s_{1/2}.$

б) $\ell = 1,\ 2p-абал;\ j = \ell + s = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2};$ $\qquad p_j \rightarrow p_{3/2}.$

$j = \ell - s = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2};$ $\qquad p_j \rightarrow p_{1/2}.$

n=3 болгон учурда:

а) $\ell = 0,\ 3s-абал;\ j = \ell + s = 0 + s = \frac{1}{2};$ $\qquad s_j \rightarrow s_{1/2}.$

б) $\ell = 1,\ 3p-абал;\ j = \ell + \frac{1}{2} = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2};$ $\qquad p_j \rightarrow p_{3/2}.$

$j = \ell - s = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2};$ $\qquad p_j \rightarrow p_{1/2}.$

в) $\ell = 2,\ 3d-абал;\ j = \ell + s = 2 + \frac{1}{2} = \frac{5}{2};$ $\qquad d_j \rightarrow d_{5/2}.$

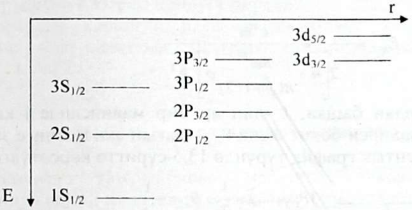
$j = \ell - s = 2 - \frac{1}{2} = \frac{3}{2};$ $\qquad d_j \rightarrow d_{3/2}.$

Алынган жыйынтыктан көрүнгөндөй s – абалдар бир гана ничке абалдан турат: $s_j \rightarrow s_{1/2}$. Ал эми p жана d абалдар эки ничке абалдардан турушат: $p_j \rightarrow p_{3/2}$, $p_j \rightarrow p_{1/2}$ жана $d_j \rightarrow d_{5/2}$, $d_j \rightarrow d_{3/2}$.

Мына ошентип, s абалдан башка бардык абалдар эки ничке абалдарга ажырайт. Бул аныктоонун натыйжасында суутектин атому үчүн абалдардын энергиясынын ажыроосун карайлы:

$\ell=0$	$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=1$	$\ell=0$	$\ell=1$	$\ell=1$	$\ell=2$	$\ell=2$
$1S_{1/2}$	$2S_{1/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$	$3S_{1/2}$	$3P_{1/2}$	$3P_{3/2}$	$3d_{3/2}$	$3d_{5/2}$

Алынган жыйынтыкты графикте карасак, ал төмөнкү 13.4-сүрөттө көрсөтүлгөн.



13.4-сүрөт.

§4. Спектралдык сызыктардын "ничке" түзүлүшүн түшүндүрүү.

Атомдогу электрондун толук механикалык моменти $\vec{J}$ жана анын проекциясын $\vec{J}_z$ эске алуу менен энергетикалык деңгээлдердин жуп санга ажырашын түшүндүрүүгө мүмкүн.

$\vec{J}$ векторунун багытын аныктоо үчүн кандайдыр бир окко болгон анын проекциясын аныктоо керек. Мисалы z огуна болгон проекциясын аныктайлы, б.а. $\vec{J}_z$.

Анда $J_z = m_j \hbar$. Мында $m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, ..., \pm j$. Баардыгы (2j+1) мааниге ээ болот.

Бул аныктоодон көрүнгөндөй m кванттык сандын жалпы мааниси 2ℓ+1 болуп, так болсо, ал эми m_j жалпы мааниси 2j+1 болуп, жуп болот.

Мисалы,

а) $j = \frac{1}{2}$ болсо, $2j + 1 = 2\frac{1}{2} + 1 = 2$ болот;

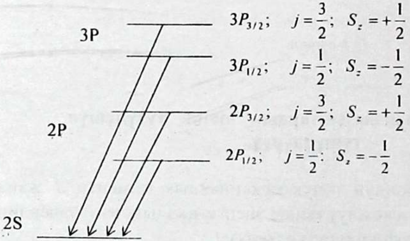
б) $j = \frac{3}{2}$ болсо, $2j + 1 = 2\frac{3}{2} + 1 = 4$ болот;

в) $j = \frac{5}{2}$ болсо, $2j + 1 = 2\frac{5}{2} + 1 = 6$ болот.

Жегич металлдардын атому үчүн карайлы. j-кванттык санынын ар кандай маанисинде энергия да ар түрдүү мааниге ээ болот.

$$E_{n,j} = -\frac{e^4 m}{2\left[n - \frac{me^2}{\hbar(j+1/2)}a\right]^2 \hbar^2} \qquad (13.4.1).$$

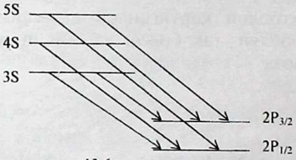
ℓ =0 учурдан башка, ℓ -дин ар бир маанисинде j кванттык санынын эки мааниси болот жана $E_{n,j}$ – дагын эки мааниге ээ болот. Алынган жыйынтык график түрүндө 13.5-сүрөттө көрсөтүлгөн.



13.5-сүрөт.

Бул негизги серия болгон p сериянын ничке түзүлүшүнүн пайда болушу.

Ал эми s-сериянын ничке сызыктарга ажырашы 13.6-сүрөттө көрсөтүлгөн.



13.6-сүрөт.

Мына ошентип p-сериянын ничке түзүлүшкө ажырашы жогорку энергетикалык деңгээлдердин ажырашы менен байланышкан. Ал эми жогорку энергетикалык деңгээлдердин ажыроо чоңдугу ар түрдүү болгондуктан, n кванттык санды маанисинин жогорулашы менен ажыроо чоңдугу да кичирейет. Мына ошондуктан p-сериянын ажырашы да ар түрдүү чоңдукта болот.

Ал эми s-сериянын ажырашы төмөнкү энергетикалык деңгээл менен байланышкан. Мына ошондуктан s-сериянын бардык сызыктары үчүн ажыроо чоңдугу бирдей.

Жогоруда каралган n, ℓ, m кванттык сандарды тандоо эрежесине j и m_S кванттык сандардын тандоо эрежеси да кошулат, б.а. $\Delta j=0, \pm 1$, $\Delta s_z=0$.

§5. Штерн-Герлахтын тажрыйбасы

Түздөн-түз тажрыйбанын негизинде текшергенге чейин электрондун спини жөнүндөгү сунуш гипотеза бойдон калган. Бизге белгилүү электрондун спини $S_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$ - өтө кичинекей. Мына ошондуктан аны түздөн-түз тажрыйбада аныктоо өтө татаал. Аны кыйыр жол менен аныктоонун жолун орус физиктери Капица жана Семенов сунуш кылышкан. Ал эми эксперименталдык аныктоону англис физиктери Штерн жана Герлах жүргүзүшкөн.

Бизге белгилүү электрондун механикалык моменти менен магниттик моменттердин байланышы орбиталдык кыймыл үчүн төмөнкүдөй:

$$M_L = \frac{e}{2m_o c} L_z \qquad (13.5.1).$$

Анда электрондун орбиталдык кыймылы үчүн гиромагниттик катыш $\frac{M_L}{L_z} = \frac{e}{2m_o c}$ болот.

Бул байланышты электрондун өздүк моменттери үчүн колдонсок, анда ал байланыш төмөнкүдөй болушу керек:

$$M_S = \frac{e}{2m_o c} S_z \qquad (13.5.2).$$

Анда электрондун өздүк кыймылы үчүн гиромагниттик катыш $\frac{M_S}{S_z} = \frac{e}{2m_o c}$ болушу керек.

Бирок, тажрыйба бул байланышты далилдеген эмес. Эйнштейн жана Де-Гааздын (1915-ж.) тажрыйбасында $\frac{M_s}{S_z} = 2\frac{e}{2m_o c}$ болуп, б.а. электрондун өздүк кыймылы үчүн гиромагниттик катыш 2 эсеге чоң болгон, анда

$$M_s = \frac{e}{m_o c} S_z \qquad (13.5.3).$$

Электрондун орбиталдык моменттери жана өздүк моменттери үчүн гиромагниттик катышты жалпылап толук момент үчүн төмөнкүдөй формула алынган:

$$\frac{M}{S} = g\frac{e}{2m_o c}$$ g – Ланденин фактору.

Эгерде g = 1 болсо, бул формула орбиталдык моменттердин арасындагы байланыш формуласына айланат, ал эми g = 2 болгондо бул формула электрондун өздүк моментеринин арасындагы байланыш формуласына айланат.

Толук моменттердин катышы үчүн 1<g<2 болот.

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s_z(s_z+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}$$

j – толук кванттык сан. Мында s_z – спиндик магниттик кванттык сан. Электрондун орбиталдык механтин эске албаганыбызда , б.а. ℓ=0 болгондо электрондук өздүк маменттери үчүн:

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - 0}{2j(j+1)} = 1 + \frac{s(s+1) + s(s+1)}{2s(s+1)} = 1 + \frac{2s(s+1)}{2s(s+1)} = 2$$

Ал эми электрондун спинин эске албаган учурда, б.а (s=0) болгондо электрондун орбиталдык моменти үчүн төмөндөгүдөй болот:

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + 0 - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)} = 1 + \frac{\ell(\ell+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)} = 1$$

Электрондун ар кандай абалдары үчүн g фактордун мааниси төмөнкүдөй болот:

Абал	$S_{1/2}$	$P_{1/2}$	$P_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$
g-фактор	2	3/2	4/3	5/4	6/5
ℓ	0	1	1	2	2
s	1/2	-1/2	1/2	-1/2	½
j	1/2	1/2	3/2	3/2	5/2

13.7-сүрөт.

$M_y = M_L + M_S$
$J_z = L_z + S_z$

$M_J = M_L - M_S$
$J_z = L_z - S_z$

Ланденин фактору, (g – фактору) атомдогу электрондор үчүн Бордун магнетонундагыдай ($\frac{e\hbar}{2m_o c}$) бирдикте гиромагниттик катыш болот. Мисалы электрондун өздүк кыймылы үчүн:

$$g = \frac{M_S / S_z}{\frac{e}{2m_o c}} = \frac{M_S / \frac{\hbar}{2}}{\frac{e}{2m_o c}} = \frac{\frac{2M_S}{e\hbar}}{\frac{e}{2m_o c}} = \frac{2\frac{e\hbar}{2m_o c}}{\frac{e}{2m_o c}} = 2$$

Ал эми электрондун орбиталдык кыймылы үчүн:

$$g = \frac{M_L / L_z}{\frac{e}{2m_o c}} = \frac{M_L / \hbar}{\frac{e}{2m_o c}} = \frac{\frac{M_L}{e\hbar}}{2m_o c} = \frac{\frac{e\hbar}{2m_o c}}{\frac{e}{2m_o c}} = 1$$

Электрондун өздүк магниттик моменти менен механикалык моменттин арасындагы байланышты атомдун ар кандай абалы үчүн аныктасак, анда спиндин маанисин эсептеп чыгрууга мүмкүн.

$$M_S = \frac{e}{m_o c} S_z \qquad (13.5.4).$$

Тажрыйба жүзүндө электрондун өздүк моментин аныктоо үчүн атомдун толук механикалык жана магниттик моменттерин аныктоо керек. Атомдун толук механикалык моменти $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, ал эми толук магниттик моменти $\vec{M}_J = \vec{M}_L + \vec{M}_S$.

Атом s-абалда болгон учурда ℓ=0 болгондуктан L = 0 жана M_L = 0 болот. Анда атомдун магниттик моменти электрондун өздүк магниттик моменти менен гана аныкталат, б.а. $M_J = M_S$.

Мына ошондуктан атомдун магниттик моментин (M_J) аныктасак, анда биз электрондун магниттик моментин (M_S) да аныктаган болобуз.

Атомдун магниттик моментин аныктоону карайлы.

Эгерде бөлүкчө магниттик моментке ээ болсо, анда ал сырткы магнит талаасында кошумча энергияга ээ болот.

$$U_H = \vec{M}_S \cdot \vec{H} = M_S \cdot H_\perp \cos\alpha = -M_S \cdot H_\perp \qquad (13.5.5).$$

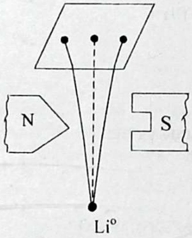
Ал эми $\vec{M}_S \uparrow\downarrow \vec{H}_\perp$ болсо, анда "–" белги алынат да, магнит талаасынын потенциалдык энергиясы минималдык мааниге ээ болот ($\alpha = 180^0$). Бул абал туруктуу абал болот.

Анда s – электрондук атомго сырткы магнит талаасында күч аракет этет. Бул күчтү аныктоо үчүн Uдан туунду алуу керек.

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x} = M_S \frac{\partial H_\perp}{\partial x} \qquad (13.5.6).$$

$$F_x = M_S \frac{\partial H_\perp}{\partial x} \qquad (13.5.7).$$

Мына ошентип электрон өздүк моментин пайда кылган атомдун магниттик моменти болсун үчүн өзгөрүлмөлүү магнит талаасы болуу керек. Анда атомго механикалык күч аракет этет, ал күчтүн чоңдугу электрондун өздүк магниттик моментинен (M_S) көз каранды.



13.8-сүрөт.

Тажрыйбада F_x - аныктап жана ал эми $\frac{\partial H_\perp}{\partial x}$ берилген болсо, анда биз M_S аныктай алабыз, андан кийин S_z маанисин төмөнкү формуланы пайдаланып аныктасак болот.

$$M_S = \frac{e}{m_o c} S_z \qquad (13.5.8).$$

Мындай тажрыйбанын схемасы 13.8-сүрөттө көрсөтүлгөн.

