

**Ўзбекистан Республикасы Жоқары ҳәм орта арнаўлы  
билим министрлиги**

**Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик  
университети**

**Физика-математика факультети**

**Улыўма физика кафедрасы**

**Б.А.Абдикамалов**

# **КВАНТЛЫҚ МЕХАНИКА**

**Физика факультетиниң студентлери ушын лекциялар конспекти**

**Нөкис 2012**

## Мазмуну

I бөлім. Квантлық механика және оның илимдегі тұтқан орны.

I бап. Квантлық механиканың тейкарғы орны.

1-1. Қысқаша кирису.

1-2. Хал.

1-3. Суперпозиция принципі.

1-4. Пси-функцияның физикалық мәнісі.

1-5. Шредингер теңлемесі.

1-6. Итималлық ағысының тығызлығы.

II бап. Квантлық механиканың математикалық аппараты.

1-7. Тейкарғы постулатлар.

1-8. Сызықты операторлар.

1-9. Операторларды матрицалық формада көрсетіу.

1-10. Операторлар алгебрасы.

1-11. Анықсызлық қатнастары.

1-12. Үзліксіз спектр.

III бап. Физикалық шамалардың меншикли мәніслері және меншикли функциялары.

1-13. Физикалық шамалардың операторлары.

1-14. Физикалық шамалардың операторларының коммутациясының қағыйдалары.

1-15. Координата және импульс операторларының меншикли функциялары.

II бөлім. Квантлық физиканың тейкарлары.

2-1-1. Жыллылық нурланыуы ызамлары.

2-1-2. Нурланыудың квантлық теориясы.

2-1-3. Фотон газы және оның қасиетлері.

2-1-4. Квантлық оптика.

2-1-5. Жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализмі.

2-2-1. Де Бройль гипотезасы.

2-2-2. Де Бройль гипотезасын экспериментте тастыйықлау.

2-2-3. Анықсызлық қатнастары.

2-2-4. Микробөлекшелерді затлардың структурасын изертлеу үшін қолланыу.

2-3-1. Толқын функциясы.

2-3-2. Шредингер теңлемесі.

2-3-3. Итималлықлар ағысының тығызлығы векторы.

2-3-4. Физикалық шамаларды операторлардың жәрдемінде беріу.

2-3-5. Операторлардың меншикли функциялары және меншикли мәніслері.

2-3-6. Квантлық механикадағы өлшеулер проблемасы.

2-3-7. Хәр қыйлы физикалық шамаларды бир уақытта өлшеу.

2-3-8. Квантлық механиканың матрицалық формасы.

2-4-1. Стационар халлар үшін Шредингер теңлемесі.

2-4-2. Өткермейтуғын дийуалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше.

2-4-3. Потенциал табалдырық және дийуал областындағы бөлекшениң қозғалысы.

2-4-4. Шеклі тереңлікке ийе потенциал шуқырдағы бөлекше.

2-4-5. Квантлық гармоникалық осциллятор.

2-5-1. Атомлардың квантлық қасиетлері.

2-5-2. Водород атомының Бор теориясы.

2-5-3. Водород тәризли атомлардың квантлық механикадағы

тәрийиплениўи.

2-5-4. Квантлық санлар хәм олардың физикалық мәниси.

2-5-5. Штерн хәм Герлах тәжирийбеси. Электронның спини ҳаққындағы гипотеза.

2-6-1. Шредингер теңлемесин жуўық түрде шешиў усыллары.

III бөлим. Паули теориясы.

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

3-2. Сфералық координаталардағы қозғалыс муғдарының толық муғдарының операторлары.

3-3. Спинге ийе шар функциялары.

3-4. Спинге ийе шар функцияларының базы бир қәсийетлери.

3-5. Паулидің толқын теңлемеси.

IV бөлим. Квантлық механиканың көп электронлық мәселеси хәм атомның қурылысы.

4-1. Толқын функциясының симметриялық қәсийетлери.

4-2. Энергия операторы хәм оның симметриясы.

4-3. Келисилген майдан усылы.

V бөлим. Дирак теориясы.

5-1. Квантлық механика хәм салыстырмалық теориясы.

5-2. Классикалық қозғалыс теңлемеси.

5-3. Толқын теңлемесин келтирип шығарыў.

5-4. Дирак матрицалары.

5-5. Еркин электрон ушын Дирак теңлемеси.

5-6. Лоренц түрлендириўлери.

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

5-8. Тоқ векторы.

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

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

5-11. Электронның кинетикалық энергиясы.

VI бөлим. Релятивистлик квантлық механика.

6-1. Скаляр релятивистлик Клейн-Гордон теңлемеси.

6-2. Дирак теңлемеси.

6-3. Дирак электронының орайлық күшлер майданындағы қозғалысы.

6-4. Дирак теңлемесиниң толық шешими.

Мәселелер хәм олардың шешимлери.

## I бөлім

# Квантлық механика хәм оның илимдеги тутқан орны

## I бап. Квантлық механиканың тийкарғы орны

### 1-1. Қысқаша кирисиў

Микродүньяда табылған ызымлар макроскопиялық объектлер бағынатуғын ызымлардан, яғный классикалық физиканың ызымларынан түпкиликли түрде айрылады. Биз сезиў органларымыз жәрдемінде тек макроскопиялық объектлерди бақлай аламыз. Сонлықтан биз усындай денелердиң көргизбели образын өзимиздиң санамызда сәўлелендире аламыз. Бул образларды микрообъектлерге алып келиў (мысалы электронды микроскопиялық шарик түринде көз алдымызға келтириў) пүткиллей дурыс емес хәм хәтте зыянлы. Сонлықтан микродүньяның механикасын (квантлық механиканы) үйрениўге кирискенде үйренилетуғын объектлер менен процесслердиң көргизбели образларын дәретиўге тырысыўлардан дәрхәл бас тартыў керек болады.

«Түсиниў» сөзи күнделикли турмыста өзинде объекттиң ямаса процесстиң көргизбели образын дәретиў дегенди аңлатады. Бирақ квантлық механика тап сондай етип «түсиниўге» болмайды. Усы жағдайға байланыслы квантлық теорияның дәретиўшилердиң бири Дирак былай деп жазды: «... физика илиминиң бас мәселеси бизди көргизбели картиналар менен тәмийинлеў емес, ал қубылысларды басқаратуғын ызымларды ашыў хәм бул ызымларды жаңа ызымларды ашыў ушын қолланыў болып табылады... Атомлық қубылыслар жағдайында әдеттеги мәнисте көргизбели картина бар деп күтиўге болмайды. Бул жерде «көргизбели» деп айтқанда тийкарынан классикалық принциплерде хәрекет ететуғын модель түсиниледи. Бирақ «картина» сөзиниң мәнисин кеңейтиўге болады. Буның ушын бул сөзге өз-ара келисиўшилик айқын көринип туратуғындай етип тийкарғы ызымларды қараўдың қәлеген усылын киргизиў керек. Бундай кең мәнисте атомлық қубылыслардың картинасы квантлық теорияның ызымларын үйрениўдиң барысында кем-кемнен ашыла береді<sup>1</sup>».

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

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

<sup>1</sup> П.А.М.Дирак. Принципы квантовой механики. Физматгиз. 1960. стр. 26.



## 1-2. Ғал

Ғал түсиниги квантлық механикадағы ең тийкарғы хәм басланғыш түсиниклердің бири болып табылады. Сонлықтан «ғал» түсинигине қатаң түрдеги дәл анықлама бериў қыйын. Дирак «ғал» түсинигин былайынша киргизеди: «...Қәсийетлери бизлерге белгили болған бөлекшелерден ямаса денелерден туратуғын базы бир атомлық системаны қараймыз (масса, инерция моменти хәм тағы басқалар). Бул бөлекшелер арасындағы тәсир етисиў күшлери де белгили болсын. Бул күшлердің тәсир етиў нызамларына сәйкес хәр қыйлы қозғалыслардың жүзеге келиўи мүмкин. Бундай қозғалыслардың хәр бири системаның ғалы деп аталады».

Ғал ушын Дирак берген анықламаны басланғыш анықлама сыпатында қабыл етемиз. «Ғал» термининиң мазмуны квантлық механиканың мазмунын баянлаўдың барысында толығы менен ашылады.

Микросистеманың ғалы ҳаққындағы информацияларды өлшеўлер өткерийўдің нәтийжесинде алады. Бундай жағдайда микросистемаға макроскопиялық система болған әсбап пенен тәсир етеди. Сонлықтан микросистемалар үстинде исленген өлшеў нәтийжелер мәжбүрий түрде макроскопиялық денелер ушын ислеп шығылған терминлерде аңлатылады (координата, импульс, импульс моменти, энергия хәм тағы басқалар). Бул характеристикалар динамикалық өзгериўшилер деп аталады.

Микробөлекшелердің қәсийетлери макроскопиялық денелердің қәсийетлеринен түп-тамырынан айрылады. Сонлықтан микробөлекшелер ушын макроденелер ушын жазылатуғын динамикалық өзгериўшилерди жазыўға болмайды. Бирақ әсбап пенен (ямаса тәбийий дене менен) тәсир етисиўдің барысында микробөлекше жоқарыда айтылып өтилген динамикалық өзгериўшилердің айырымлары менен характерленетуғындай қәсийет көрсетеди. Микробөлекшелердің қәсийетлериниң өзлерине тән екенлигин сол жағдай көрсетеди, өлшеўлердің барысында барлық өзгериўшилердің хәммеси ушын анық мәнислер алынбайды. Мысал электронның сондай ғаллары болады, бундай ғалларда турған электрон макроденелер менен тәсирлесийўдің барысында (өлшеўлердің барысында)  $p_x$  импульсине ийе екенлигин көрсетеди. Соның менен бирге экспериментлер неше рет қайталанса да усындай ғалда турған электрон ушын бирдей  $p_x$  шамалары алынады. Бирақ егер биз сол ғалда турған электронның координаталарын анықлағымыз келсе, онда өлшенип атырған координата ушын бирдей итималлық пенен  $-\infty$  тен  $+\infty$  ке шекемги мәнислер алынады. Электронның бундай ғалы ҳаққында айтқанда электронның анық  $p_x$  динамикалық өзгериўшиге ийе болатуғын ғалы ҳаққында гәп етиледі.

Өлшеўлердің барысында (яғный макроденелер менен тәсирлескенде) электрон  $x$  координатасының анық мәниске ийе болатуғын ғаллардың бар болыўының мүмкин екенлиги табылады. Бундай ғалларда  $p_x$  импульсиниң мәниси пүткиллей анық емес болып шығады. Бул жағдайда электрон ушын координатаның анық  $x$  мәниси болатуғын ғал бар деп айтады.

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда координата  $x$  та, импульс  $p_x$  та бир ўақытта анық мәнислерге ийе болмайтуғын ғаллар да бар екенлигин атап өтемиз. Бундай жағдайда электронның үстинен жүргизилген көп санлы өлшеўлердің барысында  $x$  ушын базы бир  $\Delta x$  интервалының ишиндеги, ал импульс  $p_x$  ушын да базы бир  $\Delta p_x$  интервалының ишиндеги мәнислер алынады. Усы  $\Delta x$  хәм  $\Delta p_x$  шамалары бир бири менен Гейзенберг анықсызлық қатнаслары арқалы байланысқан:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2. \quad (1.2.1)$$

Анықсызлық қатнастары классикалық механиканың түсиниклерин микробөлекшелер ушын қандай дәрежеде пайдаланыўға болатуғынлығын, мысал ретинде микробөлекшелердің траекториялары ҳаққында қандай дәрежедеги дәлликте айтыўға болатуғынлығын көрсетеди. Траектория бойынша қозғалыс ҳәр бир ўақыт моментинде координаталар менен тезликтин анық мәнислери менен характерленеди. (1.2.1)-аңлатпаны

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \hbar/2m$$

түринде көширип жазсақ бөлекшениң массасы қанша көп болса, оның координаталары менен тезликлериндеги анықсызлықтың соншама киши болатуғынлығын, бөлекшениң траекториясы түсинигиниң жоқары дәлликте қолланыўға болатуғынлығын көрсетеди. Ҳәтте егер өлшеми 1 мкм болған микробөлекшени алсақ, онда оның массасы атомның массасынан шама менен  $10^{12}$  есе үлкен болады. Бундай бөлекше ушын  $x$  пенен  $v_x$  шамаларындағы анықсызлықтың мәниси бул шамаларды өлшеўдин дәллиги шеклеринде болады. Сонлықтан оның қозғалысын траектория бойынша қозғалыстан айырыўға болмайды.

Солай етип бөлекшениң массасы қаншама үлкен болса, онда оның қозғалысы ушын классикалық механиканың нызамлары менен түсиниклерин соншама үлкен дәлликте қолланыўға болады екен. Бул тастыйықлаў сәйкеслик принципи деп аталатуғын улыўмалық тастыйықлаўдың дара жағдайы болып табылады. Бул принцип бойынша  $\hbar \rightarrow 0$  шеклеринде квантлық механиканың нызамлары қатнастары классикалық механиканың сәйкес нызамлары менен қатнастарына өтеди. Бул жағдай бойынша Планк турақлысына пропорционал болған эффектлердин тутқан орны қаншама киши болса, қарап атырылған системаның қәсийетлериниң классикалық қәсийетлерге соншама жақын болатуғынлығын көрсетеди.

Квантлық ҳәм классикалық нызамлар арасындағы көпирдин орнын ийелеў менен бир қатарда сәйкеслик принципи классикалық шамалардың квантлық механикалық аналогларын табыўға мүмкиншилик береді.

Биз қарап атырған микросистема жайласқан ҳалдың характеристикасы ушын бул ҳалда анық мәнислерге ийе болатуғын динамикалық өзгериўшилерди сайлап алыў тәбийий. Берилген ҳалда анық мәнислерге ийе болатуғын динамикалық өзгериўшилердин жыйнағы толық жыйнақ (орыс тилинде «полный набор» деп айтылады) деп аталады. Ҳәр қыйлы ҳаллар ушын толық жыйнақлар ҳәр қыйлы болады. Дара жағдайда толық жыйнақ тек бир динамикалық өзгериўшиден тура алады. Бундай ҳалда толық жыйнақты пайда етиўши динамикалық өзгериўшилердин биреўинен басқасының барлығы да анық емес болып шығады.

Динамикалық өзгериўшилер ҳаққында улыўма айтқанда (яғный конкрет түрде емес ҳәм  $x$ ,  $p_x$ ,  $E$  ҳәм басқалардың айқын түрде қайсысы екенлиги айтылмаған жағдайларда) биз оларды әдетте  $Q$ , айырым жағдайларда  $R$ ,  $A$ ,  $B$  ҳәм басқа да ҳәриплердин жәрдемінде белгилеймиз.

Берилген динамикалық өзгериўши қабыл ете алатуғын санлық мәнислердин жыйнағын оның спектри деп атаймыз. Егер динамикалық өзгериўшиниң мәниси үзликсиз избе-изликти пайда ететуғын болса, онда бул шама мәнислердин үзликсиз (ямаса тутас) спектрине ийе деп айтады. Егер руқсат етилген санлы мәнислер дискрет избе-изликти пайда ететуғын болса, онда бундай шама мәнислердин дискрет спектрине ийе болады деп есаплаймыз. Улыўма жағдайда динамикалық өзгериўшиниң мәнислериниң спектри өз ишине үзликсиз де, дискрет те

участкаларды ала алады.

$Q$  өзгеріуішисинің хәр қыйлы мәнислерин биз  $q$  символы арқалы белгилеймиз. Егер берілген мәнис дискрет спектрге тийисли болса, онда биз мәнистің номерин аңлататуғын төменге индекс қоямыз, яғный  $q_n$  түрінде жазамыз. Индексстің жоқлығы  $q$  шамасының берілген мәнисинің үзликсиз спектрге тийисли екенлигин аңғартады.

Микродүньяның ызыамларының макроскопиялық денелерди изертлегенде бақланатуғын ызыамлықтардан түп-тамырынан айрылатуғынлығы жоқарыда атап өтилди. Бул айырма мынадай жағдайда анық көринеди: квантлық механикада халлар хәм динамикалық өзгеріуішлерди тәрийиплеуі ушын классикалық физикада пайдаланылатуғын математикалық шамалардан басқа тәбиятқа ийе математикалық шамалар қолланылады. Хәр бир динамикалық өзгеріуіш ушын базы бир сызықты оператор жазылады. Системаның халы улыўма айтқанда базы бир  $\psi$  комплексли өзгеріуіш менен тәрийипленеди. Бул комплексли өзгеріуішини толқын функциясы ямаса пси-функция ямаса итималлықлар амплитудасы деп атайды. Биз көбинесе пси-функция термининен пайдаланамыз. Халдың характеристикасы ушын Дирак айрықша түрдеги комплексли векторды усынды. Оны хал векторы деп атайды.

Хеш бир пси-функцияны сәйкеслендириуіге болмайтуғын халлардың да болатуғынлығын аңғарамыз. Бундай халларды аралас халлар, ал пси-функциялар менен тәрийипленетуғын халларды таза халлар деп атаймыз. Биз тек таза халларды қараймыз. Сонлықтан «таза» сөзин биз айтпаймыз хәм халдың халлары хаққында гәп етемиз.

### 1-3. Суперпозиция принципи

Суперпозиция принципи квантлық механиканың тийкарғы принципи болып табылады. Бул принциптің мәниси төмендегилерден ибарат: Мейли базы бир система базы бир  $Q$  шамасы  $q_1$  мәнисине ийе болатуғын  $\psi_1$  халында ямаса сол  $Q$  шамасы  $q_2$  мәниске ийе болатуғын  $\psi_2$  халында да тура алатуғын болсын. Бундай жағдайда  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$  ( $c_1$  менен  $c_2$  арқалы ықтыярлы комплексли санлар белгиленген) халы да бар болып, бул халда  $Q$  шамасын өлшенгенде  $q_1$  ямаса  $q_2$  мәниси алынады.

Суперпозиция принципинен  $Q$  шамасы анық мәнислерге ийе болатуғын  $\psi_1$  хәм  $\psi_2$  халларын қосқанда сол  $Q$  шамасы пүткиллей анық емес болып қалатуғын жаңа  $\psi$  халының пайда болатуғынлығы келип шығады.

Тап усындай нәтийже еки халдан көп халларды қосқанда да орын алады. Егер  $Q$  шамасы анық мәнислерге ийе болатуғын  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$  халлары бар болатуғын болса, онда

$$\psi = \sum_{m=1}^n c_m \psi_m \quad (1.3.1)$$

толқын функциясы (пси-функция,  $c_n$  арқалы ықтыярлы комплексли сан белгиленген) менен тәрийипленетуғын да хал болып, бул халда  $Q$  шамасы  $q_1, q_2, \dots, q_n$  мәнислеринің бирине тең болады.

Мынадай кери тастыйықлау да дурыс: Квантлық системаны қәлеген  $\psi$  халы жоқарыда айтылған  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$  халларының қосындысы (суперпозициясы) деп көрсетилиуі мүмкин. Бул тастыйықлау да суперпозиция принципинің формулировкасы болып хызмет ете алады.

(1.3.1)-теңлеме менен тәрийипленетуғын системаның қәсийетлери векторлардың қәсийетлерине уқсас. Хақыйқатында да бирдей тәбиятқа ийе  $a_1, a_2, \dots$ ,

$a_n$  векторларын хақықый  $c_1, c_2, \dots, c_n$  санларына көбейтсек хәм буннан кейин оларды қоссақ сондай тәбиятқа ийе  $a = \sum c_m a_m$  жаңа векторын аламыз. Бундай аналогия тийкарында Дирак системаның халлары ушын жазылатуғын шамаларды бир бири менен салыстырыў ушын айрықша кеңисликтеги векторлар түринде қараўды усынды.

Базы бир  $\psi_m$  халын өзиниң үстине өзін қойсақ, яғный  $\psi_1 = \psi_2 = \psi_m$  деп болжасақ, онда (1.3.1)-аңлатпаға сәйкес

$$\psi = c_1 \psi_m + c_2 \psi_m = (c_1 + c_2) \psi_m = c \psi_m$$

функциясы менен тәрийипленетуғын халды аламыз. Бул хал да дәслепки  $\psi_m$  халындай хал болады. Бундай халда  $Q$  шамасын өлшегенимизде  $q_m$  нәтийжесин аламыз. Алынған халдың дәслепки халдан айырмасы жоқ деп болжаў тәбийий. Тек ғана  $c = c_1 + c_2 = 0$  болған жағдай бул анықламаға кирмейди. Бул жағдайда  $q_m$  шамасын  $c$  ға көбейткен менен ҳеш қандай хал алынбайды ( $\psi = 0$  ҳеш қандай халдың жоқ екенлигин билдиреди).

Жоқарыда айтылғанларға сәйкес  $\psi$  хәм  $c\psi$  ( $c$  арқалы ықтыярлы нолге тең емес комплексли сан белгиленген) функциялары менен тәрийипленетуғын халларды бир бири менен бирдей деп қабыл етемиз. Егер халларды векторлардың жәрдемінде тәрийиплейтуғын болсақ, онда соңғы тастыйықлаўдан халдың вектордың бағыты менен ғана тәрийипленетуғынлығын, ал вектордың узынлығының ҳеш қандай әхмийетиниң жоқ екенлигин көремиз.

Суперпозиция принципиниң классикалық физикада да бар екенлигин атап өтемиз. Тардың ықтыярлы тербелисин жийилиги тийкарғы жийиликтен пүтин сан есе өзгешеликке ийе гармоникалық тербелислердиң қосындысы (суперпозициясы) деп қараўға болады. Бул аналогия дәслепки ўақытлары квантлық механикаға толқын механикасы, ал квантмеханикалық системаның халы ушын жазылатуғын  $\psi$  функциясына толқын функциясы деп атама бериў ушын себеп болды. Бирақ жоқарыда атап өтилген аналогияның алысқа бармайтуғынлығы атап өтиў керек. Квантлық механикадағы суперпозиция менен классикалық суперпозиция арасында оғада терең айырма бар. Мысалы тербелиўши тардың халларының суперпозициясы тербелистиң басқа амплитудаға ийе халына алып келеди. Демек нәтийжеде жүзеге келген тербелис дәслепки тербелистен айырмаға ийе болады. Квантлық механикада болса халлардың суперпозициясы жаңа халдың пайда болыўына алып келмейди. Квантлық халда классикалық тербелислердиң амплитудасына сәйкес келетуғын характеристика пүткиллей жоқ.

#### § 4. Пси-функцияның физикалық мәниси

Координаталық көрсетиў деп аталатуғын көрсетиўде пси-функция бөлекшелер системасын пайда етиўши бөлекшелердиң координаталарының хәм ўақыттың функциясы болып табылады. Бир бөлекшеден туратуғын системаны қараймыз. Бул жағдайда  $\psi = \psi(x, y, z, t)$ . Пси-функцияның модулиниң квадраты  $|\psi|^2 = \psi^* \psi$  ( $\psi^*$  арқалы  $\psi$  ге комплексли түйинлес функция аңлатылған) кеңисликтин хәр қыйлы ноқатларында бөлекшени табыўдың итималлығына тең. Егер  $|\psi(x, y, z, t)|^2$  шамасын  $x, y, z$  ноқатында алынған көлем элементи  $dV = dx dy dz$  шамасына көбейтсек, онда бөлекшениң  $t$  ўақыт моментинде  $dV$  көлеминде табыўдың итималлығы  $dP$  шамасын аламыз:

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^* \psi dV. \quad (1.4.1)$$

Тап сол сыяқлы еки бөлекшеден туратуғын система ушын жазылған

$$dP = |\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, t)|^2 dV_1 dV_2$$

шамасы система үстінде  $t$  ўақыт моментінде жүргизилген өлшеўлерде 1-бөлекшениң  $dV_1$  көлемінде, 2-бөлекшениң  $dV_2$  көлемінде табылыўының итималлығына тең болады. Бул формулада  $x_1, y_1, z_1$  арқалы биринши бөлекшениң координаталар, ал  $x_2, y_2, z_2$  арқалы 2-бөлекшениң координаталары белгиленген.

Бөлекшениң қандай да бир орында жайласқаны анық, яғный сондай орында жайласқанлығының итималлығы 1 ге тең болғанлықтан (1.4.1) итималлықларының барлық кеңислик бойынша қосындысы 1 ге тең болыўы керек. Солай етип бизлер пси-функциясының нормировка шәртине келемиз

$$\int |\psi|^2 dV = 1. \quad (1.4.2)$$

Алдыңғы параграфта биз пси-функцияны нолге тең емес ықтыярлы комплексли санға көбейтиўдиң мүмкин екенлигин айтқан едик. Демек интеграл шекли мәниске ийе болса (1.4.2) шәртиниң орынланыўы керек. Бул шәртти қанаатландыратуғын пси-функцияны нормировкаланған пси-функция деп атаймыз. Демек нормировкаланған пси-функция фазалық көбейтиўши деп аталатуғын  $e^{i\alpha}$  көбейтиўшиси дәллигине шекем дәлликте анықланған екен ( $\alpha$  арқалы ықтыярлы ҳақыйқый сан белгиленген).

Базы бир жағдайларда (1.4.2)-интеграл тарқалыўшы интеграл (яғный шексизликке айланады) болады ҳәм сонлықтан (1.4.2)-шәртке сәйкес пси-функцияны нормировкалаўдың мүмкиншилиги болмайды. Бундай жағдайда  $|\psi|^2$  шамасын итималлықтың тығызлығы деп айта алмаймыз. Бирақ бул жағдайда да  $|\psi|^2$  шамаларының мәнислериниң кеңисликтің ҳәр қыйлы ноқатларындағы қатнаслары координаталардың сәйкес мәнислериниң салыстырмалы итималлығын анықлайды.

Бөлекшениң ҳәр қыйлы орынларда турыўының итималлықларын билиў арқалы оның координаталарының орташа мәнислерин есаплаўға болады. Мысалы, бөлекшениң радиус-векторы болған  $\langle \mathbf{r} \rangle$  шамасының орташа мәниси

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} dP = \int \mathbf{r} |\psi|^2 dV = \int \psi^* \mathbf{r} \psi dV$$

аңлатпасының жәрдемінде анықланады<sup>2</sup> (формулаға симметриялық түр бериў ушын биз  $\mathbf{r}$  шамасын  $\psi^* \psi$  көбеймесиниң ишине алып жаздық). Бул векторлық көбейме үш скаляр көбеймеге эквивалентли:

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dV, \langle y \rangle = \int \psi^* y \psi dV, \langle z \rangle = \int \psi^* z \psi dV. \quad (1.4.3)$$

Тап сондай жоллар менен координаталардың қәлеген функциясының орташа мәнисин табыў мүмкин. Мысалы бөлекшениң потенциал энергиясының орташа мәниси

<sup>2</sup> Орташа мәнисти белгилеў ушын шаманың символының үстине «-» белгиси қойылады (мысалы  $\vec{r}$ ) ямаса  $\langle \mathbf{r} \rangle$  түриндеги сынық қаўсырмаға алады. Соңғы усыл көбирек пайдаланылып атыр.

$$\langle U \rangle = \int \psi^* U(x, y, z) \psi dV. \quad (1.4.4)$$

Соңғы аңлатпаның мәнісі мынадай: Мейли бөлекшениң потенциал энергиясының шамасын өлшеу көп рет қайталанатуғын хәм усы өлшеулердің барлығында да бөлекше бир  $\psi$  халында турған болсын. Бундай жағдайда өлшеулердің санының артыуының барысында алынған нәтижелердің орташа мәнісі (1.4.4) шамасына умтылады.

Солай етип бөлекшениң пси-функциясын биле отырып өлшеулердің барысында координаталардың қәлеген функциясының хәр қыйлы мәніслеринің алынуы итималлығын хәм бул өлшеулерде алынатуғын орташа мәністи есаплауды үйрендик. Бирақ бөлекшелердің координаталарының функциялары болмаған физикалық шамалардың (мысалы импульсти, импульс моментин, энергияны) қалай анықлаудың кереклиги хәзирше белгисиз болып қалмақта. Хәр қыйлы күш майданда жайласқан бөлекшениң пси-функциясы хәққындағы мәселе де еле анықланған жоқ. Усындай мәселелерди қарау менен шуғылланыуды енди баслаймыз.

### 1-5. Шредингер теңлемеси

$U = U(x, y, z, t)$  потенциалы менен тәрийипленетуғын күш майданында жайласқан бөлекшениң пси-функциясын Шредингер тәрәпинен ашылған дара тууындылы дифференциал теңлемени шешиу менен табыуға болады

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Бул теңлемени жыйнақлы түрде былайынша жазамыз

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (1.5.1)$$

Бул теңлемеді  $\nabla^2 = \Delta$  арқалы Лаплас операторы,  $m$  арқалы бөлекшениң массасы, ал  $\hbar$  арқалы  $2\pi$  шамасына бөлінген Планк турақлысы белгиленген.

Бул теңлемениң ашылыуына қандай көз-қараслардың алып келгенлиги хәққындағы мәселеге итибар бермей, (1.5.1)-теңлемени ең тийкарғы басланғыш аңлатпа, теңлемени шешиудің барысында алынған нәтижелердің экспериментлердің нәтижелери менен сәйкес келиуинің себебинен теңлемениң дурыслығына гүмәнның хеш қандай жоқ екенлигин атап өтемиз<sup>3</sup>.

Потенциал  $U$  өз ишине уақыт  $t$  ны анық алмайтуғын жағдай айрықша қызықтырады. Бундай жағдайда  $U$  потенциал майдан мәнісине ийе. Бундай шәрт орын алғанда (1.5.1)-теңлемениң шешими эпийайыласады. Себеби бул жағдайда пси-функция еки көбейтиушиге ажыралады<sup>4</sup>. Олардың бири тек бөлекшелердің координаталарынан ғәрезли, ал екіншиси тек уақыттан ғәрезли болады. Бул тастыйықлауды тексерип көриу ушын пси-функцияны

<sup>3</sup> Бундай көз-қараслар хәққында улыуа физика бойынша көп қолланбаларда оқыуға болады. Мысалы И.В.Савельев. Курс общей физики. Т. III. § 65. «Наука». 1973.

<sup>4</sup> Гәп дара шешимлер хәққында болып атыр.  $\sum c_n \varphi_n(x, y, z) \cdot f_n(t)$  улыуа шешиминің биреуи тек координаталардан, екіншиси тек уақыттан ғәрезли болған еки көбейтиуши түрінде берилиуи мүмкин емес.

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) \cdot f(t)$$

түрінде жазамыз хәм бул аңлатпаны (1.5.1)-теңлемеге қоямыз.  $\nabla^2$  операторының тек  $\varphi$  көбейтiушисине тәсир ететуғынлығын, ал  $\partial f / \partial t = df / dt$  екенлигин есапқа алып

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + U \varphi f = i \hbar \varphi \frac{df}{dt}$$

аңлатпасын аламыз. Бул теңлемениң еки тәрәпин де  $\varphi f$  ке бөлсек

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + U \varphi}{\varphi} = \frac{i \hbar}{f} \frac{df}{dt}$$

аңлатпасына келемиз. Бул теңлемениң шеп тәрәпи тек бөлекшениң координаталарына, ал оң тәрәпи тек ўақытқа ийе. Хәр қыйлы болған ғәрезсиз өзгериўшилердиң еки функциясы усы функциялар тек турақлы мәниске ийе болған жағдайда ғана өз-ара тең болады. Бул турақлы шаманы  $E$  арқалы белгилеймиз. Бундай жағдайда биз еки дифференциал теңлемеге келемиз

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + U \varphi = E \varphi, \quad (1.5.3)$$

$$\frac{i \hbar}{f} \frac{df}{dt} = E. \quad (1.5.4)$$

Екинши теңлемени былайынша жаза аламыз:

$$\frac{df}{dt} + \frac{i}{\hbar} E f = 0.$$

Биз турақлы коэффициентлерге ийе сызықлы бир текли теңлемеге келдик. Бул теңлемени  $f = e^{\lambda t}$  аңлатпасын қойыў жолы менен шешсек

$$f = e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)Et} \quad (1.5.5)$$

түріндеги функцияны аламыз (улыўмалық шешимде биз  $C$  көбейтiушисин жазбадық, себеби пси-функция усындай көбейтiуши дәллигинде анықланған).

Енди (1.5.3)-теңлемеге итибар беремиз. Бул теңлемеден  $E$  арқалы белгиленген турақлы шаманың мәнисин анықлаў мүмкин. (1.5.3)-теңлемениң барлық ағзаларының бирдей бирликке ийе болыўы талабынан  $E$  шамасының да  $U$  шамасының бирлигиндей бирликке, яғный энергияның бирлигине ийе болатуғынлығы келип шығады. Потенциал күш майданындағы қозғалыста системаның тек толық энергиясы ғана турақлы болып қалады. Сонлықтан  $E$  шамасын бөлекшениң толық энергиясына теңлестиремиз.

Солай етип бөлекше потенциаллық күш майданында қозғалғанда пси-функция мына түрге ийе болады екен

$$\psi(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z) \cdot e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)Et}. \quad (1.5.6)$$

Бул аңлатпада  $E$  арқалы бөлекшениң толық энергиясы белгиленген. Буннан кеңісликтің хәр қыйлы ноқатларында бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы  $|\psi|^2 = |\varphi|^2$  шамасына тең хәм ўақыттан ғәрезсиз екен. Сонлықтан (1.5.6) түрдеги пси-функциялар менен тәрийипленетуғын халлар стационар халлар деп аталады. Стационар халлар ушын пси-функцияларды табыў мәселеси  $\varphi(x,y,z)$  функциялары табыў мәселесине алып келинеди. Усы жағдайға байланыссыз бул функцияны стационар халдың пси-функциясы деп атайды хәм  $\psi$  хәрипиниң жәрдеминде белгилейди. (1.5.3)-теңлемедегі  $\varphi$  хәрипин  $\psi$  хәрипи менен алмастырып стационар халлар ушын Шредингер теңлемеси деп аталатуғын теңлемеге келемиз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi. \quad (1.5.7)$$

Бул теңлемени

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \quad (1.5.8)$$

түрінде жийи жазады. (1.5.8)-теңлемеді  $U = 0$  деп есаплап еркин бөлекше ушын Шредингер теңлемесин аламыз:

$$\nabla^2\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0. \quad (1.5.9)$$

Бул теңлемени

$$\psi = e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (1.5.10)$$

функциясының қанаатландыратуғынлығын аңсат тексерип көриўге болады. Бул аңлатпада

$$\mathbf{k}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \quad (1.5.11)$$

хәм  $\mathbf{p}$  арқалы бөлекшениң классикалық импульси белгиленген.

(1.5.10)-аңлатпадағы  $\mathbf{k}$  ны  $\mathbf{p}/\hbar$  пенен алмастырып хәм алынған аңлатпаны (1.5.6) ға қойсақ еркин бөлекшениң пси-функциясын аламыз

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)(Et \pm \mathbf{p}\mathbf{r})}. \quad (1.5.12)$$

Тап усындай функция (дурысырағы оның хақықый бөлими) жийилиги  $\omega = E/\hbar$  хәм толқын векторы  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$  болған тегис толқынды тәрийиплейди. Бул сәйкеслик микробөлекшелердің корпускулалық-толқынлық тәбиятының сәўлеси болып табылады. Бундай корпускулалық-толқынлық тәбияттың дифракция бойынша экспериментлерде көринетуғынлығы белгили. Мысалы кристал арқалы өткен электронлар дәстеси фотопластинка менен тәсирлескенде рентген нурлары кристаллар арқалы өткенде пайда болатуғын дифракциялық сүўреттей дифракциялық сүўрет пайда болады.

(1.5.10)-аңлатпадағы жоқарғы плюс хәм (1.5.12)-аңлатпадағы минус  $\mathbf{k}$  бағытындағы, ал төменги белги [(1.5.10) дағы плюс хәм (1.5.12) деги минус)] оған



қарама-қарсы бағытта тарқалатуғын жуығырыушы толқынға сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз. Сонлықтан стационар халларды қарағанымызда  $e^{ikx}$  түріндеги пси-функцияны  $x$  көшери бағытында оң тәрепке қарай жуыратуғын толқын, ал  $e^{-ikx}$  түріндеги толқын функциясын  $x$  көшери бағытында шеп тәрепке қарай жуыратуғын толқын түрінде трактовкалаймыз.

Анық мәниске ийе болған импульске ийе еркін бөлекше ушын Шредингер теңлемесиниң улыўма шешими (1.5.10) түріндеги еки толқынның суперпозициясы түрінде жазылады

$$\psi = C_1 e^{ikr} + C_2 e^{-ikr}. \quad (1.5.13)$$

$C_1 = C_2$  ямаса  $C_1 = -C_2$  теңликлери орынланатуғын жағдайларда (1.5.13)-функция сәйкес

$$\psi = A \cos kr \text{ ямаса } \psi = B \sin kr \quad (1.5.14)$$

түрінде жазылады. Бул функциялардың турғын толқынды тәрийиплейтуғыны өз-өзинен түсиникли.

$\Delta x$  интервалының ишинде жайласқан (локализацияланған) еркін бөлекшениң қозғалысын қараймыз (әпиұайылық ушын биз бир өлшемли мәселени қараймыз). Анықсызлық принципи бойынша бөлекшениң импульси  $\hbar/\Delta x$  шамасындағы анықсызлыққа ийе болады.

Суперпозиция принципине сәйкес бөлекшениң пси-функциясы импульсиниң мәнислери  $p_0 - \Delta p$  шамасынан  $p_0 + \Delta p$  шамасына шекемги (1.5.12)-түрдеги халлардың қосындысы сыпатында көрсетилиўи мүмкин:

$$\psi(x, t) = \int_{p_0 - \Delta p}^{p_0 + \Delta p} b(p) e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right)(Et - px)} dp.$$

$E$  шамасын (энергиясын)  $\omega = E/\hbar$  шамасы менен, ал  $p$  импульсин  $k = p/\hbar$  толқынлық сан менен алмастырып

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} c(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (1.5.15)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Биз толқын пакетин ямаса толқынлар группасын тәрийиплейтуғын аңлатпаға келдик.

$\omega$  жийилиги толқынлық сан  $k$  ның базы бир функциясы болып табылады:  $\omega = \omega(k)$ . Бул функцияны  $k_0$  ноқатының этирапында қатарға жаямыз. Қатардың биринши еки ағзасы менен шекленсек

$$\omega(k) = \omega_0 + (d\omega/dk)_0 (k - k_0) \quad (1.5.16)$$

аңлатпасын аламыз.

(1.5.15)-аңлатпадағы  $c(k)$  коэффиценти әстелик пенен өзгеретуғын функция деп есаплап оны интегралдың алдына шағарамыз ( $\Delta k$  шамасы киши деп есапланады). Усының менен бирге экспонентаның көрсеткишиндеги  $\omega$  шамасын оның (1.5.16)-мәниси менен алмастырамыз хәм жаңа  $\xi = k - k_0$  өзгериўшисин киргиземиз. Нәтийжеде

$$\psi(x, t) = c(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{i[-(\frac{d\omega}{dk})_0 t] \xi} d\xi$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпа аңсат интегралланады хәм соның нәтийжесинде биз

$$\psi(x, t) = 2c(k_0) \frac{\sin\left\{\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]\right\}}{x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} = A(x, t) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (1.5.17)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

$\Delta k$  шамасының киши екенлигине байланысly (1.5.17)-функциясын ўақытқа хәм кеңисликке байланысly әсте-ақырынлық пенен өзгеретуғын, амплитудасы  $A(x, t)$  шамасына тең дерлик монохромат толқынды тәрийиплейди деп есаплаўға болады. (1.5.17)-аңлатпаның бөлими нолге тең болған ноқатта амплитуданың максимумы жайласады. Солай етип толқын пакетиниң орайы (яғный амплитуда максималлық мәниске ийе ноқат)

$$x_{\text{pak}} = (d\omega/dk)_0 t \quad (1.5.18)$$

ноқатында жайласқан болады.

(1.5.18)-аңлатпадан толқын пакетиниң орайының

$$v_{\text{gr}} = (d\omega/dk)_0 \quad (1.5.19)$$

тезлиги менен қозғалатуғынлығын көрийўге болады. Бул аңлатпада  $v_{\text{gr}}$  арқалы группалық тезлик белгиленген.

Еркин бөлекшениң энергиясы ушын релятивистлик емес аңлатпа  $E = p^2/2m$  түрине ийе болады.  $E$  ни  $\hbar\omega$  менен, ал  $p$  ны  $\hbar k$  менен алмастырып  $\omega$  хәм  $k$  арасындағы байланысты табамыз:

$$\omega = \frac{k^2 \hbar}{2m}. \quad (1.5.20)$$

(1.5.20)-аңлатпаны  $k$  бойынша дифференциаллап еркин бөлекшениң қозғалысын тәрийиплейтуғын толқын пакетиниң тезлиги ушын  $\hbar k/m = p/m = v$  аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада  $v$  арқалы бөлекшениң тезлиги белгиленген. Солай етип толқын пакети де бөлекшениң тезлигиндей тезлик пенен қозғалады екен.

Толқын пакетиниң кеңлиги ҳаққында айтқанда амплитуда нолге айланатуғын пакеттиң орайына ең жақын жайласқан ноқатлар арасындағы қашықтықты түсинемиз. Бул ноқатларға (1.5.17)-аңлатпадағы синустың аргументи  $\pm\pi$  шамасына тең болған жағдайдағы  $x$  тың мәнислери сәйкес келеди (аргументтиң ноллик мәниси пакеттиң орайына сәйкес келеди). Демек пакеттиң шегараларының координаталары  $\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right] \Delta k = \pm\pi$  шәртин қанаатландырады. Буннан

$$x = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t \pm \frac{\pi}{\Delta k}. \quad (1.5.21)$$

(1.5.21)-аңлатпадан толқын пакетинің кеңлиги ушын турақлы  $\frac{2\pi}{\Delta k}$  шамасы алынады. Егер (1.5.20)-аңлатпадағы қатарға жайыұдың кейинги ағзаларын да есапқа алатуғын болсақ, онда толқын пакетинің кеңлиги ушын ўақытқа байланысly өзгеретуғын шама алынады. Толқын пакетинің кеңлиги үлкейетуғын болып шығады. Бул кеңисликтеги бөлекшениң локализациясының дәллигинің қозғалыстың барысында кемейетуғынлығын аңғартады.

## § 6. Итималлық ағысының тығызлығы

Кеңисликтің ҳәр қыйлы ноқатларында бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы түсиниги менен бир қатарда итималлық ағысының тығызлығы түсинигин де киргизиў мүмкин. Бул түсиникке келиў ушын шексиз үлкен көлем бойынша емес, ал базы бир шекли  $V$  көлеми бойынша алынған  $\int |\psi|^2 dV$  интегралын қараймыз. Бул интеграл бөлекшени берилген көлемде табыўдың итималлығын береді. Бул итималлықтан ўақыт бойынша туўынды аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \psi^* \psi dV = \int_V \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) dV. \quad (1.6.1)$$

(1.5.1)-теңлемеге сәйкес

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi + \frac{1}{i\hbar} U\psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi^* - \frac{1}{i\hbar} U\psi^*.$$

Екинши теңлеме биринши теңлемениң комплексли тўйинлеси болып табылады. Ол биринши теңлемеден  $\psi$  функциясын  $\psi^*$  функциясы менен,  $i$  ди  $-i$  менен армастырыў арқалы алынады. Бул қатнастардың жәрдеминде (1.6.1)-формуланың оң тәрәпин

$$-\int_V \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) dV + \frac{1}{i\hbar} \int_V (\psi^* U\psi - \psi U\psi^*) dV$$

түринде жаза аламыз. Бул интеграллардың екиншисинің нолге тең екенлиги анық. Биринши интегралды болса былайынша жазыў мүмкин:

$$-\int_V \frac{\hbar}{2mi} \nabla(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) dV. \quad (1.6.2)$$

Бул

$$\begin{aligned} \nabla(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) &= \nabla \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla^2 \psi^* - \nabla \psi \nabla \psi^* - \psi \nabla^2 \psi^* = \\ &= \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* \end{aligned}$$

түриндеги элементар есаплаўлардан келип шығады.

Солай етип (1.6.1)-формуланың оң тәрәпин (1.6.2)-аңлатпа менен алмастырыўға болады екен. Нәтийжеде

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \int_V \nabla \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right\} dV \quad (1.6.3)$$

формуласына ийе боламыз.

Остроградский-Гаусс теоремасының жәрдеминде бул қатнастың оң тәрепін  $V$  көлемін шегаралап турған бет  $S$  бойынша интеграл менен алмастырыу мүмкін. Бул

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \int_S \left\{ \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right\} dS \quad (1.6.4)$$

формуласына алып келеді (биз "-" белгисін формуланың шеп тәрепине өткіздік).

(1.6.4)-аңлатпадан мынадай жуымақ шығарыуға болады: оң тәрепте турған бет бойынша алынған интеграл бөлекшениң  $V$  көлемінде жайласуы итималлығының киширейіу тезлигін береді. Демек ол интеграл  $S$  бети арқалы өтетұғын итималлықтың ағысын береді деген сөз. Усы жағдайға байланысly

$$j = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (1.6.5)$$

шамасын итималлықтың ағысының тығызлығы деп қабыл етемиз.

(1.6.5) белгилеуін пайдаланып (1.6.3)-формуланы былайынша көшіріп жазамыз:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 \right\} dV = - \int_V \nabla j dV.$$

$V$  көлемін сайлап алыудың ықтыярлы екенлигине байланысly кеңисликтің хәр бир ноқатында

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \nabla j = 0 \quad (1.6.6)$$

шәртинің орынланыуы керек. Биз белгилі болған үзликсизлік теңлемесін алдық. Электродинамикадағы тап сол сыяқлы теңлеме  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla j = 0$  түрінде жазылады. Бул аңлатпада  $\rho$  арқалы зарядтың тығызлығы,  $j$  арқалы тоқтың тығызлығы белгиленген [1-томдағы (51.1)-формулаға қараңыз].

(1.6.6)-аңлатпаға  $j$  ушын жазылған (1.6.5)-аңлатпаны қойсақ пси-функцияның қанаатландырыуы зәрүр болған шәртти аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \frac{\hbar}{2mi} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0. \quad (1.6.7)$$

$|\psi|^2$  шамасының бөлекшени кеңисликтің хәр қыйлы ноқатларында табыудың итималлығы екенлигін еске түсиремиз. Буннан пси-функцияның төмендегидей шәрттерді қанаатландырыуының кереклиги келип шығады: 1) бир мәнислі, 2) үзликсиз, 3) шеклі (айырым жағдайларда айрықша ноқатларда бул шәрттің орынланыуы талап етилмейді). Усылар менен бир қатарда (1.6.7)-шәрттен пси функциясының үзликсиз хәм шеклі мәниске ийе (шеклі) биринши туұындыға ийе

болатуғынлығы келип шығады (бул жағдайда да айрықша нокатларда бул шәрттиң орынланбауы мүмкин).

Пси-функцияға қойылатуғын жоқарыда атап өтилген шәртлердиң жыйнағы стандарт шәртлер деп аталады.

## II бап

# КВАНТЛЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ АППАРАТЫ

## § 7. Тийкарғы постулатлар

Квантлық механиканың тийкарында бир неше постулатлар турады. Олардың ишине системаның қалына пси-функциясының, сондай-ақ Шредингер теңлемесиниң сәйкес келетуғынлығы да киреди. Бул параграфта биз және үш постулатты қарап шығамыз<sup>5</sup>.

Биринши постулат ҳәр бир физикалық шама ушын анық бир сызықлы оператор жазылады деп тастыйықлайды.

Оператор дегенимизде бир  $\varphi$  функциясына екинши бир  $f$  функцияны теңлестириў қағыйдасын түсинемиз. Символлық түрде ол былайынша жазылады:

$$f = \hat{Q}\varphi. \quad (1.7.1)$$

Операторларды жазғанда жоқарысына «қалпақ» («шапка») белгисин қоямыз. ( $\hat{Q}, \hat{A}, \hat{x}, \hat{p}$  хәм тағы басқалар түринде). Операторлардың базы бир түрлерине мысаллар келтиремиз:  $a, U(x,y,z), d/dx, \sqrt{\cdot}$ . Бул аңлатпаларда  $a = \text{const}$ . Демек (1.7.1)-аңлатпаға сәйкес  $a\varphi = \psi$ ,  $U(x,y,z)\psi = \varphi$ ,  $a, U(x,y,z)$  операторлары көбейтиў операторлары болып табылады.  $\sqrt{\cdot}$  операторы  $\psi(x)$  функциясына тәсир етип  $\sqrt{\psi(x)} = \varphi(x)$  функциясын береді.  $d/dx$  операторы  $\psi(x)$  функциясына тәсир етип  $\frac{d\psi(x)}{dx} = \varphi(x)$  функциясын береді.

**Интеграллық оператор:** Мейли  $\int K(x, \xi)\psi(\xi)d\xi = \varphi(x)$  болсын. Бул аңлатпада  $\int K(x, \xi)d\xi$  интеграллық оператор, ал  $K(x, \xi)$  функциясы интеграллық оператордың ядросы деп аталады.

**Матрицалық оператор.** Мейли  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$  шамасы матрица-бағана түринде

жазылған  $n$  – өлшемлі вектор болсын.  $n$  – өлшемлі кеңісликтеги  $\varphi_i = \sum_{k=1}^n a_{ik}\psi_k$  сызықлы түрлендириўин қараймыз. Оны  $A\psi = \varphi$  түринде жазыўымыз мүмкин. Бул аңлатпада  $A$  арқалы

$$A = \{a_{ik}\} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

формуласындағы  $a_{ik}$  коэффициентлеринен қуралған матрица болып табылады. Сонлықтан  $A$  матрицасын матрицалық оператор деп атаймыз. Бундай жағдайда

<sup>5</sup>Квантлық механиканың постулатлар системасын сайлап алыў толық бир мәнисли емес. Бәрше тәрепинен қабыл етилген улыўмалық постулатлар системасы жоқ.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n-1} & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn-1} & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n a_{1i} \psi_i \\ \sum_{i=1}^n a_{2i} \psi_i \\ \dots \\ \sum_{i=1}^n a_{ni} \psi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{bmatrix}$$

қатнасы орын алады.

Егер

$$\begin{aligned} \hat{Q}(\varphi_1 + \varphi_2 + \dots + \varphi_n) &= \hat{Q}\varphi_1 + \hat{Q}\varphi_2 + \dots + \hat{Q}\varphi_n \\ \hat{Q}(c\varphi) &= c\hat{Q}\varphi \end{aligned}$$

шәртлери орынланатуғын болса операторларды сызықты операторлар деп атаймыз. Бул аңлатпадағы  $c$  аркалы ықтыярлы константа белгиленген. Бул еки шәртти бириктирип, былайынша компактлы түрде жазыў мүмкин:

$$\hat{Q}\left(\sum_{m=1}^n c_m \varphi_m\right) = \sum_{m=1}^n c_m \hat{Q}\varphi_m. \quad (1.7.2)$$

(1.3.12)- хәм (1.7.2)-формуларды бир бири менен салыстырып көргенде сызықты оператордың суперпозиция принципи менен сәйкес келетуғынлығын көриўге болады.

Сызықты операторларға мысал ретинде  $x$  қа көбейтиўди ( $\hat{Q} = x$ ) хәм  $x$  бойынша дифференциаллаўды ( $\hat{Q} = \partial/\partial x$ ) көрсетиўге болады. Ҳақыйқатында да

$$x \sum \varphi_m = \sum x \varphi_m, \quad x(c\varphi) = cx\varphi.$$

Тап сол сыяқты

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \sum \varphi_m \right) = \sum \frac{\partial \varphi_m}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial x} (c\varphi) = c \frac{\partial \varphi}{\partial x}.$$

Математикада ҳәр бир оператор ушын сәйкес теңлеме жазылады:

$$\hat{Q}\varphi = q\varphi. \quad (1.7.3)$$

Бул теңлемедә  $\varphi$  ( $\psi$  арқалы да белгилеўимиз мүмкин) арқалы базы бир функция,  $q$  арқалы параметр белгиленген. Буннан кейин (1.7.3)-теңлемени теңликке айландыратуғын, усының менен бир қатарда базы бир қосымша шәртлерди (мысалы стандарт шәртлерди) қанаатландыратуғын барлық функцияларды излеў мәселеси қойылады. Көплеген операторлар ушын жоқарыда қойылған шәртлерди қанаатландыратуғын шешимлер  $q$  параметриниң қәлеген мәнислеринде емес, ал айырым мәнислеринде алынатуғынлығы мәлим. Параметрдиң усындай айрықша

мәніслери  $\hat{Q}$  операторының меншикли мәніслери, ал (1.7.3)-теңлемеден алынатуғын  $\varphi$  функциялары оператордың сол меншикли мәніслерге тийисли болған меншикли функциялары деп аталады. Бир қатар жағдайларда бир меншикли мәніске бир неше меншикли функциялардың сәйкес келиуі де мүмкин. Бундай жағдайда берилген меншикли мәністи айныған (рус тилиндеги «вырождение» сөзи) деп атайды. Берилген меншикли мәніске сәйкес келиуі хәр қыйлы функциялардың жыйнағын айныудың еселиги (рус тилинде «кратность вырождения» деп атайды) деп атаймыз.

Квантлық механиканың екінши постулаты бойынша  $\hat{Q}$  операторына сәйкес келиуі  $Q$  физикалық шамасын өлшегенде усы оператордың  $q_m$  меншикли мәніслеринің биреуі алынады.

Солай етип (1.7.3) түріндеги теңлеме квантлық механикада оғада әхмийетли орынды ийелейди екен. Екінши постулат бойынша  $q$  параметринің бирлигинің  $Q$  шамасының бирлигиндей екенлиги көринип тур. Тап усындай бирликке  $\hat{Q}$  операторы да ийе болады

$\hat{Q}$  операторының меншикли мәніслеринің жыйнағы оператордың спектри ямаса  $Q$  шамасының спектри деп аталады. Спектр  $q_1, q_2, \dots$  дискрет мәніслеринен турыуы мүмкин. Бундай жағдайда спектрди дискрет спектр деп атаймыз. Егер меншикли мәніслердің жыйнағы үзликсиз избе-изликти пайда ететуғын болса спектрди үзликсиз ямаса тутас спектр деп атайды. Улыўма жағдайда спектр өз ишине дискрет областты да, үзликсиз областты да алыуы мүмкин.

Дискрет спектр жағдайында  $\hat{Q}$  операторының меншикли мәніслери менен меншикли функцияларын номерлеу мүмкин:

$$q_1, q_2, \dots, q_m, \dots \\ \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m, \dots$$

Квантлық механикада қәлеген физикалық шаманың меншикли функцияларының жыйнағы толық системаны пайда етеди деп есаплайды. Бул қәлеген  $\psi$  үзликсиз функциясын меншикли функциялар бойынша төмендегидей түрде қатарға жайыуға болатуғынлығын аңғартады

$$\psi = \sum c_m \psi_m. \quad (1.7.4)$$

Бул аңлатпада  $c_m$  арқалы турақлы, улыўма жағдайда комплексли коэффициентлер белгиленген.

(1.7.4)-аңлатпаны системаның базы бир ҳалының пси функциясы деп көз алдымызға елеслетейик. Квантлық механиканың үшінши постулаты төмендегилерди тастыйықлайды: Система  $\psi$  ҳалында турған болсын.  $Q$  функциясы бойынша (1.7.4)-қатар жайылған. Бундай жағдайда  $q_m$  шамасының алынуы итималлығы (функцияларды тәртиби бойынша нормировкалағанда)  $c_m$  коэффициентинің модулинің квадратына тең болады.

$c_m$  коэффициентлеринің мәнісине сәйкес төмендеги шәртий орынланыуы керек:

$$\sum |c_m|^2 = 1. \quad (1.7.5)$$

Төменде биз  $\psi_m$  функцияларын сәйкес түрде нормировкалағанда бул шәртий ҳақыйқатында да орынланатуғынлығын көремиз.

Қатардың тек бир коэффициентинен басқа коэффициентлеринің барлығыда нолге тең болса (1.7.4)-формула  $\psi = \psi_m$  қатнасына өтеди (пси-функцияның  $e^{i\alpha}$  фазалық көбейтiушисине шекемги дәлликте анықланатуғынлығын еске салып өтемиз). Бул жағдайда барлық өлшеулерде  $q_m$  нәтижеси алынады. Демек  $\psi_m$  меншикли функциясы  $Q$  шамасының  $q_m$  шамасына тең болатуғын халдың пси-функциясы болып табылады екен.

(1.7.4)-қатардың ағзаларының екиден кем емес ағзалары нолге тең болмаса, онда  $Q$  шамасы  $\psi$  халында анық мәниске ийе болмайды. Өлшеулерде оның ушын  $q_1, q_2, \dots$  мәнислери алынады. Анау ямаса мынау мәнистің алынуы итималлығы сәйкес  $\psi_m$  функциясының (1.7.4)-қатардағы салмағы, яғный  $c_m$  коэффициентинің шамасы арқалы анықланады деп есаплау тәбийй.  $c_m$  шамасының өзи комплексли болғанлықтан бундай итималлыққа тең бола алмайды. Сонлықтан  $dV$  көлеминде бөлекшени табыудың итималлығы  $\psi$  функциясы тәрепинен емес, ал оның модулинің квадратының шамасы менен анықланатуғынлығын еске түсиремиз хәм тап сол сыяқлы итималлық сыпатында  $c_m$  шамасының модулинің квадратын алыу керек деген жуумақ шығарамыз. Бундай таллауды үшінши постулаттың дәлили сыпатында қарауға болмайды. Усы жағдай тек қандай постулатқа келиудің кереклигин ғана көрсетеди. Постулаттың өзін квантлық механиканың тийкарына қойылған тийкарғы болжау деп қарау керек.