Тажрыйбада $\frac{\partial H_\perp}{\partial x}$ жетишээрлик чоң болгондо Литийдин атому эки симметриялык агымга ажырайт. Экиге ажырагандыгынын себеби атомдордун агымына чоңдуктары бирдей, бирок карама-каршы багытталган эки күч аракет этет. Бул күчтөрдүн таасиринин натыйжасында электрондун магниттик моменти (M_S) эки гана маанини алат.

Тажрыйбада M_s ти аныктаганда, ал сан мааниси боюнча Бордун бир магнетонуна барабар болгон.

$$|M_S| = \pm \frac{e\hbar}{2m_o c} = \pm 9{,}3 \cdot 10^{-21}\, эрг \cdot Гс^{-1}$$

Бул чоңдукту $M_S = \frac{e}{m_o c} S_z$ менен салыштырып $S_z = \mp \frac{1}{2}\hbar$ экендигин көрөбүз.

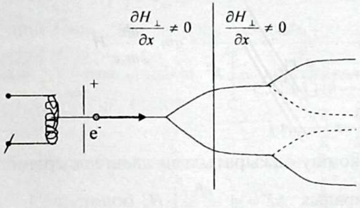
Мына ошентип электрон спинге ээ жана анын z огу боюнча проекциясы $\mp \frac{1}{2}\hbar$ барабар.

Ушундай тажрыйба H, Ag атомдору менен дагы жүргүзүлгөн. Тажрыйбада бардык учурда атомдордун агымы экиге ажырагандыгы аныкталган.

Акыркы учурда ошондой тажрыйбалар эркин электрондор менен жүргүзүлгөн. (13.8-сүрөттү караңыз).

Баштапкы өзгөрүлмөлүү магнит талаасы аркылуу өткөн электрондордун агымы экиге ажыраган. Себеби электрондордун

агымына болгон учурда эки күч аракет эткен $\frac{\partial H_\perp}{\partial x} \neq 0$. Электрондук агым кайрадан экинчи жолу өзгөрүлмөлүү магнит талаасы аркылуу өткөрүлгөндө, электрондук агым экиге ажыраган эмес. Себеби бир түрдүү спинге ээ болгон электрондор мурда бөлүнүп калгандыктан кайрадан бөлүштүрүү болгон эмес.



13.9-сүрөт.

Мына ошентип магниттик моменти менен механикалык моменти же спини электрондун өзүнө таандык болгон касиет. Жаратылышта эки түрдүү спинге ($\mp\frac{1}{2}\hbar$) ээ болгон эки түрдүү электрондор бар.

§6. Зеемандын аномалдык эффектин түшүндүрүү

Электрондун спинин жана g – факторду эске алуу менен сырткы магнит талаасында спектралдык сызыктардын жуп сандагы ичке сызыктарга ажырашын (Зеемандын аномалдык эффекти) жана ажыроо чоңдугун түшүндүрүүгө мүмкүн. Магнит талаасындагы электрондун кошумча энергиясы электрондун толук магниттик моменти M_J менен аныкталат.

$$\vec{M}_J = \vec{M}_L + \vec{M}_S \tag{13.6.1}$$

$U_H = -M_J H_\perp$ мында $M_J = -g\frac{e}{2m_o c}J_z$ экендиги белгилүү.

Ал эми $J_z = m_j\hbar$ болгондуктан, анда $M_J = -gm_j\frac{e\hbar}{2m_o c}$ болот.

Анда магниттик потенциалдык энергия же электрондун орбиталдык жана өздүк маменттерин эске алган мезгилде магнит талаасындагы электрондун кошумча энергиясы:

$$U_H = gm_j\left(\frac{e\hbar}{2m_oc}\right)\cdot H_\perp \qquad (13.6.2).$$

Анда жегич металлдардын атомундагы электрондун энергиясы:

$$E_{n,j,m_j} = -\frac{e^4 m_o}{\left[n - \frac{e^2 m_o}{\hbar^2(j+1/2)}a\right]^2\hbar^2} + gm_j\frac{e\hbar}{2m_oc}H_\perp \qquad (13.6.3).$$

$$m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, ..., \pm j$$

Ал эми коңшу ажыратылган деңгээлдердин арасындагы энергетикалык аралык $\Delta E = g\left(\frac{e\hbar}{2m_oc}\right)\cdot H_\perp$ болот.

$\Delta E = gM_{OL}\cdot H_\perp$ Мында $M_{OL} = \frac{e\hbar}{2m_oc}$ - Бордун магнетону.

Ар түрдүү абалдар үчүн g-факторунун мааниси ар башка болгондуктан ажыроо чоңдуктары да алар үчүн ар түрдүү болот.

Магнит талаасында ичке төмөнкү деңгээлдердин ажыроосун карайлы.

1) Алгач $S_{1/2}$ деңгээлдин жуп санга ажыроосун аныктайлы

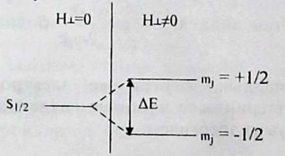
$S_{1/2}$ ($\ell = 0$, $j = 1/2$, $m_j = \pm 1/2$, $g=2$)

а) $(m_j = +\frac{1}{2})$; $E_{n,j,m_j} = E_{n,j} + gm_j\frac{e\hbar}{2m_oc}H_\perp = E_{n,j} + \frac{1}{2}g\frac{e\hbar}{2m_oc}H_\perp$

б) $(m_j = -\frac{1}{2})$; $E_{n,j,m_j} = E_{n,j} - gm_j\frac{e\hbar}{2m_oc}H_\perp = E_{n,j} - \frac{1}{2}g\frac{e\hbar}{2m_oc}H_\perp$

Мына ошентип бул учурда ар бир $S_{1/2}$ деңгээлде $2j+1=2\cdot 1/2+1=2$ болуп эки ичке деңгээлчелерге ажырайт. Алардын арасындагы энергетикалык аралык $\Delta E = g\frac{e\hbar}{2m_oc}\cdot H_\perp$ болот.

Алынган жыйынтык график түрүндө 13.10-сүрөттө көрсөтүлгөн.



13.10-сүрөт.

2) $P_{1/2}$ – деңгеелдин жуп сандагы ничке деңгеелчелерге ажырашын карайлы. Бул учурда ($\ell = 1$, $j = 1/2$, $m_j = \pm 1/2$, $g=3/2$). Анда

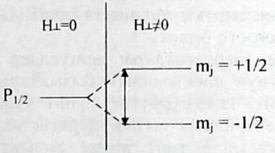
$$а)\ (m_j = +\frac{1}{2});\quad E_{n,j,m_j} = E_{n,j} + \frac{1}{2} g \frac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$$

$$б)\ (m_j = -\frac{1}{2});\quad E_{n,j,m_j} = E_{n,j} - \frac{1}{2} g \frac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$$

Мына ошентип $P_{1/2}$ деңгеел да эки ничке деңгеелчелерге ажырайт $2j+1=2\cdot 1/2+1=2$.

Алардын арасындагы энергетикалык аралык $\Delta E_{P_{1/2}} = g\frac{e\hbar}{2m_o c}\cdot H_\perp = \frac{3}{2}\frac{e\hbar}{2m_o c}\cdot H_\perp$ болот.

График түрүндө бул ажыроо 13.11-сүрөттө көрсөтүлгөн.



13.11-сүрөт.

3) $P_{3/2}$ – деңгеелдин ничке деңгеелчелерге ажыратып карайлы. Бул учурда ($\ell = 1$, $j = 3/2$, $m_j = \pm 1/2, \pm 3/2$, $g=4/3$).

$$а)\ (m_j = +\frac{1}{2});\quad E_{n,j,m_j} = E_{n,j} + \frac{1}{2} g \frac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$$

$$б)\ (m_j = -\frac{1}{2});\quad E_{n,j,m_j} = E_{n,j} - \frac{1}{2} g \frac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$$

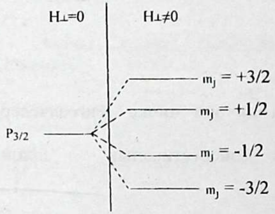
$$в)\ (m_j = +\frac{3}{2});\quad E_{n,j,m_j} = E_{n,j} + \frac{3}{2} g \frac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$$

$$г)\ (m_j = -\frac{3}{2});\quad E_{n,j,m_j} = E_{n,j} - \frac{3}{2} g \frac{e\hbar}{2m_o c} H_\perp$$

Бул аныктоодо көрүнгөндөй $P_{3/2}$ деңгеел төрт ничке деңгеелчелерге ажырайт. Алардын арасындагы энергетикалык аралык

$$\Delta E_{P_{3/2}} = gM_{OL} H_\perp = \frac{e\hbar}{2m_o c}\cdot H_\perp = \frac{4}{3}\frac{e\hbar}{2m_o c}\cdot H_\perp$$

График түрүндө бул ажыроо 13.12-сүрөттө көрсөтүлгөн.

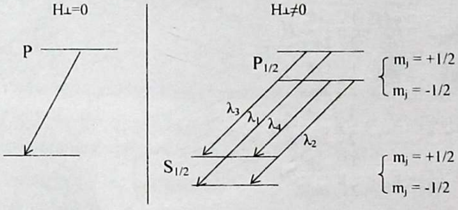


13.12-сүрөт

Мына ошондой эле жол менен сырткы магнит талаасында ж.б деңгеелдердин да ажыроосун аныктоого болот.

Сырткы магнит талаасында энергетикалык деңгеелдер жуп санга ажырагандыктан нурдануунун спектралдык сызыктары да жуп сандагы сызыктарга ажырайт. 13.13-сүрөттө магнит талаасы жок болгон учурдагы ар бир спектралдык сызык сырткы магнит талаасынын таасиринин натыйжасында төрт ичке сызыктарга ажырай тургандыгы көрсөтүлгөн.

Сырткы магнит талаасында спектралдык сызыктардын жуп сандагы ичке сызыктарга ажырашы *Зеемандын аномалдык эффекти* деген атты алган.



13.13-сүрөт

Мына ошентип спектралдык сызыктардын ичке сызыктарга ажырашы тууралуу практикалык жана теориялык эсептөөлөр дал келишет.

XIV глава. КӨП МИКРОБӨЛҮКЧӨЛӨРДҮН СИСТЕМАСЫ ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ

Ар бир микробөлүкчө үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z)+U(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \qquad (14.1).$$

Бир бөлүкчө үчүн ψ - функция үч координаттан көз каранды. Бир канча бөлүкчөлөрдүн системасы үчүн бул теңдемени жалпылоо керек.

Эгерде бизге N бөлүкчө берилсе, анда ψ - функция 3N координаттан көз каранды болот, б.а. $\Psi(x_1,y_1,z_1,x_2,y_2,z_2,\ldots,x_N,y_N,z_N)$.

Бир бөлүкчө үчүн толук энергиянын оператору

$$\hat{H}=-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2+\hat{U}(x,y,z) \qquad (14.2).$$

N – бөлүкчө үчүн толук энергиянын оператору баардык бөлүкчөлөрдүн кинетикалык жана потенциалдык энергияларынын операторлорунун суммасынан турат

$$\hat{H}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar}{2m_i}\nabla_i^2+\sum_{i=1}^{N}\hat{U}_i(x_1,y_1,z_1,\ldots,x_i,y_i,z_i) \qquad (14.3).$$

Жалпы учурда микробөлүкчөлөр өз ара бири-бири менен аракет этиши мүмкүн. Бул учурда потенциалдык энергиянын операторлоруна бөлүкчөлөрдүн бири-бири менен аракет этүү энергиясынын оператору да кирет, б.а. потенциалдык энергияны оператору $\sum_{i=1}^{N}\hat{U}_i(x_i,y_i,z_i)+\sum_{i\neq k}\hat{U}_{ik}(x_i,y_i,z_i,x_k,y_k,z_k)$ болот.

Анда толук энергиянын оператору

$$\hat{H}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar}{2m_i}\nabla_i^2+\sum_{i=1}^{N}\hat{U}_i(x_i,y_i,z_i)+\sum_{i\neq k}\hat{U}_{ik}(x_i,y_i,z_i,x_k,y_k,z_k) \qquad (14.4).$$

Анда микробөлүкчөлөрдүн системасы үчүн Шредингердин теңдемеси

$$\hat{H}\Psi=E\Psi. \qquad (14.5).$$

Эгерде баардык бөлүкчөлөрдүн массасы бирдей болсо, б.а. $m_i=m$ болсо, анда биз окшош бөлүкчөлөрдүн системасын алабыз. Окшош бөлүкчөлөрдүн системасы үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй жазылат:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2\psi(x_i,y_i,z_i)+\sum_{i=1}^{N}U_i(x_i,y_i,z_i)\psi(x_i,y_i,z_i)+\sum_{i\neq k}\hat{U}_{ik}(x_i,y_i,z_i,x_k,y_k,z_k)\psi(x_i,y_i,z_i)=E\Psi(x_i,y_i,z_i) \qquad (14.6).$$

Ар бир конкреттүү учур үчүн бөлүкчөлөрдүн потенциалдык энергиясын жана алардын өз ара бири-бири менен аракет этүүсүн аныктасак, анда Шредингердин теңдемесинин чечимин аныктоого мүмкүн. Бирок, Шредингердин теңдемесинин чечими, эң жөнөкөй болгон 2 электрон үчүн да аныктала элек.

Бирок ага карабастан окшош бөлүкчөлөрдүн системасы үчүн айрым касиеттерин аныктоого мүмкүн, б.а. Шредингердин бул теңдемесин чечпей туруп эле окшош бөлүкчөлөрдүн системасы үчүн Ψ функциясынын кээ бир жалпы касиетин аныкташыбыз мүмкүн.

Эгерде эки жолу бөлүкчөлөрдүн ордун алмаштырсак, бул бөлүкчөлөр окшош болгондуктан система абалын өзгөртпөйт. Ψ функциянын бөлүкчөлөрдүн орун алмашуусунун операторун $\hat{P}_{ki}$ менен белгилейли. Бул оператордун өздүк мааниси λ болсо,

$$\hat{P}_{ki}\Psi = \lambda\Psi . \qquad (14.7).$$

Анда λ-ны аныктайлы. Ал үчүн алмаштыруунун операторун дагы бир жолу колдонолу, анда

$$\hat{P}_{ki}\hat{P}_{ki}\Psi = \hat{P}_{ki}\lambda\Psi = \lambda\hat{P}_{ki}\Psi = \lambda\lambda\Psi = \lambda^2\Psi \qquad (14.8).$$

Ал эми экинчи жактын $\hat{P}_{ki}\hat{P}_{ki} = \hat{P}_{ki}^2$ болуп, орун алмаштыруунун операторун эки жолу колдонуу системаны кайра баштапкы абалына алып келет. Салыштыруунун негизинде $\hat{P}_{ki}\hat{P}_{ki}\Psi = \Psi;$ *же* $\lambda^2 = 1$ экенин билебиз. $\hat{P}_{ki}^2\Psi = \Psi;$ $\hat{P}_{ki}^2\Psi = \lambda^2\Psi$, анда λ=±1 болот. Мына ошентип орун алмаштыруунун оператору эки өздүк мааниге ээ.

$$\hat{P}_{ki}\Psi = +\Psi \qquad \text{жана} \qquad \hat{P}_{ki}\Psi = -\Psi \qquad (14.9).$$

Мына ошентип окшош бөлүкчөлөрдүн системасы үчүн эки түрдүү Ψ - функция жашайт.

1. Бөлүкчөлөрдүн ордун алмаштыруудан функция белгисин өзгөртпөйт. Бул функция симметриялуу толкундук функция деп аталат.
2. Бөлүкчөлөрдүн ордун алмаштырууда функция белгисин өзгөртөт. Бул функцияны антисимметриялык толкундук функция деп аталат.

Мына ошентип жаратылышта эки түрдүү окшош бөлүкчөлөр болушат.

1. Симметриялуу функциялар менен аныкталган бөлүкчөлөр. Бул бөлүкчөлөр бозондор деп аталат. Бозондор бүтүн же нол спинге ээ. Бозондорго – фотондор, пиондор, каондор киришет.
2. Антисимметриялык толкундук функция менен аныкталган микробөлүкчөлөр. Алар фермиондор деп аталат. Фермиондор бүтүн эмес спинге ээ, б.а. $\frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar$ ж.б. Фермиондорго – электрондор, позитрондор, протондор, нейтрондор жана гиперондор киришет.

Ар бир бөлүкчөнүн толкундук функциясы менен бөлүкчөлөрдүн системасынын толкундук функциясынын арасындагы байланышты карайлы.

Фермиондор үчүн антисимметриялык функцияны аныктоо үчүн, ар бир бөлүкчөнүн функциясынан аныктагыч түзүү керек. Ар бир бөлүкчөнүн функциясын төмөнкүдөй белгилейли ψ_{ik}. Мында i – бөлүкчөнүн номери, ал эми к – бөлүкчөнүн абалынын номери.

Атомдогу электрондор үчүн анын абалынын к номери n, ℓ, m, s_z – кванттык сандар менен аныкталат.

$\psi_{11}, \psi_{12}, \psi_{13}, \dots, \psi_{1n}$
$\psi_{21}, \psi_{22}, \psi_{23}, \dots, \psi_{2n}$
……………………
$\psi_{N1}, \psi_{N2}, \psi_{N3}, \dots, \psi_{Nn}$

Эгерде бөлүкчөлөрдүн саны менен бөлүкчөлөрдүн абалынын саны бирдей болсо, б.а. N=n болсо, ар бир бөлүкчөнүн толкундук функциясы менен бөлүкчөлөрдүн системасынын толкундук функциясынын арасындагы байланышты аныктоого мүмкүн (Ψ менен ψ_{ik}). Бул байланыш толкундук функциянын негизги шарты болгон бөлүкчөлөрдүн антисимметриялык абалын канааттандырышы зарыл.

Бөлүкчөлөрдүн ордун алмаштырган мезгилде системанын толкундук функциясы Ψ белгисин карама-каршыга өзгөртүүсү керек. Мындай касиетти аныктагыч канатгандырат. Бөлүкчөлөрдүн ордун алмаштыруу аныктагычтын мамычаларынын ордун алмаштыруу катарында кароого мүмкүн.

Мамычанын ордун алмаштырганда матрицанын элементтеринен түзүлгөн аныктагычтын белгиси өзгөрүлөт.

Мына ошентип системанын абалын мүнөздөгөн Ψ функция менен ар бир бөлүкчөнүн абалын мүнөздөгөн ψ_{ik} өз ара төмөнкүдөй аныктагыч менен байланышкан.

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_{11} & \psi_{12} & \psi_{13} & \dots & \psi_{1N} \\ \psi_{21} & \psi_{22} & \psi_{23} & \dots & \psi_{2N} \\ \psi_{31} & \psi_{32} & \psi_{33} & \dots & \psi_{3N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{N1} & \psi_{N2} & \psi_{N3} & \dots & \psi_{NN} \end{vmatrix} \qquad (14.10).$$

Бул абал системанын баштапкы абалы болот.

Бөлүкчөлөрдүн ордун алмаштыруу аныктагычта төмөнкүдөй аткарылат.

$\psi_{11} \to \psi_{12}$ жана $\psi_{12} \to \psi_{11}$
$\psi_{21} \to \psi_{22}$ $\psi_{22} \to \psi_{21}$
$\psi_{31} \to \psi_{32}$ $\psi_{32} \to \psi_{31}$
… …
$\psi_{N1} \to \psi_{N2}$ $\psi_{N2} \to \psi_{N1}$

Бул учурда бөлүкчөлөрдүн системасынын жалпы абалын мүнөздөгөн жаңы Ψ' толкундук функцияны алабыз.

$$\Psi' = \begin{vmatrix} \psi_{12} & \psi_{11} & \psi_{3} & \cdots & \psi_{1N} \\ \psi_{22} & \psi_{21} & \psi_{23} & \cdots & \psi_{2N} \\ \psi_{32} & \psi_{31} & \psi_{33} & \cdots & \psi_{3N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_{N2} & \psi_{N1} & \psi_{N3} & \cdots & \psi_{NN} \end{vmatrix} \qquad (14.11).$$

Алынган Ψ^1 функцияны Ψ функция менен салыштыралы.

Бул учурда алынган (14.11) аныктагыч баштапкы (14.10) аныктагычтан биринчи жана экинчи мамычаларынын ордун алмаштыруу менен айырмаланышат. Орун алмаштыруу операторлордун белгисин өзгөртүүсүнө алып келет. Анда $\Psi^1 = -\Psi$ болот. Мына ошентип, эгерде системанын толкундук функциясы Ψ бир тектүү функциялардын аныктагычы катарында алынса, анда алар антисимметриялык толкундук функциянын шартын канааттандырат, б.а бөлүкчөлөрдүн ордун алмаштырганда толкундук функция белгисин өзгөртөт.

Атомдогу эки электрондун системасы үчүн карайлы. Биринчи электрон биринчи жана экинчи орунда болсо ψ_{11}, ψ_{12} болот, ал эми экинчи электрон үчүн - ψ_{21}, ψ_{22}. Анда бул эки электрондун абалдарынын функцияларынан түзүлгөн аныктагыч

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_{11} & \psi_{12} \\ \psi_{21} & \psi_{22} \end{vmatrix} = \psi_{11}\psi_{22} - \psi_{12}\psi_{21}$$

Мына ошентип атомдогу эки электрондун системасынын толкундук функциясы ар бир электрондун абалдарынын толкундук функцияларынын көбөйтүндүсүнүн айырмасы катарында кароо керек. Эгерде бөлүкчөлөрдүн ордун алмаштырсак, б.а. $12 \to 11$, $21 \to 22$, анда $\psi_{12}\psi_{21} = \psi_{11}\psi_{22}$ болот. Анда $\Psi = \psi_{11}\psi_{22} - (-\psi_{11}\psi_{22}) = 2\psi_{11}\psi_{22}$. Эгерде эки окшош бөлүкчө алсак, б.а эки бөлүкчө бир эле орунда жана бир эле абалда болушса, анда төмөнкүнү алабыз.

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_{11} & \psi_{12} \\ \psi_{21} & \psi_{22} \end{vmatrix} = 0$$

же $\Psi = \psi_{11}\psi_{22} - \psi_{12}\psi_{21} = \psi_{11}\psi_{22} - \psi_{22}\psi_{11} = 0$ Мындай система жашабайт.

Эгерде эки окшош бөлүкчө болсо ψ_{11} жана ψ_{11}; ψ_{21} жана ψ_{21}, анда аныктагыч эки бирдей мамычага ээ болот. Мындай аныктагыч нөлгө барабар. Мындай система жашабайт. Бир абалда бирдей окшош n, ℓ, m, s_z кванттык сандарга ээ болгон бөлүкчөлөрдүн системасы жашабайт. Бир абалда бир гана бөлүкчө болот. (Паулинин принциби).

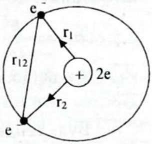
XV глава. ГЕЛИЙДИН АТОМУ ҮЧҮН ШРЕДИНГЕРДИН ТЕҢДЕМЕСИ

§1. Киришүү

Гелийдин атомунун ядросунун заряды +2е жана эки электрону бар. Бул эки электрондун ядронун борбордук талаасындагы кыймылын карайлы жана электрондун бири-бири менен аракет этүүсүн эске алалы (15.1 – сүрөттү караңыз).

Шредингердин стационардык теңдемеси

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \qquad (15.1.1).$$



15.1 – сүрөт.

Системанын потенциалдык энергиясы төмөнкүдөй түзүүчүлөрдөн турат

1) Заряды +2е ядролук талаасындагы электрондордун потенциалдык энергиясы

$$\sum_{i=1}^{2} U_i(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \frac{2e(-e)}{r_1} + \frac{2e(-e)}{r_2} = -\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} \qquad (15.1.2).$$

2) Эки электрондун өз ара бири-бири менен аракет этүү энергиясы

$$\sum_{i \neq k}^{2} U_{ik}(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = \frac{(-e)(-e)}{r_{12}} = \frac{2e^2}{r_{12}} \qquad (15.1.3).$$

Ал эми эки электрондун кинетикалык энергиясы $T_1 = \frac{P_1^2}{2m_e}$ *жана* $T_2 = \frac{P_2^2}{2m_e}$.

Анда гелийдин атому үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй түргө келет.

$$(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{2e^2}{r_1} + \frac{2e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}}\right)\psi = 0 \qquad (15.1.4).$$

Бул теңдеменин так чечими аныктала элек. Жакындатылган түрдө сезгенүү (возмущение) методу менен бул теңдеменин чечими аныкталган.

Төмөнкүдөй эки түрдүү жакындатылган метод белгилүү (нөлдүк жакындаштыруу жана биринчи жакындаштыруу).

§2. Нөлдүк жакындаштыруу.

1. Нөлдүк жакындатууда $\frac{e^2}{r_{12}}=0$, б.а. электрондордун өз ара бири-бири менен аракет этүүсү эсепке алынбайт. Бул учурда Шредингердин теңдемеси

$$(\nabla_1^2+\nabla_2^2)\psi^o+\frac{2m_e}{\hbar^2}(E^o+\frac{2e^2}{r_1}+\frac{2e^2}{r_2})\psi^o=0 \qquad (15.2.1).$$

Мында H_1^0 жана H_2^0 биринчи жана экинчи электрондор үчүн толук энергиянын операторлору. Бул операторлор төмөнкүдөй аныкталат.

$$\hat{H}_1^o=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2-\frac{2e^2}{r_1} \quad \text{жана} \quad \hat{H}_2^o=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{r_2}$$

Анда (15.2.1) теңдеме төмөнкүдөй түргө келет.

$$(\hat{H}_1^o+\hat{H}_2^o)\Psi^o=E^o\Psi^o \qquad (15.2.2).$$

Бул теңдеме нөлдүк жакындаштыруу учурундагы гелийдин атому үчүн Шредингердин теңдемеси.