Келеси параграфта биз дискрет спектрге ийе физикалық шаманың қәлеген оператордың меншикли функцияларының ортонормировкаланған система деп аталатуғын системаны пайда ететуғынлығын көрсетемиз. Бул жағдай

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = \delta_{mn} \quad (1.7.6)$$

аңлатпасының орын алатуғынлығын билдиреди. Интеграллау  $\psi_k$  функциялары анықланған областтағы өзгериушилердің өзгериу интерваллары бойынша жүргизиледи.

Математикада  $\phi$  хәм  $\psi$  функцияларының скаляр көбеймеси түсиниги бар. Бундай көбейме  $\langle \phi | \psi \rangle$  түрінде жазылады хәм төмендигидей болып анықланады:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi^* \psi dV. \quad (1.7.7)$$

$dV = dx dy dz$ . Егер скаляр көбейме нолге тең болса функцияларды ортогоналлық функциялар деп атаймыз. Тап сол сыяқлы өз-ара перпендикуляр, яғный ортогоналлық векторлардың скаляр көбеймеси нолге тең. (1.7.7)-анықламадан

$$\langle \phi | \psi \rangle^* = \langle \phi | \psi \rangle$$

екенлиги келип шығады. Функцияның скаляр квадраты, яғный функцияның өзін өзине скаляр көбейткенде алынатугын

$$\langle \phi | \phi \rangle = \int \phi^* \phi dV = \int |\phi|^2 dV$$

шамасы ҳақыйқый хәм оң мәнислерге ийе болады.

$\langle a\phi | b\psi \rangle$  түріндеги көбеймени алып қарайық. Бул көбеймедеги  $a, b$  шамалары комплексли санлар болсын. (1.7.7)-анықламаны итибарға алып

$$\langle a\phi | b\psi \rangle = a^* b \langle \phi | \psi \rangle \quad (1.7.9)$$



аңлатпасын жаза аламыз. Солай етип скаляр көбейменің белгиси алдына тұрақты коэффициентлерди шығарғанда биринши көбейтіншінің орнына оның комплекслі түйінлеси келеди, ал екінши көбейтінші өзгеріссіз қалады екен.

(1.7.7)-белгилеуді қолланып меншикли функциялардың ортонормировкалануы шәрті болған (1.7.6)-аңлатпаны

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn} \quad (1.7.10)$$

түрінде жазыуға болады.

Тап сондай шәртти тууры мүйешли координата көшерлерінің ортлары да қанаатландырады:

$$e_m e_n = \delta_{mn}.$$

(1.7.10)-шәрттің жәрдемінде (1.7.4)-қатарға жайыудағы  $c_m$  коэффициентлерінің мәнісін табыу мүмкін. Буның үшін (1.7.4)-қатнасты  $\psi_n$  ге скаляр көбейтеміз хәм (1.7.10)-аңлатпаны итибарға аламыз

$$\langle \psi_n | \psi \rangle = \sum c_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \sum c_m \delta_{mn} = c_n.$$

Сумманың  $m$  бойынша алынатуғынлығын аңғарамыз. Солай етип биз

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle = \int \psi_n^* \psi dV \quad (1.7.11)$$

формуласына келеміз.

$c_n$  коэффициентінің мәнісін билиу физикалық шама анық мәніске ийе болатуғын халдағы усы физикалық шаманың орташа мәнісін табыуға мүмкіншилик береді.  $Q$  шамасын өлшегенде  $q_m$  мәнісінің алынуы итималлығы  $|c_m|^2$  шамасына тең. Демек усы шаманың орташа мәніси

$$\langle q \rangle = \sum |c_m|^2 q_m = \sum c_m^* c_m q_m \quad (1.7.12)$$

формуласының жәрдемінде анықланады екен. Бул формулада да сумма  $m$  индекси бойынша алынады. (1.7.11) ге сәйкес  $c_m^* = \langle \psi | \psi_m \rangle$ . Бул аңлатпаны (1.7.12)-формулаға қойсақ

$$\langle q \rangle = \sum \langle \psi | \psi_m \rangle c_m q_m = \sum \langle \psi | q_m \psi_m \rangle c_m.$$

(1.7.3)-аңлатпаға сәйкес  $q_m \psi_m$  шамасын  $\hat{Q} \psi_m$  арқалы алмастырып  $c_m$  шамасын скаляр көбейме белгисінен шығарамыз хәм оператордың сызықты екенлігінен пайдаланамыз:

$$\langle q \rangle = \sum_m \langle \psi | \hat{Q} \psi_m \rangle c_m = \sum_m \langle \psi | \hat{Q} c_m \psi_m \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \sum_m c_m \psi_m \rangle.$$

Ең ақырында (1.7.4)-аңлатпаны итибарға алып

$$\langle q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle \quad (1.7.13)$$

ямаса

$$\langle q \rangle = \int \psi^* \hat{Q} \psi dV \quad (1.7.14)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Биз квантлық механиканың әхмийетли формулаларының бирин алдық. Бул формула пси-функциясын билген халда қалеген физикалық шаманы өлшеудің нәтижелеринің орташа мәнісін есаплауға мүмкіншилик береді. Буның ушын усы шамаға сәйкес келиуши оператордың түрін де билиу керек болады.

## 1-8. Сызықлы операторлар

Физикалық шамалар хақыйқый шамалар болып табылады. Сонлықтан олар меншикли мәніслери хақыйқый шамалар болып табылатуғын операторлар менен сәулеленеди. Квантлық механикада тап усындай операторлардың дыққат орайына алынатуғынлығы тәбиййи. Бирақ бир қатар есаплауларды жүргизгенде комплексли меншикли мәніслери бар жәрдемши операторлардан да пайдаланады. Усы жағдайларға байланысly биз бундай операторлардың қәсийетлери менен танысуымыз керек.

Тийкаргы анықламалардан баслаймыз.

$$\langle \varphi | \hat{Q}_1 \varphi \rangle = \langle \psi^* | \hat{Q}_2 \psi^* \rangle \quad (1.8.1)$$

қәсийетине ийе еки  $\hat{Q}_1$  хәм  $\hat{Q}_2$  операторлары бир бири менен транспонирленген деп аталады. Бул аңлатпада  $\varphi$  менен  $\psi$  арқалы ықтыярлы еки функция белгиленген.  $\hat{Q}$  операторына транспонирленген операторды  $\tilde{\hat{Q}}$  арқалы белгилеймиз. Демек (1.8.1)-аңлатпадағы  $\hat{Q}_1$  операторын әпиуайы түрде  $\hat{Q}$  арқалы белгилесек, онда  $\hat{Q}_2$  операторын  $\tilde{\hat{Q}}$  арқалы белгилеу керек болады:

$$\langle \varphi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \psi^* | \tilde{\hat{Q}} \psi^* \rangle. \quad (1.8.2)$$

Солай етип (1.8.2)-шәртти қанаатландыратуғын  $\hat{Q}$  хәм  $\tilde{\hat{Q}}$  операторлары бир бири менен транспонирленген деп аталады. (1.7.7) анықламасын итибарға алып (1.8.2) шәртин былайынша жазыуға болады:

$$\int \psi^* \hat{Q} \psi dV = \int \psi \tilde{\hat{Q}} \psi^* dV. \quad (1.8.3)$$

Ықтыярлы түрде алынған функциялардың қалеген  $\varphi$  хәм  $\psi$  жубы ушын

$$\langle \varphi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \hat{Q}^+ \varphi | \psi \rangle \quad (1.8.4)$$

шәртин қанаатландыратуғын  $\hat{Q}$  операторы ушын  $\hat{Q}^+$  операторын жазамыз. Бул жағдайда  $\hat{Q}^+$  операторын  $\hat{Q}$  операторының түйинлес эрмит операторы (ямаса әпиуайы түрде түйинлеси) деп атайды.  $\hat{Q}$  операторы өзинен оң тәрәпте турған функцияға тәсир ететуғын болса  $\hat{Q}^+$  операторы өзинің алдында (шәп тәрәпинде турған функцияға) тәсир етеди. Солай етип  $\hat{Q}$  операторы символына «+» белгисін қойыу оператордың оң тәрәпинде турған функцияға тәсир етиуди оң тәрәпинде

турған функцияға тәсир етиуге өзгертеди.  $\hat{Q}^+$  операторы тәсир ететугын функцияның оң тәрәпинде жазылады деген қағыйданы қабыл етсек, онда түйинлес операторды анықлайтуғын (1.8.4) қатнасы

$$\langle \varphi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{Q}^+ | \psi \rangle \quad (1.8.5)$$

түрине енеди. Демек (1.8.5) түріндеги аңлатпаларда оператордың символына (белгисине) түйинлес белгисин қойыу менен бирге оператордың шеп тәрәпинде турған «дийўалды» оң тәрәпине өткерий керек болады.

Енди

$$(\hat{Q}\varphi)^* = \hat{Q}^* \varphi \quad (1.8.6)$$

шәртин қанаатландыратуғын  $\hat{Q}^*$  операторын анықлаймыз. Бундай операторды  $\hat{Q}$  операторының комплексли түйинлеси деп атайды.

$$\langle \psi^* | \hat{Q} \varphi^* \rangle = \langle \hat{Q} \varphi^* | \psi^* \rangle^* = \langle (\hat{Q} \varphi^*)^* | \psi \rangle = \langle \hat{Q}^* \varphi | \psi \rangle$$

скаляр көбеймесиниң (1.7.8)-қәсийетин итибарға алып (1.8.2)-аңлатпаның оң тәрәпин түрлендиремиз. (1.8.6)-анықлама бойынша  $(\hat{Q} \varphi^*)^* = \hat{Q}^* \varphi$  екенлигин биз пайдаландық. Усының нәтийжесинде (1.8.2)-формула

$$\langle \varphi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \hat{Q}^* \varphi | \psi \rangle$$

түрине енеди. (1.8.4)-аңлатпа менен салыстырыўдан

$$\hat{Q}^+ = \hat{Q}^* \quad (1.8.7)$$

теңлиги келип шығады. Бул аңлатпада  $\hat{Q}^*$  арқалы транспонирленген  $\hat{Q}$  операторына комплексли түйинлес болған оператор белгиленген. (1.8.7)-аңлатпа  $\hat{Q}^+$  эрмитлик операторының улыўма айтқанда комплексли түйинлес оператор  $\hat{Q}^*$  менен сәйкес келмейтуғынлығын көрсетеди.

Мейли оператор комплексли санға көбейтиўди аңғартатуғын болсын:  $\hat{C} = c$ . Бул оператордың эрмитлик түйинлес операторын табамыз. (1.8.5)-аңлатпаға сәйкес

$$\langle \varphi | \hat{C} \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{C}^* \psi \rangle.$$

Демек  $\hat{C}^*$  операторының да базы бир сан болыўы керек. Сонлықтан (1.7.9)-қәсийеттен пайдаланып

$$\hat{C} \langle \varphi | \psi \rangle = (\hat{C}^+)^* \langle \varphi | \psi \rangle$$

аңлатпасын жазыўға болады. Буннан  $\hat{C} = (\hat{C}^+)^*$ , яғный  $\hat{C}^+ = \hat{C}^*$  екенлиги келип шығады. Демек

$$\text{егер } \hat{C} = c \text{ болса } \hat{C}^+ = c^* \quad (1.8.8)$$

шәрти орынланады екен хәм  $\hat{C}^+ = \hat{C}^*$ .

Биз  $\hat{Q}$  операторы менен салыстырыу ушын ( $\hat{Q}$  операторы менен сәйкеслендириу ушын) операторлардың үш түрін анықладық: транспонирленген оператор  $\tilde{Q}$ , эрмитлик түйинлес оператор  $\hat{Q}^+$  хәм комплексли түйинлес оператор  $\hat{Q}^*$ . Енди меншикли мәнислериниң ҳақыйқый мәнислер болыуы ушын оператордың қандай шәртлерди қанаатландырыуының шәрт екенлигин анықлаймыз.  $\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$  теңлемесин  $\psi_n$  функциясына скаляр көбейтеміз:

$$\langle \psi_n | \hat{Q} \psi_n \rangle = q_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle.$$

$\psi_n$  функциясының квадраты ҳақыйқый мәниске ийе (нормировкаланған функциялар ушын квадраты мәниси 1 ге тең). Сонлықтан  $q_n$  шамасының ҳақыйқый болыуы ушын теңликтиң шеп тәрәпинен ҳақыйқый болыуы керек. Бундай жағдайда

$$\langle \psi_n | \hat{Q} \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \hat{Q} \psi_n \rangle^*$$

ямаса (1.7.8)-аңлатпаны есапқа алғанда

$$\langle \psi_n | \hat{Q} \psi_n \rangle = \langle \hat{Q} \psi_n | \psi_n \rangle$$

теңлиги орынланады. (1.8.4)-аңлатпа менен салыстырыу бул шәрттиң  $\hat{Q}$  операторы өзіне түйинлес болған  $\hat{Q}^+$  операторы менен сәйкес болатуғын жағдайда орынланатуғынлығы көрсетеди.

$$\hat{Q} = \hat{Q}^+ \quad (1.8.9)$$

теңлиги орынланатуғын операторды өзи өзіне түйинлес ямаса эрмит операторы деп атайды. (1.8.9)-аңлатпаны есапқа алсақ эрмитлик болыу шәртин

$$\hat{Q} = \tilde{Q}^* \quad (1.8.10)$$

түрінде жазыу мүмкин.

Солай етип биз әҳмийетли жуўмаққа келдик: физикалық шамаларға өзи өзіне түйинлес  $\hat{Q}$  (эрмитлик) операторлар сәйкес келеди. Бундай операторлар ушын

$$\langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \hat{Q} \psi | \psi \rangle \quad (1.8.11)$$

аңлатпасы дурыс болады. [(1.8.4)- хәм (1.8.9)-аңлатпаларға қараңыз]. Оң тәрәптеги  $\hat{Q}$  операторын  $\hat{Q}^+$  операторы сыпатында қарап бул аңлатпаны былайынша да жаза аламыз:

$$\langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{Q} \psi \rangle \quad (1.8.12)$$

(өзи өзіне түйинлес операторлар ушын «дийўалды» оператордың қәлеген тәрәпине қойып жазыуға болады).

(1.8.11)-аңлатпадан эрмит операторы ушын

$$\int \varphi^* \hat{Q} \psi dV = \int \psi \hat{Q}^* \varphi^* dV \quad (1.8.13)$$

аңлатпасының орын алатуғынлығын көриўге болады. Бул аңлатпаны өзи өзіне

түйінлес оператордың анықтамасы түрінде қарауға болады.

Эрмит операторларының меншикли функцияларының өз-ара ортогоналлық екенлигин көреміз. (1.7.3)-теңлемени  $Q$  шамасының  $m$ - хәм  $n$ -меншикли мәнислери ушын жазамыз:

$$\hat{Q}\psi_m = q_m\psi_m, \text{ хәм } \hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n.$$

Биринши теңлемени скаляр түрде оң тәрәптен  $\psi_n$  шамасына, ал екіншисин шеп тәрәптен  $\psi_m$  шамасына көбейтеміз. Нәтийжеде

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}\psi_m | \psi_n \rangle &= q_m \langle \psi_m | \psi_n \rangle, \\ \langle \psi_m | \hat{Q}\psi_n \rangle &= q_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle \end{aligned}$$

аңлатпаларын аламыз. Оператордың эрмитлик екенлигине байланысly бул теңлемелердің шеп тәрәплери өз-ара тең [(1.8.11)-аңлатпаны қараңыз]. Сонлықтан жоқарыдағы теңлемеден төменги теңлемени алсақ

$$(q_m - q_n) \langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0$$

теңлемесине ийе боламыз. Буннан  $q_m \neq q_n$  шәрти орынланғанда (яғный  $m \neq n$  болған жағдайда<sup>6</sup>)  $\psi_m$  хәм  $\psi_n$  функцияларының скаляр көбеймелери нолге тең болатуғынлығы келип шығады:  $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0$ . Бул жағдай  $\psi_m$  хәм  $\psi_n$  функцияларының ортогоналлық екенлигин аңғартады.

1-3 параграфта пси-функцияның ықтыярлы комплексли көбейтиўши дәллигинде анықланатуғынлығы атап өтилген еди. Дискрет спектр жағдайында барлық ўақытта да бул көбейтиўшини  $\psi_k$  функцияларының хәр бириниң квадратының 1 ге тең етип сайлап алыў мүмкин. Бундай аўхалда меншикли функциялар системасы ортонормировкаланған система болып табылады. Солай етип биз (1.7.10)-формуланы дәлилледик. Буннан былай биз дискрет спектрдің меншикли функцияларын 1 ге нормировкаланған деп есаплаймыз.

Ең ақырында (1.7.5)-аңлатпаны дәлиллей ушын меншикли функциялардың ортонормировкаланыў қәсийетинен пайдаланамыз. (1.7.10)-аңлатпаны итибарға алып (1.7.4)-аңлатпаны пси-функцияның нормировка шәртинен қоямыз [(1.4.2)-аңлатпаға қараңыз]:

$$\begin{aligned} 1 &= \int \psi^* \psi dV = \int \left( \sum_m c_m^* \psi_m^* \right) \left( \sum_n c_n \psi_n \right) dV = \\ &= \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_m |c_m|^2. \end{aligned}$$

Бул жағдайды дәлиллей талап етилген еди.

## § 9. Операторларды матрицалық формада көрсетиў

Биз дәслеп матрицалар, матрицалар үстиндеги алгебралық әмеллер ҳаққында қысқаша тоқтап өтеміз.

**Матрицаның анықтамасы.** К есаплаў системасынан  $K'$  есаплаў системасына

<sup>6</sup> Биз хәр бир  $q_m$  шамасына бир меншикли функция сәйкес келеди деп болжаймыз (демек биз қарап атырған жағдайда айныў орын алмайды деген сөз).

өткенде вектордың құраушылары

$$a'_i = \sum_k \alpha_{ik} a_k, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{M.1})$$

$$a_i = \sum_k \alpha_{ki} a'_k, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (\text{M.2})$$

формулаларының жәрдемінде түрлендірілетуғынлығы мәлім.

Өтиу коэффициенттерін квадрат кесте түрінде жазуы мүмкін:

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}. \quad (\text{M.3})$$

Бұл кестені түрлендіріу матрицасы деп атаймыз.  $\alpha_{ik}$  шамалары матрицаның элементтері деп аталады. Биринші индекс қатардың номерін, ал екінші индекс бағананың номерін анықлайды.

Белгилеулерді анықлап аламыз. Матрицаның элементтерін екі индексі бар киші хәриптердің жәрдемінде белгилейміз. Ал матрицаның өзін белгилеу үшін үлкен хәрипті пайдаланамыз (мысалы матрицаның элементі  $\alpha_{ik}$ , матрицаның өзі  $A$  арқалы белгиленеді). Вектордың құраушыларын бір индекске ийе киші хәриптердің жәрдемінде, ал векторды болса тап сондай, бірақ жуған хәриппен белгилейміз (мысалы  $a_i$  вектордың құраушылары болса,  $a$  вектордың өзі болады).

Вектордың құраушыларын түрлендіріу операциясы болған (M.1) операциясын символлық түрде векторды матрицаға көбейтіу түрінде жаза аламыз:

$$a' = aA. \quad (\text{M.4})$$

Кери түрлендіріу болған (M.2) түрлендіріудің коэффициенттері

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{32} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{M.5})$$

матрицасын пайда етеді. Бұл матрицаны кери матрица деп атайды. Кери матрицаның элементтері  $\alpha'_{ik}$  арқалы белгилеп

$$\alpha'_{ik} = \alpha_{ki} \quad (\text{M.6})$$

аңлатпасын жаза аламыз.

А матрицасынан қатарларын бағаналармен алмастыру жолымен алынған матрицаны транспонирленген матрица деп атайды және  $\tilde{A}$  арқалы белгилейді. Егер транспонирленген матрицаның элементтерін  $\tilde{\alpha}_{ik}$  арқалы белгилесек

$$\tilde{\alpha}_{ik} = \alpha_{ki} \quad (\text{M.7})$$

теңлігін аламыз.

(M.6)- және (M.7)-формулардан (M.5) кери түрлендіріу матрицасының транспонирленген туыс түрлендіріу матрицасына сәйкес келетугынлығы көрініп тұр:

$$A^{-1} = \tilde{A}. \quad (\text{M.8})$$

(M.8) қатнасы барлық матрицалар үшін орынланбайды<sup>7</sup>. (M.8) шәртин қанаатландыратуғын матрицалар ортогоналлық матрицалар деп аталады.

(M.2) кери түрлендириуи символлық түрде былайынша жазылады

$$a = A^{-1}a'. \quad (\text{M.9})$$

Мәселениң формаль түрдеги математикалық тәрәпин қозғамай (M.4) хәм (M.9) қатнастарын [басқа сөзлер менен айтқанда (M.1) хәм (M.2) қатнастарын] бир есаплау системасынан екінши есаплау системасына өткендеги түрлендириулер деп қарауға болмайды, ал бир векторды екінши векторға түрлендириу деп қарау керек. Бул векторлардың екеуи де бир есаплау системасына тийисли болады. Тап усындай трактовканы нәзерде тутып түрлендириу формулаларын былайынша жазамыз:

$$b = Aa, \quad (\text{M.10})$$

$$a = A^{-1}b. \quad (\text{M.11})$$

Солай етип  $A$  матрицасын  $a$  векторына тәсир етип оны  $b$  векторына айландыратуғын сызықты оператор деп қарауымыз керек екен.

(M.10) хәм (M.11) түрлендириулерин анық түрде жазамыз. Улыұмалырақ түрде мәселени шешиу үшін  $a$  хәм  $b$  векторларын үш өлшемли кеңисликте емес,  $n$  өлшемге ийе кеңисликте анықланған деп есаплаймыз. (M.1) хәм (M.2) аңлатпаларына сәйкес мыналарды аламыз:

$$b_i = \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} a_k \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (\text{M.12})$$

$$a_i = \sum_{k=1}^n \alpha'_{ik} b_k \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (\text{M.13})$$

Бул аңлатпаларда  $\alpha'_{ik}$  арқалы кери түрлендириу матрицасының элементлери белгиленген ( $A^{-1}$  матрицасының элементлери белгиленген). Ортогоналлық матрица үшін  $\alpha'_{ik} = \alpha_{ki}$ .

$A$  хәм  $A^{-1}$  матрицалары енди  $n$  қатарға хәм  $n$  бағанаға ийе болады. Мысалы

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}. \quad (\text{M.14})$$

(M.14) матрицасы квадрат матрица болып табылады. Бул матрицадағы қатарлар саны бағаналар санына тең. Квадратлық матрицалар менен бир қатарда туұры мүйешли матрицалар да пайдаланылады. Оның қатарларының саны  $m$  бағаналар саны  $n$  ге тең емес:

<sup>1</sup> Улыұма айтқанда матрицалардың барлығы кери матрицаға ийе бола бермейди. Бундай матрицаларды айрықша ямаса айныған матрицалар деп атайды. Бирақ матрица хәтте айнымаған болса да оның кери матрицасы менен транспонирленген матрицасы бир бири менен сәйкес келмеуи мүмкин.

$$A = A_{(m,n)} = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \dots & \alpha_{mn} \end{vmatrix} \quad (\text{М.15})$$

Матрицаның символындағы биринши индекс қатарлар санын, ал екіншиси бағаналар санын анықлайды. Егер усындай жағдайларда гүмән пайда етпейтуғын болса биз индекслерди жазбаймыз.

Солай етип улыўма жағдайда матрица деп туўры мүйешли кесте түринде жазылған  $m \cdot n$  элементлериниң жыйнағына айтады екенбиз. Функциялар ямаса басқа да шамалар матрицаның элементлери бола алады. Сонлықтан сол шамалар үстинде алгебралық операциялар жүргизиў керек болады.  $m$  қатарға хәм  $n$  бағанаға ийе матрицаны  $(m \times n)$ -матрица ямаса  $m \times n$ -тәртипли матрица ямаса  $m \times n$  өлшемге ийе матрица деп атайды.  $m \times 1$  тәртипли матрицаны, яғный бир бағанаға ийе матрицаны гейде бағана деп те атайды. Ал  $1 \times n$ -тәртипли матрица бир қатардан турады хәм сонлықтан оны гейде тек қатар деп те атайды.

Егер  $A$  хәм  $B$  еки матрицаның сәйкес элементлери бир бирине тең болса яғный  $\alpha_{ik} = \beta_{ik}$  шәрти орынланса), онда матрицаларды бир бирине тең матрицалар ( $A = B$ ) деп атайды.

Егер  $A$  хәм  $B$  матрицалардың сәйкес элементлери  $\alpha_{ik} = -\beta_{ik}$  қатнасы арқалы байланысқан болса, онда бундай матрицалар бир биринен тек белгиси бойынша айырмаға ийе деп есаплайды ( $A = -B$ ).

(М.14) квадрат матрицасы (яғный  $m \times n$ -тәртипли матрица) (М.15) түриндеги матрицаның дара жағдайы болып табылады.  $n$  өлшемли кеңисликте векторды басқа векторды түрлендиретуғын матрицаның квадрат матрица болыўының керек екенлиги айқын

Егер матрицаның элементлери

$$\alpha_{ik} = \alpha_{ki} \quad (\text{М.16})$$

шәртин қанаатландыратуғын болса, онда матрицаны симметриялы матрица деп атаймыз. Симметриялық матрицаның өзиниң транспонирленген матрицасы менен сәйкес келетуғынлығы түсиникли:

$$A_{\text{симм}} = \tilde{A}_{\text{симм}}. \quad (\text{М.17})$$

Элементлери

$$\alpha_{ik} = -\alpha_{ki} \quad (\text{М.18})$$

шәртин қанаатландыратуғын матрицаны антисимметриялық ямаса қыя симметриялы матрица деп атайды. Антисимметриялық матрица өзиниң транспонирленген матрицасынан белгиси бойынша ғана айрылады:

$$A_{\text{антисимм}} = -\tilde{A}_{\text{антисимм}}. \quad (\text{М.19})$$

Тек диагоналық элементлери нолге тең емес (яғный  $\alpha_{ik}$  элементлериндеги  $i$  хәм  $k$  индекслериниң мәнислери өз-ара тең) квадрат матрицаны диагоналық матрица деп атаймыз. Диагоналық матрица



$$\Lambda = \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{vmatrix} \quad (\text{M.20})$$

түрінде жазылады. Бул матрицаның элементтерін былайынша көрсетіуге болады:

$$\lambda_{ik} = \lambda_k \delta_{ik}. \quad (\text{M.21})$$

Бул аңлатпада  $\delta_{ik}$  арқалы Кронекер символы белгіленген [(VI. 12)-аңлатпаға қараңыз].

Егер координаталар системасын өзгертетуғын болсақ (яғный  $e_1, e_2, \dots, e_n$  базислерін өзгертетуғын болсақ), онда  $a$  хәм  $b$  векторларының құраушылары да өзгереді [(M.10)-формулаға қараңыз]. Матрица-оператордың элементтері де өзгереді. Базы бир жағдайларда (егер  $A$  матрицасы симметриялық болса)  $A$  матрицасын диагоналық матрицаға айланатуғындай етип базисті сайлап алыу да мүмкін.

Бир координаталар системасынан екінші координаталар системасына өткенде матрицаның элементтері өзгереді. Бирақ матрицаның изи деп аталатуғын диагоналық элементтердің суммасы өзгериссиз қалады ( $\text{Sp } A$  арқалы аңлатылады, немисше  $\text{Spur}$  сөзі из деген мәністі береді). Солай етип матрицаның изи барлық координаталар системасында бирдей мәніске ийе, яғный инвариант болып табылады:

$$\text{Sp } A = \sum_i \alpha_{ii} = \text{inv}. \quad (\text{M.22})$$

Матрицаның анықлаушысы да (определители де) өзгериссиз қалады:

$$\det ||\alpha_{ik}|| = \text{inv}. \quad (\text{M.23})$$

Егер  $E$  матрицасы менен  $a$  векторы көбейтилгенде

$$a = Ea$$

теңлиги орын алатуғын болса бул  $E$  матрицасын бирлик матрица деп атаймыз.

Бирлик матрицаның элементтерінің  $\delta_{ik}$  ға тең екенлигине аңсат көз жеткізіуге болады [(M.12)-аңлатпада  $\alpha_{ik} = \delta_{ik}$  деп есапланғанда  $b_i = a_i$  теңлигине алып келеді]. Солай етип

$$E = ||\delta_{ik}|| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (\text{M.24})$$

Бул матрицаның диагоналық екенлигин атап өтемиз.

**Матрицалар алгебрасы.** Матрицалар өзінің мәнісі бойынша алгебралық объектлер болып, олардың үстинен қосыу, алыу хәм көбейтиу операцияларын орынлау мүмкін (матрицаларды бөлиу операциясы деген операция болмайды).

$A$  хәм  $B$  матрицаларының суммасы (қосындысы) деп  $\Gamma = A + B$  матрицасына айтамыз<sup>8</sup>. Бул матрицаның элементтері

<sup>8</sup> Былайынша айтылады: «гамма» тең матрица «альфа» плюс матрица «бета» («В» арқалы грек алфавитіндегі үлкен «бета» хәрипі белгіленген, ал «Г» грек алфавитіндегі «гамма» хәрипін

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ik} + \beta_{ik}. \quad (\text{M.25})$$

Матрицалардың айырмасы  $\Gamma = A - B$  деп элементлери

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ik} - \beta_{ik} \quad (\text{M.26})$$

формуласы менен анықланатуғын  $\Gamma$  матрицасына айтамыз.

Солай етип операторлардың қосындысы да оператор болып табылады екен.

Тек ғана бірдей тәртіпке ийе матрицаларды (яғный бірдей сандағы қатарларға хәм бірдей сандағы бағанаға ийе матрицаларды) бир бири менен қосыўға ямаса алыўға болатуғынлығы анық.

А матрицасының  $\eta$  скалярына көбеймеси деп элементлери

$$\beta_{ik} = \eta \alpha_{ik} \quad (\text{M.27})$$

болған  $B = \eta A$  матрицасына айтамыз.

Енди матрицаларды көбейтиўди қараўға өтемиз. А матрицасының  $a$  векторына тәсир етиўиниң нәтийжесинде  $b$  векторы алынады деп есаплайық. Ал В матрицасы  $b$  векторына тәсир еткенде оны  $c$  векторына айландыратуғын болсын. А хәм В матрицаларының көбеймеси деп  $a$  векторын  $c$  векторына айландыратуғын  $\Gamma$  матрицасын түсиниў тәбийий. Солай етип

$$b = Aa, \text{ яғный } b_m = \sum_k \alpha_{mk} a_k, \\ c = Bb = BAa, \text{ яғный } c_i = \sum_m \beta_{im} b_m = \sum_m \beta_{im} \sum_k \alpha_{mk} a_k = \sum_k a_k \sum_m \beta_{im} \alpha_{mk}.$$

Екинши тәрептен

$$c = \Gamma a, \text{ яғный } c_i = \sum_k \gamma_{ik} a_k.$$

$c$  хәм  $c_i$  ушын жазылған еки формуланы салыстырыў матрицаларды көбейтиўдин қағыйдасын береді:

$$\Gamma = BA \text{ көбеймеси } \gamma_{ik} = \sum_m \beta_{im} \alpha_{mk}. \quad (\text{M.28})$$

Бул қағыйдаға сәйкес төмендеги операцияларды орынлаўымыз керек:  $\Gamma$  матрицасының  $i$ -қатары менен  $k$ -бағанасы кесилискен орында турған элементти алыў ушын В матрицасының  $i$ -қатарының хәр бир элементин А матрицасының  $k$ -бағанасының хәр бир элементи менен көбейтип, алынған көбеймелерди қосып шығыўымыз керек.

Улыўма айтқанда матрицаларды көбейтиў коммутативлик емес, яғный

$$BA \neq AB.$$

Ал

$$BA = AB \quad (\text{M.30})$$

шәрти орынланатуғын матрицаларды коммутацияланыўшы матрицалар деп атаймыз.

Матрицалардың көбеймесинің ассоциативлік екенлігін аңсат көрсетіуге болады:

$$(\Gamma B) A = \Gamma(BA). \quad (M.31)$$

Демек В матрицасын дәслеп Г матрицасына көбейтип болып, көбеймени А ға көбейтсек алынған нәтиже А хәм В матрицаларын көбейтип болғаннан кейін алынған көбеймени Г матрицасына көбейткенде алынатуғын нәтижеге тең болады екен. Ғақықатында да матрицаларды бир бирине көбейтиу қағыйдасы бойынша:

$$\begin{aligned} \{(\Gamma B)A\}_{ik} &= \sum_m (\Gamma B)_{im} \alpha_{mk} = \sum_m \left( \sum_l \gamma_{il} \beta_{lm} \right) \alpha_{mk} = \\ &= \sum_l \gamma_{il} \left( \sum_m \beta_{lm} \alpha_{mk} \right) = \sum_l \gamma_{il} (BA)_{lk} = \{\Gamma(BA)\}_{ik} \end{aligned}$$

(түрлендириулердің барысында биз m хәм l индекслери бойынша суммалау тәртибин өзгерттик). Солай етип (M.33) қәсийетинің дурыслығы дәлилленди.

Бир бирине квадратлық емес матрицаларды (тууры мүйешли матрицаларды) да көбейтиу мүмкін. Бул жағдайда (M.29)-схемадан екинши матрицаның бағаналар саны менен биринши матрицаның қатарлар саны тең болыуының керек екенлігі келип шығады. Екинши матрицаның бағаналар саны қанша болса көбейме матрицаның қатарларының саны да соншама болады. Бул жағдайды келеси мысалда түсіндіремиз:

$$\begin{aligned} \left\| \begin{matrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \dots & \beta_{nn} \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} \end{matrix} \right\| = \\ = \left\| \begin{matrix} \sum \beta_{1n} \alpha_{n1} & \sum \beta_{1n} \alpha_{n2} & \sum \beta_{1n} \alpha_{n3} \\ \sum \beta_{2n} \alpha_{n1} & \sum \beta_{2n} \alpha_{n2} & \sum \beta_{2n} \alpha_{n3} \\ \dots & \dots & \dots \\ \sum \beta_{nn} \alpha_{n1} & \sum \beta_{nn} \alpha_{n2} & \sum \beta_{nn} \alpha_{n3} \end{matrix} \right\|. \end{aligned}$$

Егер екинши матрица квадрат матрица болса, яғный  $n \times m$  тәртибине ийе, ал биринши матрица n элементине ийе тек бир бағанаға болса, онда матрица-көбейме n элементке ийе бир бағанадан турады:

$$\left\| \begin{matrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1n} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \dots & \beta_{nn} \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{matrix} \right\| = \left\| \begin{matrix} \sum \beta_{1k} \alpha_k \\ \sum \beta_{2k} \alpha_k \\ \dots \\ \sum \beta_{nk} \alpha_k \end{matrix} \right\|. \quad (M.32)$$

Бир бағанаға ийе матрицаны бир қатарға ийе матрицаға көбейткенде тек бир сан алынады (егер матрицаның элементлери функциялар болатуғын болса функция алынады):

$$\left\| \begin{matrix} \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_n \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{matrix} \right\| = \sum_k \beta_k \alpha_k. \quad (M.33)$$

Мысалы дара жағдайда  $\|\beta\|$  матрицасының орнына транспонирленген  $\|\alpha\|$  матрицасын алсақ, онда (М.33)-аңлатпа

$$\|\alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \dots \quad \alpha_n\| \begin{vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{vmatrix} = \sum_k \alpha_k^2$$

түрине енеди. Демек тек бір бағанаға ийе  $A_{(n,1)}$  матрицасы ушын

$$\tilde{A}_{(n,1)} A_{(n,1)} = \sum_{k=1}^n \alpha_k^2 \quad (\text{М.34})$$

аңлатпасы орынлы болады.

Егер бір бағанаға ийе матрицаның элементи сыпатында вектордың құраушыларын, ал квадрат матрица сыпатында  $A$  матрица-операторын алатуғын болсақ, онда (М.32)-аңлатпа

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \dots & \dots & \dots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{vmatrix} \quad (\text{М.35})$$

түрине енеди. Бул аңлатпада  $b_i = \sum_k \alpha_{ik} \alpha_k$  [(М.12)-аңлатпа менен салыстырыңыз]. (М.35) аңлатпасының (М.10)-аңлатпа менен эквивалент екенлигин аңсат аңғарыуға болады. Демек векторды бір бағанаға ийе матрица түрінде көрсетиуге болады екен.

Е бирлик матрицасының ықтыярлы  $A$  матрицасына көбеймесин қараймыз. (М.28)-қағыйда бойынша

$$(AE)_{ik} = \sum_i A_{im} \delta_{mk}$$

аңлатпасын жазамыз ( $\delta_{mk}$  шамалары  $E$  матрицасының элементлери болып табылады). Бул суммада тек  $m = k$  шәрти орынланатуғын қосылыұшы нолге тең болмайды. Демек  $(AE)_{ik} = (A)_{ik}$ . Тап сол сыяқлы

$$(EA)_{ik} = \sum_i \delta_{im} A_{mk} = (A)_{ik}.$$

Жоқарыда айтылғанлардан бирлик матрицаға көбейткенде  $A$  матрицасының өзгермейтуғынлығы келип шығады:

$$EA = AE = A. \quad (\text{М.36})$$

Соңғы жазылған аңлатпа бирлик матрицаның қәлеген  $A$  матрицасы менен коммутацияланатуғынлығы (орынларын алмастырыуға болатуғынлығы) келип шығады.

Қандай да бир векторға дәслеп  $A$  түрлендириұин қоллансақ хәм буннан кейин оған кери болған  $A^{-1}$  түрлендириұин қоллансақ, бизиң дәслепки векторға қайтып келетуғынлығымыз анық

$$a = A^{-1}Aa. \quad (M.37)$$

Буннан туўры хәм кери матрицалардың көбеймесиниң бирлик матрицаға тең болатуғынлығын көремиз:  $A^{-1}A = E^9$ ). Соның менен бирге туўры хәм кери матрицалардың көбеймелери коммутативлик екенлиги (коммутацияланатуғынлығы) айқын болады:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = E. \quad (M.38)$$

А хәм  $A^{-1}$  матрицаларының көбеймесин (M.28)-формула бойынша жазсақ туўры хәм кери матрицалардың элементлери арасындағы байланысты табамыз:

$$\sum_m \alpha'_{im} \alpha_{mk} = \sum_m \alpha_{im} \alpha'_{mk} = \delta_{ik}. \quad (M.39)$$

Ортогоналлық матрица ушын [яғный (M.8)-шәртти қанаатландыратуғын матрица ушын]  $\alpha'_{ik} = \alpha_{ki}$  [(M.6)-аңлатпаға қараңыз]. (M.39)-аңлатпада тап усындай алмастырыўды орынласақ

$$\sum_m \alpha_{mi} \alpha_{mk} = \delta_{ik}, \quad (M.40)$$

$$\sum_m \alpha_{lm} \alpha_{km} = \delta_{ik} \quad (M.41)$$

формулаларына ийе боламыз. Солай етип ортогоналлық матрицаның элементлери (M.39)- хәм (M.40)-қатнастарды қанаатландырады екен.

Енди операторларды матрицалар түрінде көрсетиў мәселесине қайтып келемиз.

$$f = \hat{Q}\varphi \quad (1.9.1)$$

теңлемесин матрицалық формада жазыўға болады. Буның ушын  $f$  хәм  $\alpha$  функцияларын базы бир жәрдемши  $\hat{R}$  операторының меншикли функциялары болған  $\psi_k^{(r)}$  функциялары бойынша қатарға жаямыз, соның менен бирге  $\psi_k^{(r)}$  функцияларын ортонормировкаланған деп есаплаймыз. Яғный

$$\langle \psi_m^{(r)} | \psi_n^{(r)} \rangle = \delta_{mn}. \quad (1.9.2)$$

Солай етип

$$\varphi = \sum_n a_n \psi_n^{(r)}, \quad (1.9.3)$$

$$f = \sum_k b_k \psi_k^{(r)}. \quad (1.9.4)$$

Бул аңлатпаларда

---

<sup>9</sup> Бул аңлатпадан кери матрицаны белгилеў ушын қолланылатуғын  $A^{-1}$  белгилеўиниң мәниси аңсат түсиндириледі ( $E$  = «бир» деген мәнисти береді).

$$a_n = \langle \psi_n^{(r)} | \varphi \rangle, \quad b_k = \langle \psi_k^{(r)} | f \rangle \quad (1.9.5)$$

[(1.7.11)-формулаға қараңыз].

$\psi_m^{(r)}$  функцияларын белгилеп сайлап алғанда  $\varphi$  функциясы  $a_n$  коэффициентлердің жыйнағы арқалы, ал  $f$  функциясы  $b_k$  коэффициентлерінің жыйнағы менен анықланады. Сонлықтан, айтайық,  $\varphi$  функциясын (яғный  $\infty \times 1$  тәртібиндеги матрицаны) былайынша

$$\varphi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_n \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}, \quad (1.9.6)$$

ямаса төмендегидей қатар (яғный  $1 \times \infty$  түріндеги матрица) түрінде жаза аламыз<sup>10</sup>:

$$\varphi = (a_1 a_2 \dots a_n \dots). \quad (1.9.7)$$

Тап сол сыяқлы таллаулар  $f$  функциясы ушын да дурыс.

(1.9.3)- хәм (1.9.4)-қатарларды (1.9.1)-теңлемеге қойсақ,  $a_n$  хәм  $b_k$  коэффициентлери тек сан болғанлықтан  $\hat{Q}$  операторына тәсир етпейтуғынлығын есапқа алсақ

$$\sum_k b_k \psi_k^{(r)} = \sum_n a_n \hat{Q} \psi_n^{(r)} \quad (1.9.8)$$

теңлигине ийе боламыз. Бул теңликтің еки тәрәпин де  $\psi_m^{(r)}$  функцияларына скаляр көбейтеміз:

$$\sum_k b_k \langle \psi_m^{(r)} | \psi_k^{(r)} \rangle = \sum_n a_n \langle \psi_m^{(r)} | \hat{Q} \psi_n^{(r)} \rangle. \quad (1.9.9)$$

(1.9.2)-формулаға сәйкес  $b_k$  ның алдында турған коэффициенті  $\delta_{mk}$  ға тең. Сонлықтан шеп тәрәпте турған сумма  $b_m$  ге тең хәм биз

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n \quad (1.9.8)$$

аңлатпасына келеміз. Бул аңлатпада  $Q_{mn}$  символы арқалы

$$Q_{mn} = \langle \psi_m^{(r)} | \hat{Q} \psi_n^{(r)} \rangle = \int (\psi_m^{(r)})^* \hat{Q} \psi_n^{(r)} dV \quad (1.9.9)$$

<sup>10</sup> Тап сол сыяқлы берілген базисте (яғный  $e_k$  ортлары системасында)  $a$  векторы оның құраушылары болған  $a_k$  санларының жыйнағы менен анықланады.

аңлатпасы белгиленген.

(1.9.1)-теңлеме  $\varphi$  функциясының  $f$  функциясына түрлендіріуге жәрдем беретұғын қағыйданы анықлайды. Ал (1.9.8)-теңлеме болса  $a_n$  коэффициентлерінің жыйнағын (бул коэффициентлер жыйнағы  $\varphi$  функциясын береді)  $b_m$  (бул коэффициентлер жыйнағы болса  $f$  функциясын береді) коэффициенттері жыйнағына түрлендіріудің қағыйдасын анықлайды. Демек (1.9.8)-теңлеме (1.9.1)-теңлемінің басқа формадағы жазылыуы екен.  $a_n$  коэффициенттері бул формулада  $\varphi$  функциясын береді, ал  $b_m$  коэффициенттері  $f$  функциясын береді.  $Q_{mn}$  шамаларының жыйнағы  $\hat{Q}$  операторы болып табылады. Бул жыйнақ бағаналары менен қатарларының саны шексіз үлкен болған квадрат матрица түрінде жазылады:

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1n} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2n} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{m1} & Q_{m2} & \cdots & Q_{mn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}. \quad (1.9.10)$$

$f$  хәм  $\varphi$  функциялары арасындағы матрицалық қатнасқа сырттан қарағанда (1.9.1)-теңлемеге ұқсас форма беріуге болады. Буның ушын

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b \\ \cdots \\ b_m \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & Q_{mn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdots \\ a_n \\ \cdots \\ \cdots \end{pmatrix} \quad (1.9.11)$$

аңлатпасының [бул аңлатпаның оң тәрәпинде еки матрицаның көбеймеси тур] (1.9.8)-формулаға эквивалент екенлигин көрсетеміз.

Матрицаны матрицаға көбейтіудің қағыйдасы бойынша [(М.28)-формула]  $\Gamma$  хәм  $A$  матрицалары бир бирине көбейтилгенде ( $B = \Gamma A$ ) алынған  $B$  матрицасының  $\beta_{mk}$  элементтері  $\gamma_{mn}$  хәм  $\alpha_{nk}$  элементтері арқалы былайынша есапланады

$$\beta_{mk} = \sum_n \gamma_{mn} \alpha_{nk}. \quad (1.9.12)$$

Егер  $A$  матрицасы элементтері  $\alpha_{n1} = \alpha_n$  болған тек бир бағанаға ийе болса (1.9.12)-формула  $B$  матрицасының элементтері ушын  $\beta_{m1} = \sum_n \gamma_{mn} \alpha_n$  мәніслерин берди. Демек көбейме-матрица да элементтері  $\beta_{m1} = b_m$  болған бағана болып табылады екен. Соның менен бирге

$$\beta_m = \sum_n \gamma_{mn} \alpha_n. \quad (1.9.13)$$

$\alpha_n$ ,  $\gamma_{mn}$  хәм  $\beta_m$  шамаларының орнына сәйкес  $a_n$ ,  $Q_{mn}$  хәм  $b_m$  шамаларын алып биз (1.9.8)-аңлатпаға келемиз. Солай етип (1.9.11)-матрицалық жазыудың дурыс екенлиги дәлилленеди.

Солай етип  $\hat{Q}$  операторын (1.9.10)-матрица түрінде жазыу мүмкин екен. Бул матрицаның элементтері (1.9.9)-формула бойынша есапланады. Бул элементлер «базисти» сайлап алыудан ғәрезли. Яғный олардың мәніслері меншикли функциялары  $\varphi$  хәм  $f$  функцияларын қатарға жайыу ушын қолланылатұғын

қосымша  $\hat{R}$  операторынан ғәрезли.  $\varphi$  хәм  $f$  функцияларын қатарға жайыу коэффициентлериниң мәнислери де  $\hat{R}$  операторын сайлап алыудан ғәрезли.  $a_n$  коэффициентлериниң жыйнағы,  $b_m$  коэффициентлериниң жыйнағы хәм  $Q_{mn}$  матрицасы хаққында гәп еткенде  $r$ -көринисте алынған  $\varphi$  функциясы,  $f$  функциясы хәм  $\hat{Q}$  операторы нәзерде тутылады. Егер  $\hat{R}$  координата операторы болса, онда функциялардың хәм оператордың координаталық көриниси хаққында айтылады. Егер  $\hat{R}$  импульс операторы болып табылатуғын болса импульслик көринис алынады хәм тағы басқалар. Қәлеген қатнасқа кириўши барлық операторлар менен функцияларды бирдей көринисте алыу керек.

Егер (1.9.9)-формулада  $\psi_k$  функциясы сыпатында  $\hat{Q}$  операторының өзиниң меншикли функциялары  $\psi_k^{(q)}$  алынатугын болса, онда өзиниң меншикли көринисиндеги оператор алынады. Бул жағдайда (1.9.9)-формуланың жәрдеминде матрицалық элементлерди есаплау ушын пайдаланылатугын функциялардың  $\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n$  теңлемесин қанаатландырыуы ушын төмендегидей әпиұайыластырыу орын алады:

$$Q_{mn} = \langle \psi_m^{(q)} | \hat{Q} \psi_n^{(q)} \rangle \langle \psi_m^{(q)} | q_n \psi_n^{(q)} \rangle = q_n \varphi_{mn}. \quad (1.9.14)$$

Алынған нәтийжелер мынаны аңғартады: оператордың матрицасы өзиниң меншикли көринисинде диагоналлық оператор болып табылады, диагоналлық элементлер оператордың меншикли мәнислерине сәйкес келеди:

$$(Q_{mn}) = \begin{pmatrix} q_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & q_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & q_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (1.9.15)$$

Егер  $\hat{Q}$  операторы өзиниң меншикли көринисинде алынған болса ( $\varphi$  хәм  $f$  функциялары да  $q$ -көринисинде алынған) (1.9.8)-аңлатпа төмендегидей болып әпиұайыласады:

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n = \sum_n q_{mn} \delta_{mn} a_n = q_m a_m. \quad (1.9.16)$$

Бул нәтийже мыналарды аңлатады:  $b_m$  коэффициентлери  $a_m$  коэффициентлерин өзиниң меншикли көринисиндеги операторды анықлайтуғын диагоналлық матрицаның сәйкес диагоналлық элементине көбейтиу арқалы алынады.

(1.9.1)-теңлемедә  $\varphi$  сыпатында  $\hat{R}$  операторының  $\psi_k^{(r)}$  меншикли функциясын аламыз:

$$f = \hat{Q} \psi_k^{(r)}. \quad (1.9.17)$$

Бундай жағдайда (1.9.2) менен (1.9.5) ке сәйкес  $a_n = \delta_{nk}$ . Бул мәнисти (1.9.8)-аңлатпаға қойып

$$b_m = \sum_n Q_{mn} = Q_{mk}$$

формуласын аламыз. Демек (1.9.4) аңлатпасын есапқа алған ҳалда (1.9.17)-



функцияны былайынша жазыўға болады екен:

$$\hat{Q}\psi_k^{(r)} = \sum_m Q_{mk}^{(r)} \psi_m^{(r)} \quad (1.9.18)$$

(биз матрицалық элементте оның  $r$  көринисинде есапланғанлығын көрсетиў ушын жоқарыда  $(r)$  индексин жаздық).

(1.9.18)-қатнасты былайынша трактовкалаў мүмкин:  $|Q_{mk}|^2$  шамасы ҳалы  $\hat{Q}\psi_k^{(r)}$  функциясы менен тәрийипленетуғын системаның  $\psi_m^{(r)}$  ҳалында турыўының итималлығын анықлайды. Басқа сөзлер менен айтқанда  $|Q_{mk}|^2$  шамасы  $\hat{Q}$  операторы менен тәрийипленетуғын тәсирдің астында системаның  $\psi_k^{(r)}$  ҳалынан  $\psi_m^{(r)}$  ҳалына өтиўиниң итималлығын береді. Усы жағдайға сәйкес  $Q_{mk}$  шамасын  $k$  ҳалынан  $m$  ҳалына өтиўдің матрицалық элементи деп атайды.

Матрицаларға тийисли болған бир неше анықламаларды келтиремиз. Егер

$$(\tilde{A})_{mn} = A_{mn} \quad (1.9.19)$$

шәрти орынланатуғын болса, онда  $\tilde{A}$  матрицасын  $A$  матрицасына қатнасы бойынша транспонирленген деп атайды.

Солай етип транспонирленген матрица дәслепки матрицадан қатарларды бағаналар менен алмастырыў жолы менен алынады.

Элементлери  $A$  матрицасының элементлери менен комплексли түйинлес болған  $A^*$  матрицасын  $A$  матрицасы менен комплексли түйинлес матрица деп атаймыз. Олар ушын төмендегидей теңлик орын алады:

$$(A^*)_{mn} = (A_{mn})^*. \quad (1.9.20)$$

$A$  матрицасына эрмитлик түйинлес матрица деп

$$A_{mn}^+ = (\tilde{A}_{mn})^* = A_{mn}^* \quad (1.9.21)$$

қағыйдасы менен анықланатуғын  $A^+$  матрицасына айтамыз.

Демек  $A^+$  матрицасы  $A$  матрицасынан транспонирлеў ҳәм комплекс түйинлеслеў операцияларын избе-из орынлаў жолы менен алынады екен. (1.9.21)-аңлатпа эрмитлик түйинлес операторды анықлайтуғын (1.8.7)-аңлатпаға сәйкес келеді.

Ең ақырында

$$A_{mn} = A_{mn}^* = A_{mn}^+ \quad (1.9.22)$$

шәртин қанаатландыратуғын  $A_{mn}$  матрицасын өзи өзине түйинлес ямаса эрмитлик деп аталады [(1.8.9)- ҳәм (1.8.10)-аңлатпаларды салыстырыңыз]. Солай етип эрмитлик матрица жағдайында транспонирленген матрицаның элементлери дәслепки матрицаның комплексли түйинлес элементлерине сәйкес келеді.

Эрмитлик түйинлес матрицаның анықламасы болған (1.9.21)-аңлатпаның эрмитлик түйинлес оператордың (1.8.7)-анықламасына сәйкес келетуғынлығын көрсетемиз. (1.9.9)-, (1.8.7)- ҳәм (1.8.3)-аңлатпаларға сәйкес

$$A_{mn}^+ = \langle \psi_m | \psi_n \hat{A}^+ \rangle = \langle \psi_n \hat{A}^+ | \psi_m \rangle^* = \langle \psi_n | \hat{A}^+ \psi_m \rangle^* = A_{nm}^*.$$

Демек дәслепки анықлама сыпатында (1.8.7)-анықламаны алып биз (1.9.21)-анықламаға келдик.

Еки функцияның скаляр көбеймеси болған  $\langle \varphi | \psi \rangle$  көбеймесине эквивалент болған матрицалық аңлатпаны табамыз. Бул функцияларды базы бир  $\hat{R}$  операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз:

$$\varphi = \sum_m a_m \psi_m, \quad \psi = \sum_n b_n \psi_n.$$

Бул аңлатпаларды (1.7.9)-аңлатпаға қойсақ

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \left\langle \sum_m a_m \psi_m \left| \sum_n b_n \psi_n \right. \right\rangle = \sum_{m,n} a_m^* b_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \\ &= \sum_{m,n} a_m^* b_n \delta_{mn} = \sum_n a_m^* b_n \end{aligned} \quad (1.9.23)$$

аңлатпаларын аламыз [(1.7.10)-аңлатпаға қараңыз].

$r$  – көринисінде  $\varphi$  хәм  $\psi$  функциялары

$$\varphi \sim A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi \sim B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

матрицалары менен анықланады. (1.9.23)-аңлатпаны алыў ушын  $A^+$  хәм  $B$  матрицаларын бир бирине көбейтиў керек. Ҳақыйқатында да матрицаларды көбейтиў қағыйдасы бойынша

$$(a_1^* \quad a_2^* \quad \dots) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \sum_n a_n^* b_n.$$

Солай етип биз

$$\langle \varphi | \psi \rangle = A^+ B \quad (1.9.24)$$

формуласына келдик. (1.7.7)-формуладағы интеграл белгисиниң астындағы  $\varphi$  комплексли түйинлес функцияға (1.9.24)-формуладағы эрмитлик түйинлес матрица сәйкес келеди.

$Q$  шамасының орташа мәниси ушын матрицалық аңлатпаны табамыз. Буның ушын биз қарап атырған халдың пси-функциясын базы бир  $\hat{R}$  операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз. (яғный  $r$  – көринисіндеги пси-функциясын аламыз):  $\psi = \sum c_k \psi_k^{(r)}$  хәм бул аңлатпаны (1.7.14)-формулаға қоямыз:

$$\langle q \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| \hat{Q} \sum_n c_n \psi_n \right. \right\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle \psi_m | \hat{Q} \psi_n \rangle.$$

$\langle \psi_m | \hat{Q} \psi_n \rangle$  аңлатпасы  $\hat{Q}$  операторының  $r$  – көринисіндеги матрицалық элементи болып табылады. Демек

$$\langle q \rangle = \sum_{n,m} c_m^* Q_{mn} c_n \quad (1.9.25)$$

формуласын аламыз. Бул формула (1.7.14)-формуланың матрицалық аналогы болып табылады.

Егер  $\hat{Q}$  операторын меншикли көринисінде алсақ (бундай жағдайда пси-функцияны -көринисінде алыў керек болады) матрицалық элементлер  $Q_{mn} = q_n \delta_{mn}$  ге тең болады [(1.9.14)-аңлатпаға қараңыз]. Сонлықтан (1.9.25)-формула (1.7.12)-формулаға сәйкес келетуғын

$$\langle q \rangle = \sum_{n,m} c_m^* q_n \delta_{mn} c_n = \sum_{n,m} c_m^* q_n c_m$$

формулаға айланады.

Ақырында  $\hat{Q}\psi = q\psi$  теңлемесин матрицалық түрде шешиўге бола ма? деген мәселеге айқынлық киргиземиз [яғный -көринисіндеги  $Q_{mn}$  матрицасын билген халда  $Q$  шамасының  $q_n$  меншикли мәнислерин хәм меншикли функцияларын ( $r$ -көринисіндеги) табыў менен шуғылланамыз]. Теңлемеге  $\psi(x)$  тың орнына  $\hat{R}$  операторының меншикли функциялары бойынша жайылған қатардың  $\psi_n(x)$  функцияларын қоямыз:

$$\sum_n c_n \hat{Q} \psi_n(x) = q \sum_n c_n \psi_n(x).$$

Бул аңлатпаны  $\psi_m(x)$  функцияларына скаляр көбейтеміз:

$$\sum_n c_n \langle \psi_m | \hat{Q} \psi_n \rangle = q \sum_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle$$

Шеп тәрәптеги  $c_n$  көбейтиўшиси  $Q_{mn}$  шамаларының өзи болып табылады ( $Q_{mn}$  шамаларының -көринисіндеги  $\hat{Q}$  операторының матрицалық элементи екенлигин аңғарамыз). Демек

$$\sum_n c_n Q_{mn} = q \sum_n c_n \delta_{mn} = q c_m. \quad (1.9.26)$$

(1.9.26)-аңлатпада  $m = 1, 2, \dots$  мәнислерин қойыў жолы менен биз шексиз көп санлы  $c_1, c_2, \dots$  белгисизлерине ийе сызықлы бир текли теңлемелер системасын аламыз ( $Q_{mn}$  шамалары берилген деп есаплаймыз):

$$\begin{aligned} (Q_{11} - q)c_1 + Q_{12}c_2 + \dots + Q_{1m}c_m + \dots &= 0, \\ Q_{21}c_1 + (Q_{11} - q)c_2 + \dots + Q_{2m}c_m + \dots &= 0, \\ &\dots \\ Q_{m1}c_1 + Q_{m2}c_2 + \dots + (Q_{mm} - q)c_m + \dots &= 0. \end{aligned} \quad (1.9.27)$$

1-томның VII-қосымшасында егер анықлаўшысы нолге тең болса ғана бир текли сызықлы теңлемелер системасының нолге тең емес шешимлеринің болатуғынлығы атап өтилген еди:

$$\begin{vmatrix} Q_{11} - q & Q_{12} & \dots & Q_{1m} & \dots \\ Q_{21} & Q_{22} - q & \dots & Q_{2m} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ Q_{mq} & Q_{m2} & \dots & Q_{mm} - 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0. \quad (1.9.28)$$

(1.9.28)-аңлатпа белгисіз  $q$  шамасының шексіз үлкен дәрежесі үшін жазылған аңлатпа болып табылады. Оны шеклі болған  $N$  дана қатар хәм бағана үшін (1.9.28) түріндегі аңлатпаның  $N \rightarrow \infty$  шегіндегі аңлатпа сыпатында қарайға болады. Әлбетте (1.9.28)-аңлатпа бундай шек болған бар жағдайда ғана мәніске ийе болады.

(1.9.28)-теңleme шексіз көп санлы  $q_1, q_2, \dots, q_m, \dots$  түбірлерге ийе болады. Бул түбірлердің барлығы  $\psi(x)$  ты  $r$  –көринисінде (бундай көринисте  $Q_{mn}$  берілген) анықлайтуғын  $c_1, c_2, \dots, c_m, \dots$  коэффициентлеринің ноллик емес болған мәніслери алынатуғын  $q$  шамаларының мәніслери болып табылады. Демек (1.9.28)-теңлемениң түбірлери  $Q$  шамасының меншикли мәніслери болып табылады екен.

(1.9.27)-системаға  $q = q_1$  мәнісин қойып хәм оны  $c_n$  белгисизине қарата шешип  $q = q_1$  теңлигине сәйкес келетуғын  $\hat{Q}$  операторының меншикли функциясын анықлайды. (1.9.27)-теңлемелер системасына  $q = q_2$  мәнісин қойып екінші меншикли функцияны анықлайтуғын коэффициентлер жыйнағын табамыз. Бундай операцияларды шексіз дауам ете беріу мүмкін. Солай етип  $Q_{mn}$  матрицасы менен берілген  $\hat{Q}$  операторының меншикли мәніслери менен меншикли функцияларын табыу мәселеси шешиледи.

Егер  $Q_{mn}$  матрицасы өзинің меншикли көринисінде анықланған болса матрицаның барлық диагоналық емес элементлери нолге тең болады хәм (1.9.28)-теңleme мынадай түрге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} Q_{11} - q & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & Q_{22} - q & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & Q_{mm} - 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0.$$

Бул теңлемениң түбірлеринің  $q_1 = Q_{11}, q_2 = Q_{22}, \dots$  шамаларына тең екенлиги айқын. Демек биз белгили болған нәтижеге қайта келемиз: өзинің меншикли көринисінде жазылған матрицаның диагоналық элементлери бул шаманың меншикли мәніслерине тең.

Солай етип  $Q_{mn}$  матрицасын өзинің меншикли көринисине алып келиу үшін (1.9.28)-теңlemeдей теңleme дүзиу хәм оның түбірлерин табыу керек. Диагоналық түрге алып келинген матрицада бул түбірлер матрицаның элементлери болып табылады [(1.9.15-аңлатпаға қараңыз)].

Коммутацияланатуғын операторлар меншикли функциялардың улыұмалық системасына ийе болады (бул хәкқында келеси параграфта толығырақ айтылады). Демек олардың матрицаларын бир ұақытта диагоналық түрге алып келиу мүмкін екен.

## 1-10. Операторлар алгебрасы

Сызықты операторларды бир бирине қосыу хәм бир бирине көбейтиу мүмкін. Буннан былай биз сөзлерди жийи қайталамау үшін «сызықты» сөзин пайдаланбаймыз. Бирақ барлық ұақытта да сызықты оператор нәзерде тутылады.

$\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторларының суммасы  $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$  деп

$$\hat{C}\varphi = (\hat{A} + \hat{B})\varphi = \hat{A}\varphi + \hat{B}\varphi \quad (1.10.1)$$

шәрти менен анықланатуғын операторға айтамыз. (1.10.1)-аңлатпаны (1.9.9)-аңлатпаға қойып  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  хәм  $\hat{C}$  операторлары арасындағы матрицалық формадағы байланысты анықлаймыз

$$C_{mn} = A_{nm} + B_{mn}. \quad (1.10.2)$$

Бул аңлатпа матрицаларды қосыў қағыйдасына сәйкес келеди [(М.25)-формулаға қараңыз].

$\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторларының көбеймеси деп

$$\hat{K}\varphi = (\hat{A}\hat{B})\varphi = \hat{A}(\hat{B}\varphi) \quad (1.10.3)$$

шәртин қанаатландыратуғын  $\hat{K} = \hat{A}\hat{B}$  операторына айтамыз ( $\hat{K}\varphi$  функциясын табыў ушын дәслеп  $\hat{B}\varphi$  функциясын табыў керек, буннан кейин бул табылған функцияға  $\hat{A}$  операторы менен тәсир етемиз. (1.9.8)-формулаға сәйкес

$$K_{mn} = \langle \psi_m | \hat{A}\hat{B}\psi_n \rangle = \langle \psi_m | \hat{A}(\hat{B}\psi_n) \rangle. \quad (1.10.4)$$

Бул аңлатпада  $\psi_k$  арқалы  $\hat{B}$  операторының меншикли функциясы белгиленген.

$\hat{B}\psi_n$  функциясын басқа қәлеген функция сыяқлы сол  $\hat{B}$  операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жайыўға болады (яғный  $\hat{B}\psi_n = \sum c_k \psi_k$  түрінде).  $c_k$  коэффициентлери ушын (1.7.11)-формула бойынша  $c_k = \langle \psi_k | \hat{B}\psi_n \rangle$  шамасы алынады. Соңғы аңлатпа  $r$ -көринисиндеги  $\hat{B}$  операторының  $B_{kn}$  матрицалық элементи болып табылады. Демек

$$\hat{B}\psi_n = \sum_k B_{kn} \psi_k. \quad (1.10.5)$$

(1.10.5)-аңлатпаны (1.10.4)-аңлатпаға қойыў мынаны береді

$$K_{mn} = \langle \psi_m | \hat{A} \sum_k B_{kn} \psi_k \rangle = \sum_k B_{kn} \langle \psi_m | \hat{A} \psi_k \rangle = \sum_k B_{kn} A_{mk}.$$

Ең ақырында көбейтиўшилердің орынларын алмастырып

$$K_{mn} = \sum_k A_{mk} B_{kn} \quad (1.10.6)$$

формуласына келемиз. Бул формула матрицаларды бир бирине көбейтиў қағыйдасын қанаатландырады.

Операторлардың көбеймесиниң анықламасы бойынша оператордың квадраты  $\hat{Q}^2$  дегенимизде  $\hat{Q}$  операторы функциясына еки рет тәсир етиўди түсинемиз:

$$\hat{Q}^2\varphi = \hat{Q}(\hat{Q}\varphi). \quad (1.10.7)$$

Тап усындай жоллар менен оператордың жоқары дәрежелери де анықланады

$\tilde{K} = \tilde{A}\tilde{B}$  операторлардың көбеймеси менен транспонирленген операторды табамыз. Транспонирленген оператордың анықламасын хәм еки функцияның скаляр көбеймесиниң (1.7.8)-қәсийетин пайдаланып төмендегидей түрлендириўлер дизбегин жаза аламыз:

$$\begin{aligned}\langle \psi | \tilde{A} \tilde{B} \psi \rangle &= \langle (\tilde{B} \psi)^* | \tilde{A} \psi^* \rangle = \langle \tilde{A} \psi^* | (\tilde{B} \psi)^* \rangle = \\ &= \langle (\tilde{A} \psi^*)^* | \tilde{B} \psi \rangle = \langle \psi^* | \tilde{B} (\tilde{A} \psi^*) \rangle \langle \psi^* | \tilde{B} \tilde{A} \psi^* \rangle.\end{aligned}$$

Усының менен бир қатарда анықлама бойынша

$$\langle \psi | \tilde{K} \psi \rangle = \langle \psi^* | \tilde{K} \psi^* \rangle.$$

Алынған нәтийжелерди бир бири менен салыстырсақ

$$\tilde{\tilde{A}}\tilde{\tilde{B}} = \tilde{\tilde{B}}\tilde{\tilde{A}} \quad (1.10.8)$$

теңлигине ийе боламыз хәм еки оператордың көбеймесине транспонирленген оператор кери тәртіпте алынған транспонирленген көбейтиўшилердің көбеймесине тең екенлигин көреміз.

Транспонирленген матрицалар ушын да тап сондай қатнастар орын алады. (1.10.6)-аңлатпаға сәйкес  $A$  хәм  $B$  матрицаларының  $AB$  көбеймесиниң матрицалық элементи  $(AB)_{mn} = \sum_k A_{mk} B_{kn}$  формуласының жәрдемінде анықланады. (1.9.19)-аңлатпаны пайдаланып

$$\begin{aligned}(\tilde{\tilde{A}}\tilde{\tilde{B}})_{mn} &= (AB)_{mn} = \\ &= \sum_k A_{nk} B_{km} = \sum_k \tilde{A}_{kn} \tilde{B}_{mk} = \sum_k \tilde{B}_{mk} \tilde{A}_{kn} = (\tilde{\tilde{B}}\tilde{\tilde{A}})_{mn}\end{aligned}$$

аңлатпасын жазамыз. Буннан

$$\tilde{\tilde{A}}\tilde{\tilde{B}} = \tilde{\tilde{B}}\tilde{\tilde{A}} \quad (1.10.9)$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын көреміз

(1.8.6)-формулаға сәйкес

$$(\hat{A}\hat{B}\varphi)^* = (\hat{A}\hat{B})^* \varphi^*.$$

Усының менен бир қатарда

$$(\hat{A}\hat{B}\varphi)^* = [\hat{A}(\hat{B}\varphi)]^* = \hat{A}^*(\hat{B}\varphi)^* = \hat{A}^*\hat{B}^*\varphi^*.$$

Бул аңлатпаларды бир бири менен салыстырыўдан

$$(\hat{A}\hat{B})^* = \hat{A}^*\hat{B}^*. \quad (1.10.10)$$

аңлатпасы алынады.

Енди  $\hat{A}\hat{B}$  операторы менен эрмитлик түйинлес операторды табамыз.  $\hat{A}\hat{B}$  операторын бир оператор деп қарап (1.8.5)-аңлатпаны

$$\langle \varphi | \hat{A}\hat{B} \psi \rangle = \langle \varphi | (\hat{A}\hat{B})^+ | \psi \rangle$$

түрінде жазамыз. Егер  $\hat{A}\hat{B}\varphi = \hat{A}(\hat{B}\varphi)$  екенлігін есепке алсақ, онда

$$\langle \varphi | \hat{A}\hat{B} \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{A}^+ | \hat{B} \psi \rangle = \langle (\varphi | \hat{A}^+) \hat{B}^+ | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{A}^+ \hat{B}^+ | \psi \rangle$$

аңлатпасын жазамыз. Бул аңлатпалардың екеуін де салыстырыў

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{A}^+ \hat{B}^+. \quad (1.10.11)$$

қатнасын береді.

Алынған нәтиже мыналарды билдиреді: түйінлеслік пайда етилгенге шекем функцияға  $\hat{B}$  операторы менен тәсир етеді, ал буннан кейін алынған нәтижеге  $\hat{A}$  операторы менен тәсир етеді. Түйінлеслік пайда етилгеннен кейін функцияға дәслеп  $\hat{A}$  операторы менен тәсир етеді. Буннан кейін алынған нәтижеге  $\hat{B}$  операторы менен тәсир етиў керек. Демек түйінлеслік  $\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторларының тәсир етиўиниң избе-излігін өзгертеді екен. Бул жағдай көбейтиўшилердің саны екиден артық болған жағдайлар ушын да дурыс.

$\hat{C}\hat{Q}$  түріндегі операторды аламыз. Бул жерде  $\hat{C}$  операторы тек  $c$  санына көбейтиў болсын. (1.10.11)-аңлатпаға сәйкес  $(\hat{C}\hat{Q})^* = \hat{C}^+ \hat{Q}^+$ . 1-8 параграфта егер  $\hat{C}^+ = c$  болған жағдайда  $\hat{C}^+ = \hat{C}^*$  теңлігінің орынланатуғынлығы көрсетілген еді. Усы жағдайды есепке алған ҳалда

$$(\hat{C}\hat{Q})^+ = \hat{C}^* \hat{Q}^+. \quad (1.10.12)$$

Дара жағдайда

$$(i\hat{Q})^+ = -i\hat{Q}^+. \quad (1.10.13)$$

$\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторларының көбеймесине эрмитлик түйінлес болған матрицаны табамыз. (1.9.21)-аңлатпаға сәйкес

$$(\hat{A}\hat{B})_{mn}^+ = (\hat{A}\hat{B})_{nm}^* = \left( \sum_k A_{nk} B_{km} \right)^* = \sum_k A_{nk}^* B_{km}^* = \sum_k B_{mk}^+ A_{kn}^+.$$

Алынған нәтиже

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+ \quad (1.10.14)$$

теңлігінің орынланатуғынлығын аңғартады.

Демек еки матрицаның көбеймесине эрмитлик түйінлес матрица кери избе-излікте алынған эрмитлик түйінлес матрицалардың көбеймесинен турады екен.

Енди биз эрмитлик түйінлес операторды усы оператор тәсир ететуғын функцияның оң тәрәпине қойып жазыўдың себебин түсиндириў мүмкиншилигине ийеміз. Буның ушын (1.9.8)-теңлемеге итибар береміз. Бул теңлеме  $\hat{Q}$  операторының тәсирінде  $\varphi$  функциясын  $f$  функциясына айландырыўды тәрийиплейді. Бул теңлемени былайынша жазамыз:

$$b_{m1} = \sum_n Q_{mn} a_{n1}. \quad (1.10.15)$$

«1» индекси  $a$  хәм  $b$  матрицаларының тек бир бирден бағанаға ийе екенлигин билдиреди. (1.10.15)-қатнасты былайынша жаза аламыз:

$$b = Qa. \quad (1.10.16)$$

Бул аңлатпада  $b$ ,  $Q$  хәм  $a$  шамалары сәйкес матрицалар болып табылады. (1.10.16)-аңлатпа менен эрмитлик түйинлесликке ийе аңлатпаны жазамыз хәм (1.10.14) формуласынан пайдаланамыз:

$$b^+ = (Qa)^+ = a^+ Q^+. \quad (1.10.17)$$

Матрицаларды эрмитлик түйинлеске айландырғанда бағаналар қатарлар менен алмастырылады, матрица элементлери өзлеринің комплексли түйинлеслери менен алмастырылады. [(1.9.21)-аңлатпаны қараңыз]. Демек  $b^+$  хәм  $a^+$  матрицалары да бир бирден қатарларға ийе болады. (1.10.7)-аңлатпадағы матрицаны кестелер түрінде көрсетсек

$$(b_1^* b_2^* \dots b_m^* \dots) = (a_1^* a_2^* \dots a_n^* \dots) \begin{pmatrix} Q_{11}^* & Q_{21}^* & \dots \\ Q_{12}^* & Q_{22}^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix} \quad (1.10.18)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада  $Q_{mn}^*$  элементлерине ийе матрица  $\hat{Q}^+$  операторын көрсетеди.

(1.10.17)- хәм (1.10.18)-аңлатпаларда  $Q^+$  матрицасы  $a^+$  матрицасының оң тәрәпинде тұрғанда ғана дурыс нәтижениң шығатуғынлығын аңсат көрийге болады (матрицаларды бир бирине көбейткенде қатардың бағанаға көбейтилетуғынлығын еске түсиреміз). Буннан  $Q^+$  матрицасын усы матрица тәсир ететуғын функцияның оң тәрәпине жазыудың керек екенлиги келип шығады.

Улыўма айтқанда операторлардың көбеймеси коммутативлик емес:

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$$

Бул жағдайдың дурыс екенлигине  $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$  хәм  $\hat{B} = x$  операторларының мысалында исенийге болады. Ҳақыйқатында да:

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B})\varphi &= \frac{\partial}{\partial x}(x\varphi) = x\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \varphi. \\ (\hat{B}\hat{A})\varphi &= x\frac{\partial\varphi}{\partial x}. \end{aligned} \quad (1.10.19)$$

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \quad (1.10.20)$$

шәрти орынланатуғын операторларды бир бири менен коммутацияланатуғын операторлар деп атаймыз. Егер (1.10.20)-шәрт орынланбайтуғын болса операторлар бир бири менен коммутацияланбайдуғын операторлар деп есаплаймыз.

$$\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A} \quad (1.10.21)$$



шәрти орынланатуғыны операторларды антикоммутацияланыўшы операторлар деп атаймыз.

$\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторларынан пайда етилген  $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  операторын бул оператордың коммутаторы деп атайды хәм  $[\hat{A}, \hat{B}]$  арқалы белгилейди. Солай етип

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (1.10.22)$$

(1.10.19)-аңлатпаға сәйкес

$$\left[ \frac{\partial}{\partial x}, x \right] = \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} = 1.$$

Бул  $\left[ \frac{\partial}{\partial x}, x \right]$  операторы менен базы бир  $\varphi$  функциясына тәсир еткенимизде биз қайтадан сол  $\varphi$  функциясын алатуғынымызды аңлатады. Функцияны өзгериссиз қалдыратуғын операторды бирлик оператор деп атаймыз. Демек  $\frac{\partial}{\partial x}$  хәм  $x$  операторларының коммутаторы бирлик операторға тең екен.

Коммутацияланатуғын операторлардың коммутаторы нолге тең.

Квантлық механикада операторлардың жәрдеминде физикалық шамалар көрсетиледи (сүүретленеди). Енди операторларды қосыў менен көбейтиў қағыйдаларының физикалық шамаларды қосыў хәм көбейтиў менен қалай сәйкес келетуғынлығын анықлаймыз.

Мейли физикалық еки  $Q$  хәм  $R$  шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғын болсын.  $Q$  шамасы  $q_1$  мәнисине, ал  $R$  шамасы  $r_n$  мәнисине ийе болатуғын халдың пси-функциясы бир ўақытта еки теңлемени қанаатландырыўы керек:

$$\hat{Q}\psi_n = q_n\psi_n, \quad (1.10.23)$$

$$\hat{R}\psi_n = r_n\psi_n. \quad (1.10.24)$$

Демек бул жағдайда пси-функциясы еки оператордың да меншикли функциясы болыўы керек. Солай етип бир ўақытта өлшенетуғын шамалардың операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады екен. (1.10.23) хәм (1.10.24) теңлемелерди қосып

$$(\hat{Q} + \hat{R})\psi_n = (q_n + r_n)\psi_n \quad (1.10.25)$$

аңлатпасын аламыз. Демек  $\hat{Q} + \hat{R}$  операторының меншикли мәнислери сол  $\hat{Q}$  хәм  $\hat{R}$  операторларының меншикли мәнислериниң қосындысына тең болады екен. Демек  $Q$  хәм  $R$  шамаларының қосындысы дегенимизде меншикли мәнислери қосылыўшы шамалардың меншикли мәнислериниң қосындысына тең болған  $Q + R$  шамасын түсиниўимиз керек екен.

Бир ўақытта өлшенетуғын еки  $Q$  хәм  $R$  шамаларының көбеймеси деп меншикли мәнислери көбейтилетуғын шамалардың меншикли мәнислериниң көбеймесине тең  $QR$  шамасына айтамыз. Усыған байланыслы  $Q$  хәм  $R$  шамаларының көбеймесиниң операторын  $\hat{K}$  арқалы белгилеп

$$\hat{K}\psi_n = q_n r_n \psi_n \quad (1.10.26)$$

аңлатпасын жазыў мүмкин.

(1.10.24)-теңлемеге  $\hat{Q}$  операторы менен тәсир етемиз хәм бул жағдайда (1.10.23)-теңлемени итибарға аламыз:

$$\hat{Q}\hat{R}\psi_n = r_n\hat{Q}\psi_n = r_nq_n\psi_n = q_nr_n\psi_n. \quad (1.10.27)$$

Алынған нәтийжени (1.10.26)-аңлатпа менен салыстырыў (1.10.3)-қағыйдаға сәйкес келетуғын еки шаманың операторларының көбеймеси ушын  $\hat{K} = \hat{Q}\hat{R}$  аңлатпасын береди.

Жоқарыда айтылғанлардан  $Q$  шамасының квадратына  $\hat{Q}^2$  операторының жуўап беретуғынлығы келип шығады. Бул аңлатпада  $\hat{Q}$  арқалы  $Q$  шамасының операторы белгиленген. Тап сол сыяқлы  $Q^s$  шамасына  $\hat{Q}^s$  операторының сәйкес келетуғынлығын анықлаўымыз мүмкин.

(1.10.23)-теңлемеге  $\hat{R}$  операторы менен тәсир етип (1.10.24)-аңлатпаны есапқа алып

$$\hat{R}\hat{Q}\psi_n = r_n\hat{R}\psi_n = q_nr_n\psi_n.$$

теңлигин аламыз. (1.10.27)-аңлатпа менен салыстырыў  $\hat{Q}\hat{R} = \hat{R}\hat{Q}$  екенлигин дәлиллейди, яғный  $\hat{Q}$  хәм  $\hat{R}$  операторлары бир бири менен коммутацияланады екен.

Алынған нәтийжелерден төмендегише жуўмақлар шығарыў мүмкин.

Егер еки физикалық шама бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғын болса, онда:

1) олардың операторлары улыўмалық меншикли функцияларға ийе болады,

2) олардың операторлары бир бири менен коммутацияланады.

1)- хәм 2)- тастыйықлаўлар бир биринен келип шығады. Биз жоқарыда 1)-тастыйықлаўдан 2)-тастыйықлаўдың келип шығатуғынлығын көрсеткен едик. Енди 2)-тастыйықлаўдан 1)-тастыйықлаўдың келип шығатуғынлығын дәлиллеймиз.

Мейли  $\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болсын. Олардың меншикли функциялары

$$A\psi_n^{(a)} = a_n\psi_n^{(a)}, \quad (1.10.28)$$

$$B\psi_n^{(b)} = b_n\psi_n^{(b)} \quad (1.10.29)$$

теңлемелерин қанаатландырады. (1.10.28)-теңлемеге  $\hat{B}$  операторы менен тәсир етемиз хәм  $\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторларының орынларын алмастырыўға болатуғынлығынан пайдаланамыз:

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n^{(a)} = a_n\hat{B}\psi_n^{(a)} \rightarrow \hat{A}[\hat{B}\psi_n^{(a)}] = a_n[\hat{B}\psi_n^{(a)}].$$

Алынған нәтийже  $[\hat{B}\psi_n^{(a)}]$  функциясының турақлы с көбейтиўши дәллигинде  $\hat{A}$  операторының  $a_n$  меншикли мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциясына сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Яғный

$$\hat{B}\psi_n^{(a)} = c\psi_n^{(a)}.$$

Алынған нәтийжеден өз гезегинде  $\psi_n^{(a)}$  функциясының  $\hat{B}$  операторының меншикли функциясы екенлиги келип шығады. Соның менен бирге  $c = b_n$ . Солай етип  $\hat{A}$  операторының қәлеген меншикли функциясы болған  $\psi_n^{(a)}$  функциясы  $\hat{B}$  операторыныңда меншикли функциясы болады екен. (1.10.29)-теңлемеге  $\hat{A}$

операторы менен тәсир етип хәм жоқарыдағы таллаўларымыздай таллаўлардан кейин биз  $\hat{B}$  операторының қәлеген меншикли функциясының  $\hat{A}$  операторының да меншикли функциясы болатуғынлығына ийе боламыз. Солай етип коммутацияланатуғын операторлардың улыўмалық меншикли функциялардың системасына ийе болатуғынлығын дәлилледик.

Параграфтың ақырында биз физикалық шамаларды сәўлелендиретуғын матрицалар ҳаққында бир неше ескертиўлер келтиремиз. Биз жоқарыда бир ўақытта өлшенетуғын  $Q$  хәм  $R$  физикалық шамаларына  $\hat{Q}\hat{R}$  операторының сәйкес келетуғынлығын көрдик. Усыған сәйкес бул шамалардың көбеймесиниң матрицасы  $\hat{Q}\hat{R}$  операторының матрицасы болып табылады. Бул матрица (1.10.6)-аңлатпаның жәрдемінде анықланады:

$$(QR)_{mn} = \sum_k Q_{mk} R_{kn}. \quad (1.10.30)$$

Алынған нәтийже еки шаманың көбеймесиниң матрицасының көбейтилетуғын шамалардың матрицаларының көбеймесине тең екенлигин көрсетеди. Усыған сәйкес  $Q$  шамасының квадратының матрицасы

$$(Q^2)_{mn} = \sum_k Q_{mk} Q_{kn} \quad (1.10.31)$$

аңлатпасының жәрдемінде есапланады.

### 1-11. Анықсызлық қатнастары

$\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторлары бир бири менен коммутацияланбайтуғын болса, онда усындай операторларға сәйкес келетуғын физикалық шамалар бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алмайды. Усындай шамалардың анықсызлықларының бир бири менен қандай қатнасқа ийе екенлигин анықлаўға тырысамыз.

Өлшеўлер нәтийжелериниң пытыраңқылығының характеристикасы сыпатында айырым өлшеўлердиң нәтийжелериниң бул шаманың орташа мәнисинен орташа квадратлық аўысыўын аламыз. Айырым өлшеўлердеги аўысыў

$$\Delta a = a - \langle a \rangle.$$

Бул шама ушын оператор жазамыз

$$\widehat{\Delta A} = \hat{A} - \langle a \rangle. \quad (1.11.1)$$

$\langle a \rangle$  шамасына сәйкес келетуғын оператор әдеттеги сан болып табылады).

Анықламасы бойынша орташа квадратлық аўысыў  $\sqrt{\langle (\Delta a)^2 \rangle}$  шамасына тең. Демек орташа квадратлық аўысыўды табыў мәселеси  $\langle (\Delta a)^2 \rangle$  шамасын анықлаўға алып келинеди екен. Егер  $\Delta a$  шамасы ушын  $\widehat{\Delta A}$  операторы жазылатуғын болса, онда  $(\Delta a)^2$  шамасы ушын  $(\widehat{\Delta A})^2$  операторының жазылыўы керек (1-10 параграфқа қараңыз). Орташа мәнислерди есаплаўдың улыўмалық қағыйдасы бойынша

$$\langle (\Delta a)^2 \rangle = \int \psi^* (\widehat{\Delta A})^2 \psi dV. \quad (1.11.2)$$

Тап сол сыяқлы

$$\langle (\Delta b)^2 \rangle = \int \psi^* (\widehat{\Delta B})^2 \psi dV. \quad (1.11.3)$$

Енди  $\eta$  хақыйқый параметринен ғәрезли болған

$$\mathcal{I}(\eta) = \int |(\eta \widehat{\Delta A} - i \widehat{\Delta B}) \psi|^2 dV \geq 0 \quad (1.11.4)$$

жәрдемши интегралын қараймыз. Бул интегралдың терис мәниске ийе болмайтуғынлығы анық. Оны төмендегише жазамыз:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\eta) &= \int [(\eta \widehat{\Delta A} - i \widehat{\Delta B}) \psi] [(\eta \widehat{\Delta A}^* - i \widehat{\Delta B}^*) \psi^*] dV = \\ &= \int (\eta \widehat{\Delta A} \psi - i \widehat{\Delta B} \psi) (\eta \widehat{\Delta A}^* \psi^* - i \widehat{\Delta B}^* \psi^*) dV. \end{aligned}$$

Интеграл белгисиниң астындағы қаўсырмаларды ашамыз хәм интегралды

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\eta) &= \eta^2 \int (\widehat{\Delta A} \psi) \widehat{\Delta A}^* \psi^* dV + i\eta \int (\widehat{\Delta A} \psi) \widehat{\Delta B}^* \psi^* dV - \\ &- i\eta \int (\widehat{\Delta B} \psi) \widehat{\Delta A}^* \psi^* dV + \int (\widehat{\Delta B} \psi) \widehat{\Delta B}^* \psi^* dV \end{aligned}$$

түринде жазамыз.

Операторлардың өзи өзине түйинлес екенлигинен пайдаланып  $(\widehat{\Delta A} \psi)$  ны (1.8.13)-аңлатпада қатнаһатуғын функциялардың бири сыпатында қарап хәр бир интегралда (1.8.13) түрлендириўин әмелге асырамыз. Усының менен бирге екнши хәм үшінши интегралларды байланыстырамыз. Нәтийжеде

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\eta) &= \eta^2 \int \psi^* (\widehat{\Delta A})^2 \psi dV - i\eta \int \psi^* (\widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B} - \widehat{\Delta B} \widehat{\Delta A}) \psi dV + \\ &+ \int \psi^* (\widehat{\Delta B})^2 \psi dV \geq 0 \end{aligned} \quad (1.11.5)$$

формуласына келемиз. Биринши хәм үшінши интеграллар сәйкес  $\langle (\Delta a)^2 \rangle$  хәм  $\langle (\Delta b)^2 \rangle$  шамаларына тең [(1.11.2)- хәм (1.11.3)-аңлатпаларға қараңыз]. Екнши интеграл белгиси астында  $\widehat{\Delta A}$  хәм  $\widehat{\Delta B}$  операторларының коммутаторы тур. (1.11.5)-аңлатпадағы жормал бирликтен қутылыў ушын бул коммутаторды  $i\widehat{K}$  арқалы белгилеймиз, яғный

$$[\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}] = \widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B} - \widehat{\Delta B} \widehat{\Delta A} = i\widehat{K} \quad (1.11.6)$$

белгилеўин киргиземиз.

(1.11.6)-аңлатпаға  $\widehat{\Delta A}$  ушын жазылған (1.11.1)-аңлатпаны хәм тап сол сыяқлы  $\widehat{\Delta B}$  операторы ушын жазылған аңлатпаны қоямыз:

$$(\hat{A} - \langle a \rangle)(\hat{B} - \langle b \rangle) - (\hat{B} - \langle b \rangle)(\hat{A} - \langle a \rangle) = i\widehat{K}.$$

Қурамалы емес түрлендириўлерден кейин шеп тәрепи  $\hat{A}$  хәм  $\hat{B}$  операторларының коммутаторына айланады. Демек

$$[\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}] = [\widehat{A}, \widehat{B}] = i\widehat{K}. \quad (1.11.7)$$

Сонлықтан  $i\widehat{K}$  шамасын  $\widehat{A}$  хәм  $\widehat{B}$  операторларының коммутаторы деп есаплайға болады. (1.11.6)-белгилеуден пайдаланып (1.11.5)-аңлатпаның екінші ағзасын

$$-i\eta \int \psi^*(i\widehat{K})\psi dV = \eta \int \psi^*\widehat{K}\psi dV = \eta(k)$$

түрінде жазыўға болады. Бул аңлатпада  $\langle k \rangle$  арқалы  $\widehat{K}$  операторының жәрдеминде сүүретленетуғын физикалық шаманың орташа мәніси белгиленген.

Жоқарыда айтылғанлардың барлығын нәзерде тутып (1.11.5)-формуланы былайынша жазыўға болады:

$$J(\eta) = \eta^2 \langle (\Delta a)^2 \rangle + \eta(k) + \langle (\Delta b)^2 \rangle \geq 0. \quad (1.11.8)$$

Енди  $\alpha x^2 + \beta x + \gamma$  үш ағзалысының  $\alpha > 0$  шәрти орынланғанда  $x$  шамасы ҳеш қашан терис мәнислерге ийе болмайтуғын жағдай ушын коэффициентлер арасындағы қатнасты изертлеймиз. Буның ушын

$$\alpha x^2 + \beta x + \gamma = \alpha \left( x + \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2 + \gamma - \beta^2/4\alpha$$

түрлендириўин жүргиземиз. Бул аңлатпаның минималлық мәніси  $\gamma - \beta^2/4\alpha$  шамасына тең (бул мәніси қаўсырманың ишиндеги аңлатпа нолге айланатуғын  $x$  тың мәнисинде алынады). Демек үш ағзалының терис емес мәнислери ушын

$$\gamma - \beta^2/4\alpha \geq 0 \text{ ямаса } \alpha\gamma \geq \beta^2/4$$

теңсизликлериниң орынланыўы шәрт. Алынған нәтийжени (1.11.8) үш ағзалысына қолланып

$$\langle (\Delta a)^2 \rangle \langle (\Delta b)^2 \rangle \geq \langle k \rangle^2/4$$

шәртине келемиз. Буннан

$$\sqrt{\langle (\Delta a)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta b)^2 \rangle} \geq \langle k \rangle/2 \quad (1.11.9)$$

теңлигин аламыз.

(1.11.9)-аңлатпа анықсызлық қатнасы деп аталады. Бул аңлатпадан бизге белгили болған нәтийже келип шығады: Егер  $\widehat{A}$  хәм  $\widehat{B}$  операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болса, яғный  $\widehat{K} = 0$  болса, онда  $A$  хәм  $B$  шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алады.

## 1-12. Үзликсиз спектр

Егер  $\widehat{Q}$  операторы  $q$  меншикли мәнислериниң үзликсиз спектрине ийе болатуғын болса, онда меншикли функцияларды номерлеўге болмайды. Бул функцияларды бир биринен айырыў ушын функцияның символына индекс сыпатында усы функция

сәйкес келетуғын  $q$  меншикли мәнісін жазамыз. Мысалы  $\psi_q$  хәм тағы басқалар.

(1.7.4)-формуладан айырма соннан ибарат, ықтыярлы  $\psi$  функциясын оператордың меншикли функциялары бойынша жайылған қатар интеграл түрине ийе болады:

$$\psi(x) = \int c(q)\psi_q(x)dq. \quad (1.12.1)$$

Интеграллау  $Q$  шамасы ийелей алатуғын мәніслердің барлық областлары бойынша жүргизиледи.  $c(q)$  коэффиценти  $q$  шамасының базы бир функциясы болып, ол пси-функцияны  $q$  көринисінде анықлайды.

(1.8.13)-формуладан кейін жазылған формулалардағы  $\psi_m$  функциясын  $\psi_{q'}$  менен,  $\psi_n$  функциясын  $\psi_{q''}$  менен, усыған сәйкес  $q_m$  шамасын  $q'$ , ал  $q_n$  шамасын  $q''$  пенен алмастырып

$$\langle \psi_{q'} | \psi_{q''} \rangle = \int \psi_{q'}^* \psi_{q''} dV = 0 \quad (1.12.2)$$

формуласын аламыз. Бул формуладан тутас спектрдің меншикли функцияларының дискрет спектрдің меншикли функциялары сыяқлы ортогоналлық екенлигин көреміз.

Үзликсиз спектрге ийе оператордың меншикли функцияларының нормировкасы мәселеси қурамалы мәселелердің бири болып табылады. Бундай функциялар ушын  $\int \psi_q^* \psi_q dV$  интегралы барлық ўақытта тарқалыўшы болып шығады (яғный шексизликке айланады).

1-15 параграфта бул жағдайды импульс операторының меншикли функциялары мысалында көрсетеміз.

Үзликсиз спектрге тийисли функциялардың нормировкасын Дирактың дельта-функциясының жәрдеминде әмелге асырады.

## III бап

# ФИЗИКАЛЫҚ ШАМАЛАРДЫҢ МЕНШИКЛИ МӘНИСЛЕРІ ХӘМ МЕНШИКЛИ ФУНКЦИЯЛАРЫ

## 1-13. Физикалық шамалардың операторлары

(1.4.3)- хәм (1.4.4)-формулаларды (1.7.14)-аңлатпа менен салыстырып координаталардың қәлегенинің операторының усы координатаға көбейтиў екенлигин көремиз:

$$x = \hat{x}, \quad y = \hat{y}, \quad z = \hat{z}. \quad (1.13.1)$$

Тап сол сыяқлы  $U(x, y, z)$  потенциаллық энергия операторының тәсири де тек усы функцияға көбейтиўден ибарат болады:

$$\hat{U} = U. \quad (1.13.2)$$

(1.7.3)-теңлемеге тийкарланып және де бир физикалық шаманың операторының түрин табыўға болады. Хәқыйқатында да толық энергия операторын  $\hat{H}$  арқалы белгилеп

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (1.13.3)$$

теңлемесин жазамыз<sup>11</sup>. Бул теңлемени (1.5.7)-теңлеме менен салыстырып

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U \quad (1.13.4)$$

екенлигине ийе боламыз. Бул операторды гамильтониан деп атайды.

Биз жоқарыда  $U$  шамасының потенциал энергия операторы  $\hat{U}$  екенлигин көрген едик.  $\hat{H}$  операторы болса толық энергия операторы болып табылады.  $H = T + U$  классикалық аңлатпасына сәйкес кинетикалық энергия операторының

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (1.13.5)$$

түрине ийе екенлигин көремиз. Бул аңлатпаны бөлекшениң кинетикалық энергиясы  $T$  менен импульси  $\mathbf{p}$  арасындағы байланысты сәўлелендиретуғын

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

аңлатпа менен салыстырып импульс операторы болған  $\hat{\mathbf{p}}$  шамасын  $\hbar\nabla$  шамасына ( $\nabla$  арқалы Гамильтон операторы белгиленген) деп болжаўға болады. (1.13.5)-оператордың аңлатпасындағы минус белгисин  $\hat{\mathbf{p}}$  шамасына плюс ямаса минус

<sup>11</sup>Квантлық механикада энергияны тезлик арқалы емес, ал импульс арқалы аңлатады. Аналитикалық механикада импульс арқалы аңлатылған энергияны Гамильтон функциясы деп атайды хәм  $H$  арқалы белгилейди.

белгиси менен алынған жормал бирликти киргизіу менен алыуға болады. Классикалық механикаға шеклик өтіудің жәрдеминде  $i$  көбейтіушисин минус белгиси менен алыудың керек екенлигин көрсетіуге болады. Демек

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (1.13.6)$$

Усыған сәйкес импульстің құраушыларының операторлары

$$\hat{p}_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.13.7)$$

түрине ийе болады.

Биз барлық уақытта да квантлық механикада қабыл етилген қағыйда бойынша жүрдик: операторлар арасындағы қатнастар классикалық физикадағы бақланатуғын сәйкес физикалық шамалар арасындағы қатнастардай болыуы керек. Бул қағыйда 1-2 параграфта гәп етилген сәйкеслик принципинің нәтижеси болып табылады.

$\hat{\mathbf{p}}$  хәм  $\hat{\mathbf{r}}$  операторларының қандай түрге ийе болатуғынлығын билгеннен кейин [(1.13.1)-формулаға сәйкес  $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ ] импульс моменти  $\mathbf{M}$  ушын операторды жазыуымызға болады. Оны қозғалыс муғдарының моменти операторы ямаса мүйешлик момент операторы деп атайды. Биз көбинесе мүйешлик момент операторы атамасынан пайдаланамыз. Классикалық механикада  $\mathbf{M} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$ . Демек

$$\hat{\mathbf{M}} = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}] = [\mathbf{r}, -i\hbar\nabla] = i\hbar[\mathbf{r}\nabla]. \quad (1.13.8)$$

Векторлық көбеймени анықлағыш түрінде жазамыз:

$$\hat{\mathbf{M}} = -i\hbar \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}.$$

Буннан мүйешлик момент құраушылары операторлары ушын төмендегидей аңлатпа алыуға болады:

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{M}_z &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{M}_y &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (1.13.9)$$

Мүйешлик моменттің квадраты операторы құраушылары ушын жазылған операторлардың аңлатпалары арқалы анықланады:

$$\hat{\mathbf{M}}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2. \quad (1.13.10)$$

Көпшилик жағдайларда мүйешлик момент операторының квадраты хәм құраушылары ушын сфералық координаталарды пайдаланған қолайлы болады. Хәр қыйлы координаталар арасындағы байланыстарды сәулендиретуғын формулалар тийкарында



$$\hat{M}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (1.13.11)$$

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad (1.13.12)$$

формулаларын жаза аламыз.

(1.13.12)-формуладағы фигуралық қаўсырма ишинде турған аңлатпа сфералық координаталарда алынған Лаплас операторының мүйешлик бөлеги болып табылады. Бул аңлатпаны  $\Delta_{\vartheta, \varphi}$  арқалы аңлатып

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi} \quad (1.13.13)$$

аңлатпасын жазыўға болады.

Координата  $\mathbf{r}$  диң (1.13.11) — (1.13.13) формулаларының ҳеш қайсысына да кирмейтуғынлығын аңғарамыз.

Мүйешлик момент операторы  $\delta\varphi$  шексиз киши мүйешине бурыў операторы менен тығыз байланысқан. Бундай бурыўға еки түрли трактовка бериў мүмкин. Бириншиден, координаталар системасы қозғалмайды, ал координата басы этирапында биз қарап атырған бөлекшелер системасы бурылады. Екиншиден бөлекшелер системасы қозғалыссыз қалады, ал координаталар системасы бурылады ( $K$  системасы  $K'$  системасына өтеди). Еки жағдайда да бөлекшелердиң координаталары өзгереді, яғный  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$  түрлендириўи орын алады. Координаталардың бирдей өзгерисин алыў ушын биз жоқарыда қараған еки жағдайда бурыўларды қарама-қарсы бағытта әмелге асырыў керек.

Координата көшерлерин бурғанда координаталардың өзгерислерин координаталарды түрлендириў операторы болған  $\hat{g}$  операторының тәсири деп қараў мүмкин:

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{g} \hat{\mathbf{r}}. \quad (1.13.14)$$

Кери түрлендириў

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{g}^{-1} \hat{\mathbf{r}}' \quad (1.13.15)$$

түрине ийе болады.

Бөлекшелер системасын бурғанда координаталардың өзгерислерин  $\hat{G}$  операторының тәсири деп қарай аламыз:

$$\hat{\mathbf{r}}' = \hat{G} \hat{\mathbf{r}}. \quad (1.13.16)$$

Бундай жағдайда

$$\hat{G} = \hat{g}^{-1} \quad (1.13.17)$$

екенлиги өз-өзинен айқын ( $\hat{g}$  хәм  $\hat{G}$  операторларын избе-из қолланғанда бөлекшелердиң координаталары өзгериссиз қалады, яғный  $\hat{G} \hat{g} = 1$ ).

(1.13.14)- хәм (1.13.16)-түрлендириўлер менен байланыслы болған пси-функциясының өзгерисин қараймыз.

Бөлекшелер системасын шексиз киши  $\delta\varphi$  мүйешине бурғанда (эпиўайылық ушын биз системаны тек бир бөлекшеден турады деп есаплайық) бөлекшениң

радиус-векторы  $\delta \mathbf{r} = [\delta \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}]$  өсимин алады. Демек

$$\mathbf{r}' = \hat{G}\mathbf{r} = \mathbf{r} + \delta \mathbf{r} = \mathbf{r} + [\delta \mathbf{r}, \mathbf{r}]. \quad (1.13.18)$$

Пси-функцияның сәйкес өзгерісін оған  $\hat{R}_G$  операторының тәсірі сыпатында қарайға болады:

$$\psi(\mathbf{r}') = \hat{R}_G \psi(\mathbf{r}). \quad (1.13.19)$$

( $G$  индекси координатаның өзгерісі бөлекшелер системасының бурылыуы менен байланысқан екенлігін көрсетеді). (1.13.18)-аңлатпаны есапқа алып

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \nabla \psi(\mathbf{r}) \delta \mathbf{r} = \\ &= \psi(\mathbf{r}) + \{[\delta \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}] \nabla\} \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

түрінде жазыуға болады. Фигуралық қауысырма ишінде тұрған векторлардың аралас көбеймеси үшін циклық орын алмастырыуды әмелге асырып

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}') &= \psi(\mathbf{r}) + \{[\delta \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{r}] \nabla\} \psi(\mathbf{r}) = (1 + \delta \boldsymbol{\varphi} [\mathbf{r} \nabla]) \psi(\mathbf{r}) = \\ &= \{1 + (i/\hbar) \delta \boldsymbol{\varphi} \hat{\mathbf{M}}\} \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

аңлатпасын аламыз [(1.13.8)-аңлатпаға қараңыз]. (1.13.19)-аңлатпа менен салыстырыу

$$\hat{R}_G = 1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \delta \boldsymbol{\varphi} \hat{\mathbf{M}} \quad (1.13.20)$$

аңлатпасын береді.

Енді системаны  $\delta \boldsymbol{\varphi}$  мүйешке бұрғанда пси-функцияны түрлендіріу операторын табамыз. Бұндай операторды биз жоқарыда  $\hat{R}_g$  арқалы белгілейік. Координаталар системасын бурыу системаның халын өзгертпейтуғын болғанлықтан жаңа координаталардың жаңа функциясы гөне координаталардың гөне функциясындай болады, яғный

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}). \quad (1.13.21)$$

Пси-функцияны бурыуды түрлендіретуғын бурыу операторы

$$\psi'(\mathbf{r}') = \hat{R}_g \psi(\mathbf{r}')$$

теңлігінен анықланады (функцияның аргументін белгілеудің парқы жоқ,  $\mathbf{r}'$  шамасының орнына шеп тәрепке де, оң тәрепке де  $\mathbf{r}$  шамасын қойыуға болады). Бұннан (1.13.21)-аңлатпаны дыққатқа алып

$$\psi(\mathbf{r}) = \hat{R}_g \psi(\mathbf{r}') \quad (1.13.22)$$

аңлатпасын аламыз. (1.13.15)-аңлатпаны есапқа алып бұл қатнастың түрін былайынша өзгертеміз:

$$\psi(\mathbf{r}') = \hat{R}_g^{-1} \psi(\mathbf{r})$$

(1.13.19)-аңлатпа менен салыстырыў  $\hat{R}_{g^{-1}} = \hat{R}_G$  екенлигин көрсетеди. Бул жағдай (1.13.17)-аңлатпаға сәйкес келеди.

(1.13.20)-қатнастың жәрдемінде мүйешлик момент операторына (18.8)-анықламаға салыстырғанда буннан да улыўмалырақ анықлама бериўге болады. Бул улыўмалық анықлама «орбиталық» қозғалыс ҳаққындағы көз-қарас пенен пүткиллей байланыссы емес. Сонлықтан бул жаңа анықламаны буннан да қурамалы жағдайларға, мысалы спинлик момент ушын тарқатылыўы мүмкин

Классикалық формулалар менен уқсаслығына байланыссы барлық физикалық шамалар ушын операторларды ала бериўге болмайды. Мысалы спин сыяқлы шама бар. Бундай шаманың классикалық аналогы жоқ. Бундай шаманың операторлары кейинирек келтирилип шығылады.

### 1-14. Физикалық шамалардың операторларының коммутациясының қағыйдалары

Қәлеген еки координатаның операторларының бир бири менен коммутацияланатуғынлығы өз-өзинен түсиникли ( $\hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} = 0$  ҳәм басқалар). Демек бөлекшениң барлық үш координатасы бир ўақытта анық мәнислерге ийе болады екен. Тап усындай тастыйықлаў импульстиң қураўшылары ушын да дурыс ( $\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} = 0$ ).

$\hat{x} = x$  ҳәм  $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  операторларының коммутаторын табамыз. Буның ушын коммутатордың базы бир  $\psi$  функциясына тәсирин қараймыз:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \psi = x \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) = i\hbar \psi.$$

Алынған нәтийжеден

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad (1.14.1)$$

екенлиги келип шығады. (1.11.7)-аңлатпаға сәйкес бал жағдайда  $\hat{K}$  операторының орнында  $\hbar$  турыпты. Сонлықтан  $\langle k \rangle = \hbar$  ҳәм (1.11.9)-аңлатпа төмендегидей түрге енеди:

$$\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle} \geq \hbar/2. \quad (1.14.2)$$

Биз әдетте (1.2.1)-аңлатпа түринде жазылатуғын Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасына келдик. Енди биз (1.2.1)-аңлатпадағы  $\Delta x$  ҳәм  $\Delta p_x$  шамаларының олардың орташа мәнислеринен орташа квадратлық аўысыўлары екенлигин түсиниўимиз керек.

$x \cdot \partial \psi / \partial y = \partial (x\psi) / \partial y$  болғанлықтан  $\hat{x}$  ҳәм  $\hat{p}_y$  операторлары коммутацияланатуғын операторлар болып шығады. Демек  $x$  шамалары бир ўақытта анық мәнислерге ийе болатуғын бөлекшениң ҳалының болыўы мүмкин. Тап усындай тастыйықлаў  $x$  ҳәм  $p_z$ ,  $y$  ҳәм  $p_z$  лер ушын да орынлы.

$$x = x_1, \quad y = x_2, \quad z = x_3, \quad p_x = p_1, \quad p_y = p_2, \quad p_z = p_3$$

белгилеўлерин қабыл етсек координаталар операторлары менен импульстиң қураўшылары операторлары арасындағы барлық коммутациялық қатнасларды бир

аңлатпа түрінде былайынша жазамыз:

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_m] = i\hbar\delta_{km}. \quad (1.14.3)$$

Координата  $\hat{x}$  хәм импульс құраушысы  $\hat{p}_y$  каноникалық түйинлес  $q$  хәм  $p$  шамаларының дара жағдайы болып табылады. Егер бул шамалардың операторлары бирдей функциялардың көплигинде анықланған болса анықсызлық қатнасы болған

$$\Delta q \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \quad (1.14.4)$$

қатнасы қәлеген  $q$  хәм  $p$  каноникалық түйинлес шамалардың қәлеген жубы ушын орынлы. Мысалы,  $\varphi$  хәм  $M_z$  каноникалық түйинлес өзгериўшилери ушын ( $\varphi$  арқалы азимуталлық мүйеш белгиленген)  $\Delta\varphi \cdot \Delta M_z \geq \hbar/2$  қатнасы тек  $\langle (\Delta\varphi)^2 \rangle \ll \pi^2$  шәрти орынланған жағдайда ғана дурыс болады. Бул жағдайдың себеби мынадан ибарат: егер дәўири  $2\pi$  болған  $\psi(\varphi)$  дәўирли функциялар көплигинде ғана оператор өзи өзине түйинлес бола алады.  $\varphi$  өзгериўшиси болса функциялардың усы көплигинде оператор болып табылмайды, себеби  $\varphi\psi(\varphi)$  функциясы усы көпликке тийисли емес<sup>12</sup>.

Каноникалық түйинлес шамалардың қатарына энергия хәм ўақыт киреди. Демек

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2 \quad (1.14.5)$$

қатнасы орын алады деген сөз. Бул қатнас бойынша энергияны  $\Delta E$  дәллігинде анықлаў  $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$  ўақыт интервалын киши емес ўақыт интервалын алыўы керек. Системаның базы бир қалының энергиясын өлшеў қалдың жасаў ўақыты  $\tau$  дан үлкен болмаған  $\Delta t$  ўақыт аралығында әмелге асатуғын болғанлықтан қал энергиясы  $\Delta E \sim \hbar/\tau$  шамасындағы анықсызлыққа ийе болады. Бул шаманы энергия қәддиниң кеңлиги деп атайды хәм  $\Gamma$  (грек имласындағы) арқалы белгилейди. Солай етип

$$\Gamma \sim \hbar/\tau. \quad (1.14.6)$$

Мүйешлик момент операторының координаталар хәм импульслер операторлары менен коммутацияланыў қағыйдаларын табамыз. (1.13.9)-аңлатпаны нәзерде тутып мынаған ийе боламыз:

$$\begin{aligned} [\hat{M}_x, \hat{x}] \psi &= \\ &= -i\hbar \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) (x\psi) - x \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi \right\} = 0. \end{aligned}$$

Буннан  $[\hat{M}_x, \hat{x}] = 0$  теңлигиниң орынланатуғынлығы келип шығады. Тап сондай аңлатпалар мүйешлик момент пенен координаталардың басқа да операторлары ушын да алынады. Солай етип

$$[\hat{M}_x, \hat{x}] = 0, \quad [\hat{M}_y, \hat{y}] = 0, \quad [\hat{M}_z, \hat{z}] = 0. \quad (1.14.7)$$

Енди биз  $\psi$  функциясына  $[\hat{M}_x, \hat{y}]$  коммутаторы менен тәсир етемиз:

<sup>12</sup> А.С.Давыдов. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1973. стр. 55.

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{y}] \psi &= \\
&= -i\hbar \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) (y\psi) - y \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi \right\} = \\
&= -i\hbar \left\{ y^2 \frac{\partial \psi}{\partial z} - zy \frac{\partial \psi}{\partial y} - z\psi - y^2 \frac{\partial \psi}{\partial z} + yz \frac{\partial \psi}{\partial y} \right\} = i\hbar z\psi.
\end{aligned}$$

Демек  $[\hat{M}_x, \hat{y}] = i\hbar z$ . Цикллық орын алмастырыўларды әмелге асырсақ

$$[\hat{M}_x, \hat{y}] = i\hbar z, \quad [\hat{M}_y, \hat{z}] = i\hbar x, \quad [\hat{M}_z, \hat{x}] = i\hbar y \quad (1.14.8)$$

формулаларына ийе боламыз. (1.14.7)- хәм (1.14.8)-формулаларды бир қатнас түрінде жазыўға болатуғынлығын аңғарамыз:

$$[\hat{M}_k, \hat{x}_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} x_m. \quad (1.14.9)$$

Бул формулаларда  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ ,  $x_3 = z$ ,  $M_1 = M_x$  хәм басқалар.  $\varepsilon_{klm}$  арқалы Кронекердің қыя симметриялы символы белгиленген.

Алынған формулалардан мүйешлик моменттің құраўшысы менен сәйкес координатаның бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алатуғынлығын көрсетеди.  $M_x$  құраўшысы менен  $y$  координатасының (ямаса  $z$  координатасының) бир ўақытта анықланыўы мүмкин емес. Тап сол сыяқлы жағдай  $M_y$  хәм  $z$  (ямаса  $x$ ) координатасы, соның менен бирге  $M_z$  хәм  $x$  (ямаса  $y$ ) координаталары арасында да орын алады.

$\psi$  функциясына  $[\hat{M}_x, \hat{p}_x]$  коммутаторы менен тәсир етейик:

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{p}_x] \psi &= \\
&= (-i\hbar)^2 \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right\} = 0.
\end{aligned}$$

Биз  $[\hat{M}_x, \hat{p}_x] = 0$  екенлигине ийе болдық. Тап усындай нәтийже сол сыяқлы қалған коммутаторлары ушын да алынады.  $[\hat{M}_x, \hat{p}_y]$  операторы ушын басқаша нәтийже алынады:

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{p}_y] \psi &= \\
&= (-i\hbar)^2 \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right\} = \\
&= (-i\hbar)^2 \left\{ y \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial z} - z \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - y \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial z} + z \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right\} = \\
&= (-i\hbar)^2 \left( -\frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = i\hbar \left( -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) = i\hbar \hat{p}_z \psi.
\end{aligned}$$

Алынған нәтийжени (1.14.9)-формулаға усаған

$$[\hat{M}_k, \hat{p}_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} \hat{p}_m \quad (1.14.10)$$

формуласы менен көрсетиў мүмкин.

(1.14.9)- хәм (1.14.10)-формулаларының жәрдеминде мүйешлик моменттің құраўшыларының коммутаторларын аңсат алыўға болады:

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= \hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x = \\
&= \hat{M}_x (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) - (\hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z) \hat{M}_x = \\
&= \hat{M}_x \hat{z} \hat{p}_x - \hat{M}_x \hat{x} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_x \hat{M}_x + \hat{x} \hat{p}_z \hat{M}_x.
\end{aligned}$$

$\hat{M}_x$  операторының  $\hat{x}$  пенен де,  $\hat{p}_x$  пенен де коммутацияланатуғынлығынан пайдаланып екінші қосылыўшыдағы  $\hat{M}_x$  пенен  $\hat{x}$  тың, ал үшінші қосылыўшыдағы  $\hat{M}_x$  пенен  $\hat{p}_x$  лардың орынларын алмастырамыз. Нәтийжеде

$$\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= \hat{M}_x \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{M}_x \hat{p}_z - \hat{z} \hat{M}_x \hat{p}_x + \hat{x} \hat{p}_z \hat{M}_x = \\
&= (\hat{M}_x \hat{z} - \hat{z} \hat{M}_x) \hat{p}_x - \hat{x} (\hat{M}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{M}_x) = \\
&= i\hbar \epsilon_{xzy} \hat{p}_x - \hat{x} i\hbar \epsilon_{xzy} \hat{p}_y = i\hbar (\hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x) = i\hbar \hat{M}_z
\end{aligned}$$

теңлигине ийе боламыз [биз (1.14.9)- хәм (1.14.10)-формулалардан пайдаландық;  $\epsilon_{xyz} = \epsilon_{132} = -1$ ].