Бул теңдеменин чечими болгон Ψ^0 *жана* E^o аныктайлы. Ψ^0 - функцияны төмөнкүдөй көбөйтүндү түрүндө изилдейли. $\Psi^0=\psi_{11}\cdot\psi_{22}$. Жазуу жөнөкөй болсун үчүн $\Psi^0=\psi_1\cdot\psi_2$ деп белгилейли. Анда $\Psi_1=\psi_1(x_1,y_1,z_1)$ жана $\Psi_2=\psi_2(x_2,y_2,z_2)$ болот. Бул функцияларды жогорку (15.2.2) теңдемеге койсок, анда

$$(\hat{H}_1^o+\hat{H}_2^o)\psi_1\psi_2=E^o\psi_1\psi_2 \text{ болот.}$$

$$\hat{H}_1^o\psi_1\psi_2+\hat{H}_2^o\psi_1\psi_2=E^o\psi_1\psi_2$$

$$\psi_2\hat{H}_1^o\psi_1+\psi_1\hat{H}_2^o\psi_2=E^o\psi_1\psi_2$$

Бул теңдеменин эки жагын тең $\psi_1\psi_2$ бөлөлү, анда

$$\frac{1}{\psi_1}\hat{H}_1^o\psi_1+\frac{1}{\psi_2}\hat{H}_2^o\psi_2=E^o \qquad (15.2.3).$$

Электрондор өз ара бири-бири менен аракет этишпегендиктен жалпы энергияны эки электрондун энергияларынын суммасы катарында карасак болот, б.а $E^o=E_1^o+E_2^o$.

Анда $\quad \frac{1}{\psi_1}\hat{H}_1^o\psi_1+\frac{1}{\psi_2}\hat{H}_2^o\psi_2=E_1^o+E_2^o$

же $\quad \frac{1}{\psi_1}\hat{H}_1^o\psi_1-E_1^o=-\frac{1}{\psi_2}\hat{H}_2^o\psi_2+E_2^o.$

Бул теңдеменин сол жагы биринчи электрондун мүнөздөмөлөрүнөн көз каранды, ал эми оң жагы экинчи

электрондун мүнөздөмөлөрүнөн көз каранды. Электрондор бири-биринен көз каранды болушпагандыктан функциялар да бири-биринен көз каранды болушпайт. Эки бири-биринен көз каранды болбогон чоңдуктар бири-бирине барабар болгондо, алар өз алдынча нөлгө барабар болушат.

Анда биринчи электрон үчүн $\hat{H}_1^o\psi_1 = E_1^o\psi_1$ же

$$\nabla_1^2\psi_1 + \frac{2m_e}{\hbar^2}(E_1^o + \frac{2e^2}{r_1})\psi_1 = 0 \qquad (15.2.4).$$

Ал эми экинчи электрон үчүн $\hat{H}_2^o\psi_2 = E_2^o\psi_2$ же

$$\nabla_1^2\psi_2 + \frac{2m_e}{\hbar^2}(E_2^o + \frac{2e^2}{r_1})\psi_2 = 0 \qquad (15.2.5).$$

Бул (15.2.4) жана (15.2.5) теңдемелер жогоруда биз караган суутектин атомдору үчүн Шредингердин теңдемесине окшош. Мына ошентип нөлдүк жакындаштыруу учурунда гелийдин атомундагы эки электрон үчүн Шредингердин теңдемеси эки теңдемеге ажырайт.

Ал теңдемелер суутектин атомдору үчүн Шредингердин теңдемесине окшош болгондуктан эки электрондун энергиялары төмөнкүдөй болот:

$$E_1^o = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n_1^2} \quad \text{жана} \quad E_2^o = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n_2^2}.$$

Анда, гелийдин атому үчүн нөлдүк жакындаштыруу учурундагы эки электрондун энергиясы төмөнкүдөй болот.

$$E^o = E_1^o + E_2^o = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n_1^2} - \frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n_2^2} \qquad (15.2.6).$$

Эгерде бул эки электрон тең 1S абалда болсо, анда

$E_{1S}^o = 8E_{1S}^H$ болушу керек же $E_{1S1S}^{oH_e} = 8\left(-\frac{m_e e^4}{2\,\hbar^2}\right)$.

Бирок, бул жыйынтык тажрыйбада далилдеген эмес.

Эгерде бир электрон $1S^1$, ал эми экинчи электрон $2S^1$ десек, бул учурда да $E_{1S2S}^{oHe} = 5E_{1S}^{oH}$ болуп, тажрыйба менен дал келбейт.

Бул теориялык жыйынтыктар менен тажрыйбанын дал келбестигинин негизги себеби гелийдин атомундагы электрондордун өз ара аракет этүүсүн эске алган эмес. Мына ошондуктан электрондордун ядро менен байланыш энергиясы чоң болуп жатат.

Электрондордун өз ара аракет этүүсүн эске алганыбызда, бул аракет этүүнүн натыйжасында электрондун ядро менен байланыш

энергиясы төмөндөйт жана ал $E^{He} \approx 2E^{H}_{1S}$. Ал эми тажрыйба жүзүндө аныкталган энергиянын мааниси суутектин атомунун энергиясынан эки эсеге жакын чоң, б.а $E^{He}_{экс} = -24эВ$; же $E^{He}_{экс} \approx 2E^{H}_{1S}$.

§3. Биринчи жакындаштыруу.

Бул учурда электрондордун өз ара бири-бири менен аракет этүүсү эске алынат, бирок ал кичинекей сезгенүү (возмущение) катары каралат, б.а. электрондордун өз ара аракет этүү энергиясы электрон менен ядронун аракет этүү энергиясына караганда бир канча кичинекей $\left(\frac{e^2}{r_{12}} \neq 0\right)$. Бул учурда Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй түргө келет.

$$-\frac{2m_e}{\hbar^2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)\Psi^1 + \left(\frac{2e^2}{r_1} + \frac{2e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}}\right)\Psi^1 = E^1\Psi^1 \qquad (15.3.1).$$

(15.3.1) – теңдемени төмөнкүдөй өзгөртөлү.

$$(\hat{H}_1^o + \hat{H}_2^o + \frac{e^2}{r_{12}})\Psi^1 = E^1\Psi^1 \qquad (15.3.2).$$

Бул теңдеме биринчи жакындаштыруу учурундагы Шредингердин теңдемеси.

Сезгенүүнүн чоңдугун $\frac{e^2}{r_{12}} = s$ деп белгилеп, кичинекей чоңдук катарында карайлы. Анда Шредингердин (15.3.2) теңдемеси төмөнкүдөй болот.

$$(\hat{H}^o + s)\Psi^1 = E^1\Psi^1 \qquad (15.3.3).$$

Бул теңдемедеги Ψ^1- толкундук функцияны биринчи жакындаштыруу учурунда төмөнкүдөй изилдейли.

Ал үчүн нөлдүк жакындаштырууну пайдаланалы. Баштапкы учурда толкундук функция $\Psi_1^0 = \psi_{11} \cdot \psi_{22}$, ал эми электрондун ордун алмаштырган учурда толкундук функция $\Psi_2^0 = \psi_{12} \cdot \psi_{21}$ болсун. Эгерде Ψ_1^0 *жана* Ψ_2^0 абалдары жашаса, анда суперпозиция принцибинин негизинде, алардын суммалары болгон $\Psi^0 = \alpha\Psi_1^0 + \beta\Psi_2^0$ абалы да жашайт. Ψ^0 - нөлдүк жакындаштыруу учурундагы толкундук функция.

Биринчи жакындаштыруу учурундагы толкундук функция нөлдүк жакындаштыруу учурундагы толкундук функциядан кичинекей φ функцияга айырмалансын дейли.

$$\Psi^1 = \Psi^0 + \varphi . \qquad (15.3.4).$$

Ушундай эле биринчи жакындаштыруу учурундагы энергия нөлдүк жакындаштыруу учурундагы энергиядан кичинекей кошумча ε энергия менен айырмаланат деп эсептейли.

$$E^1 = E^0 + \varepsilon = E_1^0 + E_2^0 + \varepsilon \qquad (15.3.5).$$

Анда гелийдин атому үчүн Шредингердин теңдемеси төмөнкүдөй түргө келет:

$$(\hat{H}^o + s)(\Psi^0 + \varphi) = (E^o + \varepsilon)(\Psi^0 + \varphi) \qquad (15.3.6).$$

Бул теңдемени өзгөртүп түзсөк, анда

$$\hat{H}^o\Psi^0 + \hat{H}^o\varphi + s\Psi^0 + s\varphi = E^o\Psi^0 + E^o\varphi + \varepsilon\Psi^0 + \varepsilon\varphi \qquad (15.3.7).$$

Бул теңдемедеги sφ=0 жана $\varepsilon \cdot \varphi = 0$ болот, себеби экинчи тартиптеги кичинекей чоңдук. Ал эми “0”дүк жакындаштыруу учурундагы теңдеме $\hat{H}^o\Psi^0 = E^o\Psi^0$ болгондуктан, анда биринчи жакындаштыруу учурунда төмөнкүдөй теңдемени алабыз:

$$\hat{H}^o\varphi + s\Psi^0 = E^o\varphi + \varepsilon\Psi^0 \text{ же } (\hat{H}^o - E^o)\varphi = -(s - \varepsilon)\Psi^0 \qquad (15.3.8).$$

Бул теңдеме бир тектүү эмес экинчи тартиптеги дифференциалдык теңдеме.

Бул теңдеменин оң жагы жок болсо, бир тектүү дифференциалдык теңдемени алабыз

$$(\hat{H}^o - E^o)\varphi = 0 \quad \text{же} \quad \hat{H}^o\varphi = E^o\varphi \qquad (15.3.9).$$

Мына ошентип бир тектүү эмес теңдемени бир тектүү бөлүгү көрүнүшү боюнча нөлдүк жакындаштыруу учурундагы теңдеме менен дал келет. Анда бул теңдеменин чечими болгон φ функция көрүнүшү боюнча Ψ^0-го окшош болот. Анда Ψ^1 функциясы Ψ^0 жана φ функциялардын суммасы болгондуктан көрүнүшү боюнча ал функция (Ψ^1) нөлдүк жакындаштыруу учурундагы толкундук функция (Ψ^0) менен дал келет. Алар бири-бири менен коэффициенттери менен гана айырмаланышы мүмкүн. Анда 1-жакындаштырууда Ψ^1 - функциясын төмөнкүдөй деп алсак болот.

$$\Psi^1 = \alpha\Psi_1^0 + \beta\Psi_2^0 \qquad (15.3.10).$$

Функциянын ортогоналдуулук шарты боюнча эки функциянын көбөйтүндүсүнүн интегралы нөлгө барабар болгондуктан ал шартты пайдаланып төмөнкүнү жазсак болот:

$$\text{а)} \int_\tau \Psi_1^{0*}[(s - \varepsilon)\Psi^1]d\tau = 0 \qquad (15.3.11).$$

$$\text{б)} \int_\tau \Psi_2^{0*}[(s - \varepsilon)\Psi^1]d\tau = 0 \qquad (15.3.12).$$

Бул барабардыктардагы Ψ^1-функциянын маанисин ордуна коелу жана α, β, ε – аныктайлы:

$$\text{а}'). \ \alpha \int_{(\tau)} \Psi_1^{o*}(s-\varepsilon)\Psi_1^o d\tau + \beta \int_{(\tau)} \Psi_2^{o*}(s-\varepsilon)\Psi_2^o d\tau = 0 \qquad (15.3.13).$$

$$\text{б}'). \ \alpha \int_{(\tau)} \Psi_2^{o*}(s-\varepsilon)\Psi_1^o d\tau + \beta \int_{(\tau)} \Psi_1^{o*}(s-\varepsilon)\Psi_2^o d\tau = 0 \qquad (15.3.14).$$

Бул алынган шарттарды өзгөртөлү.

Баштап (15.3.13) – теңдемесин же а$'$ шартын өзгөртөлү, анда

$$\alpha \int_{(\tau)} \Psi_1^{o*} s \Psi_1^o d\tau - \alpha \int_{(\tau)} \Psi_1^{o*} \varepsilon \Psi_1^o d\tau + \beta \int_{(\tau)} \Psi_1^{o*} s \Psi_2^o d\tau - \beta \int_{(\tau)} \Psi_1^{o*} \varepsilon \Psi_2^o d\tau = 0 \qquad (15.3.15):$$

Мында $\int_{(\tau)} \Psi_1^{o*} \Psi_1^o d\tau = 1$, *ал эми* $\int_{(\tau)} \Psi_1^{o*} \Psi_2^o d\tau = 0$ болот, себеби Ψ_1^0 *жана* Ψ_2^0 функциялары $\hat{H}^o$ операторунун өздүк функциялары.

Төмөнкүдөй белгилөөлөрдү кийирели:

$$\int \Psi_1^{o*} s \Psi_1^o d\tau = \varepsilon_{11}$$

$$\int \Psi_1^{o*} s \Psi_2^o d\tau = \varepsilon_{12}$$

Анда (15.3.13) – теңдемеси же а$'$ - шарты төмөнкүдөй болот:

$$\alpha\varepsilon_{11} - \alpha\varepsilon + \beta\varepsilon_{12} = 0 \quad \text{же} \quad \alpha(\varepsilon_{11} - \varepsilon) + \beta\varepsilon_{12} = 0 \qquad (15.3.16).$$

Ушундай эле жол менен (15.3.15) – теңдемесин же б$'$ шартын өзгөртүп, төмөнкүнү алабыз.

$$\alpha\varepsilon_{21} + \beta(\varepsilon_{22} - \varepsilon) = 0 \qquad (15.3.17).$$

Мында $\int \Psi_2^{o*} s \Psi_1^o d\tau = \varepsilon_{21}$, *ал эми* $\int \Psi_2^{o*} s \Psi_2^o d\tau = \varepsilon_{22}$.