Цикллық орын алмастырыўларды әмелге асырып

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar \hat{M}_z, \quad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar \hat{M}_x, \quad [\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar \hat{M}_y \quad (1.14.11)$$

теңликлерин ямаса

$$[\hat{M}_k, \hat{M}_l] = i\hbar \epsilon_{klm} \hat{M}_m. \quad (1.14.12)$$

теңлигин аламыз. Ең ақырында  $\hat{M}^2$  хәм  $\hat{M}_x$  операторларының коммутаторларын есаплаймыз. (1.13.10)-аңлатпаны есапқа алып

$$\begin{aligned}
[\hat{M}^2, \hat{M}_x] &= \\
&= (\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2) \hat{M}_x - \hat{M}_x (\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2) = \\
&= \hat{M}_x^3 + \hat{M}_y^2 \hat{M}_x + \hat{M}_z^2 \hat{M}_x - \hat{M}_x^3 - \hat{M}_x \hat{M}_y^2 - \hat{M}_x \hat{M}_z^2.
\end{aligned} \quad (1.14.13)$$

теңлигине ийе боламыз.  $\hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x = i\hbar \hat{M}_z$  екенлигин пайдаланып [(1.14.11)-аңлатпаға қараңыз] екінші хәм бесінші қосылыўшыларды былайынша түрлендіреміз:

$$\begin{aligned}
\hat{M}_y^2 \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}_y^2 &= \hat{M}_y \hat{M}_y \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}_y \hat{M}_y = \\
&= \hat{M}_y (\hat{M}_x \hat{M}_y - i\hbar \hat{M}_z) - (\hat{M}_y \hat{M}_x + i\hbar \hat{M}_z) \hat{M}_y = \\
&= -i\hbar (\hat{M}_y \hat{M}_z + \hat{M}_z \hat{M}_y).
\end{aligned}$$

$\hat{M}_z \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}_z = i\hbar \hat{M}_y$  қатнасын пайдаланып үшінші хәм алтыншы қосылыўшыларды тап сондай етип түрлендіреміз:

$$\begin{aligned}
\hat{M}_z^2 \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}_z^2 &= \hat{M}_z \hat{M}_z \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}_z \hat{M}_z = \\
&= \hat{M}_z (\hat{M}_x \hat{M}_z + i\hbar \hat{M}_y) - (\hat{M}_z \hat{M}_x - i\hbar \hat{M}_y) \hat{M}_z = \\
&= i\hbar (\hat{M}_z \hat{M}_y + \hat{M}_y \hat{M}_z).
\end{aligned}$$

Бизлер түрлендірген аңлатпаларды (1.14.13)-формулаға қойсақ оң тәрепін нөлге айланады. Тап ұсындай нәтижелер  $\hat{\mathbf{M}}^2$  менен  $\hat{M}_y$  және  $\hat{M}_z$  коммутаторлары арасында да алынады. Солай етип

$$[\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_x] = 0, \quad [\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_y] = 0, \quad [\hat{\mathbf{M}}^2, \hat{M}_z] = 0. \quad (1.14.14)$$

нәтижесіне ийе боламыз.

(1.14.11)- және (1.14.14)-формулаларынан биз мынадай жуымақ шығарамыз: бір ұақытта тек  $\mathbf{M}$  векторының квадраты және координаталар көшеріне түсірілген проекциялардың тек бирейі ғана анық мәніске ийе бола алады. Қалған екі проекцияның шамалары анық мәніске ийе бола алмайды (бул талапқа үш проекция да бір ұақытта нөлге тең болған жағдай кирмейди). Демек  $\mathbf{M}$  векторы қаққында тек оның «ұзынлығы» және базы бір координата көшери менен ұсы вектор арасындағы мүйештің мәнісі қаққында ғана айта алады екенбиз.  $\mathbf{M}$  векторының бағытын анықлау мүмкіншилиги жоқ.

### 1-15. Координата және импульс операторларының меншикли функциялары

Координата операторының меншикли функцияларын табамыз.  $\hat{x} = x$  болғанлықтан (1.7.3)-теңлемге

$$x\psi_{x'} = x'\psi_{x'} \quad (1.15.1)$$

түріне ийе болады. Бул аңлатпада  $x'$  арқалы базы бір қақыйқый сан, ал  $\psi_{x'} = \psi_{x'}(x)$  арқалы  $x$  тың  $x'$  шамасына тең меншикли мәнісіне тең меншикли функция белгиленген.  $\delta$  функциясының белги болған  $x\delta(x) = 0$  қасиетлерінен пайдаланып  $x - x'$  аргументі ұшын төмендегидей аңлатпа жазамыз:

$$(x - x')\delta(x - x') = 0.$$

Қаўсырманы ашып  $x\delta(x - x') - x'\delta(x - x') = 0$  теңлигин аламыз. Буннан

$$x\delta(x - x') = x'\delta(x - x').$$

(1.15.1)-теңлемге менен салыстыру

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x') \quad (1.15.2)$$

теңлемесін береді. Бул  $\hat{x}$  операторының  $x - x'$  теңлигине сәйкес келиуши меншикли функциясы болып табылады.  $\hat{x}$  операторының спектринің үзликсиз екенлиги айқын.

$\delta(x - x')$  және  $\delta(x - x'')$  функцияларының скаляр көбеймесін есаплаймыз.  $\delta(x)$  функциясы қақыйқый болғанлықтан

$$\langle \delta(x - x') | \delta(x - x'') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') \delta(x - x'') dx.$$

Егер  $\delta(x - x') = f(x)$  хәм  $x'' = a$  деп есапласақ, онда бул интегралды  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$  формасына алып келиў мүмкин.  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$  формуласы тийкарында биз есаплайын деп атырған интеграл  $f(a)$  функциясына, яғный  $\delta(x'' - x')$  функциясына тең. Солай етип

$$\langle \delta(x - x') | \delta(x - x'') \rangle = \delta(x'' - x').$$

Бул (1.15.2)-функцияларының дельта-функцияға нормировкаланғанлығын көрсетеди ( $x\delta(x) = 0$  формуласына итибар бериңиз).

$\psi_\alpha(x)$  функциясын ( $\alpha$  арқалы ҳалдың индекси белгиленген)  $\hat{x}$  операторының (1.15.2)-меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз. (1.12.1)-аңлатпаға сәйкес

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} c(x') \psi_{x'}(x) dx' = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} c(x') \delta(x - x') dx' = c(x). \end{aligned} \quad (1.12.3)$$

Биз алған нәтиже координаталық көринистеги пси-функцияның  $\psi_\alpha(x)$  функциясының өзи екенлигин аңғартады. Тап усындай жуўмаққа (1.12.7)-формула бойынша  $c(x')$  функциясын есаплаў жолы менен де келиўге болады.  $q$  шамасын  $x'$  пенен алмастырып

$$c(x') = \langle \psi_{x'} | \psi_\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{x'}^*(x) \psi_\alpha(x) dx$$

аңлатпасын аламыз. Дельта-функция ҳақыйқый болып табылады. Сонлықтан  $\psi_{x'}^* = \psi_{x'} = \delta(x - x')$ . Демек

$$c(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') \psi_\alpha(x) dx = \psi_\alpha(x').$$

$x$  өзгериўшисиндеги штрихты алып таслап биз  $c(x) = \psi_\alpha(x)$  аңлатпасына келемиз.

Үш өлшемли жағдайда  $\psi_\alpha = \psi_\alpha(x, y, z) = \psi_\alpha(\mathbf{r})$ . Ал  $\hat{\mathbf{r}}$  операторының меншикли функциялары  $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  функциялары болып табылады [буны биз (1.15.2)-формулаға алып келгендей есаплаўларды жүргизиў жолы менен әмелге асырамыз].  $\psi_\alpha$  функцияларын  $\psi_{\mathbf{r}'}$  функциялары бойынша қатарға жайып (1.15.3)-нәтижеге сәйкес келетуғындай нәтижени аламыз:

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x, y, z) &= \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{r}'} dV = \\ &= \int c(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV = c(\mathbf{r}) = c(x, y, z). \end{aligned} \quad (1.15.4)$$



(1.7.3)-теңлемени  $\hat{p}_x = -i\hbar \partial/\partial x$  импульс операторы үшін жазамыз:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi.$$

Бұл теңлемениң шешими

$$\psi = C e^{(i/\hbar) p_x x} \quad (1.15.5)$$

функциясы болып табылады.  $\hat{p}_x$  операторының спектринің үзлексіз болатуғынлығы өз-өзінен түсиникли.

(1.15.5) функциясын 1 ге нормировкалауға тырысамыз. Буның үшін

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |C e^{(i/\hbar) p_x x}|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |C|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx.$$

интегралын есаплап көреміз. Бұл интеграл қалеген  $C \neq 0$  болған жағдайда тарқалады (шексізлікке айналады). Демек  $\hat{p}_x$  операторының меншикли функцияларын 1 ге нормировкалау мүмкін емес екен. 1-12 параграфта гәп етилгениндей биз келген нәтийже үзлексіз спектрге ийе меншикли функциялардың барлығы үшін орынлы болады. Бундай жағдайда дельта-функцияға нормировка етиледі.

(1.15.5)-түрдегі еки функцияның скаляр көбеймесін есаплаймыз:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{p'_x} | \psi_{p''_x} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} C^* e^{-i(p'_x/\hbar)x} \cdot C e^{i(p''_x/\hbar)x} dx = \\ &= C^* C \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i[(p''_x - p'_x)/\hbar]x} dx. \end{aligned}$$

$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = 2\pi\delta(x)$  формуласындағы  $k$  хәм  $x$  шамаларының ийелеген орынларын (роллерин) алмастырып

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = 2\pi\delta(k) \quad (1.15.6)$$

формуласын аламыз. Бұл формулаға сәйкес

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i[(p''_x - p'_x)/\hbar]x} dx &= 2\pi\delta[(p''_x - p'_x)/\hbar] = \\ &= 2\pi\hbar\delta(p''_x - p'_x). \end{aligned} \quad (1.15.7)$$

(биз  $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$  анықламасынан пайдаландық). Солай етип

$$\langle \psi_{p'_x} | \psi_{p''_x} \rangle = C^* C \cdot 2\pi\hbar\delta(p''_x - p'_x).$$

Буннан әҳмийетли жуўмақ шығарамыз: (1.15.5)-функцияларды дельта-функцияға нормировкалаў ушын  $|C|$  шамасын  $1/(2\pi\hbar)^{1/2}$  шамасына тең етип алыўымыз керек екен. Пси-функция  $e^{i\alpha}$  фазалық көбейтиўшиси дәллигине шекем анықланатуғын болғанлықтан  $C$  шамасын ҳақыйқый ҳәм  $1/(2\pi\hbar)^{1/2}$  шамасына тең деп есаплаў мүмкин.

Демек импульс операторының дельта-функцияға нормировкаланған меншикли функциялары мыналарға тең:

$$\psi_{p_x}(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{(i/\hbar) p_x x}. \quad (1.15.8)$$

$\mathbf{p}$  операторының үш өлшемли дельта-функцияға нормировкаланған меншикли функцияларының

$$\psi_{\mathbf{p}} = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{(i/\hbar) \mathbf{p} \mathbf{r}} \quad (1.15.9)$$

түрине ийе болатуғынлығына аңсат көз жеткерийге болады.

## II бөлім

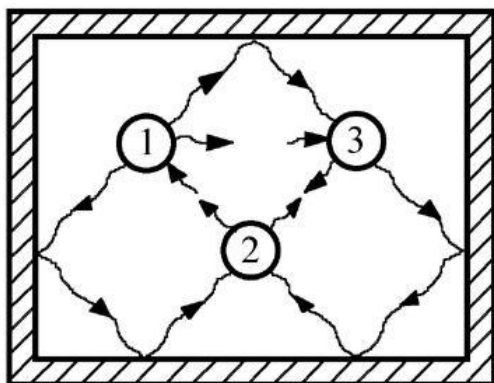
### Квантлық физиканың тийкарлары

#### 2-1-1. Жыллылық нурланыуы нызамлары

**Жыллылық нурланыуы.** Қыздырылған денелерде ишки энергияның бир бөлеги нурланыу энергиясына айлана алады. Сонлықтан қыздырылған денелер жийиликлердің үлкен диапазонындағы электромагнит толқынларының дереги болып табылады. Бундай нурланыуды жыллылық нурланыуы деп атайды.

Экспериментлер жыллылық нурланыуының үзликсиз спектрге ийе екенлигин көрсетеди. Бул қыздырылған денениң жийиликлер ямаса толқын узынлықларының қәлеген диапазонында базы бир муғдардағы нурланыу энергиясын нурландыратуғынлығын аңлатады. Денениң нурланыу энергиясының спектр бойынша тарқалыуы температурадан ғәрезли. Барлық денелер ушын температураның жоқарылауы менен нурланыу энергиясының максимумы спектрдің қысқа толқынлы участкасына қарай жылжыйды хәм нурланыудың улыұмалық энергиясының мәниси үлкейеди. Мысалы орайлық жылыту тармағына тутастырылған батареялар (температурасы  $T \approx 350$  K) көзге көринбейтуғын инфрақызыл участкада энергияның пигине ийе болатуғын болса, Қуяштың бети ( $T \approx 6 \cdot 10^3$  K) энергиясының тийкарғы бөлегин жақтылық диапазонында нурландырады. Ядролық партланыуда болса (температурасы  $T \approx 10^6$  K) энергияның үлкен бөлеги қысқа толқынлы рентген хәм гамма-нурланыуы менен алып кетиледи.

Егер қыздырылған бир неше денени нурланыуды пүткиллей өткермейтуғын қабық пенен (қуты менен) қапласақ (1-сүўрет), онда бир қанша ўақыт өткеннен кейин "нурландырыушы денелер + қуўыслықтағы (қутыдағы) нурланыу" арасында термодинамикалық тең салмақлық орнайды. Бундай жағдайда барлық денелердің температуралары теңлеседи, ал денелер хәм нурланыу арасындағы энергияның тарқалыуы ўақыттың өзгериуи менен өзгериссиз қалады. Системаның усындай тең салмақлық халы орнықты хал болып табылады. Бундай орнықты халды сырттан тәсир түсирип өзгертсек те тең салмақлық хал қайтадан орнайды. Термодинамикалық тең салмақлық қабықта да орнайды. Қабықтың дийўаллары қәлеген материалдан соғылыуы мүмкин хәм оның температурасы өзгериссиз етип услап турылады.



1-сүўрет.

Жыллылық нурланыуының нурланып атырған дене менен тең салмақтықта тура алыу қәбилетлиги денелердің басқа жыллылық нурланыуынан айырмашылыққа ийе. Сонлықтан нурландырыушы дене менен тең салмақтықта туратуғын нурланыу тең салмақтық нурланыу деп аталады.

Тең салмақтық нурланыуға усы нурланыу менен тең салмақтықта турған дененің температурасын белгилеу мүмкин. Бундай жағдайда тең салмақтық термодинамиканың нызамларын жыллылық нурланыуына да пайдаланыу мүмкиншилиги пайда болады. Бул өз гезегінде тең салмақтық жыллылық нурланыуы ушын ўақытқа байланыссы өзгермейтуғын ишки энергия, басым, энтропия хәм басқа да термодинамикалық характеристикаларды анықлау хәм есаплау мүмкин дегенди билдиреди.

Тең салмақтық жыллылық нурланыуы бир текли, яғный оның энергиясының тығызлығы қуыслықтың барлық ноқатларында бирдей. Бундай нурланыу изотроп хәм поляризацияланған емес – бундай нурланыу барлық тәреплерге бирдей болып тарқалады,  $E$  хәм  $H$  векторларының тербелиу бағытлары да хәр қыйлы.

**Жыллылық нурланыуының характеристикалары.** Жыллылық нурланыуының спектраллық қурамын тәриплеу ушын қыздырылған дененің бетинің бир бирлиги тәрепинен бир ўақыт бирлиги ишинде нурланатуғын жийиликлердің киши диапазоны болған  $\omega$  шамасынан  $\omega + d\omega$  шамасы арасындағы нурланыу энергиясын қараймыз. Дененің бир бирлик майданынан барлық тәреплерге қарай нурланып атырған нур энергиясының ағымы  $dR$  шамасының мәниси спектраллық диапазонның кеңлигине пропорционал, яғный  $dR = r d\omega$ . Жийиликлердің бир бирлик диапазонына сәйкес келиуши  $r$  энергиясын дененің спектраллық шығарыушылық қәбилетлиги ямаса жарқынлықтың энергиялық спектраллық тығызлығы деп атайды. Тәжирийбелер хәр бир дене ушын спектраллық шығарыушылық қәбилетликтің жийиликтің белгили бир функциясы екенлиги көрсетеди. Бул функцияның түри дененің температурасы  $T$  өзгергенде өзгереді. Буннан кейин берилген температурада жийиликтің базы бир функциясы болған усындай функционаллық ғәрезлик  $r = r(\omega, T)$  түріндеги ғәрезлигинің орнына жыллылық нурланыуы теориясында қабыл етилген  $r(\omega, T) \equiv r_{\omega, T}$  белгилеуин пайдаланамыз.

Дененің майдан бирлигинен жийиликлер диапазонының барлығынан нурланатығын энергияның улыұмалық ағысы

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

формуласының жәрдемінде бериледи хәм бул шаманы дененің интеграллық шығарыушылық (нурландырыушылық) қәбилетлиги ямаса оның энергиялық жарқынлығы деп атайды. SI бирликлер системасында энергиялық жарқынлық Вт/м<sup>2</sup> бирликлерінде, ал спектраллық шығарыушылық қәбилетлик Дж/м<sup>2</sup> бирликлерине ийе.

Дененің шығарыушылық (нурландырыушылық) қәбилетлигин нурланыу ушын толқын узынлығы болған  $\lambda$  шамасының функциясы деп қарау мүмкин.  $\lambda$  менен жийилик  $\omega$  жақтылықтың ваккумдеги тезлиги  $c$  арқалы былайынша байланысқан:  $\lambda = 2\pi c / \omega$ . Бундай жағдайда төмендегидей теңликке ийе боламыз:

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

Буннан шығарыушылық қабилетлик бойынша жийиликлер шкаласындағы хәм толқын узынлықлары шкаласындағы байланыстырыушы формуланы аламыз

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

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

Денелер тәрепинен бетке келип түсип атырған нурланыуды жутыу процессин тәриплеу ушын денениң спектраллық жутыу қабилетлиги болған  $a_{\omega,T}$  шамасын киргиземиз. Буның ушын жийиликлердин  $\omega$  дан  $\omega + d\omega$  ға шекемги киши интервалын айырып аламыз хәм денениң бетине келип түсиуши  $d\Phi_{\omega}$  ағысын қараймыз. Егер усы ағыстың бир бөлеги болған  $d\Phi_{\omega}'$  ағысы дене тәрепинен жутылатуғын болса, онда денениң  $\omega$  жийилигиндеги жутыушылық қабилетлигин өлшем бирлигине ийе емес төмендегидей шаманың жәрдеминде анықлаймыз

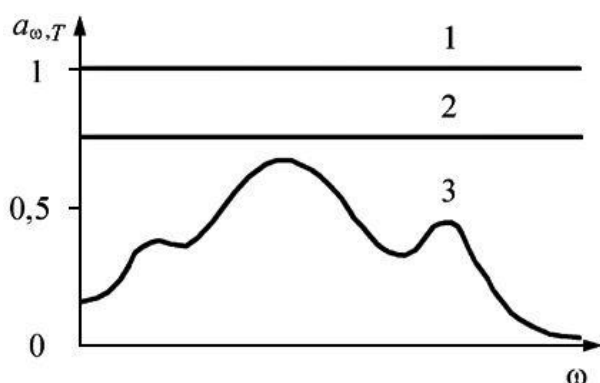
$$a_{\omega,T} = d\Phi_{\omega}' / d\Phi_{\omega}. \quad (2.1.4)$$

Бул шама жийилиги  $\omega$  шамасына тең келип түсиуши нурланыудың жутылған үлесин береді.

Тәжирийбелер қалеген денениң темпертурасына байланыслы хәр қыйлы жийиликтеги нурларды хәр қыйлы етип жутатуғынлығын көрсетеді. Сонлықтан денениң жутыушылық қабилетлиги  $a_{\omega,T}$  жийилик  $\omega$  ның функциясы болып табылады. Ал бул функцияның түри денениң температурасы  $A$  ның өзгериуи менен өзгериске ушырайды.

Өзиниң анықламасы бойынша денениң жутыу қабилетлигиниң шамасы 1 ден үлкен бола алмайды. Жутыу қабилетлиги бирден кем хәм жийиликлердин барлық диапазонында бирдей болған денени сур дене деп атайды.

Жыллылық нурланыуы теориясында абсолют қара дене айрықша орынды ийелейді. Абсолют қара дене деп барлық жийиликлерде хәм барлық температураларда жутыушылық қабилетлиги бирге тең денени Г.Кирхгоф абсолют қара дене деп атауды усинды. Хақыйқый денелер болса өзлерине келип түскен нурланыудың тек бир бөлимин ғана шағылыстырады (2.1.2-сүүрет). Хәтте қара күйе де өзиниң қәсийетлери бойынша абсолют қара денеге тек оптикалық диапазонда ғана жақынлайды.



1.2-сүүрет.

Хәр қыйлы денелердин жутыушылық қабилетлиги.

1 – абсолют қара дене;

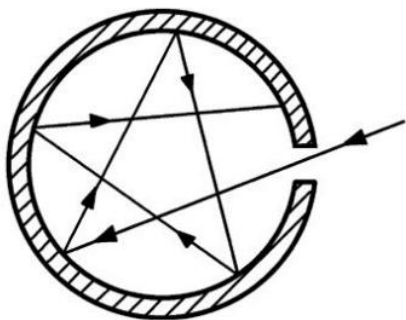
2 – сур дене;

3 – хақыйқый дене.

Абсолют қара дене жыллылық нурланыуы теориясында эталон дене болып табылады. Тәбиятта абсолют қара дене болмаса да, жутыушылық қабилетлиги бирден айырмасы жүдә киши болған модельди аңсат жүзеге келтириу мүмкин.

Абсолют қара дененің усындай моделин жабық қуыслық түрінде соғып алыуға болады (2.1.3-сұрет). Бұл қуыслық диаметрі ұсы қуыслықтың диаметрінен әдеуір киши болған кишкене тесикшеге ийе. Усының менен бир қатарда қуыслықтың қәлеген формаға ийе хәм қәлеген материалдан исленген болыуы мүмкин.

Киши тесикше оған келип түсиуши нурланыудың дерлик толық жутылыуына алып келеди. Тесикшениң диаметрі қаншама киши болған сайын оның жутыушылық қәбилетлиги бирге умтылады. Хәқыйқатында да тесикше арқалы қуыслыққа кирген нурланыу қуыслықтың дийуалларына келип түседи хәм бұл дийуалларда шалама-шекки жутылады. Егер тесикшениң диаметрі киши болса нурланыу ұсы тесикшеден шығаман дегенше ишки дийуалларда көп санлы шағылысыуларға ушырайды. Усының нәтийжесинде келип түсиуши нурлар дерлик толығы менен жутылады.

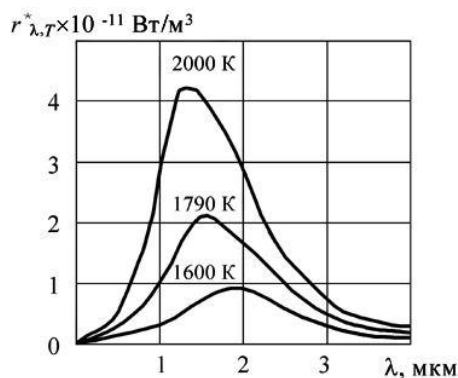


1.3-сұрет.

Абсолют қара дененің модели.

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

Егер қуыслықтың ишки дийуалларын  $T$  температурада услап турсақ, онда тесикше нурланады. Бұл нурланыуды температурасы  $T$  ға тең болған абсолют қара дененің нурланыуы деп есаплауға болады. Бұл нурланыу энергиясының спектр бойынша тарқалыуын изертлеу арқалы абсолют қара дененің нур шығарыушылық уқыплығы болған  $r_{\omega,T}^*$  хәм  $r_{\lambda,T}^*$  шамаларын экспериментте анықлау мүмкин (Ленгли, Э.Прингсгейм, О.Люммер, Ф.Курлбаум хәм басқалар). Хәр қыйлы температураларда өткерилген усындай экспериментлердің нәтийжелери 1.4-сұретте келтирилген.



1.4-сұрет.

Абсолют қара дене үшін нур шығарыушылық уқыплығы  $r_{\lambda,T}^*$  шамасының температурадан ғәрезлиги.

**Кирхгоф нызамы.** Қәлеген дененің нур шығарыушылық уқыплығы менен жутыу уқыплығы арасында байланыстың орын алыуы керек. Себеби тең салмақлық нурланыу менен өткерилген тәжірийбелерде (2.1.1-сұрет) системадағы тең салмақлық егер хәр бир дене уақыт бирлигинде қанша энергияны

нурландыратуғын болса, тап сондай энергияны жутатуғынлығынлығын да билдиреди. Бул жағдай денениң қандай да бир жийиликтеги нурларды күшли түрде нурландыратуғын болса, тап сондай жийиликтеги нурларды күшли жутатуғынлығын аңлатады. Усы жағдайды толық тең салмақтық принципі деп атаймыз (принцип детального равновесия).

Толық тең салмақтық принципіне сәйкес тәбияттағы барлық денелер ушын (соның ишінде абсолют қара дене ушын да) берілген температурадағы нур шығарыушылық қәбилетлигиниң нурды жутыу қәбилетлигине қатнасы бирдей мәниске ийе хәм жийиликтің (толқын узынлығының) универсаллық функциясы болады.

1959-жылы нурланыу менен тең салмақтықта туратуғын системалардың термодинамикалық ызыамлықларын үйрениудің барысында Г.Кирхгоф тәрәпинен ашылған бул ызыамды былайынша жазамыз:

$$\left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_1 = \left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_2 = \left( \frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_3 = \dots = \frac{r_{\omega,T}^*}{1} = f(\omega, T) \quad (2.1.5)$$

ямаса

$$\left( \frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_1 = \left( \frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_2 = \left( \frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_3 = \dots = \frac{r_{\lambda,T}^*}{1} = \varphi(\lambda, T) \quad (2.1.6)$$

Бул аңлатпалардағы 1, 2, 3... хәр қыйлы хақыйқый денелерге сәйкес келеди.

Кирхгоф ызыамынан  $f(\omega, T)$  хәм  $\varphi(\lambda, T)$  универсаллық функцияларының сәйкес жийиликлер шкаласындағы хәм толқын узынлықлары бойынша абсолют қара денениң спектраллық нур шығарыушылық қәбилетлиги  $r_{\omega,T}^*$  хәм  $r_{\lambda,T}^*$  екенлиги келип шығады. Сонлықтан олар арасындағы байланыс (2.1.3)-формула менен анықланады.

Жыллылық нурланыуы теориясында абсолют қара денениң нурланыуы универсаллық характерге ийе. Хақыйқый денелер барлық ўақытта да қәлеген температурада нурды абсолют қара денеге салыстырғанда кемирек нурландырады. Абсолют қара денениң нур шығарыушылық қәбилетлигин (яғный Кирхгофтың универсаллық функциясын) хәм хақыйқый денениң жутыушылық қәбилетлигин билген халда Кирхгоф ызыамы бойынша дене тәрәпинен жийиликлердің ямаса толқын узынлықларының қәлеген диапазонында нурландырылатуғын энергияның мәнисин анықлау мүмкин.

**Стефан-Больцман ызыамы.** Й.Стефанның 1879-жылы өткерген экспериментлери хәм Л.Больцманның 1884-жылы орынланған теориялық изертлеулери абсолют қара денениң жыллылық нурланыуының әхмийетли ызыамын дәлиллейге мүмкиншилик берди. Бул ызыам бойынша абсолют қара денениң энергиялық жарқынлығы оның абсолют температурасының төртінши дәрежесине туўры пропорционал. Оны былайынша жазамыз

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

Ескертиу: Ендигиден былай жулдызша белгиси менен абсолют қара денениң жыллылық нурланыуының характеристикаларын белгилеймиз.

Хәзирги ўақытлары өткерилген өлшеулер Стефан-Больцман турақлысы ушын  $\sigma = 5,6686 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/(м}^2\text{(K}^4\text{))}$  шамасын береди.

Хақыйқый денелер ушын Стефан-Больцман нызамы тек сапалық жақтан орынланады. Олар ушын температураның жоқарылауы менен энергиялық жарқынлық үлкейеди. Бирақ хақыйқый денелер ушын энергиялық жарқынлықтың температурадан ғәрезлиги әпиұайы болған (2.1.7)-аңлатпа менен тәриппенбейди, ал төмендегидей түрге ийе болады

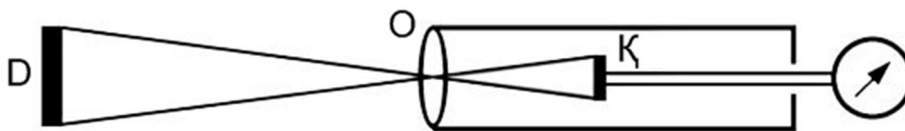
$$R = A_T R^* = A_T \sigma T^4 \quad (2.1.8)$$

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

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

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

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



1.5-сүўрет. Оптикалық пирометрдиң принципиаллық схемасы.

Нурландырыўшының материалының интеграллық жутыў қәбилетлигин билиў арқалы экспериментте өлшенген нурланыўдың радиациялық температурасы  $T_p$  ны биле отырып оның хақыйқый температурасы болған  $T$  шамасын



$$T = \frac{T_p}{\sqrt[4]{A_T}}$$

формуласының жәрдеминде есаппап анықдай аламыз. Мысалы егер вольфрам нырландырғыштың қыздырылған бетин бақлағанда радиациялық пирометр  $T_p = 933$  К температураны көрсететугы болса, онда оның хақықый температурасы  $T = 1500$  К шамасына тең болады (вольфрам ушын  $A = 0,15$ )

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

$$r_{\omega, T}^* = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (2.1.9)$$

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

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

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

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

Солай етип В.Вин жыллылық нурланыўы нызамын ашты. Бул нызам бойынша абсолют қара денениң нур шығарыўшылық қәбилетлигиниң максимумы сәйкес келетуғын толқын узынлығы  $\lambda_m$  оның абсолют температурасына кери пропорционал өзгереді. В.Виннің жыллылық нурланыўы нызамын былайынша жазамыз:

$$\lambda_m = \frac{b}{T}. \quad (2.1.11)$$

Экспериментлерде анықланған бул нызамдағы турақлы шаманың мәниси  $b = 2,898 \cdot 10^{-3}$  мК шамасына тең болып шықты.

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

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

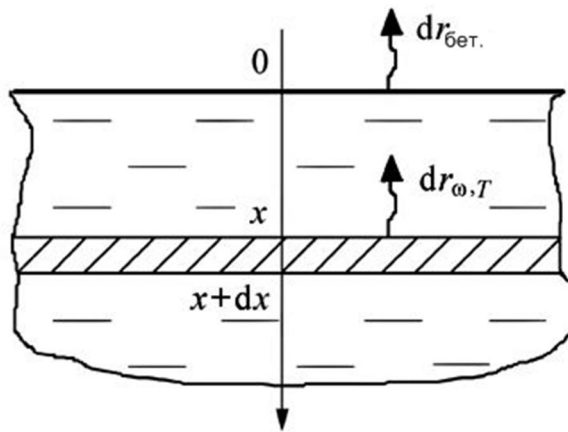
**Түнде көриў (қараңғыда көриў).** Түнги ўақытлары (ямаса қараңғыда) адам этирапындағы затларды көре алмайды. Бирақ сол затлардың барлығы да ноллик емес температураға ийе хәм сонлықтан олар түнде де электромагнитлик жыллылық нурланыўын нурландырады. Винниң аўысыў нызамы болған (2.1.11)-формуланың жәрдемінде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

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

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

**1.1-мәселе.** Көлеми жеткиликли дәрежеде үлкен болған қәлеген затты алайық. Оның қалыңлығының бир бирлигине  $E_{\omega,T}$  нур шығыраўшылық хәм  $A_{\omega,T}$  жутыўшылық қәбилетлиги сәйкес келетуғын болсын. Бундай денениң бетиниң абсолют қара денедей болып нурландыратуғынлығын көрсетиңиз. Мәселени шешкенде денениң бетине перпендикуляр бағытта тарқалатуғын нурланыў менен шекленилсин.

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



1.6-сұйрет.

1.1-мәселени шешіу үшін арналған сұйрет.

Қатламның бетинен шығаман дегенше бұл нурлар қалықлығы  $x$  болған жутыушы дененің қатламы арқалы өтеді. Усының нәтижесінде Бургер нызамы бойынша нурланыу энергиясының ағымы экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди хәм  $x = 0$  болған беттен өткенде энергияның мәніси

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

шамасына тең болады. Барлық қатламлар бойынша нурланыуды қосып (суммалап) қатламның бетинің нур шығарыушылық уқыплылығын табамыз:

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

Бирақ Кирхгоф нызамы бойынша  $E_{\omega,T}/A_{\omega,T} = r_{\omega,T}^*$ . Бұл аңлатпада  $r_{\omega,T}^*$  арқалы абсолют қара дененің нур шығарыушылық уқыплығы белгиленген. Сонлықтан  $r_{\text{бет}} = r_{\omega,T}^*$  хәм усының менен биз қатламның бетинің абсолют қара денедей болып нурландыратуғынлығын дәлилледик.

Бұл әхмийетли жуўмақ (биз буны мысал ретинде келтиремиз) үлкен көлемге ийе жоқары температуралы плазманың бетинен (мысалы Қуяштың бетинен) нурланатуғын электромагнит толқынлардың спектрлик қурамы бойынша абсолют қара дененің нурланыуына неликтен жүдә жақын екенлигин көрсетеди.

**1.2-мәселе.** Қуяштың нур шығарыу қабилетлигинің максимумы  $\lambda_m = 0,48$  мкм ге сәйкес келеди. Қуяштың нурланыуын абсолют қара дененің нурланыуына жақын деп қарап Жер дөгерегинде қозғалыушы орбиталық станцияның қуўатлығы  $P = 10$  квт болған Қуяш батареяларының панеллеринің майданларының қосындысының мәнісин баҳалаңыз. Қуяш батареясының пайдалы тәсир коэффициентин  $\eta = 20\%$  деп есаплаңыз. Астрономиялық шамалардың мәніслерин кестелерден алыу керек.

Шешими: Винниң аўысыу нызамынан (2.1.11)-формула бойынша Қуяштың бетинің температурасын есаплаймыз

$$T = b/\lambda_m = (2,9 \cdot 10^{-3}) / (0,48 \cdot 10^{-6}) \approx 6000 \text{ К.}$$

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

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

Бул аңлатпадағы  $R_K^2$  Қуяштың радиусы болып табылады.

Қуяш барлық тәреплерге изотроп түрде энергияны нурландырады деп есаплаймыз хәм усы тийкарда Қуяш турақлысы болған  $C$  шамасының мәнісін табамыз. Бул шама радиусы Жер менен Қуяш арасындағы қашықтыққа ( $R_{КЖ}$  шамасына) тең болған орайында Қуяш турған сфералық беттің бир бирлик майданынан өтетұғын нурланыу энергиясының ағысына тең.  $R_{КЖ} = 1,49 \cdot 10^{11}$  м. Бундай жағдайда

$$C = \frac{W}{4\pi R_{КЖ}^2} = \sigma T^4 \cdot \left( \frac{R_C}{R_{КЖ}} \right)^2 = 1,6 \cdot 10^3 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2}.$$

Солай етип Жердің әтирапындағы космослық кеңісликте Қуяштан жетип келетуғын нурлардың бағытына перпендикуляр қойылған беттің бир бирлиги арқалы бир секундта 1,6 кДж Қуяштың нурланыуы өтеди екен. Бул энергияның бир бөлеги қуяш батареясында электр энергиясына айналады. Қуяш батареясының пайдалы тәсир коэффициентин есапқа алған халда батареяның электрлик қууатын табамыз

$$P = \eta CS.$$

Буннан Қуяш батареясының панелинің майданын табамыз

$$S = P/(\eta C) = 10^4/(0,2 \cdot 1,6 \cdot 10^3) = 31,2 \text{ м}^2.$$

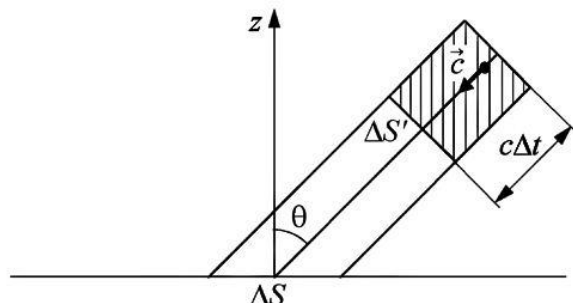
## 2-1-2. Нурланыудың квантлық теориясы

**Тең салмақлық нурланыу энергиясының көлемлик тығызлығы.** Тең салмақлық жыллылық нурланыу теориясының тийкарғы мәнісін қарап шығамыз. Буның ушын идеал түрдеги шағылыстырыушы дийәлларға ийе қууыслық қабырғасының узынлығы  $l$  ге тең куб формасына ийе деп есаплаймыз. Бул әпиуайыластырылған жағдай болса да алатуғын жууақлар улыуамалық характерге ийе болады. Бул қууыслыққа температурасы  $T$  ға тең болған өлшемлери бойынша киши абсолют қара денени жайластырамыз. Бул дене тәрепинен электромагнит толқынларды шығару хәм жутуудың есабынан қууыслық тең салмақлық жыллылық нурланыуы менен толады. Оның энергиясының тығызлығын  $u(T)$  арқалы белгилеймиз хәм бул функцияның абсолют температура  $T$  ға байланыслы екенлигин атап өтемиз. Жыллылық нурланыуының энергиясының бул көлемлик тығызлығын жийиликлер спектри бойынша жайуу мүмкин. Бул математикалық аңлатпа төмендегидей түрге ийе болады:

$$u(T) = \int_0^\infty u_{\omega,T} d\omega \quad (2.1.12)$$

Бул жерде  $u_{\omega,T} \equiv u(\omega,T)$  функциясы  $\omega$  жийилиги жанындағы жийиликтің бир бирлигине сәйкес келиуши нурланыу энергиясының көлемлик тығызлығын анықлайды. Бул функцияны  $T$  температурадағы жыллылық нурланыуының энергиясының спектраллық тығызлығы деп атаймыз.

Әлбетте, жыллылық нурланыуының энергиясының спектраллық тығызлығы усы нурланыу менен тең салмақтықта тұрған абсолют қара денениң нур шығарыушылық уқыплығы менен байланысly. Бул байланысты абсолют қара денениң бетинде алынған  $\Delta S$  элементар майданның қасындағы нурланыуды қарау арқалы анықлауға болады (2.1.7-сүрөт).



1.7-сүрөт.

Биз сайлап алған майданның қасындағы қәлеген ноқатта жыллылық нурланыуы  $4\pi$  денелик мүйеши шеклеринде мүмкин болған барлық бағытларда бирдей болып тарқалған. Сонлықтан  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$  денелик мүйешине сәйкес келиуши нурланыу энергиясының тығызлығын (яғный  $\Delta S$  майданына оған түсирилген нормалға  $\theta$  мүйеши бағытында түсетуғын энергияның тығызлығын) былайынша жаза аламыз:

$$d\mathcal{N} = u(T) \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (2.1.13)$$

Бирақ, егер энергиясының тығызлығы усындай болған нурланыу вакуумде жақтылықтың тезлиги с менен  $\Delta S$  бетине  $\theta$  мүйеши менен келип түсетуғын болса, онда  $\Delta t$  ўақыты ишинде усы майданға 1.7-сүрөтте штрихланған көлемдеги барлық нурланыу энергиясы келип түседи. Оның санлық шамасы мынаған тең:

$$dw = d\mathcal{N} c \Delta t \Delta S' = d\mathcal{N} c \Delta t \Delta S \cos\theta = \frac{c}{4\pi} u(T) \cos\theta \sin\theta d\theta d\varphi \Delta S \Delta t \quad (2.1.14)$$

Мүмкин болған барлық мүйешлерде түсетуғын нурланыу энергиясын суммаласақ ўақыттың бир бирлиги ишинде беттиң бир бирлик майданына түсетуғын нурланыу энергиясының ағысы болған  $\Phi$  шамасын табамыз:

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

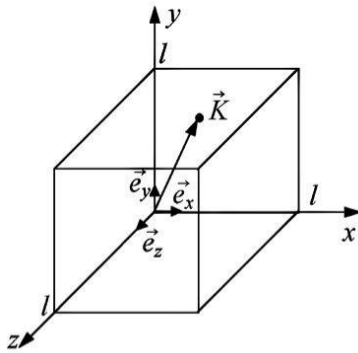
Термодинамикалық тең салмақтық ҳалында тап усындай  $\Phi$  ағысы абсолют қара денениң бир бирлик бетинен де нурланыуы керек. Бирақ, анықлама бойынша энергияның усындай ағысы абсолют қара денениң жарқынлығы болып табылады. Сонлықтан

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

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

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

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



1.8-сүүрет.

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

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

шәртиниң орынланыўы талап етиледі. Бул шәрт бойынша шашыратыўшы дийўаллар арасындағы қашықлық  $l$  узынлығында пүтин сан еселенген ярым толқын узынлығының жайласыўы керек. Бундай толқын ушын толқын векторы  $\vec{k} = k_x \vec{e}_x$  болғанлықтан (бул аңлатпада  $k_x = \frac{2\pi}{\lambda}$ )  $x$  бағытында турғын толқынлардың пайда болыўы шәртин толқынлық санға қойылатуғын шәрт сыпатында жаза аламыз:

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

Тап усындай талқылаўларды  $y$  хәм  $z$  көшерлери бағытында тарқалатуғын толқынлар ушын да өткере аламыз. Бул талқылаўлар туўры хәм шағылысқан нурлардың суперпозициясы болған турғын толқын ушын улыўмалық жуўмақты

келтирип шығарыуға мүмкіншілік береді. Ғақыйқатында да кублық формаға ийе қуысылық ишінде ықтыярлы

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

толқын векторына ийе турғын толқын ушын

$$k_x = n_1 \frac{\pi}{l}, \quad k_y = n_2 \frac{\pi}{l}, \quad k_z = n_3 \frac{\pi}{l}. \quad (2.1.20)$$

шәртинің орынланыуы керек болады. Бул аңлатпада  $n_1, n_2$  хәм  $n_3$  арқалы бир биринен ғәрезсиз  $0, 1, 2, \dots$  мәнислерин қабыл ететуғын пүтин санлар белгиленген.

(2.1.20) шәртлерин қуысылық ишіндеги тоқынлардың толқынлық санына қойылатуғын шәрт сыпатында жаза аламыз

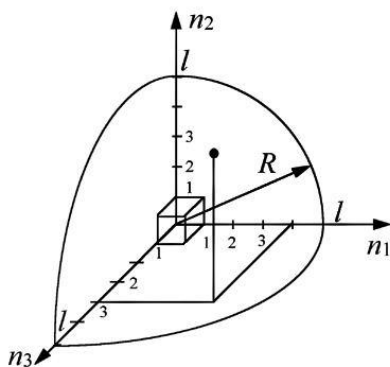
$$k = |\vec{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\pi}{l} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}. \quad (2.1.21)$$

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

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

аңлатпасының жәрдемінде есапланады. Терис мәниске ийе болмайтуғын  $n_1, n_2, n_3$  санларының хәр бир үшеуіне бир турғын толқын сәйкес келеді. Усындай турғын толқынлардың улыұмалық саны шексиз үлкен.

Қуысылықтың ишіндеги жийилиги берилген  $\omega$  мәнисинен үлкен болмаған турғын электромагнит толқынларының санын анықлаймыз. Буның ушын дискрет болған үш өлшемлі  $Z^3$  кеңислигин қараймыз (2.1.9-сүўрет.). Бул кеңисликтеги координаталары  $n_1, n_2$  хәм  $n_3$  болған хәр бир ноқат тең салмақлы жыллылық нурланыуына ийе қуысылықтағы бир турғын электромагнит толқынға сәйкес келеді. Бул ноқатлар  $Z^3$  кеңислигин көлеми бир бирликке тең болған қуышаларға бөледі.



1.9-сүўрет.

Дискрет болған үш өлшемлі  $Z^3$  кеңислиги. Бул кеңисликтеги координаталары  $n_1, n_2$  хәм  $n_3$  болған хәр бир ноқат тең салмақлы жыллылық нурланыуына ийе қуысылықтағы бир турғын электромагнит толқынға сәйкес келеді. Бул ноқатлар  $Z^3$  кеңислигин көлеми бир бирликке тең болған қуышаларға бөледі.

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

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2. \quad (2.1.23)$$

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

Енди жийиликлеринің мәнісі  $\omega$  шамасынан үлкен болмаған турғын толқынлардың саны болған  $\tilde{N}$  шамасын анықлауға болады. Буның ушын  $Z^3$  кеңислигиндеги радиусы  $R$  ге тең болған шардың оң октанты ишиндеги ноқатлардың санын есаплаймыз.  $Z^3$  кеңислигиндеги хәр бир ноқат пенен бир бирлік көлемге ийе қутыша байланысқа болғанлықтан радиусы  $R$  ге тең болған шардың  $1/8$  бөлегинің көлеми биз излеп атырған ноқатлар санын (турғын толқынлар санын) анықлайды. Сонлықтан

$$\tilde{N} = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{1}{6} \frac{\omega^3 l^3}{\pi^2 c^3} = \frac{1}{6} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot V. \quad (2.1.24)$$

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

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

$$N = 2\tilde{N} = \frac{1}{3} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} V. \quad (2.1.25)$$

(2.1.25) ти жийилик бойынша дифференциаллап қуысылықтағы жийиликлері  $\omega$  дан  $d\omega$  ға шекемги турғын толқынларды табамыз:

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

Егер енди  $\langle \epsilon \rangle$  арқалы жийилиги  $\omega$  болған турғын электромагнит толқынның орташа энергиясын белгилесек, онда тең салмақты жыллылық нурланыуының спектраллық тығызлығының анықламасы бойынша

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

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

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \langle \epsilon \rangle \quad (2.1.27)$$

екенлигине ийе боламыз.



Жыллылық нурланыуы теориясын раўажландырыу барысында Д.Рэлей (1900-жылы) хәм Д.Джинс (1905-жылы) хәр бир турғын электромагнит толқынды еки еркинлик дәрежесине ийе объект сыпатында қараўды усынды. Олардың биреуи электрлик, екиншиси магнитлик.

Энергияның еркинлик дәрежелери бойынша тең өлшеули тарқалыуы ҳаққындағы классикалық теоремаға муўапық термодинамикалық тең салмақлық ҳалында системаның хәр бир еркинлик дәрежесине  $\frac{1}{2}kT$  шамасына тең энергия сәйкес келеди. Бул аңлатпада  $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К арқалы Больцман турақлысы белгиленген. Сонлықтан  $T$  температурасындағы тең салмақлық жыллылық нурланыуында жийилиги  $\omega$  болған хәр бир турғын толқынға орташа

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

энергиясы сәйкес келеди. Бундай жағдайда (1.27)-аңлатпадан

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

аңлатпасын келтирип шығарамыз. (2.1.17)-аңлатпаларының жәрдеминде тең салмақлық жыллылық нурланыуының энергиясының спектраллық тығызлығы ушын алынған бул формуланы абсолют қара денениң нур шығарыушылық уқыплығы ушын жазылған Рэлей-Джинс формуласына түрлендириу мүмкин:

$$r_{\omega, T}^* = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT \quad (2.1.30)$$

Рэлей-Джинс формуласы абсолют қара денениң нурланыуы бойынша алынған эксперименталлық мағлыұматларға киши жийиликлер ямаса үлкен толқын узынлықлары областларында жақсы сәйкес келеди. Бирақ үлкен жийиликлер ямаса киши толқынлар областларында Рэлей-Джинс формуласы менен эксперименттерде алынған мағлыұматлар арасында үлкен айырма жүз береді. Усының менен бир қатарда (2.1.29) бенен (2.1.30) ды барлық жийиликлер бойынша интегралласақ тең салмақлық нурланыуының энергиясының интеграллық тығызлығы  $u(T)$  хәм абсолют қара денениң энергетикалық жарқынлығы  $R^*$  ушын шексиз үлкен мәнис аламыз. Ҳақыйқатында да

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

Буннан жыллылық нурланыуының классикалық теориясы бойынша нурланыу энергиясының шекли мәнислеринде зат пенен нурланыу арасында тең салмақлықтың орын алыуы мүмкин емес деген жуўмақ шығады. Бул жуўмақ тәжірийбе нәтийжелерине пүткиллей қайшы келеди.

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

**Квантлар хақындағы гипотеза. Планк формуласы.** "Ультрафиолет катастрофа" классикалық физиканың бир қатар принципаллық ишки қарама-қарсылықтарға ийе екенлигин айқын көрсетти. Сонлықтан жыллылық нурланыуы теориясында пайда болған машқалаларды шешиу ушын пүткіллей жаңа идеялардың керек екенлиги айқын болды.

Бундай физикалық идея 1900-жылы М.Планк тәрөпинен квантлар хақындағы гипотеза түрінде усынылды. Бул гипотеза бойынша затлар тәрөпинен нурлар үзликсиз нурландырылмайды ямаса жутылмайды, ал порциялар түрінде нурландырылады ямаса жутылады. Энергияның шекли порцияларын М.Планк энергияның квантлары деп атады. Квантлық энергияның мәниси нурланыудың жийилигинен ғәрезли хәм

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

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

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

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

Классикалық физика бойынша қәлеген физикалық шама, соның ишинде энергия да үзликсиз өзгереди. Оның шексиз киши ўақыт ишиндеги өсими де шексиз киши шама. Тап усындай жағдай орын алып атырған ўақытта усынылған квантлар хақындағы гипотеза физиканың буннан былай раўажланыуы ушын оғада үлкен тәсирин тийгизди. ХХ әсирдиң басында усынылған Планктиң квантлар хақындағы гипотезасы квантлық механиканың дәрөтилиўине алып келди. Хәзирги заман физикалық теория болып табылатуғын квантлық механикада квантланыу идеясы ямаса дискретлик системаның халын характерлеўши хәр қыйлы физикалық шамаларға тарқатылады. Тап усындай көз-қараста 1900-жылды квантлық физиканың туўылған жылы деп атау мұмкин. Бул теория келеси 100 жыл даўамында хәр тәрөплеме хәм жоқары тезликлер менен раўажланып, физиклерге атомлық кубылыслар қәддиндеги микродүньяның тамамланған хәм қарама-қарсылықсыз теориясын дәрөтиўге мұмкиншилик берди.

Биринши этапта нурланыу энергиясының квантланыуы хақындағы гипотезаның жәрдемінде Планк тең салмақлық жыллылық нурланыуының толық теориялық тәрөплемесин берди хәм классикалық теорияның қарама-қарсылықларын ақырына шекем қалдырмай шешти.

Нурланыудың квантлық теорияның классикалық теориядан парқы  $\omega$  жийилигиндеги нурланыудың орташа энергиясын есаплауда айқын көринеди. Планк гипотезасын есапқа алған халда нурланыудың орташа энергиясы

$$\langle \epsilon \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P_n \epsilon_n \quad (2.1.32)$$

формуласының жәрдемінде анықланады. Бул формулада  $\epsilon_n = n\hbar\omega$  арқалы нурланыу энергиясының мумкин болған мәниси, ал  $P_n$  арқалы термодинамикалық тең

салмақтық халында  $T$  температурда нурланыудың  $\varepsilon_n$  энергиясына ийе болуы итималлығы белгиленген. Итималлықтың бул мәнісін Больцман тарқалыуының жәрдеминде анықлау мүмкін. Бул итималлықты базы бир константа дәллігінде

$$P_n = A e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}} \quad (2.1.33)$$

түрінде жазамыз. Егер  $\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$  екенлігін есепке алсақ, онда  $A$  константасы ушын

$$A = \left( \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\varepsilon_n}{kT}} \right)^{-1}.$$

формуласына ийе боламыз. Солай етип нурланыудың квантлық теориянда жийилигі  $\omega$  болған нурланыудың орташа энергиясы мына аңлатпаның жәрдеминде бериледи екен:

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

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

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

Бул қатнасты  $\xi$  бойынша дифференциаллап (2.1.34)-формуланың бөлімінде турған қатардың суммасын табамыз:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\xi} = - \frac{dS}{d\xi} = \frac{e^{-\xi}}{(1 - e^{-\xi})^2}. \quad (2.1.36)$$

Сумманың табылған мәнісін (2.1.34)-аңлатпаға қойып жийилигі  $\omega$  шамасына тең болған нурланыудың орташа мәнісін ушын ақырғы аңлатпаны аламыз

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

Киши жийиликлерде  $\frac{\hbar \omega}{kT} \ll 1$  хәм  $e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} \approx 1 + \frac{\hbar \omega}{kT}$ . Сонлықтан (2.1.37)-формуладан классикалық теорияның формуласы болған  $\langle \varepsilon \rangle = kT$  формуласына кайтып келемиз. бирақ үлкен жийиликлер областында (2.1.28)- хәм (2.1.37)-формулар бойынша есапланған нурланыудың орташа энергиялары пүткиллей хәр қыйлы мәніслерге ийе болады. Ал тап усындай жийиликлер областында классикалық теория "ультрафиолет катастрофаға" алып келетуғын еди. Нурланыудың квантлық теориясы эксперимент пенен теория арасындағы бул қарама-қарсылықты

сапластырады. Ғақыйқатында да(2.1.37) ни (2.1.27) ге қойып тең салмақты жыллылық нурланыўының энергиясының спектраллық тығызлығы ушын Планктің белгили формуласын аламыз:

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

Байланыс формуласы (2.1.17) абсолют қара денениң жийиликлердің барлық диапазонындағы нур шығарыўшылығын тәриплейтуғын Планк функциясын

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

түринде жазыўға мүмкиншилик береді.

Планк функциясы абсолют қара денениң барлық жийиликлерде ҳәм барлық температураларда нурланыўы бойынша эксперименттерде алынған нәтийжелерге сәйкес келеді. Төменги жийиликлерде нурланыўдың квантлық теориясының (2.1.39)-формула Рэлей-Джинстің (2.1.30)-формуласына өтеді. Жоқары жийиликлерде  $\hbar\omega \gg kT$ ,  $e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} \gg 1$  теңсизликлери орынланатуғын жоқары жийиликлерде (2.1.39)-формула

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

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

Жоқарыда баян етилген Планк формуласын келтирип шығарыў усылы тарийхый жақтан ең биринши рет қолланылған усыл болып табылады. Кейинирек бул мәселе квантлық физиканда басқа да усыллардың жәрдеминде шешилди. Олардың бир қаншасы алдымыздағы параграфларда қарап өтиледі.

1.3-мәселе. Нурланыўдың квантлық теориясының тийкарғы аңлатпаларын пайдаланып Стефан-Больцман нызамын келтирип шығарыңыз ҳәм Стефан-Больцман турақлысының мәнисин есаплаңыз.

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

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

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

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

формуласының жәрдеминде анықланады.

Меншикли емес

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

интегралының мәнісін Mathematica 8.0 программалау тилинің жәрдеминде есептейміз хәм  $\frac{\pi^4}{15}$  нәтижесін аламыз. Сонлықтан Стефан-Больцман тұрақтысы үшін

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 c^2 \hbar^3} = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}$$

мәнісін аламыз.

Планктың өзі экспериментте анықланған  $\sigma$  тұрақтысының мәнісін пайдаланған хәм жоғарыдағы формула бойынша  $\hbar$  тың мәнісін есептеген.

1.4-мәселе. Абсолют қара дененің нур шығарушылық ұқыплығы үшін жазылған Планк функциясының жәрдеминде жыллылық нурланыуы үшін Виннің  $\lambda_m T = b$  нызамындағы  $b$  тұрақтысының мәнісін есептеңіз.

Шешімі: (2.1.3)-формула бойынша  $\omega = 2\pi c/\lambda$  өзгерісуін алмастырып, (2.1.39)- Планк функциясын түрлендірудің жәрдеминде абсолют қара дененің нур шығару ұқыплығын толқын ұзындығының функциясы түрінде табамыз:

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

$z = 2\pi c \hbar / (\lambda k T)$  белгілеуін пайдаланып  $\varphi$  функциясын

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

түрінде жазамыз.  $\varphi$  функциясының қандай  $z = z_m$  мәнісінде максимумға ийе болатуғынлығын табамыз. Бұның үшін

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

тууындысын алып, оны нолге теңейміз хәм  $z = z_m$  экстремаллық мәнісін үшін

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

трансцендент теңлемесін ямаса

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

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

Демек

$$\frac{2\pi c\hbar}{\lambda_m kT} = 4,965$$

теңлиги орынланған жағдай ушын алынған  $\lambda = \lambda_m$  толқын узынлығында абсолют қара денениң нур шығарыўшылық уқыплығы максимумына жетеді екен.

Буннан

$$\lambda_m T = b = \frac{2\pi c\hbar}{4,965k} = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$$

екенлигине ийе боламыз.

## 2-1-3. Фотон газы ҳәм оның қәсийетлери

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

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

Фотонның энергиясы

$$\varepsilon_\Phi = h\nu = hc/\lambda \quad (2.1.41)$$

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

с тезлиги менен қозғалыушы фотон импульске ийе болады. Оның импульси менен энергиясы арасында  $p_{\phi} = \varepsilon_{\phi}$  түріндеги релятивистлик қатнас орын алады. (2.1.32)-аңлатпаны есапқа алып

$$p_{\phi} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (2.1.43)$$

теңлигин жаза аламыз.

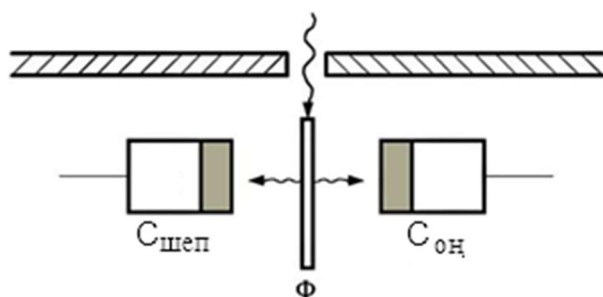
Фотон ушын модули  $k = 2\pi/\lambda$  шамасына тең, ал тарқалыу бағыты  $\vec{k}$  векторы жәрдемінде анықланатуғын нурланыу ушын (2.1.43)-формуланы төмендегидей векторлық түрде жазыу мүмкин

$$\vec{p}_{\phi} = \hbar \vec{k} \quad (2.1.44)$$

**Боте тәжірийбеси.** Экспериментте нурланыуға тийисли болған айырым фотонды табыуға бола ма? деген сорау бериледи. Егер фотон үлкен массаға хәм үлкен энергияға ийе болғанда бул сорауға аңсат жууап бериуге болар еди. (2.1.42)-хәм (2.1.43)-аңлатпалардан бундай фотонның қысқа толқынлы электромагнит нурланыуда (мысалы рентген нурларында) болатуғынлығын аңлауға болады.

Рентген нурларының фотонын табыу ушын В.Боте 1925-жылы орынлады. Бул экспериментте жуқа металл фольга  $\Phi$  (2.1.10-а сүүрет) рентген нуры менен нурландырылды. Усының менен бирге фольганың өзи әззи екінши нурланыудың дерегине айланды.

Толқынлық көз-қараслар бойынша хәтте жүдә әззи нурлардың энергиясы кеңисликте оң хәм шеп тәреплерге қарай бир текли тарқалған болады. Бундай жағдайда шеп хәм оң тәрептерде жайластырылған есаплағышлар бир уақытта бирдей шамаларды көрсеткен болар еди. Соның менен бирге усындай жағдайларда шептеги хәм оң тәрептеги есаплаушы дүзиліслер менен тутастырылған жазып алыушы әсбаплар қозғалыушы қағаз лентада бирдей тамғаларды қойған болар еди (2.1.10-б сүүрет).



1.10-а сүүрет.



1.10-б сүүрет.

Нурланыудың корпускулалық фотонлық теориясы көз-қарасында екінши нурланыудың энергиясы бир фотонның энергиясындай киши болғанда, фотонлар фольгада тек оң тәрепке ямаса тек шеп тәрепке нурландырылған болар еди. Бундай жағдайда қозғалыушы қағаз лентаға түсирилген тамғалар бир бирине сәйкес келмей қалады.

Тәжірийбе (2.1.10-б сүүрет) нурланыудың фотон теориясының жуўмағын тастыйықлады хәм усының менен бирге фотонның бар екенлиги экспериментте дәлилленди

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

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

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

Әлбетте фотонлар газын классикалық идеал газдай болып таллаўға болмайды. Фотон газының бөлекшелери (фотонлар) тезликлер бойынша тарқалыўға ийе емес, ал олардың энергия бойынша тарқалыўын классикалық Максвелл-Больцман тарқалыўы менен тәриплеўге болмайды. Фотонлардың энергиялар бойынша тарқалыўын квантлық статистиканың жәрдеминде келтирип шығарыў мүмкин (усы қолланбаның 6.5 бөлимин қараңыз). Буның ушын дәслең бир биринен парқы жоқ бөлекшелерден туратуғын системалардың квантлық теориясын талқылап алыў керек болады. Хәзир болса биз улыўмалық термодинамикалық ызымлар хәм тең салмақлық жыллылық нурланыўы ушын келтирип шығарылған аңлатпалар тийкарында фотонлар газының базы бир қәсийетлерин таллаў менен шекленемиз

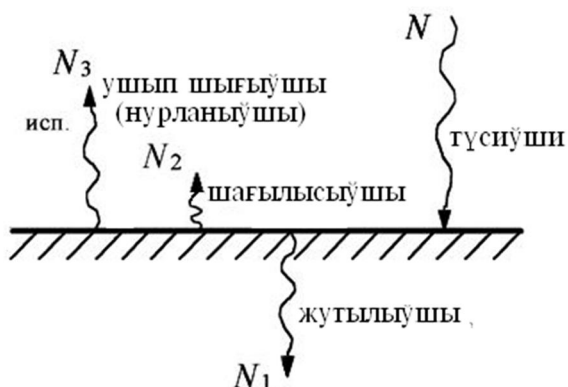
Ең дәслең фотонлар газы ушын ҳал теңлемесин келтирип шығарамыз. Бул теңлеме фотонлар газының термодинамикалық параметрлери болған басымды, көлемди хәм температураны бир бири менен байланыстырады. Газлердиң молекулалық-кинетикалық теориясындағыдай жоллар менен фотон газының қуўыслықтың дийўалларына түсиретуғын басымын есаплаймыз хәм келип түсиўши фотонлардың импульслериниң ыдыстың дийўалларына берилиўиниң салдарынан басымның пайда болатуғынлығын еске түсиремиз

Барлық фотонлардың ишинен биз дәслең  $\omega$  жиилигиндеги нурланыўға сәйкес келиўши фотонларды бөлип аламыз хәм оның көлемлик концентрациясын  $n_\omega$  арқалы белгилеймиз. Бирдей хуқыққа ийе болғанлықтан бир бирине перпендикуляр хәм ыдыстың дийўалларына да перпендикуляр болған бағытларды қараймыз. Хәр бир дийўалға қарай барлық фотонлардың үштен бири қозғалады деп есаплаймыз. Олардың да тек ярымы ғана дийўалға қарай, ал қалған ярымы дийўалға қарама-қарсы бағытта қозғалады. Фотонлар с тезлиги менен қозғалатуғын болғанлықтан дийўалдың майданының бир бирлигине бир ўақыт бирлиги ишинде келип түсетуғын фотонлар саны былайынша жазылады

$$N = \frac{1}{6} n_\omega c$$

Егер заттың дийўалының жутыўшылық қәбилетлигин  $a_{\omega,T}$  арқалы белгилесек, онда дийўалға келип жетиўши  $N$  дана фотонның  $N_1 = a_{\omega,T}N$  данасы дийўал тәрөпинен жутылады, ал  $N_2 = (1 - a_{\omega,T})N$  данасы шағылысады.  $N_1 + N_2 = N$  екенлиги өз-өзинен түсиникли (2.1.11-сүүрет).





1.11-сұйрет.

Дийұалдың бетине келип түсіуші, беттен шағылысушы және беттен нурланыушы фотонлардың санын есаплау үшін керекли болған сұйрет.

"Зат – нурланыу" системасындағы термодинамикалық тең салмақлық шәрти беттен нурландырылатуғын (ушып шығыушы) фотонлардың саны  $N_3$  (яғный бир шамасының бирлик майданнан ўақыт бирлигинде нурландырылатуғын фотонлар саны) жұтылған фотонлар саны  $N_1$  ге тең болыуын талап етеди. Тек  $N_3 = N_1$  шәрти орынланатуғын жағдайда ғана денениң ишки энергиясы ўақыттың өтиуи менен өзгериссиз қалады. Соның менен бирге ўақыттың өтиуи менен нурланыу энергиясы да өзгермейди.

Қәлеген жұтылған және шығарылған фотон дийұал  $p_\phi$  импульсин береди. Оның шамасы (2.1.43)-формуланың жәрдеминде есапланады. Шағылысқан фотон өзиниң дәслепки бағытын қарама-қарсы бағытқа өзгертеди. Сонлықтан дийұалға  $2p_\phi$  импульсин береди. Демек бир ўақыт бирлигинде дийұалдың майданының бир бирлигине

$$N_1 p_\phi + N_2 2p_\phi + N_3 p_\phi = 2(N_1 + N_2) p_\phi = 2N p_\phi$$

шамасына тең импульс бериледи. Ньютонның екінши нызамы бойынша дийұалға берилген бул импульс жийилиги  $\omega$  болған нурланыудың дийұалға түсирген басымы  $P_\omega$  ны анықлайды. Демек

$$P_\omega = 2N p_\phi = \frac{1}{3} n_\omega c p_\phi = \frac{1}{3} n_\omega \varepsilon_\phi = \frac{1}{3} u_\omega. \quad (2.1.45)$$

Бул аңлатпада  $u_\omega$  арқалы жийилиги  $\omega$  болған нурланыудың энергиясының тығызлығы белгиленген.

Хәр қыйлы жийиликтеги нурланыудың фотонларының дийұалға түсиретуғын басымын суммалап  $T$  температурасында тең салмақлықта турған фотон газының улыұмалық басымын

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

түринде табамыз. Бул аңлатпада  $u(T)$  арқалы мүмкин болған барлық жийиликлердеги нурланыу энергиясының интеграллық тығызлығы белгиленген. (2.1.7) және (2.1.16) ларды есапқа алсақ

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

аңлатпасына ийе боламыз, сонлықтан фотон газының басымы үшін төмендегі формуланы аламыз

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

Бұл аңлатпада  $\sigma$  арқалы Стефан-Больцман тұрақтысы,  $c$  арқалы жақтылықтың вакуумдағы тезлігі белгіленген.

Солдай етип фотон газы түсіретуғын басымның шамасы оның абсолют температурасының төртінші дәрежесіне пропорционал, фотон газы жайласқан қуыслықтың көлемінен фәрезсіз екен. Мысалы  $T = 10^3$  К шамасын (2.1.48)-формулаға қойсақ  $P = 2,5 \cdot 10^4$  Па басымын аламыз. Температураның артыуы менен фотон газының басымы кескин түрде артады хәм  $T = 10^8$  К де  $P = 2,5 \cdot 10^{16}$  Па =  $2,5 \cdot 10^{11}$  атм ға жетеді.

**Фотон газының термодинамикалық характеристикалары.** Енді көлемі  $V$ , температурасы  $T$  болған қуыслықты толтырып тұрған фотон газының ишки энергиясын есаплаймыз. (2.1.47)-формуланы есапқа алсақ

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

екенлігін табамыз. Сонлықтан тұрақты  $V$  көлемін ийелеп тұрған фотон газының жыллылық сыйымлығы үшін

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

аңлатпасын аламыз.

Классикалық идеал газдің жыллылық сыйымлығы температурадан фәрезсіз шама еді. Фотон газының жыллылық сыйымлығы болса оның абсолют темпетарурасының кубына пропорционал екен.

Фотон газы үшін белгілі болған термодинамикалық аңлатпа  $dQ = TdS = dU + PdV$  формуласын пайдаланып, (2.1.48) бенен (2.1.49) ды есапқа алып

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

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

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

алынған термодинамикалық аңлатпалар фотон газы қатнастатуғын хәр қыйлы процесслерди қарап шығыуға мүмкиншилик береді. Мысалы (2.1.48) ден изотермалық процесстің ( $T = \text{const}$ ) изобаралық та процесс ( $P = \text{const}$ ) екенлігін көріуге болады.

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

$$T^3 V = \text{const} \quad (2.1.52)$$

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

$$P V^{4/3} = \text{const} \quad (2.1.53)$$

түрине келеди.

**Әлемниң жыллылық нурланыўы.** Жоқарыда келтирилген мағлыўматлар нурланыў энергиясының жоқары температураларда системаның ишки энергиясына үлкен үлес қосатуғынлығын көрдик. Бундай системаның бири ретинде жоқары температуралы плазманы көрсетиў мүмкин. Заттың бундай ҳалында фотон газы (нурланыў) бөлекшелер газы менен бир қатарда (электронлар, ионлар хәм басқалар) системаның рең ҳуқықлы элементи сыпатында есапқа алыныўы шәрт. Жоқары температуралы плазманың көплеген қәсийетлери фотон газының бөлекшелер газы менен тәсирлесийи тийкарында түсиндириледі.

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

Партланыўдың ақыбетинде жүдә киши көлемде жүдә жоқары температурада хәм жүдә жоқары тығызлықларда Әлемниң барлық затлары жайласқан. Г.Гамовтың берген мағлыўматлары бойынша партланыўдан 100 секунд өткеннен кейин заттың тығызлығы суўдың тығызлығынан мыңлаған есе үлкен, ал температура болса термоядролық партланыўдың орайында пайда болатуғын температурадан ( $T \sim 10^9$  К) салыстырмас дәрежеде жоқары болған.

Ыссы от шарда материя жоқары температуралы плазма ҳалында болады. Бул плазма тийкарынан электронлардан, протонлардан, нейтронлардан, нейтринолардан хәм олардың антибөлекшелеринен турған. Бундай ҳалдағы затлар нурланыў ушын мөлдир бола алмайды хәм сонлықтан нурланыў затта "қақпанға" түскен ҳалға түседі.

1922-жылы дөретилген А.А.Фридманның теориясына сәйкес партланыўдан кейин Әлем үлкен тезликлер менен кеңейе баслаған. Кеңейиўдин ақыбетинде Әлемдеги затлардың хәм нурланыўдың температурасы төменлеген хәм партланыўдан соңғы шама менен 300 мың жылдан кейин  $T \approx 3000$  К шекем төменлеген. Тап усы ўақытлары затлардың тығызлығы  $\rho = 10^{-17}$  кг/м<sup>3</sup> шамасына шекем киширейген. Бундай шараятларда электронлар, протонлар хәм нейтронлар биригеди хәм водород, гелий хәм басқа да жеңил элементлердин атомлары пайда болады. Бундай нейтрал атомлардан туратуғын орталық нурланыў ушын мөлдир болады хәм нәтийжеде нурланыў затлардан "айрылып шығады". Усы дәўирлерден баслап фотон газы Әлемниң барлық көлемин ийелейди хәм Әлем менен бирге кеңейеди. Фотон газының бундай кеңейиўин адиабаталық кеңейиў деп атаўға болады

(2.1.52)-аңлатпадан Әлемнің көлемі үлкейген сайын оны толтырып тұрған фотон газының температурасы да төменлейді. Әпиұайы есаплаулар (бұндай есаплаулар 1.6-мәселеде келтірілген) ұсындай кеңейіу процессинің салдарынан пүткіл Әлем хәзирги ұақытлары температурасы шама менен 3 К шамасындағы тең салмақлық нурлар менен толған болыуы керек. Ондай электромагнитлик нурларды микротолқынлық нурлар деп атайды. Әлемнің эволюциясының ең басланғыш моментлеринде пайда болған бул космослық жыллылық нурланыуын белгили астрофизик И.С.Шкловский реликтлик деп атады. Есаплаулар хәзирги ұақытлары Әлемнің хәр бир куб сантиметринде реликтлик нурланыудың шама менен 700 фотонының бар екенлигин көрсетеди.

1965-жылы Америкалы радиоинженерлер А.Пензиас хәм Р.Уилсон радиотелескоптың қабыллағышын жумысқа таярлаудың барысында эzzi фонлық радиошауқымның бар екенлигин тапты. Олар өткерген изертлеулер бұндай радиотолқынлардың космос кеңлигинің барлық тәреплеринен бирдей интенсивликте келетуғынлығын хәм бул толқынлардың энергиясының максимумы  $\lambda_m = 0,96$  мм ге сәйкес келетуғынлығын көрсетти. Виннің ауысыу нызамы болған (2.1.11) аңлатпасынан ұсындай толқын узынлығы ушын тең салмақлық жыллылық нурланыуының энергиясының максимумының сәйкес келетуғынлығын нурланыудың температурасының  $T = 2,7$  К екенлиги келип шығады. Солай етип радиоинженерлер тәрепинен дерлик тосыннан Әлемде жүдә ертеде болып өткен физикалық процесслердің излери табылды.

1978-жылы физика бойынша халық аралық Нобель сыйлығы берилген реликтлик нурланыудың ашылыуы хәзирги заман илиминің әхмийетли жетискенлеринің бири болып есапланады. Бул ашылыу Әлемнің он миллиард жылдан да көбирек ұақыт ишиндеги эволюциясын тәрийиплейтуғын "ыссы" кеңейіуши Әлем теориясының дурыс екенлигин тастыйықлады. Бул теориядан өзинің рауажланыуының басланғыш дәуірлеринде Әлемнің хәзирги дәуірлердеги Әлемге пүткіллей усамағанлығын көрсетеди. Бул теориядан сол ұақытлары Әлемнің үлкен партланыудың ақыбетинде пайда болған аса тығыз плазмадан хәм жүдә жоқары температурадағы нурланыудан тұрғанлығы келип шығады. Бул жерде биз Жердеги шараятларда ашылған нызамлардың космослық масштаблардағы физикалық қубылыстар ушын да дурыс екенлигин көремиз. Усы жуўмағымыздың әхмийети жүдә уллы.

1.5-мәселе. Т температурасындағы тең салмақлық жыллылық нурланыуы менен толған кеңисликтің көлеминің бир бирлигиндеги фотонлардың санын анықлаңыз хәм фотонлардың концентрациясының температурадан ғәрезлигинің графигин сызыңыз.

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

$$n_\Phi = \int_0^\infty n_\omega d\omega$$

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

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

екенлигин табамыз.

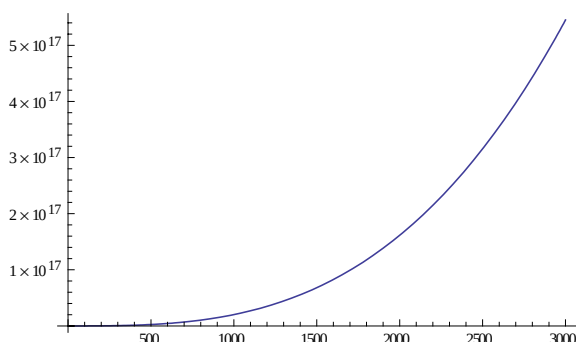
Бул формуладағы меншикли емес интегралдың мәнісін Mathematica 8.0 тилинде  $N[\int_0^\infty \frac{\xi^2}{\text{Exp}[\xi]-1} d\xi]$  аңлатпасын жазыу жолы менен шешеміз. Компьютер 2.4041138063191885 шамасын береді. Усыған байланысты фотонлардың концентрациясын есаплау үшін

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

формуласын аламыз. Есаплаулар төмнедегі нәтижелерді береді

| T, K | $n_\Phi, \text{м}^{-3}$ |
|------|-------------------------|
| 10   | $2 \cdot 10^{10}$       |
| 300  | $5,45 \cdot 10^{14}$    |
| 1000 | $2 \cdot 10^{16}$       |

Биз  $n_\Phi$  шамасының температура T дан ғарезлигинің графигін де дүзіуиміз мүмкін. Оның үшін  $\text{Plot}[\frac{2,4}{\pi^2} (\frac{kT}{\hbar c})^3, \{T, 0, 3000\}]$  аңлатпасын жазамыз (температура T үшін 0 ден 3000 K ге шекемгі интервал алынған. Алынған график



түріне ийе болады. Бөлекшелер концентрациясының температурадан тап усындай болған ғарезлиги фотон газының өзине тән өзгешелигі болып табылады.

1.6-мәселе. "Ыссы" Әлем теориясында Әлемнің раужланыуының дәслепкі дәуірінде нурланыудың затлардан "бөлиніп шығуы"  $T = 3000 \text{ K}$  температурада хәм  $\rho = 10^{-17} \text{ кг/м}^3$  тығызлықта жүзеге келді деп есапланады. Хәзиргі уақытлары Әлемнің тығызлығының  $\rho_0 = 10^{-29} \text{ г/см}^3 = 10^{-26} \text{ кг/м}^3$  екенлигін есапқа алып хәзиргі уақыттағы Әлемдегі реликтлик нурлардың температурасының шамасын бахалаңыз.

Шешими: Әлемді толтырып тұрған нурланыу (реликтлик нурланыу) Әлем менен бирге адиабаталы түрде кеңейеді деп есаплаймыз. Бундай жағдайда (2.1.52) ни есапқа алған қалда

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

екенлигін табамыз. Бул аңлатпада  $T_0$  арқалы биз ізлеп атырған температура, V хәм  $V_0$  арқалы Әлемнің басланғыш хәм хәзиргі көлемлери белгиленген. Әлемдегі затлардың массасын M арқалы белгилеймиз хәм бул шаманы өзгермейді деп есаплаймыз. Бундай жағдайда Әлемнің ертедегі хәм хәзиргі уақытлардағы тығызлықтары үшін  $\rho = \frac{M}{V}$  хәм  $\rho_0 = \frac{M}{V_0}$  аңлатпаларын жаза аламыз. Демек

$$T_0^3 = \frac{V}{V_0} T^3 = \frac{\rho_0}{\rho} T^3$$

аңлатпасына ийе боламыз. Буннан

$$T_0 = T \sqrt[3]{\rho_0 / \rho}$$

формуласын аламыз.  $\rho$  менен  $\rho_0$  шамаларының мәнісін қойып

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

екенлігіне ийе боламыз.

Усы ўақытларға шекем кеңейіуші Әлемдегі нурланыў тап усындай шамаға шекем төменлеген.

## 2-1-4. Квантлық оптика

Планк пенен Эйнштейннің квантлық теорияларының тийкарғы талаптарына сәйкес нурланыў, соның ишінде жақтылық та корпускулалық қасиетлерге ийе болады. Демек белгили бир шараятларда бул қасиетлер оптикалық экспериментлерде бақланыўы керек.

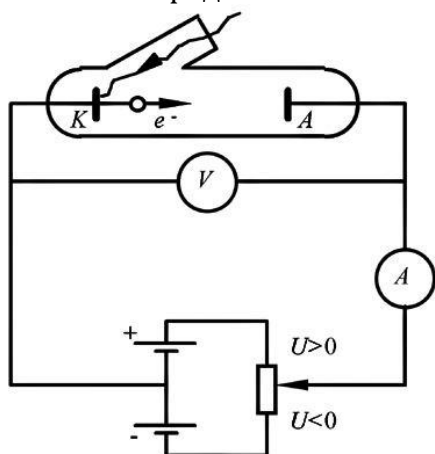
Оптикалық қубылыслардың бир қатар классын түсиндириў ушын нурланыў энергиясының квантлары хәм оларды алып жүриўши фотонлар түсиниги керек болады. Фотонлар түсиниги қолланылатуғын оптикалық қубылыслардың классын квантлық оптикасы деп атайды. Бундай қубылыслар тийкарынан нурланыўдың затлар менен тәсир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

**Фотоэффект.** Сыртқы фотоэффект деп сыртқы нурланыўдың тәсиринде затлардан электронлардың ушып шығыўына айтамыз. Ең дәслеп фотоэффект 1887-жылы Г.Герц тәрепинен ашылды. Ол еки металл шарик арасындағы газ разрядының пайда болыўын изертледи хәм изертлеў барысында шариклердиң бирейин ультрафиолет нурлар менен нурландырғанда еки шарик арасындағы ушқынлы разрядтың әдеўир үлкен интенсивлик пенен пайда болатуғынлығын тапты. Нурланыўдың тәсиринде металдан ушып шығатуғын бөлекшелердиң салыстырмалы зарядын өлшегенде олардың электронлар екенлиги мәлим болды.

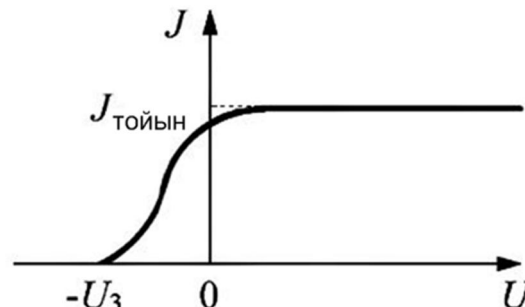
Нурланыўдың тәсиринде электронлардың ушып шығыўы барлық затларда да бақланатуғын болса да фотоэффектти көбинесе металлар менен байланыстырады. Металларда атомлардан "еркин" болған электронлар бар, бул электронлар металдың бетине жақын орынларда базы бир энергетикалық барьер тәрепинен услап турылады деп есапланады. Металдан ушып шыққанда сол барьер арқалы өтиў ушын электрон шығыў жұмысын орынлайды хәм буның ушын өзиниң кинетикалық энергиясының бир бөлегин жумсайды. Металлардан электронлардың шығыўы ушын исленетуғын жұмыс  $A$  ның муғдары бир неше электрон-вольтке тең.

Сыртқы фотоэффектти 1888-жылы А.Г.Столетов толығырақ изертледи. Ол схемасы 1.12-сүүретте көрсетилгендей еки электродлы вакуумлы лампа түриндеги фотоэлементти пайдаланды. Фотоэлементтеги  $K$  катодынан көзге көринетуғын жақтылық ямаса ультрафиолет нурлар менен жақтыландырғанда электронлар ушып шығады. Бундай электронларды фотоэлектронлар деп атайды. Катодтан

ушып шыққан электронлар А анодына келип жетип шынжыр арқалы электр тоғының өтиінін тәміинлейди. Бул тоқтың шамасы гальванометр ямаса миллиамперметр жәрдеминде өлшенеди. Шынжырға ток көзін тутастырыудың арнайы схемасы фотоэлементке түсірилген кернеудің полярлығын өзгертіуге мүмкіншілік береді.



1.12-сүрөт. А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлементтің схемасы.



1.13-сүрөт. А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлементтің вольт-амперлик характеристикасы.

А.Г.Столетов пайдаланған фотоэлементтің келип түсіуші жақтылық ағысы өзгермейтуғын жағдайдағы вольт-амперлик характеристикасының (яғный фототоқтың шамасы  $J$  тың кернеу  $U$  дан ғәрезлиги) сапалық түрі 1.13-сүрөтте келтирилген.

Оң кернеу тезлетиуші электр майданына сәйкес келеди. Бундай майданда катодтан ушып шыққан электронлар жайласқан. Сонлықтан оң кернеулер областында катодтан шығарылған электронлардың барлығы анодқа жетеди хәм тойыныу тоғы болған  $J_{\text{тойын}}$  тоғын пайда етеди.

Тәжирийбелерде бақланатуғын киши оң кернеулердеги фототоқтың шамасының азмаз кемейиуі анод пенен катод арасындағы контактлы потенциаллар айырмасы менен байланысly. Биз фотоэффекттиң нызамлықларын үйрениу барысында контактлық потенциаллар айырмасын есапқа алмаймыз.

$U < 0$  болған кери кернеулерде катодтан ушып шыққан электронлар тормозлаушы электр майданына тап болады. Бул майданды басып өтиу ушын ол базы бир муғдардағы кинетикалық энергияға ийе болыуы шәрт. Кинетикалық энергиясы киши болған электрон тормозлаушы майдан арқалы өтип анодқа барып жете алмайды. Бундай электрон катодқа қайтып келеди хәм фототоқтың шамасына үлес қоса алмайды. Сонлықтан кери кернеулер областындағы фототоқтың әстелик пенен кемейиуі катодтан ушып шығып атырған электронлардың хәр қыйлы кинетикалық энергияларға ийе болатуғынлығын көрсетеди.

Кери кернеудің базы бир шамасында фототоқтың шамасы нолге тең болады. Кернеудің бул мәнисин  $U_i$  арқалы белгилеймиз хәм оны иркиуші потенциал деп атаймыз. Усы кернеуге сәйкес келиуші тормозлаушы (иркиуші) электр майданы катодтан ушып шыққан электронлардың барлығын иркеди. Бундай электронлардың ишине кинетикалық энергиясы максимал  $E_m$  болған электронлар да киреди.

Иркиуші потенциалдың мәнисин өлшеп

$$E_m = \frac{1}{2} m_0 v_m^2 = eU_{\text{з}} \quad (2.1.54)$$

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

Эксперименттерде фотоэффекттиң төмендегидей тийкарғы нызамлықтары табылды:

1. Белгили бир узынлықтағы монохроматлық жақтылық ушын тойыныұ фототоғының шамасы катодқа келип түсіуши жақтылық ағысына пропорционал

2. Фотоэлектронлардың максималлық кинетикалық энергиясының шамасы жақтылық ағысының шамасына байланыссы емес, ал нурланыұдың жийилигинен ғарезли.

3. Катодтың ҳәр бир материалы ушын шегаралық жийилик  $\nu_{\text{ш}}$  бар болып, жийилиги бул жийиликтен кем болған нурланыұ ( $\nu < \nu_{\text{ш}}$ ) фотоэффектти пайда етпейди. Бул шегаралық жийиликти фотоэффекттиң қызыл шегарасының жийилиги деп атайды. Толқын узынлығы шкаласында бул жийиликке қызыл шегараның толқын узынлығы  $\lambda_{\text{ш}}$  сәйкес келеди. Берилген металл ушын толқын узынлығы тек  $\lambda < \lambda_{\text{ш}}$  теңсизлигин қанаатландыратуғын ғана узынлықтағы нурланыұ фотоэффектти жүзеге келтиреді.

Фотоэффекттиң жоқарыда келтирилген нызамлықларын классикалық физика көз-қараслары тәрөпинен түсиндириуе умтылыұлар экспериментте алынған нәтийжелер менен қарама-қарсы болған жуұмақларды берди. Ғақыйқатында да классикалық физика бойынша фотоэлектронлардың максималлық кинетикалық энергиясы катодқа келип түсіуши жақтылықтың ағысына пропорционал болыуы керек. Ал эксперименттер болса максималлық кинетикалық энергияның жақтылықтың ағысына емес, ал жийилигине байланыссы екенлигин көрсетеди. Сонлықтан фотоэффекттиң қызыл шегарасының болыуы толқынлық теорияның болжауларына қарама-қарсы келеди.

Фотоэффектти үйрениу бойынша өткерилген эксперименттердің нәтийжелерин түсиндириу ушын 1905-жылы А.Эйнштейн энергия квантын алып жүриуши нурланыұ бөлекшелери болған фотонлар концепциясы усынды. Усындай теорияның жәрдеминде металл менен нурланыұдың тәсирлесиуин фотонның металдағы еркин электрон менен серпимли емес тәсирлесиуи сыпатында қарады ҳәм фотоэффекттиң нызамлықларын аңсат түсиндирди. Ғақыйқатында да бундай процессте металдағы еркин электрон барлық энергияны фотоннан алады. Ал фотонның энергиясы болса жийиликке туұры пропорционал. Металдан жулып алынатуғын электронлардың саны ҳәм соған байланыссы болған тойыныұ фототоғының мәниси металдың бетине келип түсіуши фотонлардың санына байланыссы. Фотонлардың саны болса нурланыұ энергиясының ағысынан анықланады.

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

$$h\nu = A + E_m \quad (2.1.55)$$

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



Бул теңлемеден фотоэффекттиң екінші хәм үшінші нызамлары бирден келип шығады. Ҳақыйқатында да (2.1.55)-теңлемеден фотоэлектронлардың максималлық энергиясының металдың бетине келип түсіуші нурлардың жийилигине байланысly екенлиги көринип тур. Соның менен бирге  $h\nu < A$  болса фотоэффект бақланбайды. Буннан фотоэффекттиң қызыл шегарасы ушын толқын узынлығы менен жийиликтің мәнисин есаплаўға мүмкиншилик беретугын әпиўайы формулаларды аламыз

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

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

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

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

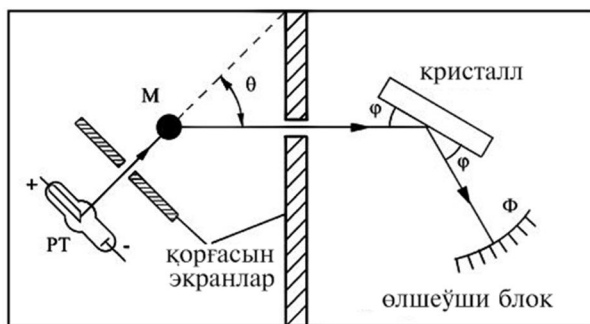
1923-жылы А.Комптон рентген нурларының парафиндеги шашыраўын изертледі хәм бул изертлеўлердиң барысында шашыраған толқынлардың толқын узынлығы  $\lambda'$  тың парафинге келип түскен толқынның узынлығы  $\lambda$  ден үлкен екенлигин тапты. Толқынның затларда шашыраўының нәтийжесинде толқын узынлығының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

Комптон пайдаланған эксперименталлық дүзилистиң схема түриндеги сүўрети 1.14-сүўретте келтирилген. РТ рентген трубкасы айланыўшы платформаға бекитилген. Бул нышана  $M$  ге келип түсіуші  $\theta$  мүйешиниң мәнисин өзгертиўге мүмкиншилик береди.

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

$$2d \sin \varphi = k\lambda', \quad k = 1, 2, \dots, \quad (2.1.58)$$

шәрти орынланғанда (бул аңлатпада  $d$  арқалы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықтық,  $\varphi$  арқалы рентген нурларының сол кристаллографиялық тегисликлерге түсіу мүйеши,  $\lambda'$  арқалы  $M$  нышанасы тәрәпинен шашыратылған рентген толқынларының толқын ұзындығы белгиленген) келип түскен шашыраған рентген толқынының кристалдағы шағылысыуы (дифракциясы) орын алады. Сонлықтан  $d$ ,  $\varphi$ ,  $k$  шамаларын анық билген жағдайда  $M$  нышанасында шашыраған толқынның толқын ұзындығы болған  $\lambda'$  шамасын анықлау мүмкин. (2.1.58)-формула бойынша  $\varphi$  мүйеши менен  $\lambda'$  толқын ұзындығы арасындағы сәйкеслик тийкарында фотопенкада алынатуғын дақтың мүйешлик координатасы бойынша шашыраған толқынның толқын ұзындығын есаплау мүмкиншилиги тууылады. Комптонның дәслепки тәжирийбелерінде фотопенканың орнына қозғалыуы ионизациялық камера пайдаланылған.



1.14-сүүрет. А.Комптон пайдаланған эксперименталлық дүзилістің схема түріндегі сүүрети.



1.15-сүүрет. Нурланыудың фотонлық теориясы Комптон эффектін фотонның электронлардағы серпимли соқлығысыуының нәтийжеси деп түсіндиреди

Комптон өз экспериментлерінде шашыраған рентген толқынларының толқын ұзындығының нышанаға келип түскен рентген толқынларының толқын ұзындығынан үлкен екенлигин анықлады. Толқын ұзындығының өзгерислери нышананың материалынан ғәрезсиз хәм шашырау мүйеши  $\theta$  ға байланысly болып шықты. Тәжирийбелерде Комптон

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \Lambda_K (1 - \cos\theta) \quad (2.1.59)$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын анықлады. Бул формуланы Комптон формуласы деп атайды. Турықлы шама болған  $\Lambda_K$  шамасының  $\Lambda_K = 2,426 \cdot 10^{-12}$  м мәнисин Комптонның өзи экспериментлерінде анықлады.

Шашырағанда нурлардың толқын ұзындығының үлкейиуін электромагнит толқынларының толқынлық теориясы тийкарында түсіндириу мүмкин емес. Дж.Томсон классикалық теорияда шашырауды келип түсіуші толқынның электр майданының тәсирінде электрон мәжбүрий тербелетуғын хәм усының салдарынан

сол электронның өзі антенна сыяқлы электромагнит толқынларын тарқататуғылығын көрсетті. Соның менен бірге шашыраған толқынның жийилигі менен келип түскен толқынның жийилигі бірдей болады.

Солдай етип Комптон эффекти квантлық оптиканың қубылыстары қатарына кiredи екен. Нурланыудың фотонлық теориясы болса бул эффектти фотонның затлардың электронларындағы серпимли соқлығысыуының нәтийжеси деп түсіндиреди (2.1.15-сүўрет). Бул жағдайда (2.1.59)-Комптон формуласы фотон менен электронның серпимли соқлығысыў процессиндеги энергия менен импульстиң сақланыў ызыамларының нәтийжеси болып табылады.

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

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

Бул формулада  $mc^2$  арқалы тынышлықта турған электронның энергиясы, ал  $\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$  арқалы соқлығысқаннан кейин  $v$  тезлигин алған электронның энергиясы белгиленген. Бул формуланы

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

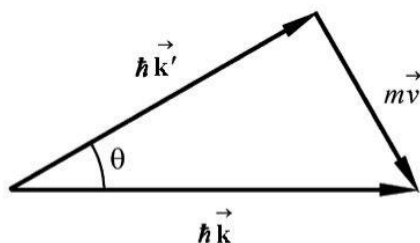
түринде де жаза аламыз. Бул жерде  $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ .

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

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

$$\hbar \vec{k} = \hbar \vec{k}' + m\vec{v} \quad (2.1.61)$$

түринде жазылады. Бул жерде  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $k' = 2\pi/\lambda'$ ,  $\theta$  болса  $k$  ҳәм  $k'$  векторлары арасындағы мүйеш (оны шашыраў мүйеши деп атаймыз).



1.16-сүўрет.  
Комптон эффектінде орын алатуғын  
импульстиң сақланыў ызыамының  
векторлық диаграммасы.

1.16-сүўретте келтирилген векторлық диаграмманың тийкарында импульслер үш мүйешлигинен

$$(m\vec{v})^2 = \hbar^2 k^2 + \hbar^2 k'^2 - 2\hbar^2 k k' \cos\theta$$

теңлигиниң орын алатуғынлығын табамыз ямаса

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

(2.1.60) ты

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

түріне келтиріп және бул теңликти квадратқа көтеріп

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

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

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

(2.1.62)- менен (2.1.64)-аңлатпалардан

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

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

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

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

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

Затлардағы электронлардың басым көпшилиги еркин емес, ал атомлар менен байланысқан екенлиги атап өтиўимиз шәрт. Егер нурланыў квантының энергиясы электронның байланыс энергиясынан үлкен болса, онда бундай электрондағы шашырау еркин электрондағы шашыраудай болады. Бирақ атом менен байланысқан

электронда шашырағанда жағдайда фотон атомның тутасы менен энергия алмасады. Бундай шашырауда формуладағы электронның массасының орнына атомның массасын қойыу керек болады. Бирақ бул жағдайда толқын ұзындығының өзгеріуі жүдә киши болып, бундай киши шаманы экспериментте бақлау мүмкиншилиги дерлик жоғалады.

**1.7-мәселе.** Фотон еркин электрон менен серпимли емес соқлығысқанда электронның фотонды жутыуы сақланыу нызамлары тәрепинен қадаған етилген процесс екенлигин көрсетиңиз.

**Шешими:** Фотон менен соқлығыспастан бурын электрон тынышлықта турған есаплау системасында серпимли емес соқлығысыу орын алатуғын жағдайлар ушын энергияның сақланыу нызамы былайынша жазылады

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

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

Биз қарап атырған процесс ушын импульстиң сақланыу нызамынан

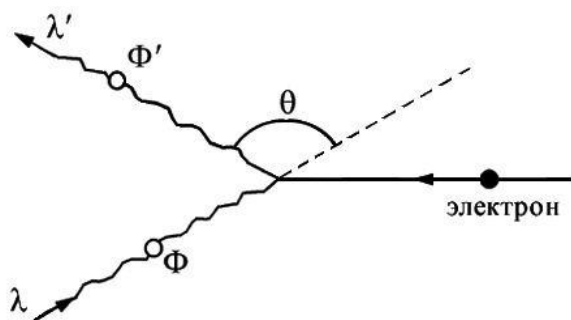
$$p = \frac{h\nu}{c}$$

формуласын аламыз. Алынған формуланы квадратқа көтерип

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

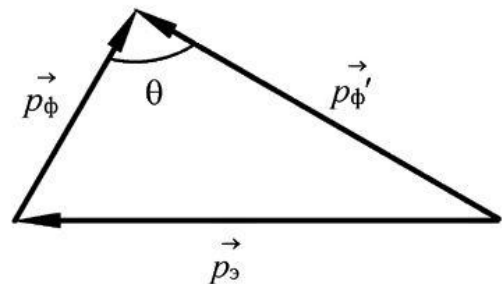
аңлатпаларына ийе боламыз.  $m \neq 0$  теңсизлиги орынланатуғын жағдайлар ушын бул теңликтің орынланыуы мүмкин емес. Буннан еркин электронның фотонды жута алмайтуғынлығы келип шығады. Бундай процесс тек үшінши бөлекшениң қатнасыуында ғана орын алыуы мүмкин. Бундай жағдайда үшінши бөлекше фотонның энергиясы менен импульсиниң бир бөлегин алыуы шәрт.

**1.8-мәселе.** Релятивистлик электронлар дәстесинде шашыраған толқынның толқын ұзындығының фотон менен электрон серпимли соқлығысқанда электрон толық тоқтайтуғын жағдайда қанша шамаға өзгеретуғынлығын есаплаңыз. (2.1.17-сүүрет).



1.17-сүүрет.

1.8-мәселени шешіу ушын арналған



1.18-сүүрет.

1.9-мәселени шешіу ушын арналған

схема.

импульслердің векторлық диаграммасы.

Шешими: Соқлығысқаннан кейін электрон тынышлықта туратуғын есаплау системасындағы энергияның сақланыуы нызамы былайынша жазылады

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

Электрон менен келип түсіуіш фотонның импульслеринің қосындысы  $\Phi$  шашыраған фотонның импульси болған  $\Phi'$  шамасына тең болуы керек. Сонлықтан 1.18-сүүретте келтирилген импульслердің векторлық диаграммасынан

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

ямаса

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

аңлатпаларын аламыз. Бул аңлатпаларды дыққат пенен талласақ  $\lambda$  шамасын  $\psi'$  шамасына алмастырғанда (2.1.60)- хәм (2.1.62)-аңлатпаларға өтетуғынлығына көз жеткеріуіге болады. Сонлықтан таллауды қайталамай шашыраған толқынның толқын узынлығының өзгериси ушын төмендеги ең ақырғы формуланы

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

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

Бундай эффектти Комптонның кери эффекти деп атаймыз. Комптонның кери эффекти бойынша космослық объектлердің рентген нурланыуын түсіндириуіге болады.

## 2-1-5. Жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализми

Жақтылықтың физикалық тәбияты қандай? деген сорауға жууап бериу қоршаған тәбиятты дурыс түсиниу ушын да, физика илиминің буннан былай рауажланыуы ушын да оғада уллы әхмийетке ийе

XIX әсирдің ақырында жақтылықтың тәбияты хаққындағы мәселе толық шешилди хәм ол кеңисликте тарқалатуғын электромагнит толқынлары деп есапланды. Усының нәтийжесинде жақтылықтың толқынлық теориясы үлкен пәтлер менен рауажланды. Бул теория жақтылықтың интерференциясы менен дифракциясы, жақтылықтың поляризациясы сыяқлы қубылысларды табыс пенен түсіндирди.

Бирақ XX әсирдің басында-ақ жақтылықтың затлар менен тәсир етисиуін изертлеулердің барысында фотоэффект (фотоэлектрлик эффект), Комптон эффекти, фотохимиялық реакциялар сыяқлы қубылыслар табылды. Бул қубылысларды жақтылықтың толқынлық теориясы түсіндире алмады. Бул теория тийкарында келтирилип шығарылған болжаулар квантлық оптиканың

эксперименттерде анықланған ызығалықтарына ытқыллей қайшы келди. Бул кубылыстарды түсиндириў ушын А.Эйнштейн 1905-жылы жақтылықтың корпускулалық (бөлекшелик) теориясын усынды. Бул теория Ньютонның жақтылық корпускулалары ҳақындағы идеяларын раўажландырып жақтылықты фотонлар деп аталатуғын көп санлы бөлекшелердин ағысы деп қарады. Жақтылықтың фотонлық теориясы квантлық оптиканың кубылыстарын сапалық жақтан да, санлық жақтан да жеңил түсиндире алды.

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

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

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

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

Тап усындай диалектикалық жуўапты ҳәзирги заман физикасы жақтылықтың тәбияты ушын береді. Жақтылық дегенимиз материаллық объект болып, ол толқынлық қәсийетке де, корпускулалық қәсийетлерге де ийе. Хәр қыйлы физикалық кубылыстарда бул қәсийетлер хәр қыйлы дәрежеде жүзеге келеді. Базы бир шараятларда, мысалы бир қатар оптикалық кубылыстарда жақтылық өзиниң толқынлық қәсийетлерин көрсетеди. Бундай жағдайларда биз жақтылықты электромагнит толқынлары деп қараймыз. Басқа оптикалық кубылыстарда жақтылық өзиниң корпускулалық қәсийетлерин көрсетеди. Бундай жағдайда жақтылықты фотонлардың ағымы деп қараўымызға туўры келеді. Базы бир жағдайларда жақтылықтың толқынлық қәсийетин де, корпускулалық қәсийетин де көрей мүмкин. Мысалы Комптон тәжирийбесинде (2.1.14-сүўретке қараңыз) нышанадағы шашыраўдың биринши этапында жақтылық өзін фотонлардың ағысы сыпатында көрсетеди, бирақ өлшеў блогында бул нурланыў электромагнит толқын сыпатында кристалда дифракцияға ушырайды.

Жақтылықтың толқынлық ҳәм корпускулалық теориялары тийкарында сапалық жақтан да, санлық жақтан да түсиндириў мүмкин бир қатар оптикалық кубылыстар да бар. Мысалы еки теория да жақтылықтың затларға түсиретуғын басымын есаплағанда бирдей аңлатпалардың алыныўына алып келеді. Бул жағдай

толқынлық моделде де, корпускулалық моделде де жақтылықта энергия, импульс сыяқлы материаллық характеристикалардың бар екенлиги менен байланысly.

Солай етип жақтылықтың тәбияты хаққындағы көз-қараслар мәниси бойынша тереңлеген сайын жақтылықтың қарама-қарсылықлы тәбиятқа ийе екенлигине көз жеткеремиз. Бундай жағдайды жақтылықтың корпускулалық-толқынлық дуализми деп атаймыз. Базы бир объектлер менен жақтылық толқындай болып тәсир етиседи, ал басқа бир объектлер менен тәсир етискенде жақтылықтың толқын емес, ал материаллық бөлекшелердин ағысы сыпатында тәсир етиседи. Д.Джинстың жазыуы бойынша "Сол еки картинаның (корпускулалық хәм толқынлық картинаның) хеш бирейи де жақтылықтың тәбияты хаққындағы толық шынлықты айта алмайды". Хәтте еки картина бир бирине қарама-қарсы болса да, бир картина екіншисин толықтырады. Уллы физик Н.Бор былай жазған еди: "Қарама-қарсылықлар қарсылық емес, ал бир бирин толықтырыу"

Жақтылықтың толқынлық хәм корпускулалық теориялары арасындағы тартыс тәреплердин бирейиниң жеңисине де, жеңилиуине де алып келген жоқ. Бул тартыстың барысында бул теорияларды бирлестиретуғын жақтылықтың тәбияты хаққындағы жаңа түсиниклер пайда болды.

Физика илиминде жақтылық толқынлық қәсийетке де, корпускулалық қәсийетке де ийе биринши объект болып табылады. Биз төменде физиканың раўажланыуының барысында бундай объектлер классының әдеуир кеңейгенлигин көремиз.

Бул параграфтың ақырында биз фотонның қозғалысын толқынлық электромагнит майданы менен анықланатуғын статистикалық итималлық нызамларына бағынады деп есапласақ толқынлар менен бөлекшелерди буннан да тығыз байланыстыра алатуғынлығымызды атап өтемиз. Хақыйқатында да электромагнит толқынының амплитудасының квадраты, яғный интенсивлиги кеңисликтің хәр бир ноқатында фотонды, яғный жақтылық ағысының усы ноқатындағы фотонлардың концентрациясын табыудың итималлығын береді деп есаплаймыз. Бундай жағдайда еки саңлақ арқалы өтиуши жақтылықтың интерференциясын жақтылықтың корпускулалық тоериясы көз-қарасы менен де түсиндириу мүмкиншилиги тууылады. Экранға бир жақтылық нуры түскен жағдайда экранның хәр қыйлы ноқатларына фотонның келип түсиу итималлығы бирдей мәниске ийе хәм сонлықтан экранның бирдей болып жақтыланыуын бақлаймыз. Жақтылық еки саңлақтан өткенде фотонның экранның хәр қыйлы ноқатларға барып түсиуиниң итималлығы өзгереді. Интерференциялық максимумлар пайда болатуғын орынларда бул итималлықтың мәниси кескин түрде өседі, ал интерференциялық минимумларда – кескин кемейеді. Усындай жоллар менен кеңисликтеги фотонлардың ағысы өзгерислерге ушырайды. Бул өзгерислерди толқынлық майдан басқарады.

Биз материаллық объектлердин корпускулалық хәм толқынлық қәсийетлерин бирлестиріу усылын таптық. Тап усындай усыл, яғный толқынның жәрдемінде бөлекшелердин қозғалысын тәриплеу усылы квантлық механиканың тийкарын қурайды. Ал квантлық механиканың тийкарын тәриплеуді биз келеси бапларда баслаймыз.



## 2-2-1. Де Бройль гипотезасы

**Бөлекшелердің толқынлық қасиеті. Материяның корпускулалық-толқынлық дуализми.** Оптикалық құбылыстардағы корпускулалық-толқынлық дуализмнің ашылуы физиканың бұнан былай дауысжаруы үшін ұлы әхмийетке ие болды. Физикалық объект болған электромагнит нурланыудың екілік корпускулалық-толқынлық табиғаты анықталды. Бұндай екілік тек оптикалық құбылыстарға ғана болуы мүмкін емес деген пікірдің пайда болуы табиғий

1924-жылы француз физигі Луи де Бройль батыл гипотезаны ұсынды. Бұл гипотеза бойынша корпускулалық-толқынлық дуализм универсаллық қасиетке ие. Де Бройль гипотезасы бойынша әрбір материалдық бөлекше толқынлық қасиетке ие. Оның үстінде бөлекшенің корпускулалық және толқынлық характеристикаларын байланыстыратуын аңдатпалар (қатнастар) электромагнит нурланыуындағы қатнастар менен бірдей болады. Біз фотонның энергиясы  $E$  менен импульсі  $p$  ның цикльық жиілік  $\omega$  және толқын ұзындығы  $\lambda$  менен

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

аңдатпаларының жәрдеминде байланысқанлығын еске түсіріп өтеміз. Де Бройль гипотезасы бойынша энергиясы  $E$ , импульсі  $p$  болған қозғалушы бөлекшеге жиілігі

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (2.2.1)$$

ал толқын ұзындығы

$$\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (2.2.2)$$

болған толқын сәйкес келеді. Жиілігі  $\omega$  болған және  $x$  көшери бағытында тарқалуы тегіс толқынды комплекс формада бере аламыз

$$\xi(x, t) = A \exp[-i(\omega t - kx)].$$

Бұл аңдатпада  $A$  арқалы толқынның амплитудасы, ал  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  арқалы толқынлық сан белгіленген.

Де Бройль гипотезасы бойынша  $x$  көшери бағытында қозғалуы энергиясы  $E$  және импульсі  $p$  шамасына тең еркін бөлекшеге

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

сол  $x$  көшери бағытында тарқалуы бөлекшенің толқынлық қасиетін тәріптейтуі тегіс толқын сәйкес келеді. Бұл толқында де Бройль толқыны деп атайды.

Бөлекшениң толқынлық хәм бөлекшелік қасиетлерин байланыстырыушы аңлатпалар

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

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

**Де Бройль толқынларының қасиетлери.** Ең дәслеп де Бройль толқынларының материяның толқынлары екенлигин хәм бул толқынлардың тарқалыу процессинде әдеттеги толқынлық нызамлар бойынша шағылысыуының, сыныуының, интерференцияға хәм дифракцияға ушырауының мүмкин екенлигин атап өтемиз. Дәслеп де Бройль толқынының фазалық тезлиги болған  $v_\phi$  шамасын табамыз. Турақлы фазаға ийе толқынның ноқатларының тарқалыу тезлигин фазалық тезлик деп атаймыз. Мейли бөлекше  $x$  көшери бағытында қозғалатуғын болсын. Бундай жағдайда (2.2.3) толқынының фазасының турақлы болыу шәрти

$$Et = px = \text{const}$$

түрінде жазылады. Бул аңлатпаны дифференциаллап

$$v_\phi = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p}$$

шамасына тең болатуғынлығына ийе боламыз.

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad \text{хәм} \quad p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$$

теңликлери орынлы болғанлықтан де Бройль толқынының фазалық тезлиги ушын

$$v_\phi = \frac{c^2}{v} \quad (2.2.5)$$

аңлатпасын аламыз.  $v < c^2$  болғанлықтан де Бройль толқынының фазалық тезлиги жақтылықтың вакуумдеги тезлигинен үлкен болып шығады. Бирақ бул жағдай жақтылықтың тезлигинен үлкен тезлик пенен қозғалыуды қадаған ететуғын салыстырмалық теориясының постулатларына қайшы келмейди. Салыстырмалық теориясы тәрәпинен қойылатуғын шеклер тек масса ямаса энергияның көшиулері ушын орынлы. Толқынның фазалық тезлиги болса бул процесслердің биреуін де тәриплемейди. Сонлықтан фазалық тезликтің шамасына хеш қандай шек қойылмайды.

Енди де Бройль толқынларының  $v_{\text{гp}}$  группалық тезлигин табамыз. Анықламасы бойынша

$$v_{\text{гp}} = \frac{d\omega}{dk}.$$

Бул аңлатпаны түрлендирип

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

формуласын аламыз. Салыстырмалық теориясы бойынша бөлекше үшін  $E$  хәм  $p$  арасындағы байланысты [Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Теория поля. Физматлит. Москва. 2001. 47-беттегі (9.6)-формула]

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

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

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

ямаса

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

аңлатпасына ийе боламыз. Солай етип

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

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

**Де Бройль толқынларының узынлығын релятивистлик емес хәм релятивистлик бөлекшелер үшін есаплау.** Де Бройль толқынының узынлығын  $\lambda_{db}$  арқалы белгилейик. Кинетикалық энергиясы  $E_k$  болған бөлекше үшін де Бройль толқынының узынлығы болған  $\lambda_{db}$  шамасын анықлайтуғын аңлатпаны табамыз. (2.2.2) ге сәйкес

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Бул аңлатпада  $p$  арқалы бөлекшениң импульси белгиленген. Релятивистлик емес бөлекшелер үшін  $v \ll c$ ,

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

Сонлықтан

$$\lambda^{\text{p.e.}} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}}. \quad (2.2.6)$$

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

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

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

$$\lambda^p = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}\sqrt{1 + \frac{E_k}{2mc^2}}} \quad (2.2.7)$$

формуласын аламыз.

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

$$\lambda_{ab} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_k}} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}}. \quad (2.2.8)$$

(2.2.8) ге константалардың санлық мәнисин қойып

$$\lambda_{ab} = \sqrt{\frac{150,4}{U}} \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

аңлатпасын аламыз. Солай етип тезлетиўши потенциаллар айырмасының шамасы онлаған вольттен бир неше киловольтке тең болғанда электронның де Бройль толқынының узынлығы  $10^{-10} \text{ м} = 10^{-8} \text{ см} = 1 \text{ Å}$  шамасында болады екен. Бул шаманың физика илими ушын үлкен әҳмийетке ийе екенлигин ескертип өтемиз: атомлардың өлшемлери, қатты денелердеги атомлар хәм молекулалар арасындағы қашықлық шамасы жағынан  $10^{-10} \text{ м}$  этирапында болады.

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

(2.2.2)-аңлатпаны пайдаланып

$$\lambda_{ab} = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34}}{10^{-9} \cdot 10^{-3}} \text{ м} = 6,6 \cdot 10^{-22} \text{ м}$$

шамасын аламыз. Табылған толқын узынлығы оғада киши шама болып, оның үлкенлиги атом ядросының өлшемлеринен де әдеўир киши (атом ядросының диаметри шама менен  $10^{-15} \text{ м}$ ).

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

Механикалық хәм оптикалық кубылыслар арасындағы терең аналогияның бар болыўына байланысly классикалық Ньютон механикасы геометриялық оптикаға,

ал квантлық механикасы (оны толқын механикасы деп те атайды) болса толқын оптикасына сәйкес келеді. Солай етіп бөлекшелердің толқынлық қасиеттері олардың де Бройль толқынларының ұзындығы бөлекшелер қозғалатуының областтың өлшемлері  $L$  менен барабар болғанда ғана ең анық көрінеді. Бул жағдайда  $\lambda_{db} \sim L$ . Жоқарыда талқыланған мысаллардың бириншисінде электронның де Бройль толқынының ұзындығы  $\lambda_{db}$ , атомның өлшемлері, кристаллардағы атомлар арасындағы қашықтықтар шама менен бирдей мәніске ийе. Демек электронлар атомлар менен тәсірлескенде хәм электронлар кристаллық денелерде қозғалғанда олардың толқынлық қасиеті максималлық рәуиште көрінеді.  $\lambda_{db} \ll L$  болған жағдайларда болса (мысалы жоқарыда қарап өтилген шаң бөлекшесі жағдайында) бөлекшениң толқынлық қасиетінің әхмийеті жоқ. Бундай жағдайда усындай объектлердің қозғалысын тәриплеу үшін классикалық механиканың ызымдарынан пайдаланыу керек. Усы мәселени таллауға 2.5-мәселе бағышланған.

**Металлардағы электронлар толқынларының сыныуы.** Металлдың ишиндеги электронға кристаллық пәнжерениң түйинлерінде жайласқан оң зарядланған ионлардың электр майданы тәсір ететуының белгили. Бул майдан кристалдың ишинде дәуирли түрде өзгереді. Металлдың көлеми бойынша орталастырылған усы майданның потенциалы болған  $\phi_0$  шамасын металлдың ишки потенциалы деп атайды.

Металлдан электронды жулып алыу үшін шығыу жұмысы  $A_{шығ}$  шамасына тең энергия жумсау керек. Шығыу жұмысының мәнісі менен металдың ишки потенциалы

$$A_{шығ} = e\phi_0$$

аңлатпасы бойынша байланысқан. Егер металлға сырттан электрон келип түссе оның энергиясы шығыу жұмысына тең шамаға артады. Усының салдарынан электронлар толқынының фазалық тезлиги хәм де Бройль толқын ұзындығы өзгеріске ушырайды хәм нәтижеде металдың бетінде электронлар толқынлары сынады.

Мейли электрон вакуумнан келип металлға түсетуы болсын. Бундай жағдайда сыныу көрсеткіші  $n_e$  электронның вакуумдағы фазалық тезлигинің (оны  $n_\phi^v$  арқалы белгилеймиз) электронның металдағы фазалық тезлигине (оны  $n_\phi^m$  арқалы белгилеймиз) қатнасына тең болады:

$$n_e = \frac{n_\phi^v}{n_\phi^m}.$$

(2.2.5) қатнасын пайдаланып

$$n_e = \frac{c^2 v^v}{c^2 v^m} = \frac{v^v}{v^m}$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада  $v^v$  арқалы электронның вакуумдағы, ал  $v^m$  арқалы электронның металдағы тезлиги белгиленген.