Мына ошентип, α жана β аныктоо үчүн эки теңдеменин системасын алабыз. Бул эки система чечимге ээ болуш үчүн системанын аныктагычы нөлгө барабар болушу керек:

$$Д = \begin{vmatrix} \varepsilon_{11} - \varepsilon & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 .$$

Аныктагычты ачканыбыздан кийин $(\varepsilon_{11} - \varepsilon)(\varepsilon_{22} - \varepsilon) - \varepsilon_{12}\varepsilon_{21} = 0$. Бул аныктагычтагы ε_{11}, ε_{22}, ε_{12}, ε_{21} жана толкундук функциялар Ψ_1^0 *жана* Ψ_2^0 тең укуктуу. Ψ_1^0 *жана* Ψ_2^0 - функциялары үчүн да нормировкалоо шарты бирдей болгодуктан $\varepsilon_{11}=\varepsilon_{22}$, ал эми $\varepsilon_{12}=\varepsilon_{21}$ болот. Анда $(\varepsilon_{11} - \varepsilon)(\varepsilon_{11} - \varepsilon) = \varepsilon_{12}^2$ же $(\varepsilon_{22} - \varepsilon)(\varepsilon_{22} - \varepsilon) = \varepsilon_{21}^2$

$$\varepsilon_{11} - \varepsilon = \pm\varepsilon_{12} \quad \text{же} \quad \varepsilon_{22} - \varepsilon = \pm\varepsilon_{21}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_{11} \pm \varepsilon_{12} \quad \text{же} \quad \varepsilon = \varepsilon_{22} \pm \varepsilon_{21} \qquad (15.3.18).$$

Тамырдан чыгаргандагы алынган эки (±) белги гелийдин атомундагы эки электрондун абалы үчүн жаңы күтүлбөгөн жыйынтыкка алып келет.

Гелийдин атому үчүн биринчи жакындаштырууда эки электрондун энергиясы эки түрдүү маанилерди алат.

$$E^1 = E^0 + \varepsilon_{11} \pm \varepsilon_{12} = E_1^0 + E_2^0 + \varepsilon_{11} \pm \varepsilon_{12} \qquad (15.3.19).$$

же

$$E^1 = E^0 + \varepsilon_{22} \pm \varepsilon_{21} = E_1^0 + E_2^0 + \varepsilon_{22} \pm \varepsilon_{21} \qquad (15.3.20).$$

Гелийдин атомунун эки абалы үчүн алынган чечимдер бири-биринен $2\varepsilon_{12}$ айырмаланат.

Жогорку аныкталган чечимдеги ε_{11}, ε_{22}, ε_{12} жана ε_{21} . чоңдуктардын маанисин аныктайлы.

а) Анда алгач ε_{11} же ε_{22} - маанисин аныктайлы.

$$\varepsilon_{11} = \int\limits_{(\tau)} \Psi_1^{o*} s \Psi_1^o d\tau = \int\limits_{(\tau)} \psi_{11}^* \psi_{22}^* \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{11}\psi_{22} d\tau = \iint\limits_{(\tau)} \frac{e\psi_{11}^* \psi_{22}^* e \psi_{11}\psi_{22}}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 =$$

$$= \iint \frac{\rho_{11}\rho_{22}}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 = \iint \frac{de_{11} de_{22}}{r_{12}} = K > 0$$

Бул аныкталган ε_{11} энергия эки электрондун кулондук түртүшүү энергиясы. Биринчи абалдагы биринчи электрондун заряды экинчи абалдагы экинчи электрондун заряды менен аракет этет. Бул учурда эки электрондун кулондук түртүшүү энергиясы жалпы энергияга "+" белги менен киргендиктен эки электрондун ядро менен байланыш энергиясын төмөндөтөт. Ушундай эле жол менен ε_{22} да аныкталат.

б) ε_{12} же ε_{21} чоңдуктардын маанилерин аныктайлы.

$$\varepsilon_{12} = \int \Psi_1^{o*} s \Psi_2^o d\tau = \int\limits_{(\tau)} \psi_{11}^* \psi_{22}^* \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{12}\psi_{21} d\tau = \iint\limits_{(\tau)} \frac{e\psi_{11}^* \psi_{12} e \psi_{22}^* \psi_{21}}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 =$$

$$= \iint \frac{\rho_{12}\rho_{21}}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 = \iint \frac{de_{12} de_{21}}{r_{12}} = A > 0$$

Алынган А интегралы *"алгоолошуу"* (обменный) интегралы деп аталат, ал эми аныкталган ε_{12} энергия электрондун *"алгоолошуу"* энергиясы деп аталат. Жогорку формуладан аныкталгандай бул энергия экинчи абалдагы биринчи электрондун заряды менен биринчи абалдагы экинчи электрондун зарядынын өз ара аракет этүүсүнүн натыйжасы катарында аныкталат. Ушундай эле жол менен ε_{21} чоңдугунун маанисин аныктоого мүмкүн.

Классикалык физикадагы макробөлүкчөлөр үчүн мындай энергия жок. Алгоолошуу энергиясынын пайда болушун төмөндөгүдөй түшүндүрсө болот. Электрондун заряды жана электрон өзү да мейкиндикте бир орунга *"топтолгон"* эмес. Алар

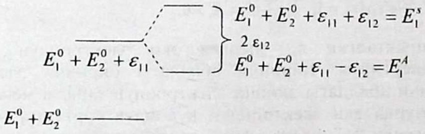
жалпы мейкиндик боюнча "жайылган". Мына ошондуктан бир эле электрондун заряды биринчи орунда да экинчи орунда да болушу мүмкүн. Бул учурда электрон өзү менен өзү аракет эткендей болот.

Мына ошентип, гелийдин атомундагы эки электрондун энергиясы ядронун талаасындагы ар бир электрондун кулондук энергиясынын, эки электрондун кулондук түртүлүү энергиясынын жана ошондой эле эки электрондун *"алгоолошуу"* энергияларынын суммаларынан турат.

Бул теңдемедеги ± белгисин ажыратып жазсак, анда эки түрдүү чечимди алабыз.

$$\left.\begin{aligned} E_1^S &= E_1^0 + E_2^0 + \varepsilon_{11} + \varepsilon_{12} \\ E_1^A &= E_1^0 + E_2^0 + \varepsilon_{11} - \varepsilon_{12} \end{aligned}\right\} \quad (15.3.21).$$

Алынган жыйынтыктар график түрүндө 15.2-сүрөттө көрсөтүлгөн.



15.2 – сүрөт.

Мына ошентип, *"алгоолошуу"* энергиясын эске алган мезгилде гелийдин атомундагы эки электрондун энергиясынын энергетикалык деңгээли эки ничке деңгээлчелерге ажырайт.

Гелийдин атомундагы эки электрондун толкундук функцияларын аныктайлы:

Жогорку (13.3.13) теңдемени кайра жазалы.

$\alpha(\varepsilon_{11} - \varepsilon) + \beta\varepsilon_{12} = 0$. Ал эми жогоруда аныкталгандай $\varepsilon_{11} - \varepsilon = \pm\varepsilon_{12}$ болгондуктан $\alpha(\pm\varepsilon_{12}) + \beta\varepsilon_{12} = 0$ болот. Анда $\varepsilon_{12}(\alpha \pm \beta) = 0$.

Бул барабардыкта $\varepsilon_{12} \neq 0$ *анда,* $\beta \pm \alpha = 0$ *же* $\beta = \pm\alpha$ болушу керек. Анда β маанисин ордуна коюп биринчи жакындаштыруу учурундагы толкундук функциянын маанисин алабыз. $\Psi^1 = \alpha(\Psi_1^0 + \beta\Psi_2^0)$ же өзгөртүп түзсөк $\Psi^1 = \alpha\Psi_1^0 \pm \alpha\Psi_2^0$ алабыз, анда $\Psi^1 = \alpha(\Psi_1^0 \pm \Psi_2^0)$ болот.

Жогорку формулалардагы α чоңдугунун маанисин толкундук функциянын нормалдаштыруу шартынан аныктайбыз. Нормалдаштыруу шарты боюнча $\int \Psi^{1*}\Psi^1 d\tau = 1$ болгондуктан интегралдын маанисин аныктайлы. Анда

$$1=\int \alpha^2(\Psi_1^{0*}+\Psi_2^{0*})(\Psi_1^0+\Psi_2^0)d\tau=\alpha^2\left|\int \Psi_1^{0*}\Psi_1^0 d\tau+\int \Psi_1^0\Psi_2^{0*} d\tau+\int \Psi_1^{0*}\Psi_2^0 d\tau+\int \Psi_2^{0*}\Psi_2^0 d\tau\right|=2\alpha^2$$

болот. Бул барабардыкты өзгөртүп α чоңдугун аныктасак $\alpha=\frac{1}{\sqrt{2}}$ болот. Анда биринчи жакындаштыруу учурундагы толкундук функция төмөнкүдөй түргө келет.

$$\Psi^1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1^0\pm\Psi_2^0) \quad \text{же} \quad \Psi^1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{11}\psi_{22}\pm\psi_{12}\psi_{21}) \qquad (15.3.22).$$

Мына ошентип биринчи жакындаштыруу учурунда Шредингердин теңдемеси төмөкүдөй эки түрдүү чечимге ээ болот:

$$\left.\begin{aligned} E_S^1&=E_1^0+E_2^0+\varepsilon_{11}+\varepsilon_{12}\\ \Psi_S^1&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{11}\psi_{22}+\psi_{12}\psi_{21})\end{aligned}\right\} \text{ симметриялык чечим}$$

$$\left.\begin{aligned} E_A^1&=E_1^0+E_2^0+\varepsilon_{11}-\varepsilon_{12}\\ \Psi_A^1&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{11}\psi_{22}-\psi_{12}\psi_{21})\end{aligned}\right\} \text{ антисимметриялык чечим.}$$

Бул чечимдердин мүнөзүн аныктайлы:

1). Эки электрондун орундарын алмаштыралы. Ал үчүн электрондун ордун мүнөздөөчү функциялардын ордун алмаштырабыз.

$\psi_{11}\rightarrow\psi_{12}$; $\psi_{22}\rightarrow\psi_{21}$; $\psi_{12}\rightarrow\psi_{11}$; $\psi_{21}\rightarrow\psi_{22}$;

Анда симметриялык чечим үчүн

$$\Psi_S^1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{11}\psi_{22}+\psi_{12}\psi_{21})=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12}\psi_{21}+\psi_{11}\psi_{22})=\Psi_S^1 \qquad (15.3.23).$$

Бул аныктоодон көрүнгөндөй эки электрондун ордун алмаштыруудан жалпы функция белгисин өзгөртпөйт. Бул абал симметриялык абал, ал эми бул абалды аныктаган чечимдер симметриялык чечимдер деп аталат.

2). Эки электрондун ордун алмаштырылгандан кийин экинчи функцияны карайлы:

$$\Psi_A^1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{11}\psi_{22}-\psi_{12}\psi_{21})=-\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{12}\psi_{21}-\psi_{11}\psi_{22})=-\Psi_A^1 \quad (15.3.24).$$

Бул учурда жалпы Ψ функция белгисин өзгөртөт жана атомдун бул абалы антисимметриялык абал, ал эми бул абалды мүнөздөгөн чечимдер антисимметриялык чечимдер деп аталат.

Мына ошентип биринчи жакындаштыруу учурундагы гелийдин атому үчүн Шредингердин теңдемеси эки түрдүү чечимге ээ – симметриялык жана антисимметриялык чечимдер.

Анда гелийдин атомундагы эки электрон эки түрдүү абалдарда, б.а. симметриялык жана антисимметриялык абалдарда болушат. Тактап айтканда бири биринен абалдары боюнча айырмаланышкан эки түрдүү гелийдин атому бар.

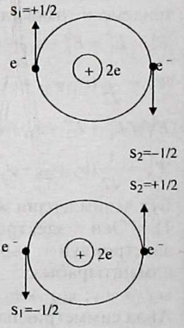
Мына ошентип эки түрдүү гелийдин атомунун бар экендиги алдын ала теориялык жол менен аныкталган.

Физикалык жактан гелийдин атомундагы эки электрондун эки түрдүү абалда болушу эмне менен байланышкандыгын аныктайлы. Симметриялык абалда электрондордун ордун алмаштырган учурда Ψ - функция белгисин өзгөртпөйт, ал эми антисимметриялык абалда функция белгисин өзгөртөт.

Мындай абалды электрондордун спиндери менен түшүндүрүүгө болот. Бизге белгилүү ар бир электрондун спини $s = \pm\frac{1}{2}$ барабар. Анда эки электрондордун суммардык спини төмөнкүдөй маанилерди алышы мүмкүн.

а) *Симметриялык абалды карайлы:*

Эгерде $s_1 = +\frac{1}{2}$ жана $s_2 = -\frac{1}{2}$, анда суммардык спин $S = s_1 + s_2 = +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ болот. Ошондой эле эгерде $s_1 = -\frac{1}{2}$ жана $s_2 = +\frac{1}{2}$ болсо, анда да суммардык спин $S = s_1 + s_2 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0$ болот. Мындай учурлар 15.3-сүрөттө көрсөтүлгөн.



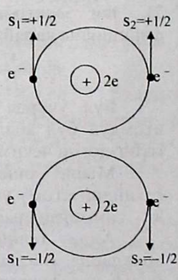
15.3 – сүрөт.

Суммардык спин S=0 болгон абал симметриялык чечимге дал келет. Бул учурда электрондордун ордун алмаштыруу системанын абалын өзгөртпөйт. Симметриялык абалда эки электрондун спиндери карама-каршы. Мындай карама-каршы спинге ээ болгон гелийдин атому *парагелий* деп аталат.

б) *Антисимметриялык абалды карайлы.*

$s_1 = +\frac{1}{2}$ жана $s_2 = +\frac{1}{2}$ болсун, анда суммардык спин $S = s_1 + s_2 = +\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = +1$ болот.

Ошондой эле эгерде $s_1 = -\frac{1}{2}$ жана $s_2 = -\frac{1}{2}$ болсо, анда суммардык спин $S = s_1 + s_2 = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1$ болот.



15.4 – сүрөт.

Мындай учурлар 15.4-сүрөттө көрсөтүлгөн.

Суммардык спин S=±1 болгон бул абал антисимметриялык чечимге дал келет. Бирдей спиндеги эки электронго ээ болгон гелийдин атому *ортогелий* деп аталат.

Парагелийден ортогелийге өтүш үчүн жана тескерисинче ортогелийден парагелийге өтүү үчүн бир электрондун спинин карама-каршы багытка өзгөртүү керек. Мындай процесс өтө төмөн ыктымалдуулукка ээ. Мына ошондуктан гелийдин атому парагелий же ортогелий абалында узак убакытка жашайт. Бир абалдан экинчи абалга өтүү үчүн сөзсүз түрдө сырттан энергия талап кылат.

Электрондордун орбиталдык механикалык моменттерин эске алуу менен гелийдин атомунун нормалдык жана дүүлүктүрүлгөн абалда болушун карайлы. Эки электрондун орбиталдык механикалык моменттери вектордук кошулса $\vec{L}_1 + \vec{L}_2 = \vec{L}$ болот.

Анда суммардык орбиталдык моментти мүнөздөөчү ℓ кванттык саны ℓ_1 жана ℓ_2 кванттык сандардын суммасы болот.

Гелийдин атомундагы эки электрондун суммардык орбиталдык моменттери жана суммардык өздүк моменттери вектордук түрдө кошулуп, эки электрондун толук механикалык моментин түзүшөт.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Электрондун толук механикалык моментин мүнөздөөчү кванттык санды J менен белгилейли. Бул кванттык сан $\vec{L}$ *жана* $\vec{S}$ векторлорунун бирдей багытында J эң чоң мааниге ээ болот, ал эми карама-каршы багытында ал эң кичинекей мааниге ээ болот. Мына ошондуктан J жалпы учурда төмөнкүдөй маанилерге ээ.

$$J = (\ell + S), \ldots, (\ell - S).$$

1) *Эки электрондун орбиталдык, спиндик жана толук моменттерин пайдалануу менен гелийдин атомунун симметриялык абалын карайлы.* Бул учурда $S = s_1 + s_2 = \pm\frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} = 0$ болот.

Биринчи маани экинчи электрондордун негизги кванттык сандары $n_1=1$ жана $n_2=1$ болсун. Анда $\ell_1=0$, $\ell_2=0$, болгондуктан эки электрон үчүн $\ell=0$ болот. Ал эми S=0 болгондуктан $J=\ell \pm S=0$ болот. Бул учурда гелийдин атомундагы эки электрон тең 1S абалда жайгашкан б.а. $1s^2$ болот. Бул өтө чоң мааниге ээ болгон жыйынтык.

S, ℓ, J чоңдуктарын белгилөө үчүн абалдын мультиплеттүүлүгү деген M символиканы кийиребиз. Анда абалды белгилеген символиканын сол жак үстүнө мультиплеттүүлүктүн белгиси, ал эми символиканын оң жак астына толук механикалык моментин кванттык санынын сан мааниси коюлат. Мисалы гелийдин атомундагы эки электрондун мультиплетүүлүк абалы

суммардык спиндик кванттык сан S менен аныкталат, б.а $M=(2S+1)$: $S=0$, $\ell=0$, $J=0$. Мындай атом үчүн символика 1^1S_0 болот. Бул символиканын алдына n_1 и n_2 кванттык сандарынын эң чоң сан мааниси жазылат, берилген учурда ал сан 1 ге барабар.

Мындай $M=1$ болгон абал синглеттик абал деп аталат. Мына ошентип эки электрондуу гелийдин атомунун симметриялык абалында *синглеттик абалдагы парагелийди* алабыз. Электрондордун байланыш энергиясы Шредингердин теңдемесинин чечиминен аныкталат жана бул абал үчүн ал $E_S = -24{,}5$ эВ барабар.
Теориялык жол менен аныкталган маани тажрыйбада аныкталган энегиянын мааниси менен дал келген. Мына ошентип жаратылышта чындыгында эле *синглеттик абалдагы парагелий* бар жана анын негизги абалы 1^1S_0 – абал болот ($1^1S_0(1S^2\downarrow\uparrow)$).

Парагелийдин дүүлүктүрүлгөн абалдары n_1, n_2, l, J кванттык сандардын башка маанилеринде алынат:

$2^1P_1(1S^12P^1\downarrow\uparrow)$; $2^1S_0(1S^1,2S^1\downarrow\uparrow)$.

2. *Электрондордун орбиталдык, спиндик жана толук моменттерин эске алып атомдүн антисимметриялык абалын карайлы.*

Бул учурда $S = s_1+s_2 = \pm1$ болот. Мында эки электрондун негизги кванттык сандары $n_1=1$, $n_2=1$ болсо, $\ell_1=0$, $\ell_2=0$, $\ell=0$ болот. Ал эми спиндери $s_1=\pm\frac{1}{2}$, $s_2=\pm\frac{1}{2}$ болот. Анда мультиплеттүүлүк $M=(2S+1) = 3$ болот.

Атомдун мындай абалы 1^1S_0 болот. Жалпы кванттык сан $J=\ell+S=0+1=1$.

Бул антисимметриялык абалда электрондун байланыш энергиясынын мааниси -24,5 эВ чоң болушу керек, бирок тажрыйбада бул учур далилденген эмес. Анда триплеттик антисимметриялык 1^1S_0 абалында электрондор жок. Бул жыйынтык чоң мааниге ээ. Себеби триплеттик 1^1S_0 абалында n, ℓ, m, S_z кванттык сандар эки электрон үчүн бирдей окшош маанилерге ээ болот. Мына ошондуктан бул абал бош. *Атомдо бирдей окшош төрт кванттык санга ээ болгон жок дегенде эки электрон болбойт. Бул принцип Паулинин принциби деп аталат.*

Реалдык антисимметриялык абалды алуу үчүн кванттык сандардын башка маанилерин кароо керек. Мисалы эки электрон үчүн $n_1=1$, $n_2=2$, $\ell_1=0$, $\ell_2=0$. Ал эми $s_1=\pm\frac{1}{2}$, $s_2=\pm\frac{1}{2}$ болгондуктан S=1 болот. Анда $\ell=\ell_1+\ell_2=0$, $J=\ell+S=0$, $M=2S+1=3$.

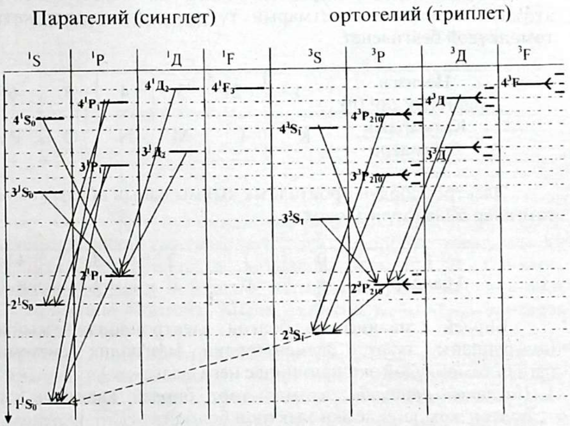
2^3S_1 – же ($1S\uparrow2S\uparrow$) абал *ортогелийдин негизги абалы.* Гелийдин атомунун бул абалындагы эки электрон үчүн байланыш энергиясы тажрыйбада аныкталган маани менен дал келген. Ал эми ортогелийдин дүүлүктүрүлгөн абалы кванттык сандардын башка

маанилеринде алынат. Мисалы, төмөнкү учурда, б.а $n_1=1$, $n_2=2$, $\ell_1=0$, $\ell_2=1$ болсо, анда $\ell = \ell_1 + \ell_2 = 1$ болгон абал P – абал болот.
Ал эми S=1 жана $\ell=1$ болгондуктан $J = \ell + S, \ldots, \ell - S$ болот, анда J=2,1,0. Ал эми мультиплеттүүлүк M=2S+1=3 болот.

Символикалык түрдө төмөнкүдөй жазылат: $2^3P_{0,1,2}(1S^1,2P^1\uparrow\uparrow)$.

Мына ошентип биз триплеттик абалды алдык, алар бири биринен толук механикалык моменттин маанилери менен айырмаланышат.

Алынган жыйынтыктар график түрүндө төмөнкү 15.5-сүрөттө берилген.



15.5 – сүрөт.

Бул сүрөттө ошондой эле парагелийде жана ортогелийде энергетикалык деңгеелдердин жайланышы жана ал деңгеелдердин арасындагы электрондордук өтүү учурундагы нурдануунун схемасы берилген. Ал нурдануулар парагелий жана ортогелий үчүн бири-биринен айырмаланышат. Мына ошондуктан тажрыйбада нурдануу спектрлери аркылуу парагелийди жана ортогелийди бири-биринен ажыратышат.

суммардык спиндик кванттык сан S менен аныкталат, б.а $M=(2S+1)$: $S=0$, $\ell=0$, $J=0$. Мындай атом үчүн символика 1^1S_0 болот. Бул символиканын алдына n_1 и n_2 кванттык сандарынын эң чоң сан мааниси жазылат, берилген учурда ал сан 1 ге барабар.

Мындай $M=1$ болгон абал синглеттик абал деп аталат. Мына ошентип эки электрондуу гелийдин атомунун симметриялык абалында *синглеттик абалдагы парагелийди* алабыз. Электрондордун байланыш энергиясы Шредингердин теңдемесинин чечиминен аныкталат жана бул абал үчүн ал $E_S = -24{,}5$ эВ барабар. Теориялык жол менен аныкталган маани тажрыйбада аныкталган энегиянын мааниси менен дал келген. Мына ошентип жаратылышта чындыгында эле *синглеттик абалдагы парагелий* бар жана анын негизги абалы 1^1S_0 – абал болот $(1^1S_0(1S^2\downarrow\uparrow))$.

Парагелийдин дүүлүктүрүлгөн абалдары n_1, n_2, l, J кванттык сандардын башка маанилеринде алынат:

$2^1P_1(1S^1 2P^1\downarrow\uparrow)$; $2^1S_0(1S^1, 2S^1\downarrow\uparrow)$.

2. *Электрондордун орбиталдык, спиндик жана толук моменттерин эске алып атомдүн антисимметриялык абалын карайлы.*

Бул учурда $S = s_1+s_2 = \pm 1$ болот. Мында эки электрондун негизги кванттык сандары $n_1=1$, $n_2=1$ болсо, $\ell_1=0$, $\ell_2=0$, $\ell=0$ болот. Ал эми спиндери $s_1 = \pm\frac{1}{2}$, $s_2 = \pm\frac{1}{2}$ болот. Анда мультиплеттүүлүк $M=(2S+1) = 3$ болот.

Атомдун мындай абалы 1^1S_0 болот. Жалпы кванттык сан $J=\ell+S=0+1=1$.

Бул антисимметриялык абалда электрондун байланыш энергиясынын мааниси -24,5 эВ чоң болушу керек, бирок тажрыйбада бул учур далилденген эмес. Анда триплеттик антисимметриялык 1^1S_0 абалында электрондор жок. Бул жыйынтык чоң мааниге ээ. Себеби триплеттик 1^1S_0 абалында n, ℓ, m, S_z кванттык сандар эки электрон үчүн бирдей окшош маанилерге ээ болот. Мына ошондуктан бул абал бош. *Атомдо бирдей окшош төрт кванттык санга ээ болгон жок дегенде эки электрон болбойт. Бул принцип Паулинин принциби деп аталат.*

Реалдык антисимметриялык абалды алуу үчүн кванттык сандардын башка маанилерин кароо керек. Мисалы эки электрон үчүн $n_1=1$, $n_2=2$, $\ell_1=0$, $\ell_2=0$. Ал эми $s_1 = \pm\frac{1}{2}$, $s_2 = \pm\frac{1}{2}$ болгондуктан S=1 болот. Анда $\ell = \ell_1 + \ell_2 = 0$, $J = \ell + S = 0$, $M=2S+1=3$.