Мейли электрон дәслепп  $E_k$  шамасына тең болған кинетикалық энергияға ийе болған болсын. Металдың ишинде болса электронның кинетикалық энергиясы  $E_k + A_{шығ}$  шамасына тең болады. Бөлекшениң тезлиги менен кинетикалық энергиясы арасындағы классикалық байланысты пайдалансақ

$$v = \sqrt{\frac{2E_K}{m}}$$

аңлатпасынан

$$n_e = \sqrt{\frac{E_K + A_{\text{шығ}}}{E_K}} = \sqrt{1 + \frac{A_{\text{шығ}}}{E_K}}$$

формуласын аламыз. Электронның кинетикалық энергиясының шамасын тезлетиуші потенциаллар айырмасы  $U$  арқалы, ал шығыу жұмысының мәнісін ишкі потенциал  $\varphi_0$  арқалы аңлатсақ, онда электронлық толқынлардың сыныу көрсеткіші үшін төмендегідей аңлатпаны аламыз:

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

(2.2.9)-формулаға сәйкес сыныу көрсеткіші  $n_e$  тек әсте қозғалатуғын электронлар үшін ғана сезилерліктей мәніске ийе болады екен. Бұндай электронлар үшін  $U$  дың шамасы  $\varphi_0$  ге салыстырғанда үлкен емес. Жоқары энергияға ийе электронлар үшін (бұндай жағдайда  $U \gg \varphi_0$ )

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

хәм 1 ден азмаз ғана айырмаға ийе болады.

**2.1-мәселе.** Кинетикалық энергия  $E_K$  ниң қандай мәнісінде де Бройль толқын ұзындығын релятивистік емес формула жәрдеминде есапқағанда  $\varepsilon = 1\%$  шамасынан көп емес қәтелікке жол қойылады? Мәселені а) электронлар хәм б) протонлар үшін шешіңіз.

**Шешими:** Де Бройль толқынының толқын ұзындығын анықлағанда жиберилетуғын салыстырмалы қәтелік  $\varepsilon$  (2.2.6) менен (2.2.7) ни есапқа алғанда хәм релятивистік емес формула бойынша

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

түріне ийе болады.  $E_K$  кинетикалық энергиясын  $\varepsilon$  ниң функциясы сыпатында аңлатсақ

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

аңлатпасына ийе боламыз. Мәселенің шәрті бойынша  $\varepsilon = 0,01 \ll 1$  болғанлықтан Тэйлор қатарына жайыуды пайдаланып  $(1 - \varepsilon)^\varepsilon \approx 1 + 2\varepsilon$  екенлігін табамыз. Бул жағдайды есапқа алсақ

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

аңлатпасына ийе боламыз. Бул формулада  $E_0 = mc^2$  арқалы бөлекшениң тынышлықтағы энергиясы белгіленген.

Электронның тынышлықтағы энергиясы  $E_0 = 0,511$  МэВ болғанлықтан электрон үшін  $E_K = 20,4$  кэВ екенлігін табамыз. Бұл жағдай кинетикалық энергиясының шамасы  $E_K = 20,4$  кэВ болғанша  $\lambda_{db}$  толқын ұзындығын анықлағандағы қателік 1 проценттен артық болмауының билдиреді.

Физикалық эксперименттерде зарядланған бөлекшелерді тезлетіу әдетте электр майданында әмелге асырылады.  $U$  шамасына тең болған потенциаллар айырмасын өткенде электрон  $E_K = eU$  кинетикалық энергиясын алады. Кинетикалық энергияның мәнісі біз жоқарыда алған  $E_K = 20,4$  кэВ шамасына тең болуы үшін ол (электрон)  $U = 20,4$  кВ потенциаллар айырмасын өтіуі керек.  $U$  дың кишірек мәнісінде (2.2.6)-формула бойынша есапланған  $\lambda_{db}$  толқын ұзындығының мәнісін анықлауда жиберилетуғын қателіктің шамасы 1 проценттен әдеуір киші болады.

Протон үшін тынышлықтағы энергия  $E_0 = 938,2$  МэВ шамасына тең. Ал де Бройль толқынының толқын ұзындығын анықлағанда жиберилетуғын қателіктің мәнісі 1 проценттен артық болмауының кинетикалық энергияның мәнісі  $E_K = 37,5$  МэВ шамасына тең.

**2.2-мәселе.** Сызықлы өлшемлери  $l$  болған структураларды изертлеу үшін массасы  $m$  болған бөлекшелерге тезлеткіш қандай энергияны беріуі керек? Мәселені  $l = 10^{-15}$  м болған жағдай үшін (бұл атом ядроларының өзлеріне тән сызықлы өлшемі) электронлар хәм протонлар үшін шешіу керек.

**Шешімі:** Сызықлы өлшемлери  $l$  болған структураларды изертлеу үшін де Бройль толқынының ұзындығы  $\lambda_{db} \leq l$  болған бөлекшелер керек. Мәселенің шәртиндегі  $l$  үшін берілген шама оғада киші. Сонлықтан толқын ұзындығы усы  $l$  шамасы менен теңдей бөлекшелерді алыу үшін жүдә үлкен энергияға ийе релятивистлик бөлекше керек болады. Релятивистлик бөлекшенің де Бройль толқынының толқын ұзындығы үшін жазылған (2.2.7)-аңлатпаны пайдаланып

$$\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_K}\sqrt{1 + \frac{E_K}{2mc^2}}} \leq l$$

аңлатпасын аламыз. Бұл теңсізлікті (теңлік белгисін есапқа алмаймыз)

$$E_K^2 + 2mc^2E_K - m^2c^2\frac{\Lambda_K^2}{l^2} \geq 0$$

түріне келтіреміз. Бұл аңлатпада  $\Lambda_K = \frac{2\pi\hbar}{mc}$  арқалы бөлекше толқынының Комптонлық ұзындығы белгіленген. Бұл теңсізлікті шешіп

$$E_K \geq mc^2 \left( \sqrt{1 + \frac{\Lambda_K^2}{l^2}} - 1 \right)$$

аңлатпасын аламыз.

Электрон үшін Комптонлық ұзындық  $\Lambda_K^e = 2,43 \cdot 10^{-12}$  м болғанлықтан

$$\frac{\Lambda_K^e}{l} \gg 1.$$

Усы шәртті есапқа алып электронлардың энергиясы үшін

$$E_K^e \geq mc^2 \frac{\Lambda_K^e}{l}$$

аңлатпасын аламыз. Санлық мәніслерін қойып  $E_K^e \geq 1,2$  ГэВ мәнісіне ийе боламыз.

Протонлар үшін Комптонлық ұзындық  $\lambda_K^p = 1,32 \cdot 10^{-15}$  м. Бул шаманы есапқа алып  $E_K^p \geq 0,6$  ГэВ мәнісіне ийе боламыз.

## 2-2-2. Де Бройль гипотезасын экспериментте тастыйықлау

Қәлеген физикалық теорияның дурыс екенлигинің критерийи барлық ұақытта да эксперимент болып табылады. Де Бройль гипотезасын экспериментте тексерип көріу өз ұақтында жүдә әхмийетли мәселелердің бири болды. Бириншиден бул гипотеза материяның терең фундаменталлық қәсийетлерине тийисли еди. Екиншиден бөлекшелерде толқынлық қәсийетлердің болыуы классикалық физикадағы дәстүрге айланған көз-қарасларға сәйкес келмейтуғын еди.

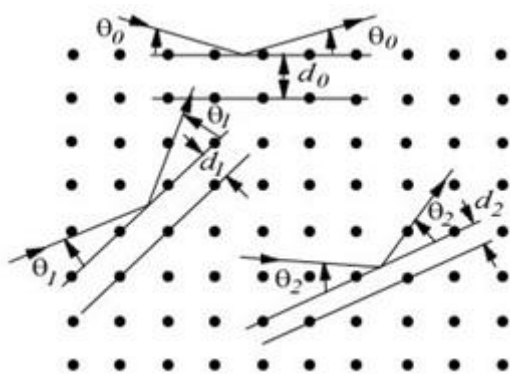
Бөлекшелердің толқынлық тәбиятын тастыйықлаған биринши эксперименталлық изертлеулерди америкалы физиклер Клинтон Джозеф Дэвиссон менен Лестер Джермерер хәм олардан ғәрезсиз англиялы физик Джлордж П.Томсон (1906-жылы электронды ашқаны ушын Нобель сыйлығы лауреаты болған Дж.Дж.Томсынның улы) тәрәпинен 1927-жылы өткерилди. Бул жумысларда электронлардың кристаллық пәнжерелердеги дифракциясы пайдаланылды. Бул экспериментлерди толық таллаудың алдында төмендегидей жағдайларды атап өтемиз.

"Электронлардың толқынлық тәбиятын ашқанлығы" ушын 1929-жылы Луи де Бройль, ал "Электронлардың кристаллардағы дифракциясын экспериментте ашқанлығы" ушын К.Дж. Дэвиссон менен Джордж Томсон халық аралық Нобель сыйлықтарын алыуға миясар болды.

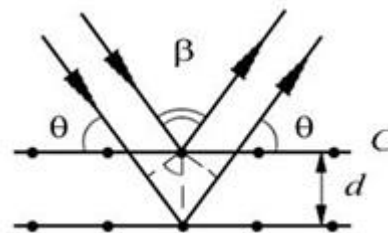
Жоқарыда айтылып өтилгениндей тезлетиуши потенциаллар айырмасының жүдә жоқары емес мәніслерінде (шама менен 100 вольт болғанда) электронның де Бройль толқынының ұзындығы шама менен  $10^{-10}$  метрди қурайды. Бундай шама кристаллардағы атомлық тегисликлер арасындағы қашықтықлар ушын тән. Сонлықтан рентген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

Жетилискен кристаллардағы электронлардың дифракциясын қарап өтемиз. Жетилискен кристалл деп қурамында структуралық дефектлер болмаған кристалларға айтамыз. Де Бройль толқынының ұзындығы  $\lambda_{db}$  болған электронлар хәр қыйлы атомлық тегисликлерде дифракцияға ушырай алады (2.2.1-а сүүрет). Бундай тегисликлерди кристалға келип түсиуши электронлар дәстеси менен шашыратыушы кристалдың өз-ара ориентациясын сайлап алыу менен жүзеге келтириу мүмкин. Мейли кристалға келип түсиуши электронлар дәстеси менен шашыратыушы тегисликлер арасындағы мүйеш  $\theta$  шамасына тең болсын (рентгенографияда, электронографияда хәм электрон микроскопиясында бундай мүйешти сырғанау мүйеши деп атайды, русшасы "угол скольжения"). Эпиұайылық ушын симметриялық жағдайға итибар беремиз (2.2.1-б сүүрет). Бундай жағдайда кристалдың бети С шашыратыушы тегисликлерге параллель болады (бундай жағдай әмелде көп ушыраспайды). Бундай жағдайда электронлар кристалдың бетине келип түсетуғын мүйеш  $\theta$  сырғанау мүйеши болып табылады. Ал  $\beta = \pi - 2\theta$  мүйеши кристалға келип түсиуши хәм дифракцияға ушыраған электронлар дәстеси арасындағы мүйеш.





2.1-а сүрет. Де Бройль толқынының ұзынлығы  $\lambda_{db}$  болған электронлар хәр қыйлы атомлық тегисликлерде дифракцияға ушырай алады.



2.1-б сүрет. Электронлардың дифракциясы ушын симметриялық жағдай (кристаллардың бети шашыратыушы кристаллографиялық тегисликлерге параллель).

Кристаллардағы электронлардың дифракциясын теориялық жақтан таллау рентген нурларының кристаллардағы дифракцияға ушырауын таллауға ұқсас. Егер  $\theta$  мүйешинің мәніси

$$2d_{hkl}\sin\theta_{db} = n\lambda_{db} \quad (2.2.10)$$

Вульф-Брэгг шәртин қанаатландыратуғын жағдайда шашыраған толқынның интенсивли дифракциялық максимумы пайда болады. Бул теңлемде  $\theta_{db}$  Брэгг мүйеши,  $d_{hkl}$  арқалы Миллер индексleri  $hkl$  болған шашыратыушы кристаллографиялық тегисликлер арасындағы қашықлық белгиленген. Ендигиден былай әпиұайылық ушын  $hkl$  Миллер индексlerini жазбаймыз. (2.2.10)-формуладағы  $n$  шамасы 1, 2, 3, ... мәніслерин қабыл ететуғын пүтин сан (оны дифракциялық максимумның тәртиби деп те атайды).

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

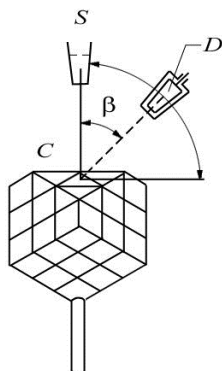
(2.2.10)-шәрт электронлар толқынларының кристаллардағы сыныұын есапқа алмаған халда жазылғанлығын атап өтемиз. Егер сыныұды есапқа алатуғын болсақ Вульф-Брэгг шәртин былайынша жазамыз:

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

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

**Дэвиссон хәм Джермер тәжирийбеси.** Дэвиссон хәм Джермерлер никель монокристаллындағы электронлардың дифракциясын изертледи. Никельдің кристаллық структурасы рентген нурларының дифракциясы бойынша өткерилген тәжирийбелерден белгили еди. Олардың экспериментинің схемасы 2.2-сүретте келтирилген. Электронлар пушкасынан (электронлар толқынларының дерегин әдетте электронлар пушкасы деп атайды) шыққан электронлар  $U$  тезлетиуши

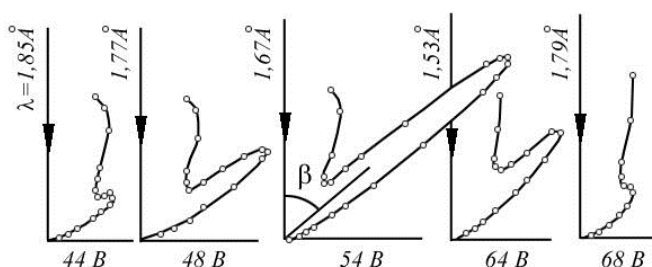
потенциаллар айырмасын өтеди хәм никель кристаллының шлифовкаланған бети С ға нормал бағытта келип түседі. D детекторының жәрдеминде хәр қыйлы U кернеулерінде хәр қыйлы  $\beta$  мүйешлерине шашыраған электронлардың саны изертленді. U дың хәр қыйлы мәнісілеріне (2.2.8)-аңлатпаға муўапық де Бройль толқындарының хәр қыйлы ұзындықтарының сәйкес келетуғынлығын еске салып өтеміз.



2.2-сұйрет. Дэвиссон хәм Джермерлер тәрәпинен электронлардың дифракциясын изертлеу бойынша өткерилген экспериментиниң схемасы.

Дэвиссон хәм Джермердинң тәжірийбесинде кристаллық пәнжере шашыратыўшы дифракциялық пәнжерениң орнын ийеледи. Сонлықтан де Бройль гипотезасының көз-қарасы бойынша (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәрти орынланғанда шашыраған толқынның амплитудасының үлкейиуи электронлардың усындай мүйеш пенен шашыраўының итималлығының хәм кристалда шашыраған электронлардың санының үлкейиуин билдиреди.

Дэвиссон хәм Джермердинң эксперименталлық изертлеулериниң нәтийжелери 2.3-сұйретте келтирилген. Бул сұйретте тезлетиўши потенциал U дың бир неше мәнісіне сәйкес келиўши шашыраған толқынлардың поляр диаграммалары келтирилген. U = 44 в болғанда (2.2.3-сұйрет)  $\beta = 134^\circ$  ( $\theta = 22,82^\circ$ ) шамасына тең мүйешинде дифракциялық максимум пайда бола баслайды. U = 54 в кернеуинде дифракциялық максимум максималлық интенсивликке ийе. U дың мәнісиниң буннан былай үлкейиуи менен дифракциялық максимум толық жоқ болғанша азаяды.



2.3-сұйрет.  
U тезлетиўши потенциалының хәр қыйлы мәнісілериндеги электронлардың дифракциялық шағылысыўының динамикасы.

Дэвиссон хәм Джермердинң тәжірийбелеринде тезлетиўши потенциаллар айырмасы U = 54 в болғанда электронлардың максималлық шағылысыўы бақланды. Бундай потенциаллар айырмасында де Бройль толқынының ұзындығы

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}} = 0,1668 \text{ нм} = 1,668 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

шамасына тең болады. Никель ушын  $d = 2,15 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ . Сонлықтан Вульф-Брэгг теңлемеси бойынша  $\theta = 22,82^\circ$  шамасы ушын есапланған де Бройль толқынының толқын ұзындығы  $\lambda_{db} = 0,166 \text{ нм}$  болып шығады.

Экспериментте хәм есаплаўлар менен алынған  $\lambda_{db}$  шамасының бирдей екенлиги бөлөкшелердин толқынлық қәсийетке ийе екенлиги ҳаққындағы де Бройль гипотезасының дурьс екенлигиниң ең жақсы дәлилиниң бири болып табылады.



К.Дэвиссон хәм Л.Джермер

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

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

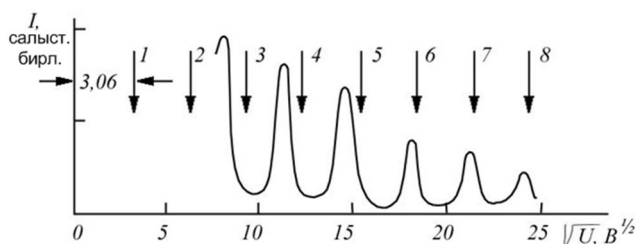
формуласы орын алғанлықтан (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәртинен

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

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

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

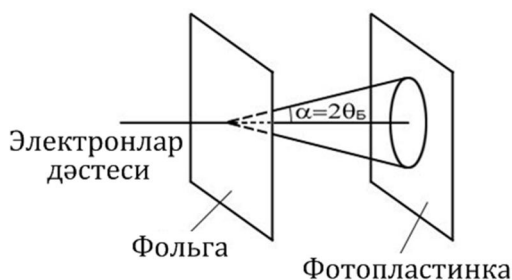
түрине ийе болатуғынлығын көремиз. Бул  $\sqrt{U}$  шамасына байланысly шашыраў максимумларының бир биринен эквидистанциялық жайласыўына (яғный бирдей аралықларда жайласыўына) сәйкес келеди.



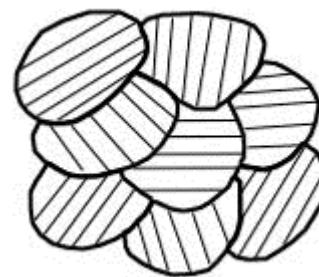
2.4-сүўрет. Турақлы  $\beta$  мүйешинде (ямаса турықлы  $\theta$  сырғанаў мүйешинде) дифракцияға ушыраған электронлар толқынының интенсивлигиниң тезлетиўши потенциаллар айырмасы  $U$  дың  $\frac{1}{2}$  дәрежесине ғәрезлиги.

Бул тәжірийбеде теория менен эксперимент арасында толық сәйкеслик орын алмады. Себеби эксперименталлық дифракциялық максимумлардың орны менен (2.2.10)-Вульф-Брэгг шәрти тийкарында анықланған дифракциялық максимумлардың орны (олар 2.4-сүўретте вертикал бағытланған стрелкалар менен белгиленген) арасында сезилерликтей айырма болды. Бундай айырма  $n$  ниң киши мәнислеринде (яғный тезлетиўши кернеў  $U$  дың киши мәнислеринде) жақсы сезиледи. Егер электронлар толқынларының металдағы сыныўын есапқа алсақ (Вульф-Брэгг шәрти буны есапқа алмайды), онда эксперименталлық нәтийжелер менен теориялық есаплаўлар берген нәтийжелер арасындағы айырма толығы менен жоғалады.

**Дж. П. Томсон тәжірийбеси.** Дж.П.Томсон экспериментлеринде электронлардың поликристаллық үлгилердеги дифракциясы изертленди. Бирдей энергияға ийе бағытланған (коллиматордан өткерилген) электронлар дәстеси метал поликристал фольганың бетине нормал бағытта түсирилди (2.2.5-сүўрет). Фольганың екінши тәрәпинде орналастырылған фотопластинкада фольга арқалы өткен электронлар концентрли сақыйналар түриндеги дифракциялық сүўретти пайда етти. Биз дәслепп поликристаллық үлгиде электронлар дифракцияға ушырағанда фотопластинкада неликтен дифракциялық сақыйналардың пайда болатуғынлығын түсиндиремиз.

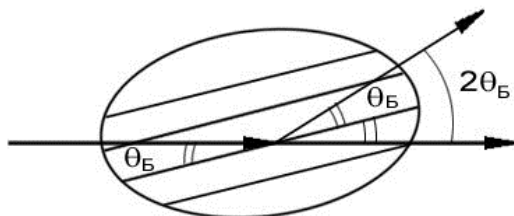


2.5-сүўрет. Электронлардың поликристаллық фольгадағы дифракциясы.

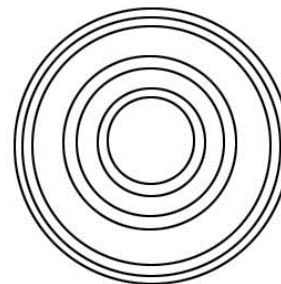


2.6-а сүўрет. Поликристаллық үлгиниң структурасы.

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



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



2.7-сүўрет. Гүмис поликристаллындағы дифракциялық тәжірийбелердиң нәтийжеси.

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

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

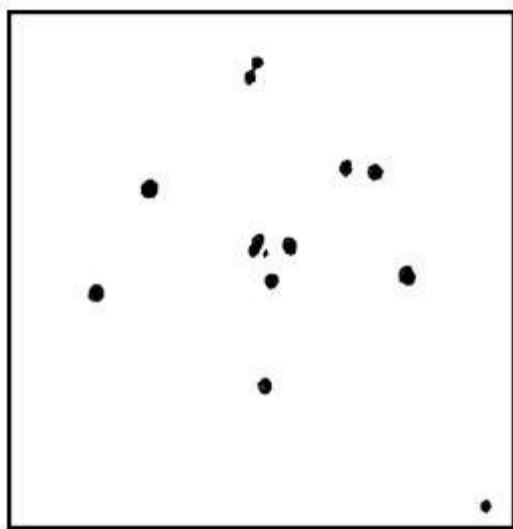
Мәселениң көшерлик симметриясына байланыслы (бул көшердин бағыты поликристалға келип түсиуши электронлар дәстесиниң бағыты болып табылады) усы көшерге шағылыстырыушы атомлық тегисликлери  $\theta_{ab}$  мүйешке бурылған кристаллитлер де фотопластинкада дифракциялық ноқатларды береди. Демек поликристалларға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

Томсон тәжирийбелеринде энергиясы 17,5 - 56,5 кэВ болған үлкен тезликке ийе электронлар пайдаланылды. Себеби киши тезликлер менен қозғалатуғын электронлар фольга тәрeпинен күшли жутылады хәм бул жағдай поликристал арқалы өтиуши толқынның интенсивлигиниң жоғалыуына алып келеди. Поликристаллық фольгадағы электронлардың дифракциясын изертлеу бойынша өткерилген экспериментлердин нәтийжеси 2.7-сүүретте келтирилген.

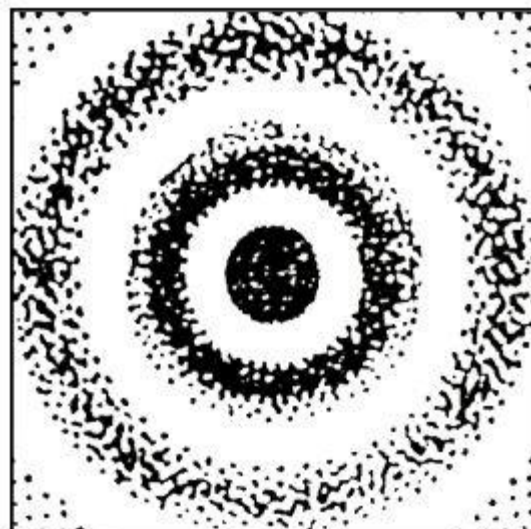
Электронлардың поликристаллардағы дифракциясын таллауда төмендегидей жүдә әҳмийетли сорау пайда болды: Электронлар дәстеси келип түскенде поликристалдағы атомлар қозады хәм өзлеринен рентген нурларын шығарады. Демек фотопластинкада пайда болған дифракциялық сүүрет сол рентген нурларының поликристалдағы дифракциясының нәтийжеси шығар? Сонлықтан дифракцияға ушыраған бөлекшелердин (электронлар ямаса рентген квантлары) тәбиятын анықлау мақсетинде поликристалл фольга менен фотопластинка арасында магнит майданы пайда етилди. Егер дифракциялық картинаны электронлар пайда етсе, онда олар магнит майданы тәрeпинен қозғалыу бағытын өзгертиуи хәм усының нәтийжесинде дифракциялық картинаның майысыуы шәрт. Егер рентген нурлары дифракцияға ушыраса, онда рентген нурларына магнит майданы тәсир етпейди хәм дифракциялық сүүреттеги сақыйналар системасы өзгериссиз қалады. Магнит майданы менен өткерилген экспериментлер дифракциялық сүүретти электронлардың беретуғынлығын тастыйықлады.

**Жеке электронлардың дифракциясы.** Жоқарыда қарап өтилген экспериментлер электронлардың жеткиликли дәрежеде интенсивли дәстелери менен өткерилди. Сонлықтан оларда бақланған толқынлық қәсийетлер жеке электронларға тийисли емес, ал бир бири менен тәсирлесетуғын электронлар ансамблине тийисли шығар? деген сораудың пайда болыуы тәбийий. Усы жағдайға

байланыссыз жеке электрон толқынлық қасиетке ийе бола ала ма деген сорауға жуып беріу үшін 1949-жылы Москва қаласында В.А.Фабриканттың басшылығындағы бір топар физиклер электронлардың оғада әззи дәстелери менен дифракциялық изертлеулер өткерди. Бул тәжірийбелерде электронлардың кристал арқалы избе-из өтиулері арасындағы уақыт бир электронның әсбап арқалы өтетугын уақтынан 30000 есе үлкен етип алынды. Солай етип жалғыз электронның бир өзи кристалда дифракцияға урылады хәм усының салдарынан электронлардың бир бири менен тәсирлесиуі толық сапластырылды. Фотопластинкадағы дифракцияға ушыраған электронлардың тарқалыуының сапалық түри 2.8-сүүретте келтирилген. Киши уақыт аралықларында өткерилген экспериментлерде фотопластинкадағы ноқатлар (яғный фотопластинкаға электронлар келип түскен орынлар) пүткиллей тәртипсиз түрде тарқалған (2.2.8-а сүүрет). Бирақ экспериментлер узақ уақыт дауамында өткерилсе ноқатлардың жайласыуларында тәртип көрине баслайды (2.2.8-б сүүрет). Фотопластинкада орайлары бир ноқатта жайласқан сақыйналар пайда болады. Солай етип толқынлық қасиеттин жеке электронға да тән екенлиги дәлилленди.



2.8-а сүүрет. Жеке электронлар менен қысқа уақыт ишинде өткерилген эксперименттин нәтийжеси. Фотопластинкадағы дифракциялық дақлар тәртипсиз түрде жайласқан.



2.8-б сүүрет. Жеке электронлар менен жеткиликли дәрежеде узақ уақыт өткерилген эксперименттин нәтийжеси. Фотолатинкада дифракциялық сақыйналар пайда болған.

**Кристалларсыз өткерилген дифракция бойынша тәжірийбелер.** Де Бройлдың гипотезасын тастыйықлау мақсетинде дәслепки экспериментлердин барлығы да кристалларды пайдаланыу менен өткерилди. Себеби кристаллардың өзи электронлардың дифракциясын бақлау үшін тәбият тәрөпинен дөрөтилген дифракциялық пәнжерелер болып табылады. Буннан кейин электронлар менен оптикада жақсы белгили болған классикалық тәжірийбелерге уқсас дифракциялық тәжірийбелер өткерилди. Электронлардың ярым шексиз тегисликтин шетиндеги, еки саңлақтағы хәм басқа да объектлердеги дифракциялары бақланды. Электронлардың бир текли емес электр майданындағы дифракциясын изертлеу бойынша да тәжірийбелер өткерилди. Бундай жағдайда бир текли емес электр майданы Френель бипризмасының орнын ийелейди. Бул экспериментлердин барлығы да электронларда толқынлық қасиетлердин бар екенлигин дәлилледди.

**Рамзауэр эффекти.** 1921-жылы немис физиги К.Рамзауэр аргон атомларындағы электронлардың серпимли шашырауын изертлеудің барысында классикалық физиканың шеклерінде түсіндириуге болмайтуғын қубылысты ашты. Тек бір неше жыллар өткеннен кейін бул қубылыстың электронларда толқынлық қасиеттің бар екенлігінің және бір дәлилі екенлігі түсиникли болды. Бул қубылыс оптикада жақсы белгили болған Пуассон дағының электронлық аналогы болып табылады.

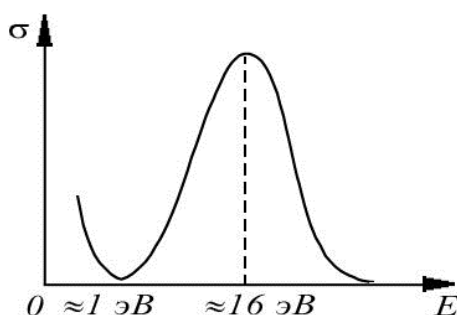
Рамзауэр энергиясы бир неше онлаған электрон-вольтке шекемги электронларды пайдаланды. Ол бундай электронлардың аргон атомларындағы серпимли шашырауының кесе-кесими  $\sigma$  ны изертледі. Электронлардың серпимли шашырау кесими

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

формуласының жәрдеминде анықланады. Бул формулада  $N$  арқалы уақыт бирлигиндеги аргон атомларындағы электронлардың серпимли шашыраулар актлеринің саны,  $n$  арқалы дәстедегі электронлардың тығызлығы, ал  $v$  арқалы олардың тезлиги белгиленген. Серпимли шашырау кесими  $\sigma$  майданның бирлигине ийе хәм оның мәніси атомның этирапында электрон шашырауға ушырайтуғын нышананың майданына тең.

Серпимли шашырау кесими электронлардың энергиясы  $E$  ден ғәрезли. Хәқыйқатында да  $E$  қаншама үлкен болса электронның тезлиги де үлкен хәм сонлықтан атом менен тәсир етискенде электрон қозғалыс бағытын өзгертиу қыйынырақ болады. Демек электронлардың энергиясы (тезлиги) кемейгенде серпимли шашырау кесиминің шамасының киширейиуі керек.

Рамзауэр алған нәтийжелер сапалық түрде 2.9-сүүретте келтирилген. Бул сүүретте энергиясы 16 эВ шамасындағы электронлар ушын аргон атомларындағы серпимли шашырау кесиминің ең үлкен мәніске ийе болатуғынлығы көринип тур. Энергиясы 16 эВ шамасынан киши хәм үлкен болған электронлардың серпимли шашырау кесими киши. Электронның энергиясының шамасы  $E \approx 1$  эВ болғанда кесим  $\sigma$  ның мәніси дерлик нолге тең болады. Электронлардың энергиясы және де киширейгенде  $\sigma$  ның мәніси артады.



2.9-сүүрет.

Электронлардың аргон атомларынан серпимли шашырау кесиминің электронлардың энергиясынан ғәрезлиги.

Кесим  $\sigma$  ның нолге айланыуы аргон атомларының электронлар ушын мөлдир болатуғынлығын көрсетеді. Бундай жағдайда электронлар аргон атомларында шашырамайды. Классикалық физиканың көз-қарасларына пүткиллей сәйкес келмейтуғын бул эксперименталлық нәтийже электронның толқынлық тәбиятын есапқа алғанда өзинің шешимін табады.

Оптикада экранда Пуассон дағы деп аталатуғын дақтың қалайынша пайда болатуғынлығы белгили. Мөлдир емес дисктеги жақтылықтың дифракциясында геометриялық саяның орайында жақтылы дақ пайда болады. Усы дақты Пуассон

дағы деп атаймыз. Рамзауэр өткерген тәжірийбелерде усындай дисктиң орнын аргон атомы ийелейди. Егер электронның де Бройль толқынының ұзындығы атомның диаметри менен салыстырғандай үлкенликте болса атомдағы толқынның дифракциясының нәтийжесінде электронлар толқыны ушын Пуассон дағы пайда болады. Бул аргон атомы арқалы электронлар өткенде өзиниң қозғалыу бағытын өзгертпейди дегенди аңлатады. Буннан кейин тап усындай қубылыс басқа да инерт газлер болған криптонда да, ксенонда да табылды. Соның менен бирге Рамзауэр эффектиниң тек инерт газлердиң атомларында ғана бақланатуғынлығы мәлим болды. Себеби инерт газлердиң атомлары толық толтырылған сыртқы электронлық қабыққа ийе, олар сфералық симметрияға хәм сонлықтан жеткилики дәрежедеги анық сыртқы шегараға ийе.

**Нейтронлар хәм басқа да бөлекшелер дәстеси менен исленген тәжірийбелер.** Усы ўақытқа шекем биз микробөлекшелердиң толқынлық қасиетлерин талқылау барысында тийкарғы дыққатты электронларға аудардық. Бул тәбийий жағдай. Себеби бөлекшелерде толқынлық қасиеттиң бар екенлигин тастыйықлаушы экспериментлер электронлар менен орынланды. Бирақ де Бройль гипотезасына муўапық басқа бөлекшелер болған атомлар да, молекулалар да, электроннан кейин ашылған элементар бөлекшелер протонлар да, нейтронлар да, басқа да элементар бөлекшелер толқынлық қасиетке ийе болыуы керек. Бирақ бундай бөлекшелердиң басым көпшилиги электронларға салыстырғанда мыңлаған есе үлкен массаларға ийе. Де Бройль толқынының ұзындығы масса  $m$  ге кері пропорционал болғанлықтан  $\left(\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{mv}\right)$  бирдей тезликлерге ийе болған жағдайларда де Бройль толқынының ұзындығының шамасы электронлардың де Бройль толқын ұзындығынан мыңлаған есе киши болады. Үлкен салмаққа ийе болған бөлекшелердиң кристаллардағы дифракциясын бақлау ушын олардың толқын ұзындығының үлкенлиги кристал турақлысының шамасы ( $\sim 10^{-10}$  м) менен барабар болыуы керек. Ал бундай бөлекшелердиң кристаллық денелердеги дифракциясын бақлау тек киши тезликлер менен қозғалыушы бөлекшелер жағдайында ғана мүмкин.

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

Нейтронлардың кристаллардағы дифракцияға ушырауы физика хәм техника ушын үлкен әхмийетке ийе болды. Нейтронларда электр заряды жоқ хәм сонлықтан олар хәтте киши тезликлерде де кристал арқалы тарқала алады хәм үш өлшемли кеңисликлик кристаллық пәнжеререде дифракцияға ушырайды. Нейтронлардың дереги ядролық реакциялар болып табылады. Сонлықтан дифракциялық экспериментлерди өткеріу ушын зәрүрли болған нейтронлар дәстеслерин ядролық реакторлардан ямаса зарядланған бөлекшелерди тезлеткишлерден алыу мүмкин.

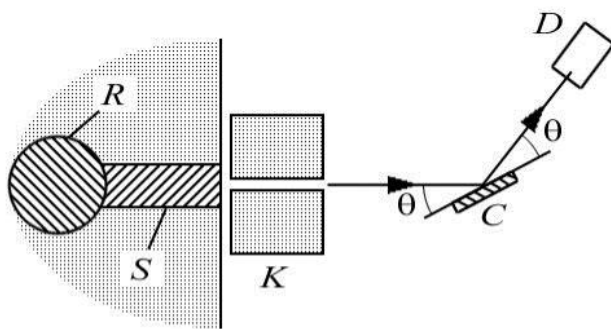
Кристалларда дифракцияға тек жыллылық нейтронлары деп аталатуғын нейтронлар ушырай алады. Бундай нейтронлардың энергиясы газ молекулаларының энергиясы менен барабар, яғный өжире температураларындағы ( $T \sim 300\text{K}$ )  $E = \frac{3}{2}kT$  шамасына жақын болыуы керек. бундай жыллылық нейтронларының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



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

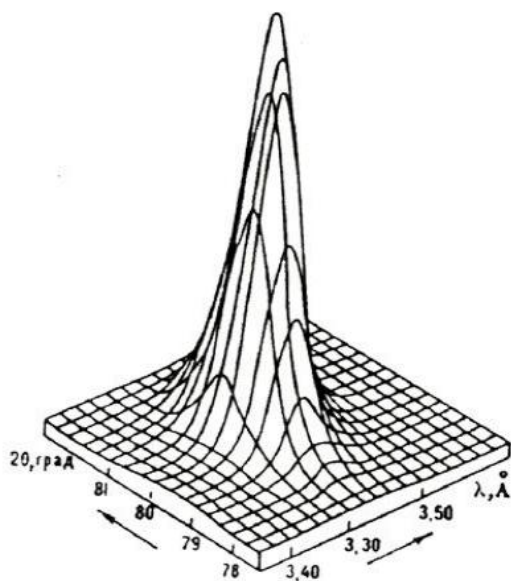
шамасына тең болады. Бул аңлатпада  $m_n$  арқалы нейтронның массасы белгиленген. Өжире температураларында  $\lambda_{db}$  ниң шамасы шама менен  $10^{-10}$  м ге тең хэм усының салдарынан нейтронлардың кристаллардағы дифракциясын бақлау мүмкин.

Нейтронлардың дифракциясы биринши рет бақланған экспериментлер 1936-жылы Х.Хальбан, П.Прайсверк хэм Д.Митчел тәрөпинен орынланды. Олардың экспериментлеринде радийли-бериллийли нейтронлар дереги қолланылды. Бирақ хәзирги уақытларда нейтронлардың дифракциясы бақланатуғын эксперименттерде нейтронлардың дереги ретинде ядролық реактор қолланылады (2.2.10-сүүрет).

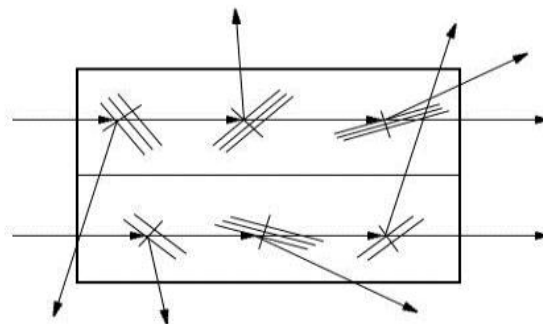


2.10-сүүрет.  
Нейтронлардың дифракциясын  
бақлауға мүмкиншилик беретүғын  
эксперименталлық дүзилістің  
схемасы.

R ядролық реактордан шыққан нейтронлар S әстелеткиши арқалы өтип, бул әстелеткиште өзиниң энергиясының бир бөлегин жоғалтады. Буннан кейин нейтронлар коллимациялаушы система K арқалы өтеди хэм бул системада жиңишке дәстеге айланады. Бул дәсте C кристаллына түседи хэм кристалда дифракцияға ушырайды. Дифракцияға ушыраған нейтронлар дәстесин D нейтронлар детекторы регистрациялайды (есапқа алады). Эксперименттерде бақланатуғын дифракцияға ушыраған нейтронлардың интенсивлигиниң Брэгг мүйеши  $\theta$  дан хэм де Бройль толқынының узынлығы  $\lambda_{db}$  дан фәрезлиги 2.11-сүүретте келтирилген.



2.11-сүүрет. CSHSeO<sub>4</sub> монокристаллынан  
шашыраған нейтронлардың



2.12-сүүрет.  
Поликристал фильтрдиң жәрдемінде

интенсивлигинің дифракциялық максимумы.

нейтронлар дәстесін фильтрлеу схемасы.

Нейтронларды әстелетіуші ретінде ядролары нейтронларды жүдә әззи жутатуғын графиттің, бериллийдің хәм басқа да элементлердің поликристаллары хызмет етеди. Әстелеткишлерде нейтронлар көп рет дифракцияға ушырайды хәм соның нәтийжесінде өз энергиясының артық бөлегін кристалдың ядроларына береді.

Усының менен бир қатарда поликристал әстелеткиште нейтрон дәстесінің спектринің киши энергияға ийе бөлегінің бөліп алыныуы (фильтрлеу) жүзеге келеди. Бул қубылыс та нейтронлардың дифракциясына тийкарланған. Бул қубылысты толығырақ қарап шығамыз.

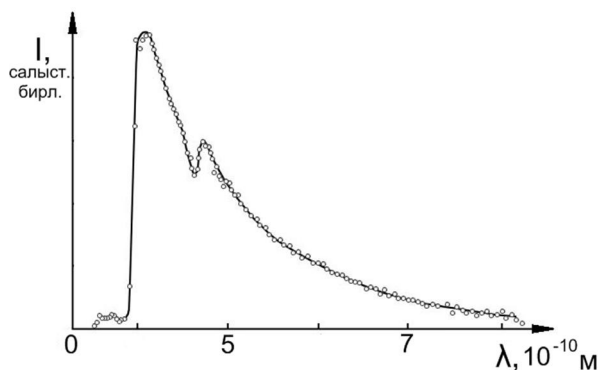
$$2d \sin \theta = n\lambda$$

Вульф-Брэгг шәртинен дифракциялық шағылысуға қатнасатуғын максималлық ұзынлыққа ийе де Бройль толқынының ұзынлығының

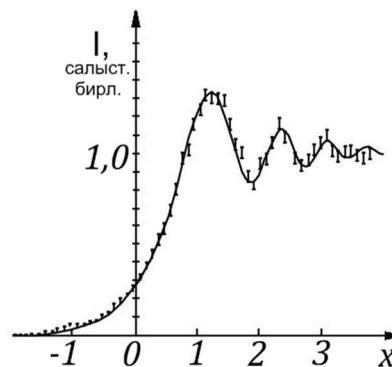
$$\lambda^{max} = \max \left\{ \frac{2d \sin \theta}{n} \right\} = 2d$$

шамасына тең болатуғынлығынлығын аңсат түрде көрсетіуге болады. Бул аңлатпадағы  $\sin \theta$  ның ең үлкен мәнісі 1 ге тең. Сонлықтан  $\lambda^{max} = 2d/n$  хәм толқын ұзынлығының максимум мәніске ийе болыуы үшін  $n = 1$  шәртинің орынланыуы керек. Бул  $\lambda^{max}$  толқын ұзынлығын шегаралық толқын ұзынлығы деп атаймыз. Бул шәрт  $\lambda < \lambda^{max}$  болған тез қозғалыушы нейтронлардың кристалда дифракцияға ушырайтуғынлығын хәм соның салдарынан өзинің бағытын өзгертетуғынлығын хәм әстелеткиш арқалы тууры бағытта өтетуғын дәстеден шығып қалатуғынлығын билдиреди (2.2.12-сүүрет).

Толқын ұзынлығы  $\lambda > \lambda^{max}$  болған киши энергияға ийе нейтронлар дифракцияға ушырамайды хәм (әстелеткиш) поликристал арқалы интенсивлигин дерлик өзгертпей өтеди. Бериллий поликристаллы арқалы өткен нейтронлар дәстесінің интенсивлигинің де Бройль толқын ұзынлығы  $\lambda$  шамасынан ғәрезлиги 2.13-сүүретте көрсетілген. Өткен дәстениң интенсивлигинің кескин түрде киширейиуі  $\lambda \approx 0,4$  нм толқын ұзынлығынан баслап орын алады. Бул бериллий фильтри үшін шегаралық толқын ұзынлығының шамасына сәйкес келеди (бериллий үшін  $\lambda^{max} = 0,395$  нм).



2.13-сүүрет. Поликристалл бериллий фильтри арқалы өткен нейтронлардың спектри.



2.14-сүүрет. Жутыушы экранның шетінде дифракцияға ушыраған нейтронлар дәстесінің интенсивлиги.

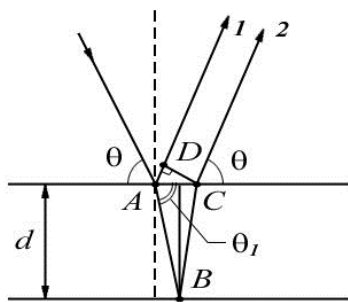
Полкристаллық фильтр арқалы өтетұғын киши энергияға ийе нейтронлар салқын нейтронлар деп аталады. 2.4-мәселеде усындай нейтронлардың неликтен салқын нейтронлар деп аталатуғынлығы түсіндириледі

Нейтронлар ушын да, басқа бөлекшелер ушын да оптикада кеңен белгили болған дифракциялық тәжірийбелерди экспериментлерде бақлау мүмкин. 2.14-сүўретте мөлдир емес экранның шетиндеги нейтронлардың дифракциясын изертлеу бойынша өткерилген экспериментлердің нәтийжеси келтирилген. Бул экспериментлерде толқын узынлығы 2 нм болған нейтронлар қолланылған. Графикте х көшери бойынша бир бирлик ени 30 мкм болған детектордың саңлағының 100 мкм ге жылжыуына сәйкес келеди.

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

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

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



2.15-сүўрет.

Металлдағы электронлық толқынның сыныуын есапқа алған ҳалдағы электронлардың дифракциясы.

Мейли электронлар атомлық тегисликке  $\theta$  сырғанау мүйеши менен түсетуғын болсын. Сынған нур ушын сырғанау мүйешиниң шамасын  $\lambda_1$  арқалы белгилеймиз (2.2.15-сүўрет). Әпиўайылық ушын симметриялы жағдайды қараймыз, яғный атомлық тегисликлерди кристалдың бетине параллель деп есаплаймыз. Қоңысылас атомлық тегисликлерде шашыраған толқынлар ушын жүрислер айырмасы  $\Delta$  ны есапаймыз. Сыныуды есапқа алған ҳалда

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

аңлатпасын аламыз. Электронлар толқыны ушын сыныу нызамы (Снелиус нызамы)

$$\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2} - \theta_1\right)} = \frac{\cos\theta}{\cos\theta_1} = n_e$$

түрине ийе болады. Буннан  $\cos\theta$  ны есаплап ҳәм оны жүрислер айырмасы  $\Delta$  ға қойсақ

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

аңлатпасына ийе боламыз. Солай етип де Бройль толқынының сыныұын есапқа алған қалда қоңсылас тегисликлерде шағылысқан толқынлардың бир бирин күшейтиұ шәрти, яғный Вульф-Брэгг шәрти

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

түрине енди [(2.2.11)-аңлатпаға].

Биз алған Вульф-Брэгг шәрти тек электронлар ушын ғана емес, ал толқынлық қәсийетлерге ийе фотонлар, нейтронлар хәм басқа да бөлекшелер ушын орынланады. Бундай формуланы сыныұ көрсеткишинң шамасы 1 ден өзгере болғанда қолланыұ керек болады. Егер  $n_e - 1 \ll 1$  болса биз алған шәрт әдеттеги сыныұды есапқа алмайтуғын жағдайдағы Вульф-Брэгг шәртине айланады.

**2.4-мәселе.** Графит пәнжересиниң турақлысы  $d = 0,335$  нм. Графит поликристаллы тәрeпинен өткерилетуғын ең қысқа узынлықтағы нейтронлар толқының температурасы  $T$  ны анықлаңыз.

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

$$T = \frac{(2\pi\hbar)^2}{3mk\lambda_{db}^2}.$$

Бул аңлатпаға  $\lambda_{db} = \lambda_{\text{шег.}} = 0,67 \cdot 10^{-9}$  м шамасын қойып

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

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

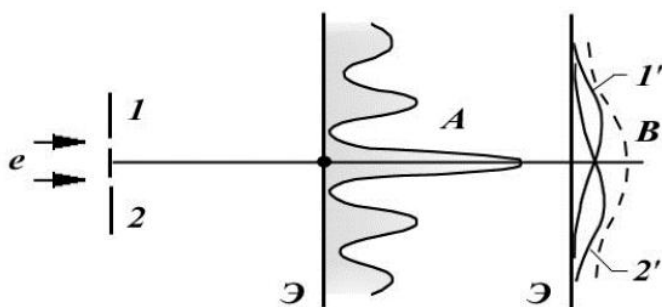
## 2-2-3. Анықсызлық қатнастары

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

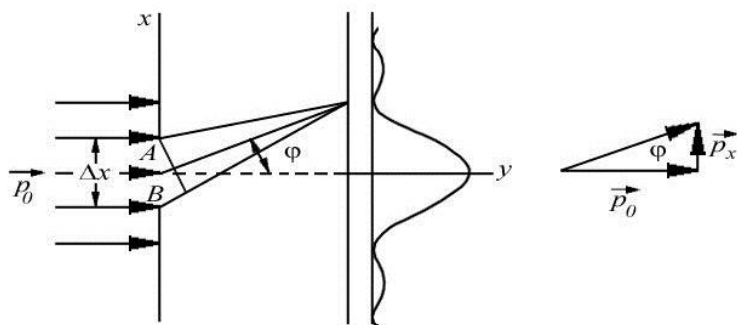
Микробөлекшениң толқыннан айырмасын көп санлы мысаллардың жәрдемінде көрсетиұ мүмкин. Мысалы ярым мөлдир айнаны пайдаланып қәлеген толқынды екиге бөлип, олардың хәр қайсысын өз алдына изертлеұ мүмкин. Микробөлекше болған электронды ямаса нейтронды бөлеклерге бөлиұге болмайды. Усы ўақытқа шекем ҳеш ким ярым электронды, бир ярым протонды ямаса шерек нейтронды көрген жоқ.

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

Мейли моноэнергиялы (бирдей энергияға ийе) электронлардың параллель дәстеси еки саңлағы бар диафрагмаға келип түсетуғын болсын (2.2.16-сұурет). Электронлар толқынлық қасиетке ийе болғанлықтан диафрагманың артына қойылған Э экранында интерференциялық сұурет пайда болады. Интерференциялық сұуреттиң максимумлар менен минимумлардың избе-излигинен туратуғынлығын билемиз. (А иймеклиги). Енди 1-саңлақ ашық хәм 2-саңлақ жабық болған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда экрандағы электронлардың тарқалыуы тек бир саңлақтың үлеси менен анықланады (1' иймеклиги). Тап сол сыяқлы 1-саңлақты жапсақ хәм 2-саңлақты ашсақ, онда 2' иймеклиги менен сыпатланатуғын тарқалыуды аламыз. Егер хәр бир электрон белгили бир саңлақ арқалы өтетуғын болса (1- ямаса 2-саңлақтан), онда электронлардың тарқалыуы еки саңлақ та ашық турғандағы (яғный В иймеклиги) жағдайдағыдай болып тарқалған болар еди (2.2.16-сұуретте келтирилген 1' хәм 2' иймекликлериниң қосындысы пунктир сызық пенен көрсетилген). В иймеклигиниң экспериментте алынған иймекликтен тиккелей айырмасы электрон диафрагма арқалы өткенде еки саңлақты да "көреді" деген жуўмақтың шығарылыуына алып келеди. Электрон диафрагма арқалы өткенде экранда пайда болатуғын интерференциялық сұурет еки саңлақтың қатнасыуы менен ғана пайда болады деп түсиндириледі. Электрон қандай да бир саңлақ арқалы өтти хәм соның салдарынан интерференциялық сұурет пайда болды деп түсиндиретуғын қәлеген тырысыу интерференциялық сұуреттиң бузылыуына алып келеди. Солай етип интерференциялық сұуретти бузбай электронның саңлақлардың қайсысынан өткенлигин көрсетиу мүмкин емес болып шығады. Демек электронға ямаса қәлеген басқа микробөлекшеге қандай да бир айқын траектория сәйкес келеди деп айтыу мүмкин емес.



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



2.17-сұурет.  
Саңлақтағы электронның дифракциясы.

Микробөлекшениң толқынлық қәсийетке ийе екенлиги классикалық физиканың әхмийетли түсиниклериниң бири болған траектория түсинигинен бас тартыўға алып келеди. Классикалық көз-қараслар бойынша бөлекше ўақыттың ҳәр бир моментинде кеңисликтің белгили бир ноқатында жайласады хәм бул ноқатта белгили муғдардағы импульске ийе болады. Демек бир ноқатта жайласқан электронның тап сол ўақыт моментинде екинши ноқатта да жайласыўы мүмкин емес. Квантлық көз қараслар бойынша толқынлық қәсийетлерге ийе болғанлығы себепли бир ўақыт моментинде микробөлекше кеңисликтің ҳәр қыйлы ноқатларында жайласа алады. Сонлықтан микробөлекшелердиң қозғалысын тәриплеў ушын траектория түсинигинен пайдаланыў пүткиллей мүмкин емес болып табылады.

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

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

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

Интерференциялық сүўрет экраннан соң жайласқан Ф фотопластинкасында регистрацияланатуғын болсын. Экран тегислигиндеги  $x$  көшерин саңлаққа перпендикуляр бағытқа қарай бағытлаймыз, ал  $y$  көшерин болса келип түсиўши электронлар дәстесиниң қозғалыс бағытында аламыз. Мейли келип түсиўши электронлар  $p_0$  муғдарындағы импульске ийе болсын. Бундай жағдайда квант-механикалық көз-қараслар бойынша бундай электронлар (2.2.4)-де Бройль теңлемеси тәрәпинен анықланатуғын толқын векторы  $\vec{k}$  болған тегис толқын түринде сыпатланады

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

Толқын барлық кеңислик бойынша тарқалған болғанлықтан ҳәр бир электрон саңлақ арқалы өтемен дегенше дәл  $p_0$  муғдарындағы импульске ( $p_x = 0$ ,  $p_y = p_0$ ,  $p_z = 0$ ) хәм мәниси пүткиллей белгисиз болған  $x$  координатасына ийе болады.

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

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

Саңлақ арқалы өткен электронлардың басым көпшилиги орайлық дифракциялық максимумға барып түседі. Бул максимумның шегаралары  $\varphi_1$  дифракция мүйешинің мәнісі бойынша табылады.  $\varphi_1$  мүйеши дифракциялық сұұреттеги интенсивликтің биринши минимумын береді. Дифракция теориясына сәйкес бул мүйеш

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

шәртинен табылады. Биз барлық ўақытта  $\lambda_{db}$  арқалы электронның де Бройль толқынының толқын ұзынлығын белгилеп келдик.  $\varphi_1$  мүйешинің киши екенлигине байланысly  $\varphi_1 \sin \varphi_1 \approx \operatorname{tg} \varphi_1$ . Демек

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

Екинши тәрөптен  $\varphi_1$  мүйешинің мәнісин электронның  $p_x$  хәм  $p_y$  құраўшылары арқалы да анықлаўға болады:

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

$x$  көшеринің бағытында импульстің проекциясындағы анықсызлық  $\Delta p_x$  шамасының мәнісі  $p_x$  тың өзинің мәнісі менен барабар деп есаплап

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

аңлатпасын аламыз. (2.2.13) пенен (2.2.14) аңлатпаларын бир бири менен салыстырып

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \lambda_{db} p_y$$

қатнасына ийе боламыз.

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{p_y}$$

екенлигин итибарға алып ең ақырғы нәтийжени аламыз

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

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

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

формуласын береді.

(2.2.16)-формула 1927-жылы немис физиги В.Гейзенберг тәрөпинен алынды хәм сонлықтан Гейзенбергтің анықсызлық қатнаслары деп аталады. Бул қатнаслар

бойынша биз бөлекшениң координаталарын қаншама дәл тапсақ (яғный  $\Delta x$  шамасының мәнісі қаншама киши болса), онда усы координатаға түсірилген импульстиң проекциясының мәнісін тапқанда жиберилетуғын анықсызлықтың мәнісі  $\Delta p_x$  соншама үлкен болады (яғный  $\Delta x$  киши болса  $\Delta p_x$  үлкен хәм  $\Delta x$  үлкен болса  $\Delta p_x$  киши мәніске ийе болады деген сөз).

Анықсызлық қатнастары анықсызлық принципинің математикалық аңлатпасы болып табылады. Бул принцип бойынша координата менен импульстиң усы координатаға түсірилген проекциясы дәл мәніслерге ийе болатуғын хал тәбиятта бола алмайды.

(2.2.16)-аңлатпаның материяның корпускулалық-толқынлық дуализминің салдары екенлигин және бир рет атап өтемиз. Бул дуализм бойынша бөлекше бир ўақытта толқынлық қасиетке де, бөлешелик қасиетке де ийе болады. Бул анықсызлық анаў ямаса мынаў экспериментте пайдаланылатуғын айқын физикалық әсбаптың шаманы өлшегенде жиберетуғын қәтелиги менен хеш қандай байланысқа ийе емес. Бул қатнас микробөлекшениң характеристикаларын өлшеўдің дәллигинің теориялық шегин береді.

Гейзенбергтің анықсызлық қатнастары бөлекшениң координатасының анықсызлығы менен импульсинің усы координатаға түсірилген проекциясының анықсызлығын байланыстырады. Биз жоқарыда қарап өткен жағдайда  $x$  көшери хеш бир себеп пенен айырып алынған жоқ еди. Сонлықтан (2.2.16)-қатнас басқа координата көшерлери ушын да орынлы

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

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда координатаны хәм импульстиң басқа координаталарға түсірилген проекцияларын анықлаўға хеш қандай шек қойылмайды. Мысалы  $\Delta x$  пенен  $\Delta p_y$  ямаса  $\Delta p_z$  шамаларын анықлаў дәлликлерине хеш қандай шек қойылмайды.

Квантлық механикада анықсызлық қатнастары фундаменталлық әхмийетке ийе. Бул қатнастар оғада әхмийетли физикалық нәтийжелерди алыўға мүмкиншилик береді. Соның менен бирге бул қатнастар квант-механикалық мәселелерди шешкенде қурамалы болған дәл математикалық есаплаўларды жүргизбей-ақ көп шамалардың мәніслерин жеткилики дәрежедеги дәлликте алыўға имканят жаратып береді. Мысалы не себепли атомдағы электрон ядроға қулап түспейди, неликтен атом ядросының ишинде электрон жоқ хәм басқа да әхмийетли сораўларға аңсат жуўап бериўге мүмкиншилик береді. Анықсызлық қатнастары жәрдемінде атомның өлшемлеринің шамасы, атомдағы электронның ең минималлық энергиясы ҳаққындағы мәселелерге айқын жуўап алыўға болады.

Анықсызлық қатнастарының атомның орнықтылығы ҳаққында қалай жуўмақ шығаратуғынлығын көрсетемиз. Водород атомын аламыз хәм ондағы электрон ядроның (протонның) дөгерегинде радиусы  $r$  болған дөңгелек орбитада  $v$  тезлиги менен қозғалады деп есаплаймыз. Электронның орбита бойынша қозғалысы Кулон күшинің тәсиринде жүзеге келетуғын болғанлықтан Ньютонның екінши ызамаы бойынша

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (2.2.17)$$

аңлатпасын жаза аламыз. Енди анықсызлық қатнастарынан пайдаланамыз. Электронның координатасындағы анықсызлық орбитаның радиусы  $r$  ге тең. Ал



импульстің анықсызлығы  $\Delta p$  ның шамасы импульс  $p$  ның шамасынан артық емес, яғни  $\Delta p \approx p = mv$ . Бул жағдайда (2.2.16)-аңлатпа мына түрге енеді:

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

(2.2.17) менен (2.2.18) ди бириктирип

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

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

Анықсызлық қатнастары классикалық механиканың қолланылуы шеклерин де сызып бере алады. Бул жағдайды демонстрациялау үшін (2.2.16)-аңлатпаны оған масса  $m$  киретуғын етип көширип жазамыз. (2.2.16) ға  $\Delta p_x = m\Delta v_x$  теңлигин қойып

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

теңсизлигин аламыз.  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$  Дж·сек жүдә киши шама болғанлықтан тезликтің анықсызлығы  $\Delta v_x$  тек массасы жүдә киши хәм жүдә киши  $\Delta x$  өлшемлерінде ғана сезилерликтей мәніске ийе болуы мүмкин.

Мысал ретінде массасы  $m = 10^{-6}$  кг болған шаңның бөлекшесин аламыз. Бундай бөлекшенің координатасын анықлауда жиберилетуғын қәтеликтің шамасы  $\Delta x = 10^{-6}$  метрден артық емес. Бундай жағдайда шаң бөлекшесинің тезлиги ушын алынатуғын анықсызлықтың шамасы  $\Delta v_x \sim 10^{-22}$  м/сек шамасынан артпайды. Бул шама ең жақсы эксперименталлық дүзилістердің өлшеулерінде жиберилетуғын қәтеликтің шамасынан оғада көп есе киши. Солай етип шаң бөлекшеси ушын, сондай-ақ барлық макроскопиялық денелер ушын анықсызлық қатнастары хеш қандай әхмийетке ийе емес. Олардың қозғалысын изертлегенде квантлық механиканы емес, ал классикалық механиканы қолланыу керек.

Енди атомдағы электрон ушын анықсызлық қатнастарының қандай нәтижелерди беретуғынын көріп өтеміз. Электронның массасы  $m = 0,91 \cdot 10^{-30}$  кг, оның координатасындағы анықсызлықты  $\Delta x \approx 10^{-10}$  м ге тең дейик. Бул жағдайда  $\Delta v_x \sim 10^6$  м/сек.

Бул шаманы атомдағы электронның тезлиги менен салыстырайық. Водород атомындағы электронның энергиясы шама менен 10 эВ шамасында. Бундай энергияға  $v = 10^6$  м/сек шамасындағы тезлик сәйкес келеді. Солай етип электронның тезлигиндегі анықсызлық  $\Delta v_x$  тың шамасы электронның өзинің тезлиги  $v$  ға барабар екен деген жуымақ келип шығады. Сонлықтан атомдағы электронның қәсийетин тәриплеу ушын квантлық механиканың ызымларын пайдаланыу керек болады.

Биз төменде координата менен импульстің проекциясы менен бир қатарда бир уақытта дәл мәніслерге ийе бола алмайтуғын басқа да физикалық шамалардың жупларының бар екенлигин көреміз. Олар ушын да (2.2.16)-аңлатпаға ұқсас анықсызлық қатнастары орын алады. Сондай қатнастардың ишинде энергияның анықсызлығы  $\Delta E$  менен уақыттың анықсызлығы  $\Delta t$  шамасын байланыстыратуғын анықсызлық қатнастары үлкен әхмийетке ийе. Бул қатнас мынадай түрге ийе

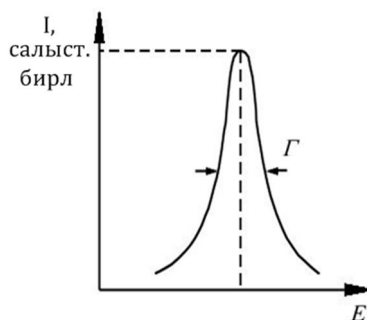
$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.2.20)$$

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

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

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

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



2.18-сүүрет.

Атомлардың нурланыў спектриндеги сызықтың формасының сапалық сүүрети.

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

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

Экспериментте спектраллық сызықтардың тәбйий кеңлиги  $\Gamma$  шамасын өлшеп (2.2.22)-аңлатпаның жәрдемінде қандай да бир қозған қалдағы жасау ұақытын есаплау мүмкин. Көзге көринетуғын диапозонда нурланатуғын атомлардың спектраллық сызықтарының тәбйий кеңлиги ушын эксперименттерде  $\Gamma \sim 10^{-7}$  эВ шамасы алынады. Бул мәнисти (2.2.22) ге қойсақ атомның қозған қалдағы жасау ұақыты ушын  $\tau \approx 10^{-8}$  сек мәнисин аламыз. Атомлардың спектраллық сызықтарының кеңейиуі қаққында биз төмениректе гәп етемиз

**Анықсызлық қатнастарынан келип шығатуғын нәтийжелер.** Анықсызлық қатнастарынан келип шығатуғын нәтийжелердің бирин биз жоқарыда талладық хәм квантлық механикада бөлекшениң траекториясы қаққында гәп етиудің мәнисинің жоқ екенлигин көрдик (себеби толқында траектория болмайды). Классикалық көз-қараслар бойынша (класскалық механиканың нызамлары бойынша) бөлекше хәр бир ұақыт моментінде координатаға хәм импульске (тезликке) ийе болады. Бул бөлекшениң белгили бир траектория бойынша қозғалатуғынлығын аңлатады. (2.2.16)-(2.2.19)-аңлатпалардан сол шамалардың биреуинің ғана дәл мәниске ийе болатуғынлығын көремиз. Бөлекшениң координатасының белгили болыуы мүмкин (бул жағдайда  $\Delta x = 0$ ). Бундай жағдайда оның тезлигин анықлау мүмкин емес (себеби  $\Delta v_x \rightarrow \infty$  шамасына тең болады). Егер бөлекшениң тезлиги дәл мәниске ийе болса (бундай жағдайда  $\Delta v_x = 0$ ), онда оның координатасы анық мәниске ийе бола алмайды (яғный  $\Delta x \rightarrow \infty$ ). Улыұма жағдайда болса корпускулалық-толқынлық дуализмнің салдарынан бөлекшениң координатасы да, импульси де белгили бир анықсызлықларға ийе болады. Бул анықсызлықлар бир бири менен (2.2.16)-аңлатпа арқалы байланысқан.

Ядро физикасында кеңнен қолланылатуғын Вильсон камерасын еске түсиремиз. Вильсон камерасы арқалы өткенде жоқары энергияға ийе зарядланған бөлекшелер треклер деп аталатуғын из қалдырады. Бул көзге анық көринетуғын ямаса сүүретке түсирип алыуға болатуғын из траектория болып табылады. Треклердің көриниуіндеги бөлекшелердің толқынлық қәсийетинің ақыбетінде келип шығатуғын шашалау (анықлығының төменлеуі) пүткиллей бақланбайды. Мәселе неден ибарат? Жууаптың мәниси төмендегилерден ибарат.

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

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

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

Бундай жууақлар жоқары энергиялы бөлекшелер ушын толық тастыйықланады. Қақыйқатында да үлкен импульслерге ийе бөлекшелер ушын де Бройль толқынының узынлығы жүдә киши болады. Бундай жоқары энергиялы бөлекшелерди классикалық бөлекшелер деп атауға болады.

Анықсызлық қатнастарына келип шығатуғын екінши әхмийетли нәтийжени қараймыз. Биз хәзир микробөлекшениң толық тынышлық қалының болмаиуғынлығын көрсетемиз.

Қақыйқатында да егер бөлекшениң координатасының өзгериуі областы шекленген болса, яғный  $\Delta x = a$  болса, онда (2.2.16) ға сәйкес бундай бөлекшениң импульси

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a}$$

анықсызлығына хәм усыған сәйкес нолге тең емес энергияға ийе болады. Усы энергияның ең киши мәніси болған  $E_{min}$  шамасын бақалаймыз. Импульс бойынша минималлық шашаулық

$$\Delta p_{x\ min} = \frac{\hbar}{2a}.$$

$p_{x\ min} \approx \Delta p_{x\ min}$  деп болжап

$$E_{min} = \frac{p_{x\ min}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

аңлатпасын аламыз. Солай етип квантлық механикада бөлекше ҳеш қашан тынышлық ҳалында тура алмайды екен.

Енди анықсызлық қатнастарына келип шығатуғын үшінши әҳмийетли нәтийжени қараймыз. Квантлық механикада бөлекшениң толық энергиясын кинетикалық хәм потенциал энергияларға бөлиў мәніси жоқ иске айланады. Кинетикалық энергия бөлекшениң импульсине, ал потенциал энергия болса бөлекшениң координатасына байланысly. Бирақ (2.2.16)-аңлатпа бойынша координата менен импульс бир ўақытта анық мәнислерге ийе болмайтуғын болғанлықтан толық энергия  $E$  бир ўақытта дәл анықланған кинетикалық хәм потенциал энергиялардың қосындысына тең бола алмайды. Солай етип квантлық механикада кинетикалық энергия  $E_K$  менен потенциал энергия  $U$  дың бир заматлық мәнислериниң қосындысы толық энергияға тең болыўы мүмкин емес.

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

**2.5-мәселе.** Гейзенбергтин анықсызлық қатнасын пайдаланып характерли сызықлы өлшем  $L$  ге ийе кеңисликтин базы бир областындағы классикалық механиканың қолланылыў шеклерин бақалаңыз.

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

(2.2.16)-аңлатпадан пайдаланамыз хәм бул аңлатпада  $\Delta p_x \approx p$  теңлиги орынланады деп есаплаймыз. Бөлекшениң координатасының анықсызлығы ушын

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \approx \frac{\hbar}{2p} = \frac{\lambda_{db}}{4\pi}$$

аңлатпасын аламыз. Демек  $\lambda_{db} \leq 4\pi\Delta x$ , ал  $\Delta x \ll L$  болғанлықтан  $\lambda_{db} \ll L$ . Усы теңсизлик орынланғанда бөлекшениң қозғалысын тәриплеў ушын классикалық механиканың нызамларын пайдаланыў керек деген жуўмақты шығарамыз.

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

**Шешими:**  $\lambda$  толқын узынлығына ийе толқынның энергиясы

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

шамасына тең. Буннан энергия  $\Delta E$  менен спектраллық сызықтың толқын ұзындықтарының анықсыздықтарын (яғный  $\Delta E$  хәм  $\Delta\lambda$  шамаларының мәніслерін) есаплаймыз:

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

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

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

формуласын аламыз. Бул формулаға константалардың сан мәнісін қойсақ  $\Delta\lambda = 1,3 \cdot 10^{-14}$  м шамасын аламыз. Бундай жағдайда спектраллық сызықтың салыстырмалы кеңлиги  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 2,6 \cdot 10^{-8}$  шамасындай болады. Биз усы жерде  $\Delta\lambda$  киши шамасының атомлардың нурланыуындағы монохромлықтың дәрежесін анықлайтуғынын атап өтемиз. Ал эксперименттерде алынатуғын спектраллық сызықтардың кеңлиги (эксперименттерде алынатуғын спектраллық сызықтардың кеңлигін сызықтардың хақықый кеңлиги деп атаймыз) спектраллық сызықтардың тәбийй кеңлигинен барлық ўақытта да үлкен болады. Буған атомлардың жыллылық қозғалыслары себепли спектраллық сызықтардың Допплерлик кеңейиуі хәм басқа да көп факторлар киреди.

## 2-2-4. Микробөлекшелерди затлардың структурасын изертлеу үшін қолланыу

Микробөлекшелерди пайдаланыу арқалы затлардың хәр қандай қәддидеги қурылысын (ядролық, атомлық, молекулалық, атомлық-кристаллық, кристаллардың дефектлик қурылысы хәм басқа да қәддилердеги) мүмкин екенлиги хәзирги ўақытлары кеңнен белгили. Бул жағдай биринши рет 1911-жылы Англиялы физик Э.Резерфорд хәм оның менен бирге ислесиўи хызметкерлер тәрәпинен  $\alpha$ -бөлекшелердин атомлардағы шашырауын изертлеу бойынша өткерилген тәжирийбеде айқын түрде көрсетилди.  $\alpha$ -бөлекшелериниң жуқа металл фольгадағы шашырауын изертлеудин нәтийжесинде олар атомлардың планетарлық (ядолық) моделин ашты.

Резерфорд тәжирийбелеринде  $\alpha$ -бөлекшелери пайдаланылды, тәжирийбелер шараятларында олардың толқынлық қәсийетлери әхмийетке ийе болған жоқ. Сонлықтан атом ядроларындағы  $\alpha$ -бөлекшелериниң шашырауын классикалық –көз-қараслар бойынша таллау мүмкин еди.

Биз төменде микробөлекшелердин жәрдемінде затлардың қурылысын эксперименталлық изертлеу мүмкиншилигин қарап өтемиз хәм бул эксперименттерде олардың толқынлық қәсийетлери тийкарғы орын ийелейтуғын жағдайларды үйренемиз.

Рентген нурларының кристаллардағы дифракциясының ашылыуы қатты денелердин атомлық-кристаллық қурылысын (структурасын) изертлеудин жаңа усылы болған кристаллар рентгенографиясының пайда болыуына алып келди. Тап

сол сыяқлы электронлар менен нейтронлардың кристаллардың дифракциясының ашылуы да жаңа усыллардың (методлардың) пайда болуын тәмийинледі. Электронлардың дифракциясына тийкарланған затлардың қурылысын изертлеу методын электронография, ал нейтронлардың дифракциясына тийкарланған методты нейтронография деп атайды..

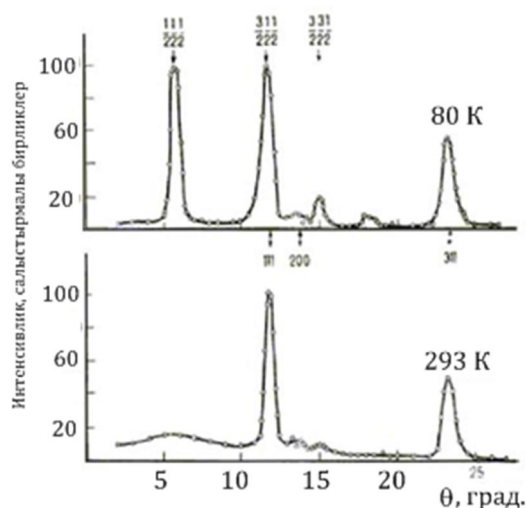
Электронография хәзирги ўақытлары кристаллардың, аморф денелердің, суйықлықлардың, газлер менен пуўлардың молекулаларының қурылысын изертлеу ислеринде кеңнен қолланылады. Электронлар затлар тәрәпинен күшли жутылатуғын болғанлықтан бул методтың жәрдеминде тек жуқа кристаллар хәм кристаллық пленкалар изертлениледі. Ал тәжирийбеде төменги энергияға ийе болған электронларды пайдаланғанда (бундай электронларды әстен қозғалатуғын электронлар деп атайды) олар кристалдың жүдә жуқа бетлик қатламына ғана өте алады. Сонлықтан олар кристалдың жүдә жуқа бетлик қатламы хаққында информацияларды бере алады. Әсте қозғалатуғын электронлардың дифракциясы хәзирги ўақытлары кристаллық затлардың бетиниң қурылысын изертлеуге мүмкиншилик беретугын ең информациялы усыллардың бири болып табылады. Бул методы жәрдеминде кристалдың бетиндеги кристаллық пәнжерениң қурылысының өзгерислерин, адсорбсия қубылысларын хәм қатты денелердің кристаллизациясының ең басланғыш дәўирлерин үйрениў мүмкин.

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

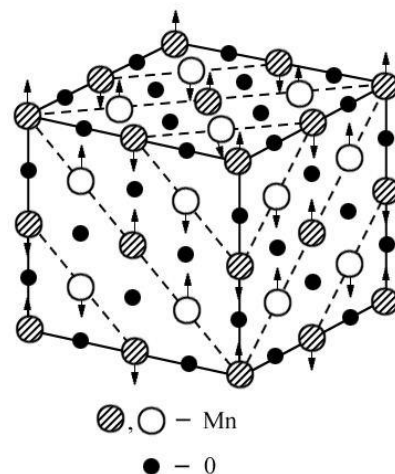
Нейтронларда магнит моментиниң болуы дифракциялық изертлеўлерде затлардың магнитлик қурылысын, яғный атомлардың магнит моментлериниң шамаларын, олардың өз-ара жайласуўларын, кристаллографиялық көшерлерге салыстырғандағы бағытларын үйрениўге мүмкиншилик береді. Структуралық изертлеўлердің сәйкес методын магнитлик нейтронография деп атайды. Хәзирги ўақытлары бул метод қатты денелердің магнитлик структурасын тиккелей анықлаўдың бирден бир усылы болып табылады.

2.19-сүўретте  $MnO$  кристалларының магнитлик қурылысын нейтронографиялық изертлеўлердің нәтийжелери келтирилген. Өжире температураларында бул бирикпе парамагнетик болып табылады, ал  $T_N = 80$  К Неель ноқатынан (ферромагнетиклер ушын Кюри температурасының аналогы) төменги температураларда  $MnO$  антиферромагнетик ҳалына өтеди. Антиферромагнетик ҳал марганец атомларының магнит моментиниң антипараллель тәртиплесиўи менен характерленеди. Кристалдың еки температурасында (Неель температурасынан жоқарыда хәм төменде) дифракцияға ушыраған нейтронлар дәстесиниң интенсивликлерин салыстырыў (2.2.19-а сүўрет) магнит моментлериниң тәртиплесиўиниң қосымша дифракциялық максимумлардың пайда болуына алып келетуғынлығын көрсетеди. Қосымша максимумлардың пайда болуы кристалдың магнитлик элементар қутышасының өлшемлериниң өзгергенлигине сәйкес келеди.

Нейтронографиялық изертлеулер барысында анықланған MnO кристаллының элементар қуышасындағы магнит моменттерінің тәртіплесіуі 2.19-b сұйретте келтирилген. Бул сұйреттегі қара дөңгелеклер кислород атомларына, ал боялмаған дөңгелеклер марганец атомларын сәйкес келеді. Стрелкалардың жәрдемінде марганец атомларының магнит моменттерінің бағыттары көрсетілген.



2.19-a сұйрет. MnO кристалларының магниттік структурасын 80 К хәм 293 К температураларда нейтронлардың дифракциясының жәрдемінде изертлеу барысында алынған нәтижелер.



2.19-b сұйрет. MnO кристалларының элементар қуышасындағы марганец атомларының магнит моменттерінің өз-ара жайласулары. Стрелкалардың жәрдемінде магнит моменттерінің бағыттары көрсетілген.

Микробөлекшелердің толқынлық қасиеттерін пайдаланатуғын және бир изертлеу областы электронлық микроскопия болып табылады. Қәлеген микроскоптың ажырата алыушылық қәбилетлиги

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

формуласының жәрдемінде анықланады. Бул "Оптика" курсы бойынша белгили. Жоқарыда келтирилген формулада  $\lambda$  арқалы толқын узынлығы,  $n$  арқалы орталықтың сынуы көрсеткиши белгиленген, ал  $2\alpha$  шамасын апертуралық мүйеш деп атайды.  $l_{min}$  шамасы микроскоптың жәрдемінде пайда етилетуғын сұйреттегі бир биринен ажыратып көриу мүмкин болған еки нокат арасындағы қашықтықтың минималлық мәниси. Оптикалық диапазонда  $l_{min} \approx 0,4\lambda$  шамасын аламыз. Бул шаманың мәниси жүзлеген нанометрге тең.

Жақтылық толқынларының орнына электронлар толқынын пайдалансақ микроскоптың ажырата алыушылық қәбилетлиги мыңлаған есе артады. Бул жағдай электронлардың де Бройль толқынының толқын узынлығының жүдә киши екенлиги менен байланысly. Хәқыйқатында да тезлетиуши потенциалдың муғдары  $U = 10$  кв болғанда де Бройль толқынының толқын узынлығы  $0,0122$  нм шамасына тең болады. Бул шама атомлардың характерли сызықты өлшемлеринен онлаған есе киши. Бирақ электронлық микроскоптарда жүдә жоқары болған ажырата алыушылықты пайда етиу сәти түсе бермейди. Себеби электрон микроскопындағы электронлар дәстелерин фокуслайтуғын электр хәм магнит линзалары әдеуир үлкен оптикалық кемшиликлерге - аберрацияларға ийе болады. Бирақ усы жағдайға

қарамастан қазіргі уақыттағы электрон микроскоптарының ажырата алыушылық қабілетліктері  $l_{min} = 0,15 - 0,30$  нм шамаларын қурайды. Бул изертлениуші объекттердің атомлық және молекулалық құрылыстарын изертлеу үшін толық жеткілікті.

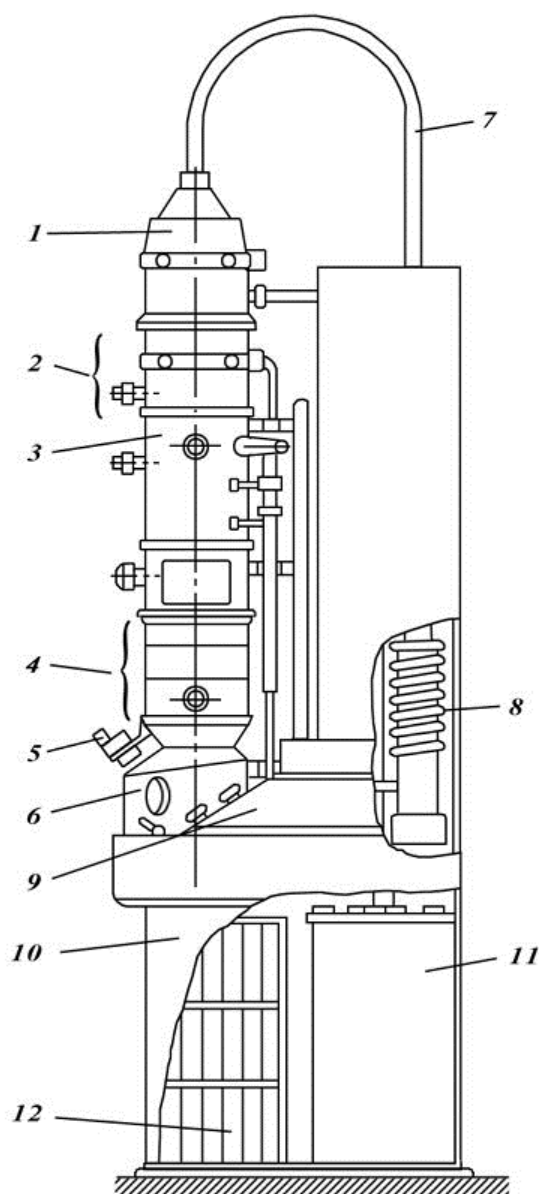
2.2.20-сұретте электронлық микроскоптың дүзилісі схема түрінде көрсетілген. Бундай микроскоп изертленетұғын объект арқалы өтіуші электрон дәстелерінде істейді (рус тілінде "электронный микроскоп просвечивающего типа" деп атайды). Жоқары ажырата алыушылық қабілетлігіне ие қазіргі заман электронлық микроскоптарында тезлетіуші кернеудің шамасы 100 - 400 кВ. Бундай жағдайларда заттың бір неше онлаған нанометр қалыңлықтағы қатламдарын изертлеуге болады. Электрон микроскопының ішінде терең вакуум орнатылуы керек.

Электронлық микроскоптың ішіне орналастырылған электрондар үшін линзаның хызметін атқаратуғын арнаулы формаларға ие электромагниттен туратуғын дүзілістерді конденсорлар деп те атайды.

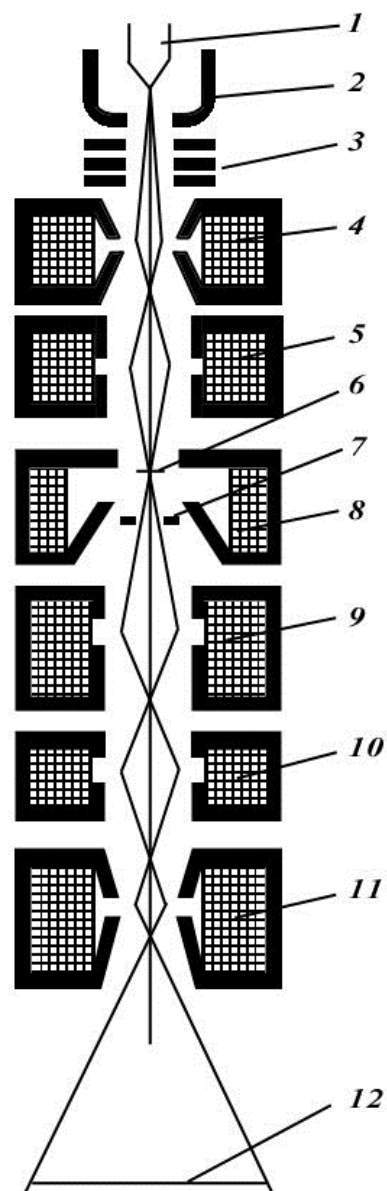
Электрон микроскопында кристаллық объекттің үлкейтілген сұретін былайынша алады. Кристалл арқалы тууры өткен электрондар дәстесі ямаса кристалдың белгілі бір кристаллографиялық тегісліктер семействосында дифракцияға ушыраған электрондардың дәстелерінің биік апертуралық диафрагманың жәрдемінде бөліп алынады. Буннан кейін бул дәсте микроскоптың проекциялық линзаларының жәрдемінде үлкейтіледі. Усыған байланысты электрон микроскопында дифракцияға ушыраған көп санлы электрондар дәстелерінің қалегенін экспериментатордың сайлап алу мүмкіншілігі бар. Бундай жағдайларда бір электрон дәстесінде көрінбейтуғын структуралық дефекттер екінші дәстесі пайдаланғанда айқын түрде көрінеді.

Электрон микроскопының оптикалық системасының схемасы 2.2.21-сұретте келтірілген. Бірінші және екінші конденсорлар тәрәпіннен пайда етілген электрондар дәстесі изертлениуші объектте диаметрі кіші болған дақ пайда етеді (диаметрінің шамасы 1 ден 20 мкм ға шекем). Объект арқалы өтіуші электрондар дәстесі проекциялық линзалар системасының жәрдемінде катодолюминесценттік экранда объекттің сұретін пайда етеді. Бул экранның астында фотопластинкалар жайластырылған арнаулы дүзіліс орнатылған болады. Бул фотопластинкаларға объекттердің сұрети түсіріледі.





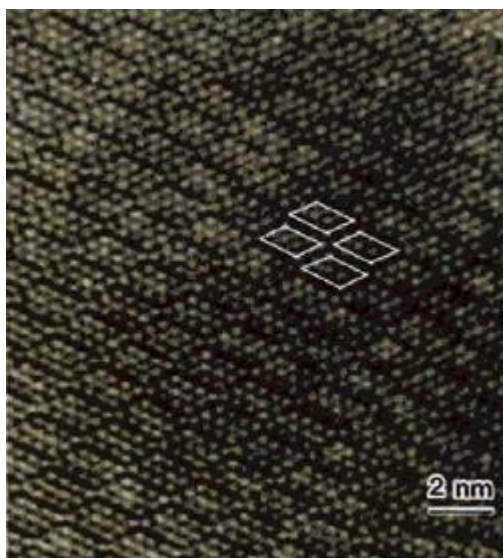
2.2.20-сұрет. Электронлық микроскоптың дүзилісі: 1 – электрон пушкасы; 2 – конденсорлық линзалар; 3 – объектив линза, 4 – проекциялық линза; 5 – экранда пайда болған суретті көзбен бақылау үшін арналған оптикалық дүзіліс, 6 – көріу айналары; 7 – жоғары вольтли кабель; 8 – вакуум системасы, 9 – басқару пульті; 10 – стенд; 11 – жоғары кернеу беріуші дүзіліс; 12 – линзалар үшін электр тоғы дерегі.



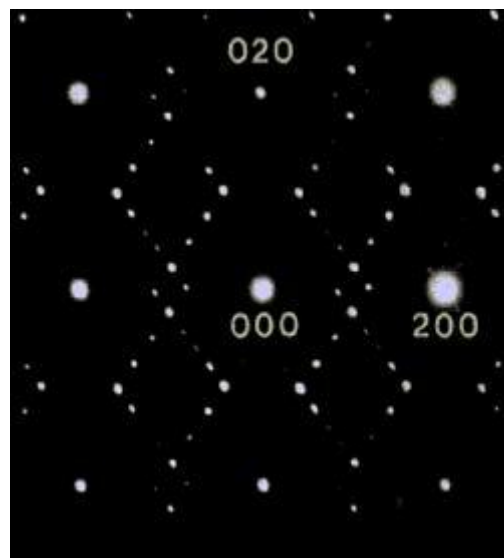
2.2.21-сұрет. Электрон микроскопының оптикалық схемасы: 1 – катод; 2 – фокуслаушы цилиндр, 3 – электронлар тезлеткіші; 4 – бірінші конденсор (қысқа фокуслы); 5 – екінші конденсор (узын фокуслы); 6 – изертлениуші жуқа объект; 7 – объективтің апертуралық диафрагмасы; 8 – объектив; 9-11 арқалы проекциялық линзалар белгіленген; 12 – катодолюминесцентли экран.

Электрон микроскопының жәрдеминде алынған суреттердің екеуі 2.2.22-сұретте келтірілген. 2.2.22-а сурет жоғары ажырата алушылық қабілетке ие электрон микроскопының жәрдеминде алынған алтын менен марганецтің қуймасының жуқа фольгасынан алынған. 2.2.22-б сурет изертленип атырған үлгінің электронлар толқынындағы дифракциялық суреті – электронограммасы

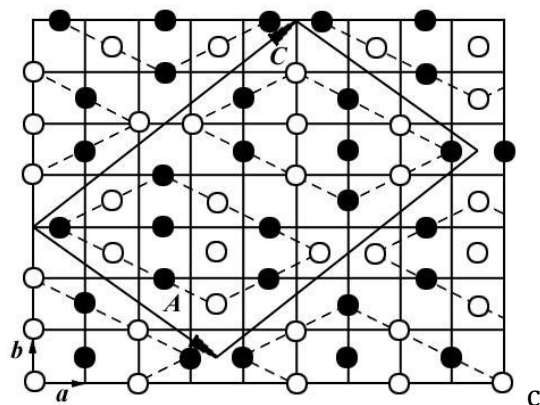
болып табылады. Усы эксперименталлық мағлыұматлар жәрдеминде алынған қуймадағы атомлардың жайласуы схемасы 2.22 с сұуретте келтирилген.



a)



b)



c)

2.2.22-а сұурет. Электрон микроскопында алтын-марганец қуймасының жуқа фольгасынан изертлеуде алынған нәтийжелер.

а) электрон-микроскопиялық сұурет,  
б) изертленген кристаллық ұлгидеги электронлардың дифракциясы (электронограмма),

с) электрон микроскопында алынған эксперименталлық мағлыұматлар тийкарында дүзилген алтын-марганец қуймасының структурасының модели.

## 2-3-1. Толқын функциясы

**Квантлық механикада бөлекшелердің қозғалысын тәрийиплеудің өзгешеліктері.** Де Бройль гипотезасына сәйкес қозғалыушы бөлекше толқынлық қасиетке ийе болады. Егер бөлекше қозғалатуғын областтың өлшемлери  $L$  электронлардың де Бройль толқын узынлығы  $\lambda_{db}$  шамасы менен барабар ямаса оннан үлкен болса толқынлық қасиетти есапқа алмауға болмайды. Таллаулар  $\lambda_{db} \geq L$  шәртиниң массасы киши хәм атомлардың сызықлы өлшемлериндей областта қозғалатуғын бөлекшелер ушын орынланатуғынлығын көрсетеди. Бундай бөлекшелерди ендигиден былай микробөлекшелер деп атаймыз

Толқынлық қасиетке ийе бөлекшелердің қозғалысын тәрийиплеу ушын классикалық механиканың усылларынан пайдаланыуға болмайды. Классикалық механикада бөлекшениң халы оның қәлеген уақыт мометиндеги кеңисликлик координаталарын хәм тезлигин (импульсин) бериу менен анықланады. Бундай жағдайда бөлекшениң қозғалысы уақыттың өтиуи менен оның механикалық халының өзгериуи менен байланысly. Ал халлардың үзликсиз өзгериси бөлекшениң белгили бир траектория бойынша қозғалысына сәйкес келеди.

Микробөлекшеде толқынлық қасиеттиң болыуы оның координатасы менен импульсин бир уақытта дәл анықлауға мүмкиншилик бермейди. Бул Гейзенбергтің (2.16)-анықсызлық қатнастарынан келип шығады. Демек микробөлекшениң механикалық халы классикалық усыл менен берилмейди екен, ал оның қозғалысының траекториясы хаққындағы көз-қарасты микробөлекшелердің қозғалыстарын тәрийиплеу ушын қолланыу принципаллық жақтан мүмкин емес.

Бөлекшениң қозғалысын тәрийиплеудің классикалық усылынан бас тартыу көпшиликте гүмән пайда етеди. Қозғалыс траекториясыз бөлекше кеңисликте қалай қозғалады? Мүмкин бизлер траекторияны тәрийиплеу ушын биз бөлекшениң қозғалысы менен байланысly болған базы бир параметрлерди өлшей алмайтуғын шығармыз? Бирақ олай емес екенлигин және бир атап өтемиз. Физиканың рауажланыу тарийхы бөлекшениң қозғалысын тәрийиплейтуғын классикалық усылдан, бөлекшениң траекториясы хаққындағы көз-қараслардан бас тартқан жағдайда ғана толқынлық қасиетлерге ийе микробөлекшелердің қозғалысын дурыс хәм толық тәрийиплеуге болатуғынлығын хәм усындай бөлекшелердің қатнасыуында өткерилетуғын экспериментлердің нәтийжелерин болжап айтыуға болатуғынлығын көрсетеди.

Толқынлық қасиетлерге ийе болған бөлекшелердің қозғалысын тәрийиплейтуғын теорияны дәслепки уақытлары толқын механикасы деп атады. Бирақ бул атама көп узамай квантлық механика атамасы менен алмастырылды.

Квантлық механика классикалық механикаға салыстырғанда улыумарақ физикалық теория болып табылады. Бирақ  $\lambda_{db} \ll L$  шәрти орынланғанда бөлекшениң толқынлық қасиетлерин есапқа алмауға болады хәм сонлықтан квантлық механиканың беретуғын нәтийжелери классикалық механиканың беретуғын нәтийжелери менен бирдей болады. Бундай жағдайды физика илиминдеги сәйкеслик принципи талап етеди. Бул принцип бойынша қәлеген жаңа теория (жаңа теория ески теорияға салыстырғанда әдетте улыуамалығы басым болады) өзинен бурынғы теорияны бийкарламауы керек, ал жаңа теория бурынғы теорияны өзиниң дара жағдайы сыпатында қамтып алыуы шәрт. Сонлықтан ракетаның космослық кеңисликтеги қозғалысын, суу асты кемесиниң океан тереңликлериндеги орын алмастырыуларын, хәтте электронның электронлық-нур трубкасындағы қозғалысын тәрийиплеу ушын физика барлық уақытта денелердің қозғалысын тәрийиплеудің классикалық усылларынан пайдаланады. Тек

кеңісликлик масштаблар жүдә киши жағдайларда ғана (яғный атом, атом ядросы масштабларында ғана) квантлық механика микродүньяның қубылыстарын тәрийиплеу ушын бирден бир мүмкин болған аппаратқа айланады. Квантлық эффектлер атом системасы қәддинде көринетуғын болса да, бул эффектлер көплеген ҳазирги заман дүзилислериниң ҳәм әсбап-үскенелериниң жұмысларының өзгешеликлерин анықлайды ҳәм алдыңғы технологиялардың тийкарында жатады.

Квантлық механикадағы бөлекшелердиң қозғалысын тәрийиплеуге өтиу алдында теорияның тийкарында жататуғын бир қатар постулатларды келтирип шығарамыз.

Квантлық механиканың биринши постулаты: Квантлық механикада бөлекшениң ҳалы  $\Psi(x, y, z, t)$  толқын функциясының жәрдемінде бериледи. Бул функция кеңісликлик координаталардың ҳәм ўақыттың функциясы болып табылады.

Квантлық механикада ислеп шығылған аппарат  $\Psi$  функциясы үстинде базы бир операциялар ислеудиң нәтийжесинде микробөлекшениң қозғалысы ҳаққындағы толық информацияларды береді.

Толқын функциясының итималлық мәниси. Қәлеген ўақыт моментиндеги бөлекшениң координаталары менен импульсин көрсетиу ҳәм траекториядан бас тартыу арқалы микробөлекшениң ҳалын бериудиң мүмкин емеслиги микробөлекшениң қозғалысын итималлық бойынша тәрийиплеу усылына алып келеди. Бул жағдай квантлық механикада бөлекшениң ҳалын анықлағанда берилген ўақыт моментинде кеңісликтиң ҳәр қыйлы ноқатларында усы бөлекшени табыудың итималлығын анықлау усылын көрсетиудиң керек екенлигин аңғартады.

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

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

Демек

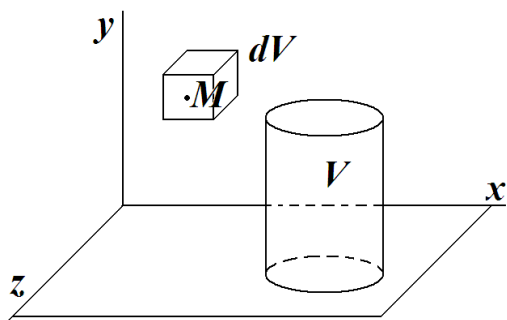
$$w = \frac{dP}{dV} = |\Psi|^2. \quad (2.3.1)$$

Улыўма жағдайда толқын функциясының комплексли функция болатуғынлығын атап өтемиз. Сонлықтан бул функция ҳақыйқый ҳәм жормал бөлимлерден турады. Усы жағдайға байланысly физикалық мәниске функцияның өзи емес, ал ҳақыйқый шама болған оның модулиниң квадраты  $|\Psi|^2$  ийе. Толқын функциясының модулиниң квадратының мәнисин табыу ушын көпшилик жағдайларда толқын функциясы  $\Psi$  ди оның комплексли түйинлес функциясы болған  $\Psi^*$  функциясына көбейтеди.  $\Psi \cdot \Psi^* = |\Psi|^2$  теңлигиниң дурьс екенлигин комплексли санлар теориясында дәлилленеди.

(2.3.12)-формулань түрлендирип

$$dP = |\Psi|^2 dV = \Psi \cdot \Psi^* dV \quad (2.3.2)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада  $dP$  арқалы бөлекшениң берилген квантлық ҳал ушын усы бөлекшени базы бир ўақыт моментинде  $M$  ноқатын қоршап турған  $dV$  элементар көлеминде табыудың итималлығы белгиленген (2.3.1-сүүрет).



3.1-сүрөт.

Бөлекшенин берилген кванттык хал ушун оны базы бир ўақыт моментинде  $M$  нокатын қоршап турған  $dV$  элементар көлеминде табыўдың итималлығын есаплаў ушын арналған схема.

Бөлекшенин қозғалысын тәрийиплеў ушын  $N$  өлшемли ( $N = 1, 2$  ҳәм  $3$ )  $\mathbb{R}^N$  Евклид кеңислигинен пайдаланамыз. Бундай кеңисликти физикада әдетте конфигурациялық кеңислик деп атайды ҳәм бул кеңисликте туўры мүйешли координаталар системасын алады. Бундай координаталар системасында бөлекшенин  $x$  көшери бағытындағы бир өшемли қозғалысы ушын ( $N = 1$ ) "көлем" элементи  $dV = dx$ , тегисликтеги еки өлшемли ( $N = 2$ ) қозғалыс ушын  $dV = dx dy$ , ал үш өлшемли ( $N = 3$ ) қозғалыс ушын  $dV = dx dy dz$ . Кеңисликлик симметрияға ийе мәселелерди шешкенде цилиндрлик  $(r, \varphi, z)$ , сфералық  $(r, \theta, \varphi)$  координаталар системаларын пайдаланыў мүмкин. Бундай жағдайларда толқын функциясын усы координаталар менен ўақыттың функциясы сыпатында анықлайды.

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

$$P = \int_V dP = \int_V w dV$$

болғанлықтан (2.3.1) менен (2.3.2) ден

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

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

теңликлеринин орынланатуғынлығы келип шығады. (2.3.1) – (2.3.3) формулалар кванттык механикадағы толқын функциясының итималлық ямаса статистикалық мәнисинин бар екенлигин анықлайды.

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

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\Psi|^2 dV = 1 \text{ ямаса } \int_{\mathbb{R}^N} \Psi \cdot \Psi^* dV \quad (2.3.4)$$

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

Квантлық механиканың базы бир мәселелерінде (2.3.4) типіндеги нормировка шәрти орынланбауы мүмкін. Бундай мәселелерде бөлекше шексизликтен қозғалып келеди хәм шексизлікке алыслап кетеди. Сонлықтан бундай мәселелерде толқын функциясының модулинің квадраты шексизлікте нолге умтылмайды хәм (2.3.4) шәртиндеги интеграл тарқалыушы интегралға айланады. Бундай толқын функциясына мысал ретінде еркин қозғалыушы денениң квантлық халды тәрийиплейтуғын толқын функциясы де Бройльдың тегис толқыны болған толқын функциясын көрсетиуіге болады. Нормировкаланбаған толқын функцияларын пайдаланғанда толқын функциясының модулинің квадратының мәніси әхмийетли емес, ал кеңисликтің еки ноқатындағы модуллеринің квадратының қатнасы әхмийетли. Бул қатнас кеңисликтің усы еки ноқатлары қасында табыудың итималлықтарының қатнасын береді. Нормировкаланбаған толқын функциясы қатнасуатын мәселелерде нормировка шәртинің базы бир аналогын итималлықтың ағысының тығызлығын пайдаланыу жолы менен алыу мүмкін. Бул физикалық шаманың анықламасы хәм оның толқын функциясы менен байланысы 3.3-параграфта келтирилген.

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

1. Толқын функциясының шеклилик шәрти. Толқын функциясы (2.3.3)- хәм (2.3.4)-интеграллар тарқалыушы интеграллар болып кететуғындай шексиз үлкен мәніслерди қабыл ете алмайды. Солай етип бул шәрт толқын функциясының квадратлық интегралланатуғын функция болыуын талап етеді. Дара жағдайларда нормировкаланған толқын функциялары қатнасуатын мәселелерде толқын функциясының модулинің квадраты шексизлікте нолге умтылыуы керек.

2. Толқын функциясының бир мәніслиги шәрти. Толқын функциясы координаталар менен ўақыттың бир мәнісли функциясы болыуы керек. Себеби бөлекшени табыудың итималлығының тығызлығы хәр бир ноқатта бир мәнісли анықланыуы لازым. Цилиндрлик хәм сфералық координаталар системаларын пайдаланатуғын мәселелерде бир мәніслик шәрти мүйешлик параметрлер бойынша толқын функцияларының дәуирлилигинің пайда болыуына алып келеді.

3. Толқын функциясының үзликсизлик принципі. Ыақыттың қәлеген моментінде толқын функциясы кеңисликлік координаталардың үзликсиз функциясының болыуы шәрт. Соның менен бирге толқын функцияларының дара тууындылары болған

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \frac{\partial \Psi}{\partial y} \text{ хәм } \frac{\partial \Psi}{\partial z}$$

функцияларында үзликсиз болыуы керек. Толқын функцияларының бул дара тууындылары тек сийрек ушырасатуғын идеалластырылған күш майданлары бар мәселелерде кеңисликтің айырым ноқатларында үзіліске түседі. Бул ноқатларда бөлекше қозғалатуғын күш майданын тәрийиплейуши потенциал функция екинши әулад үзіліске түседі.

**Квантлық халлардың суперпозиция принципі.** Квантлық халлардың ең әхмийетли қәсийетлеринің бирин келтирип шығарамыз. Бул жағдай толқын функциясы ушын Шредингер теңлемесинің сызықлылығынан келип шығады (бул хәққында толығырақ келеси параграфта айтылады). Теңлемениң сызықлылығынан егер бөлекше  $\Psi_1$  толқын функциясы жәрдемінде тәрийипленетуғын квантлық

халда хәм  $\Psi_2$  толқын функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын басқа квантлық халда да туратуғын болса, онда бөлекшениң

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 \quad (2.3.5)$$

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

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

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2 + \dots + C_N \Psi_N = \sum_{n=1}^M C_n \Psi_n \quad (2.3.6)$$

толқын функциясы менен тәрийипленетуғын квантлық халдың да болатуғынлығы ҳаққында айтыўға болады деген сөз. Бундай халда  $C_n$  коэффициентиниң модулиниң квадраты  $\Psi$  толқын функциясы менен анықланатуғын система үстинде өлшеўлер өткергенде оның  $\Psi_n$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын халда турғанлығының итималлығына тең. Сонлықтан нормировкаланған толқын функциялары ушын

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

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

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

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

Бундай бөлекше бир ўақытта  $x$  көшери бағытында оң тәрепке қарай да, шеп тәрепке қарай да қозғалады. Классикалық механика бойынша бундай аўхалдың орын алыўы ҳеш бир ақылға сәйкес келмейди. Квантлық механика көз-қараслары бойынша бул жағдай мынаны аңғартады: Усындай халда туратуғын бөлекшениң қозғалыс бағытын анықлаў бойынша тәжирийбелер сериясын өткергенде  $x$  көшери бағытында оң тәрепке қарай қозғалатуғынлығы ҳаққында  $P_1 \sim |C_1|^2$  итималлығы менен, ал қарама-қарсы бағытта қозғалатуғынлығын ҳаққында  $P_2 \sim |C_2|^2$  итималлығы менен жуўап алынады.

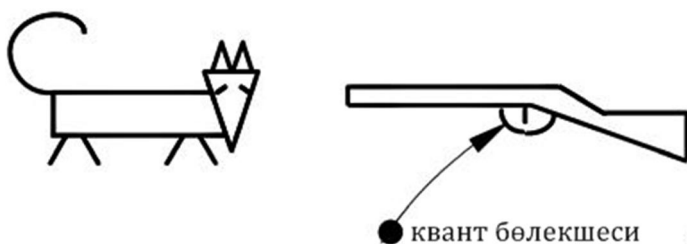
Тап сол сыяқлы  $x$  хәм  $y$  бағытларында тарқалатуғын де Бройль толқынларының суперпозициясы болатуғын халда

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

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

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

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



3.2-сүўрет.  
Шредингер пышығын  
демонстрациялайтуғын схема.

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

Мейли бизиң бөлекшемиз  $\Psi_1$  толқын функциясы жәрдеминде тәрийипленетуғын биринши квантлық ҳалда турған хәм бул ҳалда мылтықтың қулағының қасында бөлекшени табыўдың итималлығы нолге тең болсын. Демек микробөлекше биринши ҳалда турған болса, онда қутыдағы пышық тири деген сөз.

$\Psi_2$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын бөлекшениң басқа да ҳалы болсын. Бул квантлық ҳалда мылтықтың қулағының қасында микробөлекшени



табыұдың итималлығы жоқары, дерлик бирге тең болсын. Бундай жағдайда пышықтың тири калмайтұғынлығы таң қаларлық емес.

Қаллардың суперпозициясы принципи бойынша микробөлекше биринши хәм еккинши қаллардың суперпозициясынан туратуғын хәм

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_2 \quad (2.3.7)$$

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

**3.1-мәселе.** Сфералық симметрияға ийе болған күш майданында орайдын  $r$  қашықлығында қозғалатуғын микробөлекшениң толқын функциясы

$$\Psi(r, t) = A \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{i}{t}Et\right)$$

түрине ийе болсын. Бул аңтападағы  $a$  арқалы мәниси белгили болған турақлы, ал  $E$  арқалы бөлекшениң ўақыттан ғәрезсиз болған толық энергиясы бегиленген

Анықлаұ керек: а) Турақлы көбейтиұши  $A$  ның мәнисин;

б) бөлекшениң күш майданының орайынан ең итимал қашықлығын.

**Шешими:** а)  $A$  турақлысының мәнисин (2.3.4)-толқын функциясының нормировка шәртинен анықлаймыз. Буның ушын элеметар көлем ушын радиуслары  $r$  хәм  $r + dr$  болған шар қатламының көлемин аламыз. Бундай қатамның көлеми  $dV = 4\pi r^2 dr$  шамасына тең. Нормировка шәрти

$$\int_0^{\infty} |\Psi(r, t)|^2 4\pi r^2 dr = 4\pi A^2 \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) r^2 dr = 1$$

аңлатпасына алып келеди. Интегралды есаплап

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

нормировка шәртинен

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

екенлигине ийе боламыз.

б) Күшлик орайдан бөлекшениң ең итимал қашықтығын биз орайдын  $r$  қашықтығында, яғнай бөлип алынған шар қатламында бөлекшени табыўдың итималлығын есаплаў арқалы табамыз. Бул итималлық былайынша есапланады

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

Бул жерде

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

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

**3.2-мәселе.**  $t = 0$  ўақыт моментинде  $x$  көшери бойлап қозғалыўшы бөлекшениң квантлық ҳалды тәрийиплейтуғын толқын функциясы

$$\Psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2} + ibx\right)$$

түрине ийе болсын. Бул аңлатпада  $A$ ,  $a$  ҳәм  $b$  шамалары белгили болған ҳақыйқый константалар.

а) толқын функциясының ҳақыйқый бөлиминиң ҳәм б) толқын функциясының модулиниң квадратының  $x$  координатасынан ғәрезлигин анықлаңыз.

Шешими: а) Толқын функциясының ҳақыйқый бөлимин табамыз:

$$\operatorname{Re}\Psi = \operatorname{Re}\left\{A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) \exp(i \cdot b \cdot x)\right\} = A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) \operatorname{Re}\{\exp(i \cdot b \cdot x)\}.$$

Комплексли санлар теориясындағы Эйлер формуласынан

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

екенлигине ийе боламыз.

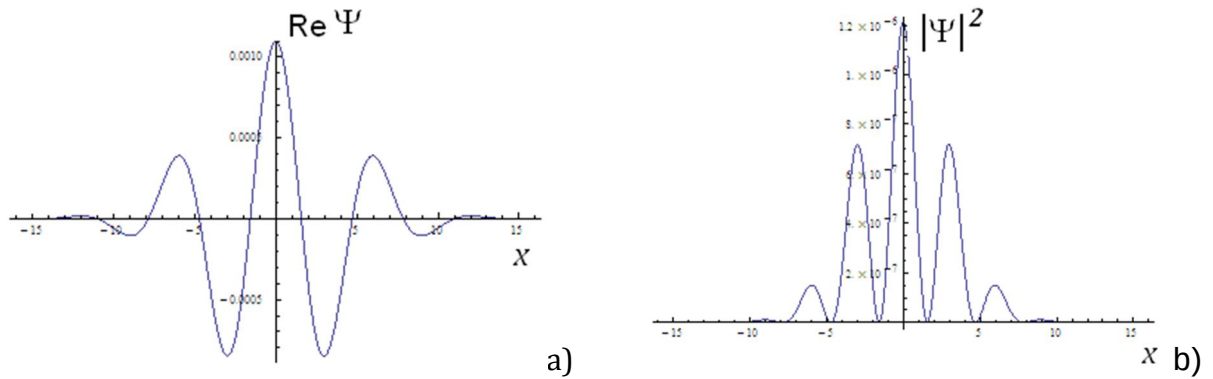
б) Толқын функциясының модулиниң квадратын анықлаймыз:

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

Буннан

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

Табылған ғәрезликлер сапалық түрде 3.3-сүүретте келтирилген.



3.3-сүрет. 3/2-мәселедегі толқын функциясының нақты бөлігінің (а) және модуль квадратының  $x$  координатасынан тәуелділігі (б).

## 2-3-2. Шредингер теңлемесі

Бөлекше қозғалатынын күш майданының структурасын биле отырып бұл бөлекшенің квант-механикалық халын тәрійіптеуі толқын функциясын қалай анықтауға болады? Ұақыттың басланғыш моментіндегі толқын функциясын биліп толқын функциясының ұақытқа байланысты эволюциясын қалай сыпаттауға болады? Бұл сорауларға жуапты 1926-жылы Э.Шредингер тәрәпинен келтирилип шығарылған релятивистік емес квантлық механиканың тийкаргы теңлемесі береді. Бундай теңлемени Шредингер теңлемесі деп атаймыз.

Біз қазір скаляр потенциал майдандағы қозғалыушы массасы  $m$  болған бөлекшени қараймыз. Оның потенциал функциясын  $U(x, y, z, t)$  арқалы белгілейміз. Бундай жағдайда бөлекше  $F = -gradU$  күш майданында қозғалады және сәйкес толқын функциясы  $\Psi$  арқалы белгілейміз. Шешімі усы толқын функциясы болған Шредингер теңлемесі былайынша жазылады:

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

Бұл теңлемеді  $i = \sqrt{-1}$  арқалы жормал бірлік белгіленген, ал  $\hbar$  арқалы рационаластырылған Планк турақлысы белгіленген.  $\Delta$  стандарт символы Лапластың дифференциал операторын аңлатады. Бұл оператор декарт координаталар системасында былайынша жазылады

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.3.9)$$

Улыма жағдайда квантлық механиканың мәселелерінде дара тууындылы (2.3.8)-дифференциал теңлемі толқын функциясына қойылатуын базы бір басланғыш және шегаралық шәрттерді есапқа алған халда шешіледі.

Басланғыш шәрт  $t = 0$  ұақыт моментіндегі толқын функциясының мәнісін береді.

Шегаралық шәрттер толқын функциясының регулярлығының нәтижесі болып табылады. Бұл жағдай толқын функциясының үзліксиздігін, бір мәнісіндігін және басқа да бір қатар қасиеттерін тәмійінлейді. Бұл шәрттер областлардың шегаралары үшін келтирилип шығарылады. Бұл шегараларда потенциал функция  $U$  бірінші және екінші әулад үзілістерге түседі. Усы шәрттерге толқын

функциясының кеңістіктің шексіз алыстағы нүктелеріндегі толқын функцияларына қойылатуғын шарттар де кіреді. Бул (2.3.4) нормировкасының орынланыуын тәмілінлейді.

Ньютонның классикалық механикасының ызамалары, термодинамиканың ызамалары, Максвеллдің электродинамика теңлемелері хәм басқа да тийкарғы физикалық теңлемелер сыяқлы Шредингер теңлемесі де басқа қатнастардан келтирилип шығарылмайды. Оны базы бир илимий қағыйда, ызама сыпатында қабыл етиу керек. Оның дурыслығы Шредингер теңлемесі жәрдемінде орынланған есаплаулардың эксперименттер нәтижелері менен сәйкес келиуінен дәлилленеді. Бундай сәйкестің бар екенлігі келиушілік атомлық хәм ядролық физиканың көпшілік қубылыстары ушын анық дәлилленді. Шредингер теңлемесі жәрдемінде болжап айтылған квантлық эффекттер оғада көп техникалық дүзилістердің, әсбаптардың, технологиялардың тийкарында жатыр.

Шредингер теңлемесі де Бройль гипотезасы хәм оннан келип шығатуғын материяның корпускулалық-толқынлық дуализмі менен тығыз байланысly. Қақыйқатында да тиккелей тексеріудің жәрдемінде кинетикалық энергиясы  $E = \frac{p^2}{2m}$  болған бөлекше күш майданлары жоқ орында  $x$  бағытында қозғалғанда сәйкес

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

түрінде жазылатуғын Шредингер теңлемесінің шешімі

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

толқын функциясы болып табылады. Бундай толқын функциясы тегіс де Бройль толқынына сәйкес келеді. Бул факт Шредингер теңлемесі толқын теңлемесі болып табылады деп тастыйықлауға мүмкіншілік береді. Бул теңлеменің сызықты екенлігі квантлық халлардың суперпозиция принципіне мууапық келеді. Ал суперпозиция принципінің физикалық мазмұны алдыңғы параграфта талқыланды.

Жоқарыда атап өтилгеніндей квантлық механика өз ишине шектегі жағдайлар ушын классикалық механиканы да алады. Демек сәйкес шектегі өтиулерді квантлық механиканың тийкарғы теңлемесінде де әмелге асыруға болады деген сөз. Усындай шеклік түрлендіріулердің нәтижесінде Шредингер теңлемесі классикалық механиканың тийкарғы теңлемесіне өтиуі керек.

Квантлық механика менен классикалық механика арасындағы байланыс толқынлық хәм геометриялық оптика арасындағы байланысқа ұқсас. Екеуінде де бир теориядан екінші теорияға өтиу салыстырмалы үлкен толқын ұзынлықтарынан салыстырмалы киші толқын ұзынлықтарына өтиуге сәйкес келеді. Бундай жағдайларда күш майданының ямаса орталықтың оптикалық қасиетлерінің характерлі областының сызықты өлшемлері  $L$  менен салыстырыу керек болады. Бул жуумақты төмендегі кесте иллюстрациялайды.