2^3S_1 – же $(1S\uparrow 2S\uparrow)$ абал *ортогелийдин негизги абалы.* Гелийдин атомунун бул абалындагы эки электрон үчүн байланыш энергиясы тажрыйбада аныкталган маани менен дал келген. Ал эми ортогелийдин дүүлүктүрүлгөн абалы кванттык сандардын башка

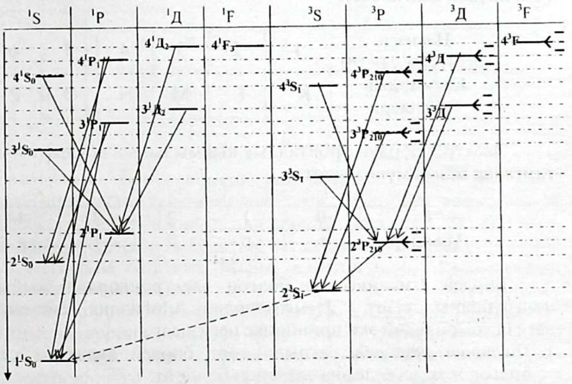
маанилеринде алынат. Мисалы, төмөнкү учурда, б.а $n_1=1$, $n_2=2$, $\ell_1=0$, $\ell_2=1$ болсо, анда $\ell = \ell_1 + \ell_2 = 1$ болгон абал P – абал болот.
Ал эми S=1 жана $\ell=1$ болгондуктан $J = \ell + S, \ldots, \ell - S$ болот, анда J=2,1,0. Ал эми мультиплеттүүлүк M=2S+1=3 болот.

Символикалык түрдө төмөнкүдөй жазылат: $2^3P_{0,1,2}(1S^1,2P^1\uparrow\uparrow)$.

Мына ошентип биз триплеттик абалды алдык, алар бири биринен толук механикалык моменттин маанилери менен айырмаланышат.

Алынган жыйынтыктар график түрүндө төмөнкү 15.5-сүрөттө берилген.

Парагелий (синглет) ортогелий (триплет)



15.5 – сүрөт.

Бул сүрөттө ошондой эле парагелийде жана ортогелийде энергетикалык деңгээлдердин жайланышы жана ал деңгээлдердин арасындагы электрондордук өтүү учурундагы нурдануунун схемасы берилген. Ал нурдануулар парагелий жана ортогелий үчүн бири-биринен айырмаланышат. Мына ошондуктан тажрыйбада нурдануу спектрлери аркылуу парагелийди жана ортогелийди бири-биринен ажыратышат.

XVI глава. МЕНДЕЛЕЕВДИН МЕЗГИЛДИК СИСТЕМАСЫ

§1. Электрондордун конфигурациясы жана электрондук катмарларды толтуруунун идеалдык схемасы

Ядронун айланасында кыймылда болгон ар бир электрон төмөнкүдөй төрт кванттык сан менен аныкталат.

1. Негизги кванттык сан $n = 1, 2, 3, \ldots$
2. Орбиталдык кванттык сан $\ell = 0, 1, 2, \ldots, n-1.$
3. Магниттик кванттык сан $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm\ell$
4. Спиндик кванттык сан $s_z = +1/2, -1/2$

Бирдей негизги кванттык санга ээ болгон электрондор атомдун электрондук катмарын түзүшөт. Ар түрдүү катмарлар төмөнкүдөй белгиленет.

Негизги кванттык сан (n)	1	2	3	4	5	6
Катмардын белгилери	K	L	M	N	O	P

Электрондордун орбиталдык кыймылынын абалы төмөнкүдөй тамгалар менен мүнөздөлөт.

ℓ	0	1	2	3	4
Абалдар	s	p	d	f	g

Бирдей ℓ-мааниге ээ болгон электрондордун жыйындысы подгруппаны түзөт. Элементтердин мезгилдик системасынын негизи төмөнкүдөй эки принципке негизделген:

1. *Паулинин принциби:* атомдо төрт бирдей кванттык санга ээ болгон жок дегенде эки электрон болбойт.
2. *Минимум энергиянын принциби:* берилген электрондордун жалпы санында атом минималдык энергияны алууга умтулат.

Менделеевдин мезгилдик системасын түзүүдөгү биринчи жакындаштырууда электрондордун өз ара аракет этүүсү эске алынбайт жана атомдун энергиясы электрондордун ядро менен аракет этүү энергияларынын суммасына барабар деп каралат.

Атом минималдык энергияга ээ болсо, Паулинин принцибин пайдаланып атомдогу электрондорду ар кандай абалдарга жайгаштыруу мүмкүн. Бул учурда катмарларды электрондор менен толтуруунун *идеалдык схемасын* алабыз. Ал электрондордун

реалдык жайланышынан айырмаланат, бирок баштап кароо ыңгайлуу.

Паулинин принциби боюнча тигил же бул катмарда канча электрондун болуу мүмкүндүгүн карайлы. Жогоруда аныкталгандай n жана ℓ кванттык сандардын берилген маанилеринде атомдо 2(2ℓ+1) электрон болот. Себеби m кванттык санынын жалпы саны 2ℓ+1 жана m кванттык санынын ар бир маанисинде эки s_z бар.

Ал эми n кванттык сандын берилген маанилеринде ℓ кванттык сан 0-дөн n-1 чейинки маанини алгандыктан, ар бир катмардагы максималдык электрондордун саны $\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell+1) = 2n^2$ болот, жана ал төмөнкү таблицада берилген.

n \ ℓ		0 s	1 p	2 d	3 f	4 g		Бардык электрон-дордун саны $2n^2$
1	K	2						2
2	L	2	6					8
3	M	2	6	10				18
4	N	2	6	10	14			32
5	O	2	6	10	14	18		50

Энергиянын формуласынан көрүнгөндөй n кванттык саны жогорулаганда кулондук талаадагы электрондордун энергиясы да жогорулайт. Электрондор K катмарда болгондо (n=1), атом минималдык энергияга ээ болот. K катмары толукталгандан кийин L (n=2) толуктана баштайт. Мына ошентип K, L, M катмарлары катары менен толуктанышат.

Бирок берилген ар бир катмарда s, p, d, f, g – абалдар кандай толуктанышы керек экендигин энергиянын формуласы аныктай албайт. Себеби бул учурда энергия ℓ кванттык санынан көз каранды эмес. Электрондордун өз ара аракет этүүсүн эске алган мезгилде ℓ кванттык санынын жогорулашы менен энергиянын мааниси да жогорулайт (n-дин бирдей маанисинде).

Мына ошентип идеалдык схема боюнча катмарды толтуруу $\ell_{min}=0$ башталып $\ell_{max} = n-1$ бүтөт. Бул схема боюнча ар бир электрон Паулинин принцибинин негизинде эң кичинекей мүмкүн болгон n жана ℓ кванттык сандардын маанилерин алат.

Качан гана катмарда толтуруу бүткөндө туруктуу электрондук конфигурация түзүлөт, ал инерттүү газдардын конфигурациясы болот. Андан кийин кийинки катмар толуктана баштайт жана баштапкы элемент жегич металл болот. Кезектеги катмарды толтурууда, мурдагы катмарды толтуруудагы удаалаштык кайталангандыктан, бир катмардан экинчи катмарга өткөндө

элементтердин химиялык касиети мезгил-мезгили менен өзгөрүлөт. Ар бир жаңы катмарды толтуруу жегич металлдан башталып инерттүү газдан бүтөт.

Мына ошондуктан, катмарды толтурууда пайда болгон элементтер *Менделеевдин мезгилдик системасын* түзөт.

Идеалдык схема боюнча электрондордук катмарлардын толтурулушу жогорку таблицадан көрүнгөндөй 2,8,18,32,50 болушу керек. Ал эми чындыгында Менделеевдин мезгилдик системасында мезгилдик удаалаштык 2,8,8,18,18,32,… болот да, идеалдык схемадан айырмалашат.

§2. Менделеевдин мезгилдик системасы. Реалдык схема.

Атомдогу электрондордун өз ара аракет этүүсүн эске алганда Менделеевдин мезгилдик системасындагы бардык өзгөчөлүктөрдү толук түшүндүрүүгө мүмкүн.

Бул учурда да атомдордун электрондук катмарлардын жана абалдардын электрондор менен толуктануусунда негизги принцип катарында Паулинин принциби жана минимум энергия принциби алынат.

Электрондордун өз ара аракет этүүсүн эске алганда да ар бир электрондун абалы жогоруда каралгандай n, ℓ, m, s_z кванттык сандар менен аныкталат. Электрондук конфигурация символикалык түрдө төмөнкүдөй жазылат. Баштап негизги кванттык сандын (n) чоң сан мааниси, андан кийин электрондун орбиталдык абалын көрсөтүүчү символ коюлат да анын даража көрсөткүчүндө электрондун саны жазылат. Мисалы: $1s^2$ – бул негизги кванттык саны n=1 болгон К катмарынын s абалында эки электрон бар дегенди көрсөтөт. $3p^5$ – негизги кванттык саны n=3 болгон М оболочканын p абалында 5 электрон бар, ж.б.

Ар кандай электрондук конфигурация ушул эреженин негизинде жазылат.

Мисалы: $1s^2 2s^2 3p^4$ – n=1 болгон К катмардын s абалында 2 электрон, n=2 болгон катмардын s абалында 2 электрон жана n=3 болгон М оболочканын p абалында 4 электрон бар дегенди түшүндүрөт. Бул электрондук конфигурация кислороддун (O) атомунун электрондук конфигурациясы.

Ушундай эле жол менен калган атомдордун да электрондук конфигурациясын жазууга мүмкүн. Менделеевдин мезгилдик системасынын башындагы элементтер үчүн электрондордун өз ара аракет этүүсү сезээрлик эмес, мына ошондуктан электрондук абалдардын толуктанышы идеалдык схема менен дал келет.

Суутекте (H) бир электрон бар. Ал минималдык энергияны алган абалда, б.а. n=1 абалда болот. Мына ошондуктан суутектин атомунун электрондук конфигурациясы $1s^1$ (же 1s - бир электрон болсо, даража катарында көрсөтүлбөйт).

Гелийдин атомунда дагы карама-каршы спиндеги бир электрон кошулат. Анын электрондук конфигурациясы $1s^2$. Бул парагелий. Ортогелийде экинчи электрондун спини биринчи электрондун спини менен дал келет. Паулинин принциби боюнча бул электрон 1s абалда болушу мүмкүн эмес. Анда минималдык энергияны алганга мүмкүндүк берген кийинки абал 2s абал. Мына ошондуктан ортогелийдин электрондук конфигурациясы 1s2s. Парагелийде биринчи катмар толуктанат жана Менделеевдин мезгилдик системасынын биринчи мезгили бүтөт. Ошондуктан гелий касиети боюнча инерттик газ болот.

Кийинки элемент Литий (Li). Парагелийдин электрондук конфигурациясынын 2s абалына бир электронду кошуу керек. Бул учурда экинчи электрондук конфигурацияны толтуруу башталат. Литийдин электрондук конфигурациясы $1s^22s$. Литийдин атомундагы үчүнчү электрон 2s абалында жайланышкандыктан, анын ядро менен байланышы начар. Мына ошондуктан литий үчүнчү электронун берип химиялык реакцияга тез кирет, б.а. жегич металл болот.

Андан кийинки элемент берилий (Be), анын конфигурациясы $1s^22s^2$. Андан кийинки элемент бор (B), анын конфигурациясы $1s^22s^22p$. Бордо бешинчи электрон 2p абалда болот. Себеби ал 2s абалда болушу Паулинин принциби боюнча мүмкүн эмес. Мына ошондуктан кийинки минималдык энергияга ээ болгон абал 2p болгондуктан бешинчи электрон мына ошол абалда жайланышкан. P абалда алты электрон болушу мүмкүн $(2(2\ell+1)=6)$. Мына ошондуктан бордон (B) баштап неонго (Ne) чейинки алты элементте 2p – абал толтурулат. Алардын электрондук конфигурациясы төмөнкүдөй: B-$1s^2\ 2s^2\ 2P$, C - $1s^22s^22p^2$, N - $1s^22s^22p^3$, O - $1s^22s^22p^4$, F - $1s^22s^22p^5$, Ne - $1s^22s^22p^6$.

Инерттик газ неондо экинчи электрондук катмар бүтөт жана экинчи мезгилди тургузуу да бүтөт. Экинчи мезгилде бардыгы болуп 8 элемент бар.

Үчүнчү мезгил жегич металл натрийден (Na) башталат. Анын электрондук конфигурациясын шарттуу түрдө төмөнкүдөй көрсөтүүгө болот. (Na)=(Ne)·3s неондун конфигурациясына 3s электронду кошуу менен алынгандыгын көрсөтөт. Натрийде да акыркы электрон 3s абалда жайгашкандыктан, анын ядро менен байланышы начар болуп реакцияга тез кирип жегич металлдын касиетин кайталайт. Натрийден башталып аргонго (Ar) чейинки 8

элемент 3s жана 3p абалдарын толтурушат. Аргондун электрондук конфигурациясы $(Ar)=(Ne)\cdot 3s^2 3p^6$. Мына ушул учурга чейин абалдардын толукталышы идеалдык схема менен дал келет.

Кийинки элемент калий (К). Идеалдык схема боюнча анын электрондук конфигурациясы $(K)=(Ar)\cdot 3d$ болушу керек. Бирок чындыгында андай эмес. Энергетикалык жактан акыркы электрон 3d абалына жайгашканга караганда 4s абалында болушу ыңгайлуу. Мына ошондуктан калий да жегич металлдын касиетин кайталайт.

Мына ошентип үчүнчү мезгилде 8 элемент болот. Калийден баштап төртүнчү катмар толуктана баштайт, б.а. мезгилдик системанын 4-чү мезгили толуктана баштайт.

Калийдин конфигурациясы $(K)=(Ar)\cdot 4s$. Калийден кийинки элемент кальций Са, анын конфигурациясы $(Ca)=(Ar)\cdot 4s^2$. Андан кийин энергетикалык жактан мурда толукталбаган 3d абалдын толуктанышы ыңгайлуу. Бул 3d абалдын толуктанышы никелге (Ni) чейин аткарылат. Бирок 4s абал ар дайым толукталган бойдон калбайт. Айрым учурда энергетикалык жактан бир электронду 3d – абалга өткөрүү ыңгайлуу.

Никелдин конфигурациясы $(Ni)=(KL)\cdot 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$. (KL) – белгиси толукталган К жана L катмарын көрсөтөт. d – абалдагы максималдык электрондордун саны 10 барабар. Мына ошондуктан никелде М – катмардын d-абалы толуктанышы үчүн эки электрон жетпейт. Кийинки элемент жез (Cu), ага бир электрон кошулат. Энергетикалык жактан 3d абалы толукталып, 4s абалда бир электрон болушу ыңгайлуу. Анын конфигурациясы $(Cu) = (KLM)\cdot 4s$, б.а. анын конфигурациясы жегич металлдардын конфигурациясына окшош. Кийинки элементтерде 4s жана 4p абалдар толуктанат. Алардын баардыгы 8 элемент. Алардын конфигурациясы экинчи жана үчүнчү мезгилдердин конфигурациясын кайталайт. Криптондо (Kr) 4s жана 4p абалдар толуктанышат. Мына ошондуктан криптон инертүү газ. Криптондо мезгилдик системадагы биринчи чоң мезгил толуктанат.

Андан кийин төртүнчү мезгил кайталанат. Криптондон кийинки элемент рубийде 5s абал толуктана баштайт. Себеби энергетикалык жактан 5s абал, 4d жана 4□ абалдарга караганда ыңгайлуу. Кийинки толуктануу жогору биз карагандай ксенондо (Xe) бүтөт. Анда 4d, 5s жана 5p абалдар толуктанат, бирок 4□, 5d, 5□, 5g – абалдар толукталбай калат. Кийинки элементтер цезийде (Cs) жана барийде (Ba) 6s абал толуктанат. Андан кийин Лантанда (La) ички 5d абал толуктанат, ал эми калган 14 элементте 4□ абал толуктанат. Ички 4□ абал толуктагандыктан, бул 14 элементте сырткы электрондордун саны өзгөрүлбөгөндүктөн, алардын химиялык касиеттери да өзгөрүлбөйт. Мына ошондуктан калган 14

элементтердин касиети окшош жана лантандын касиетин кайталайт. Мына ошондуктан ал элементтерди лантаноиддер деп аташат.

Ушундай абал актинийден (Ac) кийин байкалат. Бул учурда мурда толукталбай калган 5▫ абал толуктанат. Ал элементтер актиноиддер группасын түзөт.

Актиноиддердин ичинен жаратылышта торий (Th), протактиний (Pa) жана уран (U) туруктуу. Калгандары лабораториялык жол менен жасалма түрдө алынган. Мына ошондуктан бул элементтерди трансурандык элементтер деп, кээде жасалма элементтер деп да аташат.

Электрондордун абалдарга жайланышынын негизинде Менделеевдин мезгилдик системасындагы элементтердин группасын жана валенттүүлүгүн түшүндүрүүгө мүмкүн.

Белгилүү абалда атомдун валенттүүлүгү спиндери компесацияланбаган электрондордун саны менен аныкталат. Бул спиндери компенсацияланбаган электрондор химиялык реакциянын жүрүшүнө жардам берет жана атомдорду молекулаларга бириктирет.

Группанын номери берилген абалда эң жогорку валенттүүлүгү менен аныкталат же спини компенсацияланбаган электрондордун санын аныктайт.

Адабияттар.

1. Ландау Л.Д., Лифщиц Е.Н., Краткий курс теоретической физики. М. Наука.
2. Шпольский Э.В. Атомная физика. М. Наука 1984. Т.1.2.
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М. Наука. 1976.
4. Акоста В. Кован К. Грем Б. Основы современной физики М. Просвещение, 1981.
5. Шаршекеев Ө.Ш. Квантовая механика Б.1992.
6. М.М. Кидибаев, К. Шаршеев. Кванттык механиканын негиздери Каракол-2000.
7. Савельев И.В. Курс общей физики. М. Наука 1979.
8. Лембра Ю. Физические основы квантовой механики Тарту 1983

Басууга берилди: 04.10.2006.

Формат: 60x84 1/16 Көлөмү: 9,25 б.т.
Буйрутма: №66 Нускасы: 500 даана.

ОшМУ, "Билим" басма борбору
Ош ш., Ленин к., 331, каб.135., тел.: 7.20.61

Суутекте (Н) бир электрон бар. Ал минималдык энергияны алган абалда, б.а. n=1 абалда болот. Мына ошондуктан суутектин атомунун электрондук конфигурациясы $1s^1$ (же 1s - бир электрон болсо, даража катарында көрсөтүлбөйт).

Гелийдин атомунда дагы карама-каршы спиндеги бир электрон кошулат. Анын электрондук конфигурациясы $1s^2$. Бул парагелий. Ортогелийде экинчи электрондун спини биринчи электрондун спини менен дал келет. Паулинин принциби боюнча бул электрон 1s абалда болушу мүмкүн эмес. Анда минималдык энергияны алганга мүмкүндүк берген кийинки абал 2s абал. Мына ошондуктан ортогелийдин электрондук конфигурациясы 1s2s. Парагелийде биринчи катмар толуктанат жана Менделеевдин мезгилдик системасынын биринчи мезгили бүтөт. Ошондуктан гелий касиети боюнча инерттик газ болот.

Кийинки элемент Литий (Li). Парагелийдин электрондук конфигурациясынын 2s абалына бир электронду кошуу керек. Бул учурда экинчи электрондук конфигурацияны толтуруу башталат. Литийдин электрондук конфигурациясы $1s^22s$. Литийдин атомундагы үчүнчү электрон 2s абалында жайланышкандыктан, анын ядро менен байланышы начар. Мына ошондуктан литий үчүнчү электронун берип химиялык реакцияга тез кирет, б.а. жегич металл болот.

Андан кийинки элемент берилий (Be), анын конфигурациясы $1s^22s^2$. Андан кийинки элемент бор (B), анын конфигурациясы $1s^22s^22p$. Бордо бешинчи электрон 2p абалда болот. Себеби ал 2s абалда болушу Паулинин принциби боюнча мүмкүн эмес. Мына ошондуктан кийинки минималдык энергияга ээ болгон абал 2p болгондуктан бешинчи электрон мына ошол абалда жайланышкан. P абалда алты электрон болушу мүмкүн ($2(2\ell+1)=6$). Мына ошондуктан бордон (B) баштап неонго (Ne) чейинки алты элементте 2p – абал толтурулат. Алардын электрондук конфигурациясы төмөнкүдөй: B-$1s^2\ 2s^2\ 2P$, C - $1s^22s^22p^2$, N - $1s^22s^22p^3$, O - $1s^22s^22p^4$, F - $1s^22s^22p^5$, Ne - $1s^22s^22p^6$.

Инерттик газ неондо экинчи электрондук катмар бүтөт жана экинчи мезгилди тургузуу да бүтөт. Экинчи мезгилде бардыгы болуп 8 элемент бар.

Үчүнчү мезгил жегич металл натрийден (Na) башталат. Анын электрондук конфигурациясын шарттуу түрдө төмөнкүдөй көрсөтүүгө болот. (Na)=(Ne)·3s неондун конфигурациясына 3s электронду кошуу менен алынгандыгын көрсөтөт. Натрийде да акыркы электрон 3s абалда жайгашкандыктан, анын ядро менен байланышы начар болуп реакцияга тез кирип жегич металлдын касиетин кайталайт. Натрийден башталып аргонго (Ar) чейинки 8

элемент 3s жана 3p абалдарын толтурушат. Аргондун электрондук конфигурациясы (Ar)=(Ne)·$3s^2 3p^6$. Мына ушул учурга чейин абалдардын толукталышы идеалдык схема менен дал келет.

Кийинки элемент калий (K). Идеалдык схема боюнча анын электрондук конфигурациясы (K)=(Ar)·3d болушу керек. Бирок чындыгында андай эмес. Энергетикалык жактан акыркы электрон 3d абалына жайгашканга караганда 4s абалында болушу ыңгайлуу. Мына ошондуктан калий да жегич металлдын касиетин кайталайт.

Мына ошентип үчүнчү мезгилде 8 элемент болот. Калийден баштап төртүнчү катмар толуктана баштайт, б.а. мезгилдик системанын 4-чү мезгили толуктана баштайт.

Калийдин конфигурациясы (K)=(Ar)·4s. Калийден кийинки элемент кальций Ca, анын конфигурациясы (Ca)=(Ar)·$4s^2$. Андан кийин энергетикалык жактан мурда толукталбаган 3d абалдын толуктанышы ыңгайлуу. Бул 3d абалдын толуктанышы никелге (Ni) чейин аткарылат. Бирок 4s абал ар дайым толукталган бойдон калбайт. Айрым учурда энергетикалык жактан бир электронду 3d – абалга өткөрүү ыңгайлуу.

Никелдин конфигурациясы (Ni)=(KL)·$3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$. (KL) – белгиси толукталган K жана L катмарын көрсөтөт. d – абалдагы максималдык электрондордун саны 10 барабар. Мына ошондуктан никелде M – катмардын d-абалы толуктанышы үчүн эки электрон жетпейт. Кийинки элемент жез (Cu), ага бир электрон кошулат. Энергетикалык жактан 3d абалы толукталып, 4s абалда бир электрон болушу ыңгайлуу. Анын конфигурациясы (Cu) = (KLM)·4s, б.а. анын конфигурациясы жегич металлдардын конфигурациясына окшош. Кийинки элементтерде 4s жана 4p абалдар толуктанат. Алардын баардыгы 8 элемент. Алардын конфигурациясы экинчи жана үчүнчү мезгилдердин конфигурациясын кайталайт. Криптондо (Kr) 4s жана 4p абалдар толуктанышат. Мына ошондуктан криптон инертүү газ. Криптондо мезгилдик системадагы биринчи чоң мезгил толуктанат.

Андан кийин төртүнчү мезгил кайталанат. Криптондон кийинки элемент рубийде 5s абал толуктана баштайт. Себеби энергетикалык жактан 5s абал, 4d жана 4▫ абалдарга караганда ыңгайлуу. Кийинки толуктануу жогору биз карагандай ксенондо (Xe) бүтөт. Анда 4d, 5s жана 5p абалдар толуктанат, бирок 4▫, 5d, 5▫, 5g – абалдар толукталбай калат. Кийинки элементтер цезийде (Cs) жана барийде (Ba) 6s абал толуктанат. Андан кийин Лантанда (La) ички 5d абал толуктанат, ал эми калган 14 элементте 4▫ абал толуктанат. Ички 4▫ абал толуктагандыктан, бул 14 элементте сырткы электрондордун саны өзгөрүлбөгөндүктөн, алардын химиялык касиеттери да өзгөрүлбөйт. Мына ошондуктан калган 14

элементтердин касиети окшош жана лантандын касиетин кайталайт. Мына ошондуктан ал элементтерди лантаноиддер деп аташат.

Ушундай абал актинийден (Ас) кийин байкалат. Бул учурда мурда толукталбай калган 5f абал толуктанат. Ал элементтер актиноиддер группасын түзөт.

Актиноиддердин ичинен жаратылышта торий (Th), протактиний (Ра) жана уран (U) туруктуу. Калгандары лабораториялык жол менен жасалма түрдө алынган. Мына ошондуктан бул элементтерди трансурандык элементтер деп, кээде жасалма элементтер деп да аташат.

Электрондордун абалдарга жайланышынын негизинде Менделеевдин мезгилдик системасындагы элементтердин группасын жана валенттүүлүгүн түшүндүрүүгө мүмкүн.

Белгилүү абалда атомдун валенттүүлүгү спиндери компесацияланбаган электрондордун саны менен аныкталат. Бул спиндери компенсацияланбаган электрондор химиялык реакциянын жүрүшүнө жардам берет жана атомдорду молекулаларга бириктирет.

Группанын номери берилген абалда эң жогорку валенттүүлүгү менен аныкталат же спини компенсацияланбаган электрондордун санын аныктайт.

Адабияттар.

1. Ландау Л.Д., Лифщиц Е.Н., Краткий курс теоретической физики. М. Наука.
2. Шпольский Э.В. Атомная физика. М. Наука 1984. Т.1.2.
3. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М. Наука. 1976.
4. Акоста В. Кован К. Грем Б. Основы современной физики М. Просвещение, 1981.
5. Шаршекеев Ө.Ш. Квантовая механика Б.1992.
6. М.М. Кидибаев, К. Шаршеев. Кванттык механиканын негиздери Каракол-2000.
7. Савельев И.В. Курс общей физики. М. Наука 1979.
8. Лембра Ю. Физические основы квантовой механики Тарту 1983

Басууга берилди: 04.10.2006.

Формат: 60x84 1/16 Көлөмү: 9,25 б.т.
Буйрутма: №66 Нускасы: 500 даана.

ОшМУ, "Билим" басма борбору
Ош ш., Ленин к., 331, каб.135., тел.: 7.20.61

Издательская Центр

БИБЛИОТЕКА
Омского государственно
университета
ИНВ № 180 сои

894724