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

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

Бөлекше үшін де Бройль толқынының толқын ұзындығының киши екенлигин тәсир кванты  $\hbar$  ты мәселениң базы бир параметри деп есаплап, усы параметр бойынша  $\hbar \rightarrow 0$  өтиуі менен тәмийинлеуге болады. Ҳақыйқатында да (2.2) де Бройль формуласында  $\hbar \rightarrow 0$  шегинде де Бройль толқынының ұзындығы да нолге умтылады. Сонлықтан квантлық механиканың классикалық механикаға өтиуі үшін шеклик өтиу (2.3.8) Шредингер теңлемесинде  $\hbar \rightarrow 0$  шәрти орынланғанда әмелге асады. Бундай жағдайда Шредингер теңлемеси классикалық физиканың Гамильтон-Якоби теңлемесине айланады.

Шредингер теңлемесин шешиудің нәтижесинде табылған толқын функцияларының жәрдемінде тек релятивистлик емес бөлекшелердің квантлық ҳалларды тәрийиплеу мүмкин. Релятивистлик емес бөлекшелер жақтылықтың вакуумдағы тезлигинен көп киши тезликлер менен қозғалады. Квантлық механикада бөлекшелердің релятивистлик тезликлерине өтиу 1928-жылы П.Дирак тәрәпинен әмелге асырылды. Бундай өтиу релятивистлик бөлекшелердің квантлық ҳалларды сыпатлау үшін принципаллық жақтан пүткиллей жаңа физикалық идеяларды талап етти. Нәтижеде релятивистлик квантлық механика деп аталатуғын теория дәретилди. Бул теорияның тийкарында Дирак теңлемеси турады. Бул теңлеме Шредингер теңлемесин арнаўлы салыстырмалық теориясы тийкарында улыўмаластырады ҳәм ҳәзирги ўақытлары квантлық электродинамикада ҳәм элементар бөлекшелер физикасында (жоқары энергиялар физикасында) кеңнен қолланылады.

### 2-3-3. Итималлықлар ағысының тығызлығы векторы

Шредингер теңлемеси кеңислик пенен ўақыттың симметриясын есапқа алады. Сонлықтан квантлық механиканың тийкарғы теңлемесинен массаның сақланыуы ызамы, зарядтың сақланыуы ызамы, басқа да сақланыу ызамын алыуға болады.

Бул жағдайды көрсетиу үшін  $S$  бети менен шегараланған  $V$  көлемин айырып аламыз.  $\Psi$  толқын функциясы менен берилген квантлық ҳалда бул көлемде бөлекшени табыудың итималлығы

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

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

$$\frac{dP}{dt} = I. \quad (2.3.12)$$

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

$$I = - \oint_S \vec{j} \cdot d\vec{S}. \quad (2.3.13)$$

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

(2.3.12)- хәм (2.3.13)-аңлатпалардан итималлықтың өзгеріуі тезлиги ушын

$$\frac{dP}{dt} = - \oint_S \vec{j} \cdot d\vec{s} \quad (2.3.14)$$

интеграллық қатнасын аламыз.

$$\oint_S \vec{j} \cdot d\vec{s} = \int_V \text{div } \vec{j} dV$$

Остроградский теоремасы бойынша (2.3.14)-аңлатпа төмендегидей түрге түрлендириледі

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

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

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

(2.3.16)-аңлатпадағы биринши қосылыўшыны былайынша жазамыз

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

Толқын функциясы  $\Psi$

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

Шредингер теңлемесинің шешими болғанлықтан, онда толқын функциясының комплексли түйинлеси  $\Psi^*$

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

теңлемесін қанаатландырады. (2.3.19)-аңлатпаны  $\Psi^*$  ге, ал (2.3.19)-аңлатпаны  $\Psi$  ге көбейткеннен кейін бірінші аңлатпадан екіншісін алып таслаймыз. Бундай жағдайда

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

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

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

аңлатпасын келтиріп шығарамыз. Енді векторлық анализдің белгилі болған формулаларын пайдаланып арқалы төмендегідей екі теңлікті жазамыз:

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

хәм

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

Буннан

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

қатнасын аламыз хәм бул қатнастың жәрдемінде (2.3.21) ди

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

теңлемесіне түрлендіреміз. (2.3.22) менен (2.3.16) ны бір бири менен салыстырып итималлықтың ағысы үшін төмендегідей аңлатпа аламыз

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

$\operatorname{grad} \Psi \equiv \nabla \Psi$  екенлігін есепке алып (2.3.23) ти компакттырақ (жыйнақтырақ) формада жазамыз

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

Ағыстың тығызлығы нолге тең болмаған жағдайлардағы квантлық механиканың мәселелерінде бөлекшени тап сондай бөлекшелердің ағысында қозғалады хәм олар (бөлекшелер) бір биринен ғәрезсіз күш майданы менен

тәсирлеседи деп есаплайға болады. Усындай интерпретацияны пайдаланғанда  $\vec{j}$  векторының ағысын усы векторға перпендикуляр бир бирлик беттен ўақыт бирлигинде өтип атырған бөлекшелердің ағысы деп қараў мүмкиншилигине ийе боламыз..

Бундай жағдайда (2.3.14)- хәм (2.3.16)-аңлатпаларды интеграллық хәм дифференциаллық формаларда жазылған бөлекшелер санының сақланыў нызамы сыпатында қараўға болады.

Егер (2.3.16)-аңлатпаны бөлекшениң массасы  $m$  ге көбейтсек, онда  $\rho_m = m|\Psi|^2$  хәм  $\vec{j}_m = m\vec{j}$  шамалары кеңисликте қозғалатуғын заттың массасының тығызлығы хәм ағысы мазмунуна ийе болады. Ал (2.3.16)-теңлемениң өзи болса тутас денелер механикасындағы үзликсизлик теңлемесине өтеди

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

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда қозғалыўшы бөлекшелер өзи менен  $q$  зарядын да алып жүре алады (егер бөлекшелер зарядланған болса). Онда  $\rho_q = q|\Psi|^2$  хәм  $\vec{j}_q = q\vec{j}$  шамаларын зарядтың көлемлик тығызлығы хәм электр тоғының тығызлығы деп есаплай аламыз. Сонлықтан (2.3.16)-аңлатпаның еки тәрәпин де  $q$  шамасына көбейтип электродинамикадағы белгили болған дифференциал формадағы электр зарядының сақланыў нызамын аламыз

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

### 3.3-мәселе. Квантлық ҳал

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

тегис де Бройль толқыны менен тәрийипленетуғын еркин қозғалыўшы бөлекше ҳаққындағы мәселедеги итималлықтың ағысының тығызлығын есаплаңыз.

Шешими: Комплекс түйинлес толқын функциясы

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

болған толқын функциясын жазып градиентлердің нолге тең емес қураўшыларын табамыз

$$(\text{grad} \Psi)_x = \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \Psi,$$

$$(\text{grad} \Psi^*)_x = \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar} \Psi^*.$$

Енди (2.3.23)-формула бойынша итималлықтың ағысы тығызлығының  $x$  қураўшысын табамыз

$$j_x = \frac{p}{m} \Psi \Psi^* = \frac{p}{m} A^2 = \frac{k\hbar}{m} A^2.$$



Бул аңлатпада  $k = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda_{ab}}$  арқалы толқынлық сан белгиленген.

Солай етип қозғалыушы еркін бөлекше үшін итималлықтың ағысының тығызлығы де Бройль толқынының амплитудасына пропорционал екен. Буннан еркін бөлекшениң толқын функциясын  $j_x = 1$  теңлигиниң жәрдемінде нормировкалауға болатуғынлығы келип шығады. Бундай жағдайда де Бройль толқынының толқын ұзынлығы

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

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

### 2-3-4. Физикалық шамаларды операторлардың жәрдемінде беріу

Толқын функциясын билиу арқалы биз қарап атырған квантлық қалда тұрған бөлекшеге сәйкес келиуші қандай да бир физикалық шаманы өлшегенде алынатуғын нәтижени қалай болжауға болады деген сорау келип тууады. Қозғалыушы бөлекшелер менен байланысly болған физикалық шамалар қаққында информациялар алыу үшін квантлық механикада арнаулы математикалық аппарат ислеп шығылған. Бул математикалық аппарат физикалық шамалардың операторлары хәм олардың толқын функцияларына тәсириниң нәтижелери қаққындағы илимниң нәтижелерин пайдаланады.

М.Борнның, П.Дирактың хәм басқа да физиклердің жұмысларында квантлық механиканың екінши постулаты дөретилди. Бул постулат бойынша хәр бир физикалық шамаға усы физикалық шаманың белгилі бир операторы сәйкес келеди. Усындай жағдайда квантлық механикадағы операторлар арасындағы қатнастар классикалық механикадағы сәйкес физикалық шамалар арасындағы қатнастардай болады.

Бул постулаттың мәнісин ашып көрсетиу үшін бар қатар түсиниклер береміз. Оператор дегенимиз математикалық қағыйда болып табылады хәм бул қағыйда бойынша бир функцияны екінши функцияға түрлендиреміз. Операторды беріу дегенимиз сондай түрлендириудің рецептін беріу дегенди аңлатады. Бундай түрлендириулер қатарына дәслепки функцияны санға ямаса басқа функцияға көбейтиуди, функцияны дифференциаллауди, функцияның аргументлериниң орынларын алмастырып қойыуды хәм басқа да түрлендириулер киреди.

Квантлық механикада сәйкес оператордың белгиси ретінде хәриптиң үстине " $\hat{\phantom{x}}$ " белгисін қояды. Мысалы  $\hat{x}$  арқалы  $x$  координатасының операторы,  $\hat{p}_x$  арқалы  $x$  көшеріндеги импульс операторының проекциясы,  $\hat{U}$  арқалы потенциал энергия операторы белгиленген. Оператор усы оператордан кейін жазылған функцияға тәсир етеди деп есапланады. Бундай функциялар сыпатында квантлық механикада толқын функциялары түсиниледи. Бундай жағдайда  $\hat{a}\Psi = \hat{b}\Psi$  теңлиги үшін операторлардың  $\hat{a} = \hat{b}$  теңлиги де орынланады.

Квантлық механикадағы тийкарғы физикалық шамалардың операторларын анықлаймыз.

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

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

Жазыўдың символлық операторлық формасында бул операцияларды жазыўдың формасы

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

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

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

формуласының жәрдемінде жазыўымыз мумкин.

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

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

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

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (2.3.31)$$

Бул формулада

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

Классикалық механикадағы

$$p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z$$

аңлатпаны пайдаланып импульс квадраты операторы болған операторды

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

түрінде анықлаймыз. Лаплас символын пайдаланып (2.3.32)-операторды компакттырақ түрде көширип жазамыз

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

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

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

Бул аңлатпаларды импульс моментинің проекциялары операторларын анықлайтуғын операторлық аңлатпаларға айландырамыз

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

Импульс моментинің квадраты операторы

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

қағыйдасы бойынша дүзе аламыз.

Квантлық механиканың сфералық симметрияға ийе болған мәселелерін  $r$ ,  $\theta$  хәм  $\varphi$  сфералық координаталар системасында шешкен қолайлы. Декарт координаталарынан сфералық координаталар системасына өткенде өзгеріушілерди алмастырыудың әпиұайы болған алмастырыу формулаларынан пайдаланады:  $x = r \sin\theta \cos\varphi$ ,  $y = r \sin\theta \sin\varphi$ ,  $z = r \cos\theta$ . Бундай жағдайда (2.3.34)-хәм (2.3.35)-формуларды

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

түріндегі формулаларға түрлендириу мүмкін. Бул жерде

$$\Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

арқалы сфералық координаталар системасындағы Лаплас операторының мүйешлик бөлімі белгіленген.

**4. Энергиялар операторы.** Бөлекшениң кинетикалық энергиясы менен оның импульсинің квадратын байланыстыратуғын классикалық формула былайынша жазылады

$$E_K = \frac{p^2}{2m}.$$

Бул формула сәйкес операторлар арасындағы қатнасты жазыуға мүмкіншілік береді. Сонлықтан

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

Егер бөлекше стационар күш майданында қозғалатуғын болса, онда оның потенциал энергиясы  $U = U(x, y, z)$  кеңістіктің қалған нүктесінде анықталған. Сонлықтан  $\hat{U}$  арқылы белгіленетүгін потенциал энергияның операторы  $U$  функциясына көбейту операторы сыпатында анықланады, яғни

$$\hat{U} \cdot \Psi = U \cdot \Psi \text{ ямаса } \hat{U} = U. \quad (2.3.38)$$

Классикалық механикада бөлекшенің толық энергиясы оның кинетикалық хәм потенциал энергияларының қосындысына тең болғанлықтан квантлық механикада толық энергия операторы  $\hat{H}$  потенциал хәм кинетикалық энергиялар операторларының суммасы түрінде анықланады. Сонлықтан

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

(2.3.33)-формула бойынша импульстің квадраты үшін аңлатпаны ашып толық энергия операторын

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

түрінде жаза аламыз.

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

$\hat{H}$  гамильтониан квантлық механиканың тийкарғы операторы деп аталады. Себеби бөлекшеге тәсір ететүгін күш майданының айқын түрін сайлап алыу арқылы биз математика тилинде квантлық системаның өзине тән барлық өзгешеліктерін жаза аламыз. Сонлықтан релятивистік емес квантлық механиканың тийкарғы теңлемесі болған Шредингер теңлемесін де

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (2.3.40)$$

операторлық түрде жазыу мүмкін.

Квантлық механикадағы операторлық усулдың физикалық мазмұны квант-механикалық оператордың мүмкін болған түрлеріне базис бір шеклерді қояды. Мейли  $f$  физикалық шамасының операторы  $\hat{F}$  болсын. Бундай жағдайда қалған  $\Psi_1$  хәм  $\Psi_2$  функциялары менен ықтыярлы турақлылар  $C_1$  менен  $C_2$  үшін

$$\hat{F}(C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2) = C_1 \hat{F} \Psi_1 + C_2 \hat{F} \Psi_2 \quad (2.3.41)$$

теңлигинің орынланыуы керек. Усындай қасиетке ийе операторларды сызықты операторлар деп атаймыз. Физикалық шамалардың операторларының сызықтылық қасиеті квантлық қалалардың суперпозиция принципі менен тығыз байланысқан. Теорияда сызықты операторларды пайдаланғанда ғана суперпозиция принципі бузылмайды.

Физикалық шаманың операторы хызметін тек сызықты өзі өзіне түйінлес оператор атқара алады. Бундай операторды Эрмит операторы деп атаймыз. Тек усындай операторға ғана хақықый (комплексі емес) физикалық шама сәйкес келеді. Өзі өзіне түйінлес оператор деп өзінің түйінлес операторы менен сәйкес келетуғын операторға айтамыз. Бундай жағдайда ықтыярлы  $\Psi_1$  хәм  $\Psi_2$  функциялары ушын төмендегидей интеграллық теңлік орынланады

$$\int_{\mathfrak{R}} \Psi_1^* (\hat{F} \Psi_2) dV = \int_{\mathfrak{R}} \Psi_2^* (\hat{F} \Psi_1) dV. \quad (2.3.42)$$

Солай етип квантлық механикада хәр бир физикалық шамаға белгили бир сызықты өзі өзіне түйінлес оператор жазылады екен. Тиккелей тексерип көриу жолы менен жоқарыда келтирилген операторлардың барлығының да сондай қасиетлерге ийе екенлигине көз жеткеріуе болады.

Квантлық механикада қолланылатуғын тийкарғы операторларды төмендегидей кесте түрінде береміз.

| Физикалық шама                                                            |                                                                                                                      | Оператор                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|---------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Координата                                                                | $\mathbf{r}$<br>$x, y, z$                                                                                            | $\mathbf{r}$<br>$x, y, z$                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Импульс                                                                   | $\mathbf{p}$<br>$p_x, p_y, p_z$                                                                                      | $-i\hbar \nabla$<br>$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$                                                                                                                                                                                                                                |
| Импульстің орбиталық моменти (мүйешлік момент, импульс моменти операторы) | $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$<br>$L_x = yp_z - zp_y,$<br>$L_y = zp_x - xp_z,$<br>$L_z = xp_y - yp_x$ | $\hat{L} = -i\hbar [\mathbf{r} \times \nabla]$<br>$\hat{L}_x = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right),$<br>$\hat{L}_y = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right),$<br>$\hat{L}_z = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$ |
| Толық энергия                                                             | $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r})$                                                                        | $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z)$                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |

**3.4-мәселе.**  $\hat{p}_x$  импульс проекциясы операторының өзі өзіне түйінлес оператор екенлигинің шәртин тексерип көриңіз.

**Шешими:** Нормировкаланған хәм стандарт шәртлерди (мысал шексизліктеги шәртлерди) қанаатландыратуғын  $\Psi_1(x, t)$  хәм  $\Psi_2(x, t)$  толқын функцияларын қараймыз. Стандарт шәртлерге сәйкес  $\Psi_{1,2}(\infty, t) = \Psi_{1,2}(x, t)$ . Бөлеклерге бөлип интеграллаудың жәрдемінде

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

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

екенлигине ийе боламыз. Солай етип биз

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

екенлигин дәлилледик. (2.3.42)-аңлатпаға сәйкес бір өлшемлі жағдай үшін ( $N = 1$ ) бұл жағдай  $\hat{p}_x$  операторының өзі өзіне түйінлесігін дәлиллейді. Тап усындай жоллар менен  $N = 2$  және  $N = 3$  болған жағдай үшін да оператордың өзі өзіне түйінлес екенлігін дәлиллейге болады.

## 2-3-5. Операторлардың меншикли функциялары және меншикли мәніслері

**Меншикли функциялардың тийкаргы қасиеттері.** Квантлық механикада берілген  $f$  физикалық шамасы қабыл ететұғын мәніслерді оның меншикли мәніслері деп атайды. Бұндай мәніслерді табыу  $\hat{F}$  операторының меншикли функциялары менен сәйкес меншикли мәніслерін табыу бойынша математикалық мәселе менен тығыз байланысқан.

Егер оператор менен базис бір функцияға тәсір еткенде тек санға көбейтілген сол функция келип шығатуғын болса, яғни

$$\hat{F}\Psi = f\Psi \quad (2.3.43)$$

теңлігі орынланса бұндай функцияны  $\hat{F}$  операторының меншикли функциясы, ал  $f$  санын оператордың меншикли мәнісі деп атайды.

Квантлық механикадағы операторлар бір емес, ал көп санлы меншикли функцияларға және сол функцияларға сәйкес меншикли мәніслерге ийе бола алады. Меншикли мәніслердің жыйнағын оператордың спектрі деп атайды.  $\hat{F}$  операторының спектрін дискрет деп атайды, егер спектр  $n = 1, 2, 3, \dots$  үшін  $f_n$  мәніслерінің көпшілігінен тұратұғын болса. Бұл мәніслер  $\Psi_n$  меншикли функциялардың жыйнағына сәйкес келеді, ал  $\Psi_n$  меншикли функциялары болса

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

түріндегі теңлемелердің шешімлері болып табылады. Оператордың меншикли мәніслерінің спектрі үздіксіз де болуы мүмкін. Бұндай жағдайда (2.3.13)-аңлатпада  $f$  тиіс мүмкін болған барлық мәніслері қатнасады.  $f$  тиіс мүмкін болған мәніслері бір қатар интервалдарда жататуғын жағдай үшін спектр айырым жолақтардан да тұруы мүмкін.

Бір қатар жағдайларда  $\hat{F}$  операторының бір меншикли мәнісіне бір емес, ал бір неше  $\Psi_{n1}, \Psi_{n2}, \Psi_{n3}, \dots, \Psi_{nk}$  меншикли мәніслерінің сәйкес келуі мүмкін. Бұндай жағдайларды айныған жағдайлар (вырожденные случаи), ал  $k$  санын айныу саны деп атайды.

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

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

$$\hat{F}\Psi = f\Psi \quad (2.3.45)$$

теңлемесиниң шешими болып табылады. Бул жерде комплексли түйинлес операциясын орышлап

$$(\hat{F}\Psi)^* = f^*\Psi^* \quad (2.3.46)$$

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

$$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* (\hat{F}\Psi)^* dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi (\hat{F}\Psi)^* dV \quad (2.3.47)$$

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

$$f \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* \Psi dV = f^* \int_{\mathbb{R}^N} \Psi \Psi^* dV \quad (2.3.48)$$

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

Квантлық механикадағы операторлардың меншикли функцияларының әхмийетли болған ортогоналлық қасиетин дәлиллеймиз. Егер өзи өзине түйинлес болған  $\hat{F}$  операторының ҳәр қыйлы мәнистеги  $f_n$  ҳәм  $f_m$  меншикли мәнислерине сәйкес келиўши еки меншикли функциялары  $\Psi_n$  ҳәм  $\Psi_m$  болса, онда олар төмендеги

$$\hat{F}\Psi_n = f_n\Psi_n \quad \text{хәм} \quad \hat{F}\Psi_m = f_m\Psi_m \quad (2.3.49)$$

теңлемелердиң шешими болады.

$\Psi_n$  ҳәм  $\Psi_m$  функциялары ушын жазылған  $\hat{F}$  операторының өзи өзине түйинлес болыўының (2.3.42)-шәрти енди

$$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* (\hat{F}\Psi_m) dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_m (\hat{F}\Psi_n)^* dV \quad (2.3.50)$$

түрине енди. (2.3.49) ды есапқа алсақ бул аңлатпадан

$$f_m \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = f_n^* \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_m \Psi_n^* dV \quad (2.3.51)$$

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

$$(f_m - f_n) \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = 0 \quad (2.3.52)$$

түрине енеди. Егер  $n \neq m$  болса, онда  $f_m \neq f_n$  хәм (2.3.52)-аңлатпадан хәр қыйлы меншикли мәнислерге сәйкес келиўши меншикли функциялардың ортогоналлық шәртин аламыз

$$\text{Егер } n \neq m \text{ болса } \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = 0. \quad (2.3.53)$$

Егер  $\Psi_n$  хәм  $\Psi_m$  функциялары бирге нормировкаланған болса, онда (2.3.53) ортогоналлық шәртин ортонормировкаланғанлық шәрти сыпатында жаза аламыз

$$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm}. \quad (2.3.54)$$

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

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

$$\Psi = \sum_n C_n \Psi_n. \quad (2.3.55)$$

Бул қатардың коэффициентлерин (улыўма жағдайларда бул коэффициентлер комплексли шама болып табылады) меншикли функциялардың ортогоналлығын пайдаланып табыўға болады. Хәқыйқатында да, (2.3.55)-қатарды  $\Psi_m^*$  ге көбейтеміз хәм барлық кеңіслик бойынша интеграллаймыз. Бундай жағдайда суммалаў менен интеграллаўдың тәртибин өзгертип

$$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi_m^* \Psi dV = \sum_n C_n \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_m^* \Psi_n = \sum_n C_n \delta_{nm} = C_m \quad (2.3.56)$$

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



$$C_n = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi dV. \quad (2.3.57)$$

Егер  $\hat{F}$  операторы  $F$  интервалы ишіндегі  $f$  меншикли мәніслеринің үзлексіз спектрине ийе болса, онда қалеген толқын функциясын меншикли функцияларға жайыу интеграллауға өтеди. Сонлықтан

$$\Psi = \int_F C_f \Psi_f df \quad (2.3.58)$$

формуласына ийе боламыз хәм бундағы  $C_f$  коэффициентинің үзлексіз көплиги

$$C_f = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_f^* \Psi dV \quad (2.3.59)$$

формуласының жәрдемінде анықланады.

**Квантлық механиканың операторларының меншикли мәніслеринің спектри.** Квантлық механикадағы операторлардың меншикли мәніслерин табыу проблемаларының физикалық мазмұны 3.6-параграфта қарап өтиледі. Бул математикалық мәселедей болып көринетуғын мәселенің квантлық механикадағы оғада үлкен әхмийетин айқын көрсетеді.

Операторлардың меншикли мәніслеринің спектрин табыу хәққындағы мәселелердің бир қатарын қарап өтеміз.

1. Координата операторы  $x$  тың меншикли мәніслеринің спектри үзлексіз спектр болып табылады. Хәқыйқатында да бул оператордың толқын функциясына тәсири оны координатаға көбейтиуге алып келеді. Сонлықтан  $\hat{x}$  операторының меншикли мәнісин табыу бойынша мәселенің -теңлемеси

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

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

2. Импульстин проекциясы болған  $\hat{p}_x$  операторының спектри де үзлексіз спектр болып табылады. Хәқыйқатында да бундай оператордың меншикли мәніслерин табыу мәселесин шешиу

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

биринши тәртипли дифференциал теңлемесин шешиуге алып келинеді. Буннан  $p_x$  тың мүмкин болған мәніслерин табыу мүмкин.

$p_x$  тың барлық мәніслери ушын (2.3.61)-теңлемениң шешими

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

регулярлықтың стандарт шартларын қанаатландыратуғын  $\Psi$  функциясын анықлайды. Сонлықтан  $\hat{p}_x$  операторының меншикли мәніслери  $-\infty$  тен  $+\infty$  ке шекемги үзликсиз спектрди пайда етеди. Тап усындай жуўмақларды  $\hat{p}_y$  хәм  $\hat{p}_z$  операторлары ушын да аламыз.

3. Дискрет спектрге мысал ретинде  $\hat{L}_z$  импульс моментиниң проекциясы операторының меншикли мәніслериниң спектрин көрсетиў мүмкин. Бул спектрди анықлаў ушын сфералық координаталар системасының поляр координатасын  $z$  көшери бағытында жайластырамыз. Бундай жағдайда (3.36)-аңлатпа тийкарында  $\hat{L}_z$  операторының меншикли мәніслерин табыў ушын

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = L_z \Psi \quad (2.3.63)$$

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

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

$\hat{L}_z$  операторының меншикли функциялары бир мәнісли функциялар болып табылады. Ал мүйешлик координата  $\varphi$  цикллық өзгериўши болғанлықтан, онда бир мәніслик шәрти оның дәўирлилик шәрतिине алып келинеди:  $\Psi(\varphi + 2\pi) = \Psi(\varphi)$ . (2.3.64)-функция ушын бул шәрттти орышлап

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

теңлигин аламыз ямаса

$$\exp\left(i \frac{L_z 2\pi}{\hbar}\right) = 1.$$

Бул теңдиктен

$$\frac{L_z 2\pi}{\hbar} = 2\pi m$$

екенлиги келип шығады. Бул аңлатпада  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

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

$$L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.3.65)$$

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

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

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

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

нормировка шәртинен сайлап алынған.

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

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

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

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

түрине ийе болады. Бул теңлемени шешиў ушын ҳәзирги заман программалаў тиллерин (мысалы Mathematica 8.0 тилин) ямаса арнаўлы функцияларды пайдаланыў менен әмелге асырылады. Мәселени аналитикалық шешиўдиң жоллары теориялық ямаса математикалық физика курсларында келтириледи. Биз ҳәзир бул шешимниң қәсийетлериниң қысқа дизимин келтириў менен шекленемиз.

Ең дәслеп  $\hat{L}^2$  операторының меншикли мәнислериниң спектриниң дискрет спектр екенлигин атап өтемиз. Басқа сөз бенен айтқанда (2.3.67)-теңleme тек

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

мәнислери ушын шешимлерге ийе болады. Бул формулада  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

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

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

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

түрине ийе болады.  $Y_{l,m}$  функциялары арнаўлы функциялар классына киреди ҳәм сфералық ямаса шарлық функциялар деп аталады. Егер сол сфералық функцияларды

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{l,m}^* Y_{l,m} \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

шәрти менен нормировкаласақ, онда анық түрде биринши бир неше нормировкаланған функцияларды жазыўымызға болады

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

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

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

5. Толық энергия операторы  $\hat{H}$  операторының меншикли мәнісілерінің спектрін табыу қаққындағы мәселе бөлекше қозғалатуғын потенциаллық күш майданының айқын түрін беріу менен әмелге асырылады. Бул мәселелердің бір нешеуі 4-бапта стационар квантлық қалларды таллаудың барысында шешіледі. Бул мәселелерде Шредингер теңлемесінің шешімі  $\hat{H}$  гамильтонианның меншикли функциялары менен меншикли мәнісілерін табыуға алып келинеді.

## 2-3-6. Квантлық механикадағы өлшеулер проблемасы

Квантлық системадағы бөлекшенің қалын тәрийиплейтуғын толқын функциясы белгили болсын. Бул системадағы  $f$  физикалық шамасын өлшеудің нәтижесі қандай болады? Бул физикалық шаманы анықлау үшін орынланған эксперименттің нәтижелерін қалайынша есаплау хәм болжау керек?

Физикалық шамаларды өлшеулердің нәтижелері қаққындағы бул сорауға квантлық механиканың үшінші постулаты жууап береді. Бул постулат қалеген квантлық системада  $f$  физикалық шаманы өлшеулерде сәйкес оператор  $\hat{F}$  тың тек меншикли мәнісілері ғана алынады деп тастыйықлайды.

Квантлық механиканың бул әхмийетли нәтижесі теория менен усы теорияны эксперименталлық тексеріп көріудің мүмкиншиликлери қаққындағы байланысты орнатады. Теорияның математикалық аппараты физикалық шамалар үшін операторларды пайдаланып хәр қыйлы квантлық системалардағы физикалық шамаларды өлшеулердің нәтижелерін болжауға мүмкиншилик береді. Теорияның бул жуумақларын экспериментте тексеріп көріу мүмкин.

Мысалы, жоқарыдағы параграфта табылған  $\hat{L}^2$  хәм  $\hat{L}_z$  операторларының меншикли мәнісілерінің спектрін пайдаланып атомлардың орбиталық импульс моментін өлшегенде

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

жыйнағының ишинен  $L = \sqrt{L^2}$  мәнісі алынады деп тастыйықлауға болады. Ал магнит майданының жәрдемінде белгиленген  $z$  бағытындағы импульс моментлерінің проекцияларының мәнісілерін өлшегенде

$$L_z = m\hbar, \quad m = 1, 2, \dots$$

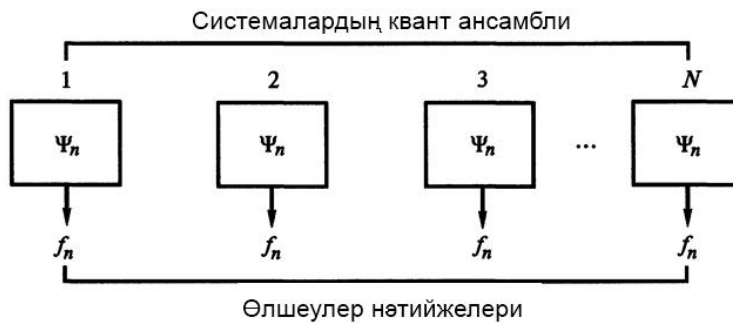
шамаларына тең мәнісілер алынады.

Водород атомы қаққындағы квантлық механиканың мәселелерін дәл шешкенде (бул мәселе 5-бапта қарап өтиледі) тап усындай жуумақларға алып келинеді. Бундай жағдайдағы атомдағы  $l$  хәм  $m$  пүтин мәнісілеріне ийе параметрлер атомдағы электронның қалын характерлейтуғын квантлық санлар деп аталады.

$\Psi$  толқын функциясының жәрдемінде тәрийипленетуғын квантлық қалда сәйкес келетуғын  $f$  физикалық шамасы өлшенетуғын болсын. Ондай жағдайда  $\hat{F}$  операторының қайсы  $f_n$  мәнісі өлшеудің нәтижесінде алынады деген сорау

бериледи. Бул сораўға берилетуғын жуўап барлық квантлық механиканың тийкарында итималлық интерпретациясының жататуғынлығын тастыйықлайды

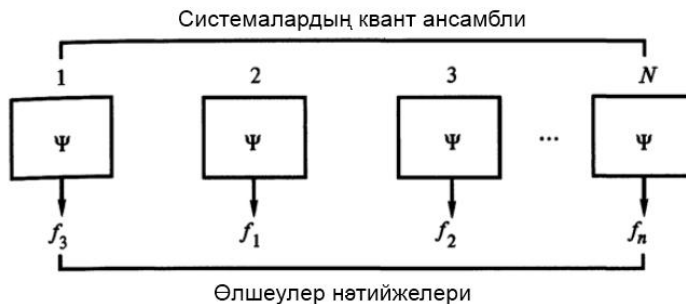
Егер квантлық системадағы бөлекшениң халы  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли функциясы болған  $\Psi_n$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын болса, онда бул квантлық халда  $f$  физикалық шамасы  $f_n$  шамасына тең белгили мәниске ийе болады. Бул жағдай мынаны аңлатады: Егер бирдей болған көп санлы квантлық системалар берилген болса (2.3.4-сүүрет) хәм бул системаларда бир биринен парқы жоқ бөлекшелер бирдей квантлық халларда туратуғын болса (системалардың усындай жыйнағын квантлық ансамбл деп атаймыз), онда бул ансамблдің хәр қыйлы системаларында  $f$  физикалық шамасын өлшегенде биз барлық ўақытта да  $f_n$  шамасын аламыз.



2.3.4-сүүрет.

Системалардың  
квантлық ансамбли.

Бирақ толқын функциясы  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли функциясы емес жағдайдың да орын алыўы мүмкин. Бундай квантлық халда  $f$  физикалық шамасы белгили бир физикалық мәниске ийе бола алмайды. Бул жағдай квантлық механиканың үшінши постулатына сәйкес квантлық ансамбли системасында  $f$  шамасының өлшеў тек  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли мәнислерин береді дегенди аңлатады. Бирақ квантлық ансамблинің хәр қыйлы системаларда өткерилген өлшеўлер хәр қыйлы болған  $f_1, f_2, \dots, f_n$  мәнислерин береді (2.3.5-сүүрет). Бундай жағдайда  $f_n$  шамасының хәр бир мәниси белгили бир  $P_n$  итималлығы менен табылады.



2.3.5-сүүрет.

Квантлық ансамблнің  
хәр қыйлы  
системаларда  
өткерилген өлшеўлер  
хәр қыйлы болған  $f_1,$   
 $f_2, \dots, f_n$  мәнислерин  
береди

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

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

(2.3.71)-аңлатпадағы  $P_n$  итималлығын есаплау үшін  $\Psi$  толқын функциясын  $\hat{F}$  операторының меншикли мәнислери болған  $\Psi_n$  толық системасы бойынша қатарға жайыу керек болады, яғный былайынша көрсетиледи

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

Усындай етип қатарға жайыудың барлық уақытта да мүмкин екенлигин хәм бул қатардағы коэффициентлердің төмендеги формулалар бойынша есапланатуғынлығын еске саламыз:

$$C_n = \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* \Psi dV. \quad (2.3.73)$$

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

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

(2.3.73)-аңлатпаны есапқа алған халда (2.3.74)-аңлатпаны есаплаулар жүргизиу үшін қолайлы болған түрге алып келемиз. Бундай жағдайда

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

$\hat{F}$  операторының меншикли функциялары менен меншикли мәнислериниң қәсийетлери бойынша

$$f_n \Psi_n = \hat{F} \Psi_n.$$

Сонлықтан

$$\langle f \rangle = \sum_n C_n \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi^* (\hat{F} \Psi_n) dV = \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi^* \left( \sum_n C_n \hat{F} \Psi_n \right) dV.$$

$\hat{F}$  операторының сызықты екенлигин есапқа алсақ

$$\sum_n C_n \hat{F} \Psi_n = \hat{F} \left( \sum_n C_n \Psi_n \right) = \hat{F} \Psi$$

теңлигине ийе боламыз. Сонлықтан квантлық системаның  $\Psi$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын халында  $f$  физикалық шамасының орташа мәнисин есаплау үшін

$$\langle f \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* (\hat{F} \Psi) dV \quad (2.3.75)$$

түріндегі формуланы аламыз.

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

Егер  $\Psi = \Psi_n$  теңлигі орынланатуғын болса, онда (2.3.75)-формуладан

$$\langle f \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* (\hat{F} \Psi) dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* f_n \Psi_n dV = f_n \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_n dV = f_n$$

аңлатпасының келип шығатуғынлығын атап өтемиз.

Солай етип квантлық механика квантлық объекттің анаў ямаса мынаў қәсийетинің потенциаллық мүмкиншиликлерине санлық түрде бақа бере алады екен. Квантлық механикада анаў ямаса мынаў өлшеў нәтийжесинің итималлығы тек белгили бир объектке тийисли болса да, бул итималлықтың санлық мәнісин экспериментте анықлаў ушын бирдей бөлекшелерден туратуғын коллективте (ансамблде) өлшеў жумысларын көп рет қайталаў керек болады.

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

**3.5-мәселе.**  $\hat{F}$  операторы ўақыттан ғәрезсиз деп есаплап  $f$  физикалық шамасының орташа мәнісинің ўақыттың өтиўи менен өзгериўинің тезлигин анықлаңыз.

**Шешими:**

$$\langle f \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* (\hat{F} \Psi) dV$$

болғанлықтан

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \int_{\mathbb{R}^N} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} (\hat{F} \Psi) dV + \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* \left( \hat{F} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dV.$$

$\Psi$  функциясының эволюциясы Шредингер теңлемесинің жәрдеминде табылатуғынлығын есапқа алып

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad \text{хәм} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \hat{H} \Psi^*$$

екенлигин табамыз. Сонлықтан

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[ \int_{\mathbb{R}^N} (\hat{H} \Psi^*) (\hat{F} \Psi) dV - \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* (\hat{F} \hat{H} \Psi) dV \right].$$

$\hat{\Phi}$  хәм  $\hat{H}$  операторлары Эрмит операторлары болғанлықтан жоқарыдағы теңликтің оң тәрәпиндеги биринши интегралды

$$\int_{\mathbb{R}^N} (\hat{H}\Psi^*)(\hat{\Phi}\Psi) dV = \int_{\mathbb{R}^N} (\hat{\Phi}\Psi)(\hat{H}\Psi)^* dV = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*(\hat{H}\hat{\Phi}\Psi) dV$$

түрге түрлендириў мүмкин. Демек

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* [(\hat{H}\hat{\Phi} - \hat{\Phi}\hat{H})\Psi] dV.$$

Бул аңлатпа физикалық шаманың орташа мәнисинен алынған ўақыт бойынша туўындыны базы бир оператордың орташа мәниси сыпатында көрсетиўдиң мүмкин екенлиги көрсетеди. Бул операторды  $\hat{\Phi}$  операторынан ўақыт бойынша алынған туўынды деп атайды. Солай етип ўақыттан айқын түрде ғәрезли емес  $\hat{\Phi}$  операторы ушын

$$\frac{d\hat{\Phi}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\Phi} - \hat{\Phi}\hat{H}) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Phi}].$$

Буннан мынадай әҳмийетли жуўмақ келип шығады: Егер базы бир  $f$  физикалық шаманың операторы  $\hat{\Phi}$  ўақыттан айқын түрде ғәрезсиз хәм гамильтониан  $\hat{H}$  пенен коммутацияланатуғын болса, онда бул физикалық шаманың орташа мәниси  $\langle f \rangle$  ўақытқа байланыссы өзгермейди. Классикалық механикадағы сыяқлы квантлық механикада да бундай шамаларды хәр қыйлы сақланыў нызамларына сәйкес келиўши қозғалыс интеграллары деп атайды.

## 2-3-7. Хәр қыйлы физикалық шамаларды бир ўақытта өлшеў

Базы бир квантлық системадағы хәр қыйлы болған еки физикалық шаманы бир ўақытта дәл өлшеў квантлық механикадағы әҳмийетли мәселелердиң бири болып табылады. Усындай бақланатуғын шамалар сыпатында бөлекшениң координатасы менен импульсиниң проекциясын, бөлекшениң потенциал энергиясы менен кинетикалық энергиясын, импульс моментиниң хәр қыйлы болған еки қураўшысын хәм басқаларды көрсетиў мүмкин. Усындай еки шаманы бир ўақытта дәл өлшеў бойынша экспериментти шөлкемлестириў мүмкин бе?

Егер эксперименттиң барысында бирдей системалардан туратуғын ансамблде базы бир физикалық шаманы хәр бир өлшегенде бирдей нәтийже беретугын болса, онда усы физикалық шаманың мәниси дәл өлшенди деп айтамыз. Бундай жағдайда өлшеўлер барысында әсбаплар да, экспериментатор да ҳеш қандай қәтеге жол қоймады деп есаплаймыз

Биз жоқарыдағы параграфта әҳмийетли жуўмақ шығарып едик. Оның мәнисин былайынша түсіндириемиз: қандай да бир  $a$  физикалық шамасының мәниси тек сондай системада дәл өлшенеди, егер бул система сәйкес  $\hat{A}$  операторының меншикли функцияларының бирейи болған толқын функциясы менен тәрийипленетуғын болса. Бирақ соны да есапқа алыў керек, усндай квантлық халда басқа бир  $b$  физикалық шамасының дәл өлшениўи шәрт емес. Усы  $a$  хәм  $b$



физикалық шамаларының мәнісін бір уақытта дәл өлшеу мүмкін, егер оларға сәйкес келіуші  $\hat{A}$  және  $\hat{B}$  операторлары улыұмалық меншикли функциялар системасына ийе болатуғын болса.

Егер  $\hat{A}$  және  $\hat{B}$  операторлары улыұмалық меншикли функциялар системасына ийе болатуғын болса олар арасында базы бір коммутациялық қатнастардың орын алатуғынлығын және операторлардың толқын функциясына избе-из тәсир етиуінің нәтижесінің оларды пайдаланыудың избе-излігінен ғәрезсіз екенлігін көрсетеміз. Мейли  $\Psi_n$  функциялары ( $n = 1, 2, \dots$ )  $\hat{A}$  операторының да,  $\hat{B}$  операторының да меншикли функциялары болсын. Бундай жағдайда төмендегідей қатнастар орынланады:

$$\begin{aligned}\hat{A}(\hat{B}\Psi_n) &= \hat{A}(b_n\Psi_n) = b_n(\hat{A}\Psi_n) = b_na_n\Psi_n, \\ \hat{B}(\hat{A}\Psi_n) &= \hat{B}(a_n\Psi_n) = a_n(\hat{B}\Psi_n) = a_nb_n\Psi_n.\end{aligned}$$

Бул аңлатпаларда  $a_n$  және  $b_n$  арқалы  $\hat{A}$  және  $\hat{B}$  операторларының улыұмалық болған  $\Psi_n$  меншикли функциясына сәйкес келіуші меншикли мәнісін белгіленген. Буннан

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi_n) = \hat{B}(\hat{A}\Psi_n)$$

екенлігіне ийе боламыз. Қәлеген  $\Psi$  толқын функциясын оның меншикли функцияларының сызықлы комбинациясы  $\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$  түрінде көрсетиу мүмкін болғанлықтан квантлық механикадағы операторлардың сызықлылығынан қәлеген толқын функциясы үшін

$$\hat{A}(\hat{B}\Psi) = \hat{B}(\hat{A}\Psi) \quad (2.3.76)$$

коммутациялық қатнасының орынланатуғынлығы келип шығады. Бул коммутациялық қатнасты операторлық формада былайынша жазамыз:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \text{ ямаса } \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \quad (2.3.77)$$

$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$  айырмасын  $\hat{A}$  және  $\hat{B}$  операторларының коммутаторы деп атайды және әдетте

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2.3.78)$$

символы жәрдемінде белгілейди. Коммутаторы нолге тең еки операторды коммутацияланыушы операторлар деп атайды.

Солай етип биз квантлық механиканың әхмийетли жуұмағына келемиз:

Егер  $\hat{A}$  және  $\hat{B}$  операторлары коммутацияланыушы операторлар болып табылатуғын болса, онда оларға сәйкес келетуғын хәр қыйлы болған еки  $a$  және  $b$  физикалық шамалары бір уақытта дәл өлшенеди [яғный олар үшін (2.3.77)-қатнасының орынланыуы керек].

Демек операторлардың коммутацияланыушылығы оларға сәйкес келіуші физикалық шамаларды бір уақытта дәл өлшеудің мүмкін екенлігінің белгиси болып табылады екен. Ал керісінше, еки оператордың коммутацияланбауы оларға сәйкес келетуғын еки физикалық шаманы бір уақытта дәл өлшеудің мүмкін емес екенлігін аңғартады.

Усы қағыйда жәрдеминде бөлекшениң координатасы  $x$  пенен импульсиниң проекциясы болған  $p_x$  шамаларын бир ўақытта дәл өлшеўге болатуғынлығын ямаса болмайтуғынлығын тексерип көремиз. Буның ушын  $\hat{x}$  хәм  $\hat{p}_x$  операторларының коммутаторын табамыз:

$$\hat{x}(\hat{p}_x\Psi) - \hat{p}_x(\hat{x}\Psi) = x\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = i\hbar\Psi.$$

Бул

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \neq 0 \quad (2.3.79)$$

екенлигин көрсетеди. Сонлықтан бөлекшениң координатасы  $x$  пенен импульсиниң проекциясы болған  $p_x$  шамаларын бир ўақытта дәл өлшеўге болмайды. Бул жуўмақ Гейзенбергтиң анықсызлық принципи тийкарында исленген жуўмақ пенен тәр сәйкес келеди (2.3-параграф).

Кинетикалық энергия менен потенциал энергия операторларының коммутацияланбайтуғынлығына аңсат көз жеткерийге болады. Толық энергия операторы болған  $\hat{H}$  операторын

$$\hat{H} = \hat{E}_K + \hat{U}$$

кинетикалық  $\hat{E}_K$  хәм потенциал  $\hat{U}$  энергияларының қосындысынан туратуғын болса да квантлық системада системаның толық энергиясы кинетикалық хәм потенциал энергиялардың қосындысынан турады деп айтыўға болмайды. Бул жағдай қозғалыўшы бөлекшениң кинетикалық энергиясы менен потенциал энергиясын бир ўақытта дәл өлшеўге болмайды дегенди аңғартады. Сонлықтан бир ўақытта кинетикалық хәм потенциал энергияларын өлшеў жолы менен бөлекшениң толық энергиясын анықлаў мүмкин емес.

Квантлық механикада математикалық объектлерге хәм сол объектлер үстинен исленетуғын операцияларға физикалық объектлердиң хәм олардың қозғалысларын басқаратуғын физикалық нызамлардың сәйкес келетуғынлығын және бир рет атап өтемиз. Белгили физик-теоретик А.В.Фок өзиниң "Квантлық механиканың басламалары" китабында квантлық механиканың математикалық тилин физика тилине аўдарыўдың сөзлигин келтирди. Мысал ретинде сол сөзликтен төмендегидей ўзинди келтиремиз:

| Математика                                                                                     | Физика                                                                          |
|------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| $\Psi$ толқын функциясы                                                                        | Квантлық бөлекшениң халы.                                                       |
| $ \Psi ^2 = \Psi^*\Psi$ модулиниң квадраты                                                     | Бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы.                                     |
| $\int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*\Psi dV = 1$ нормировка шәрти                                       | Бөлекшениң ҳақыйқатында да бар екенлиги.                                        |
| Сызықлы эрмит операторы $\hat{F}$                                                              | $f$ физикалық шамасы.                                                           |
| $f_n$ меншикли мәнисине сәйкес келетуғын $\hat{F}$ операторының меншикли функциясы $\Psi_n$    | $f$ физикалық шамасының мәниси $f_n$ ге тең болатуғын квантлық бөлекшениң халы. |
| $\hat{F}$ операторының меншикли функциялары болған $\Psi_n$ толқын функциялары бойынша қатарға | $f$ шамасын өлшегенде $f_n$ мәнисиниң алыныў итималлығы.                        |

|                                                                                               |                                                                                                              |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| жайғандағы коэффициенттің модулинің квадраты                                                  |                                                                                                              |
| $\int_{\mathbb{R}^N} \Psi^* \hat{F} \Psi dV$ интегралы                                        | Берілген квантлық қалдағы $f$ физикалық шамасының орташа мәнісі (математикалық күтилиуі).                    |
| $\hat{A}$ хәм $\hat{B}$ операторларының коммутацияланыуы: $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ . | $a$ хәм $b$ физикалық шамаларын бир уақытта бақлаудың хәм дәл өлшеудің принципиаллық жақтан мүмкин екенлиги. |

Бул сөзликті еле де даўам ете беріуіге болады.

**3.6-мәселе.**  $\vec{F} = -\text{grad}U$  потенциал майданында қозғалатуғын массасы  $m$  болған бөлекше ушын тезлениу операторын анықлаңыз.

**Шешими:** Тезликтің векторлық операторы болған  $\hat{v}$  операторын импульс операторы арқалы аңлатуға болады

$$\hat{v} = \frac{\hat{p}}{m} = -\frac{i\hbar}{m} \nabla.$$

Сонлықтан 3.5-мәселени шешкенде табылған қағыйда бойынша бул оператордан уақыт бойынша тууынды алып тезлениудің векторлық операторын

$$\hat{a} = \frac{d\hat{v}}{dt} = \frac{1}{m} \frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{m\hbar} [\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H}] = \frac{1}{m} [\hat{H}\nabla - \nabla\hat{H}]$$

түрінде анықлаймыз. Гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}$$

түрінде жазылатуғын болғанлықтан, ал  $\Delta = \nabla^2$  хәм  $\nabla$  операторлары коммутацияланыушы операторлар болғанлықтан

$$\hat{a} = \frac{1}{m} [\hat{U}\nabla - \nabla\hat{U}]$$

теңлигине ийе боламыз. Алынған коммутатордың мәнісин түсіндириу ушын олардың толқын функциясы  $\Psi$  ге тәсирин көреміз. Бундай жағдайда

$$\hat{U}(\nabla\Psi) - \nabla(\hat{U}\Psi) = U(\nabla\Psi) - \nabla(U\Psi) = -(\nabla U)\Psi$$

аңлатпаларын аламыз. Бирақ потенциал майданда  $\vec{F} = \{\hat{F}_x, \hat{F}_y, \hat{F}_z\}$  күшинің векторлық операторы  $-\nabla U$  операторы болып табылады

$$\vec{F}\Psi = -(\nabla U)\Psi.$$

Сонлықтан, ең ақырғы формуланы аламыз

$$\hat{a} = \frac{\vec{F}}{m} \text{ ямаса } m\hat{a} = \vec{F}$$

Бул операторлық теңleme классикалық механикадағы Ньютонның теңлемесі түріне ийе хәм бул жағдай квантлық механикадағы операторлар арасындағы қатнастың классикалық механикадағы сәйкес физикалық шамалар арасындағы қатнастай болатуғынлығын тастыйықлайды.

**3.7-мәселе.** Импульс моментиниң операторлары  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  хәм  $\hat{L}_z$  арасында қандай коммутациялық қатнастардың бар екенлигин анықлаңыз.

**Шешими:**  $\hat{L}_x$  хәм  $\hat{L}_y$  операторларының коммутаторын қараймыз

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x.$$

$\hat{L}_x$  хәм  $\hat{L}_y$  операторларының анық түрін есапқа алып декарт координаталар системасында усы операторлардың коммутаторының толқын функциясына тәсирин анықлаймыз:

$$\begin{aligned} & \hat{L}_x(\hat{L}_y \Psi) - \hat{L}_y(\hat{L}_x \Psi) = \\ & -\hbar^2 \left\{ \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left( z \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) - \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left( y \frac{\partial \Psi}{\partial z} - z \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) \right\} = \\ & -\hbar^2 \left\{ y \frac{\partial \Psi}{\partial x} + yz \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial x} - yx \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - z^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial x} + zx \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial z} - zy \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial z} + \right. \\ & \left. + z^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} + xy \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - xz \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial y} \right\} = -\hbar^2 \left( y \frac{\partial \Psi}{\partial x} - x \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) = i\hbar \hat{L}_z \Psi. \end{aligned}$$

Солай етип биз

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z \neq 0$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлилледик.

Импульс моментиниң проекциялары операторларының басқа жуплары ушын да коммутациялық қатнастарды алыў мүмкин:

$$\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar \hat{L}_x$$

хәм

$$\hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_y.$$

Бул қатнастардың барлығы да импульс моментиниң барлық үш проекцияларының бир ўақытта анық мәнислерге ийе бола алмайтуғынлығын көрсетеди. Бул жағдай тек ғана үш проекциялардың барлығы да бир ўақытта нолге тең болғанда орынланбайды.

Импульс моментиниң квадраты операторы  $\hat{L}^2$  шамасының  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$  хәм  $\hat{L}_z$  операторлары менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиўге болады. Демек импульс моментиниң квадраты (ямаса импульс моментиниң модули) өзиниң бир проекциясы менен ғана бир ўақытта өлшениўи мүмкин.

Бул нәтийжелер квантлық механикада импульс моментиниң вектор түріндеги сўўретиниң жеткиликли дәрежеде шәртли характерге ийе екенлигин көрсетеди. Сонлықтан импульс мометлерин қосыўды (мысалы орбиталық хәм спинлик моментлерди қосыў) векторларды қосыў түрінде әмелге асырыўға болмайды.

## 2-3-8. Квантлық механиканың матрицалық формасы

Физикалық шамаларды толқын функциясына тәсір ететұғын Эрмит операторлары түрінде көрсетіу квантлық механиканың бірден бір математикалық аппараты емес. 1925-жылы В.Гейзенберг квантлық механикада хәр бир физикалық шама ушын базы бир матрицаны алыұды усынды (Э.Шредингердің квантлық механиканың тийкарғы теңлемесин 1926-жылы дүзгенлигин еске салып өтемиз). В.Гейзенберг усынған матрица шексиз көп қатарлардан хәм шексиз көп бағаналардан турады.

Квантлық механиканың усындай "матрицалық формасы" В.Гейзенбергтің, М.Борнның, П.Иорданның хәм басқа да физиклердің жумысларында бир биринен ғәрезсиз түрде раўажландырылды. Дәслепки дәуірлерде бул жумысларда хәтте толқынлық теория есапқа да алынбады. Тек кейинирек Э.Шредингер физикалық шамаларды операторлар хәм матрицалар түрінде аңлатыұдың бир бирине эквивалент екенлигин көрсетти. Соның менен бирге квантлық механиканың мәселелерин шешиұде қолланылатуғын бул еки усылдың математикалық аппаратлары пүткиллей хәр қыйлы.

Биз енди физикалық шамалардың операторлары менен матрицалары арасындағы байланысты салыстырмалы әпиұайы жағдайлар ушын табамыз. Биз қарап атырған квантлық механика операторларының спектри дискрет деп есаплаймыз. Төменде талланатуғын барлық қатнастар кейинирек П.Дирак тәрепинен үзликсиз спектрге ийе операторлар ушын да улыұмаластырылды.

Мейли квантлық механикадағы  $\hat{A}$  операторының  $\Psi_n$  меншикли функцияларының жыйнағы болсын ( $n = 1, 2, \dots$ ). Эрмит операторларының меншикли функцияларының қәсийетлеринен қәлеген  $\varphi$  регулярлық функциясын оператордың меншикли функциялары бойынша қатарға жайыұ мүмкин:

$$\varphi = \sum_n C_n \Psi_n. \quad (2.3.85)$$

Бул қатардың коэффицентлери төмендеги формула былайынша анықланады

$$C_n = \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* \varphi dV. \quad (2.3.86)$$

Егер енди  $\varphi$  функциясы сыпатында  $f$  физикалық шамасының  $\hat{F}$  операторының  $\Psi_m$  функциясына тәсиринің нәтийжеси болған  $\hat{F}\Psi_m$  функциясы алынатуғын болса, онда (2.3.85)- хәм (2.3.86)-аңлатпалардан

$$\hat{F}\Psi_m = \sum_n \Phi_{nm} \Psi_n \quad (2.3.87)$$

аңлатпасы келип шығады. Бул жерде

$$\Phi_{nm} = \int_{\mathfrak{R}^N} \Psi_n^* (\hat{F}\Psi_m) dV. \quad (2.3.88)$$

$\Phi_{nm}$  шамаларын базы бир шексиз матрицаның элементлери сыпатында қарауымызға болады

$$\Phi = \begin{vmatrix} \Phi_{11} & \Phi_{12} & \Phi_{13} & \dots & \Phi_{1m} & \dots \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} & \Phi_{23} & \dots & \Phi_{2m} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Phi_{n1} & \Phi_{n2} & \Phi_{n3} & \dots & \Phi_{nm} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}$$

Бул матрицаны  $\hat{A}$  операторының меншикли функциялары системасындағы (ямаса  $A$  түріндегі көрсетілуіндегі)  $\hat{\Phi}$  операторының (ямаса  $f$  физикалық шамасының) матрицасы деп атаймыз. Квантлық механикада координаталық, импульслик, энергиялық хәм басқа да көринислер (түрлері) қолланылады.

Хәр бир  $\Phi_{nm}$  шамасын  $m$  қалынан  $n$  қалына өтиуге сәйкес келетуғын матрицалық элемент деп атайды. Матрицалық элемент еки индекске ийе. Бириншиси  $n$  матрицаның қатарларының қатар саны, ал екиншиси  $m$  матрицаның бағаналарының қатар саны.

$\Phi_{nm}$  матрицалық элементлер ушын П.Дирак тәрәпинен усынылған белгилеулер де қолланылады

$$\langle n|\hat{\Phi}|m\rangle \text{ ямаса } \langle n|f|m\rangle \quad (2.3.89)$$

Бундай символды физикалық шама  $f$  тиң белгисинен (ямаса оған сәйкес келиуши  $\hat{\Phi}$  операторының белгисинен) хәм  $|m\rangle$  және  $\langle n|$  символларынан конструкцияланған символ деп қарауға болады. Хәр бир  $\Psi_m$  меншикли функциясын (басланғыш қалды) шексиз көп өлшемлі кеңисликтің базы бир  $|m\rangle$  базислик векторы елеслетеди. Бул векторды кет-вектор деп атайды.  $\Psi_n$  меншикли функциясын (ақырғы қал)  $\langle n|$  векторы елеслетеди хәм оны бра-вектор деп атайды. Бундай атамалар инглиз тилиндегі bracket (қаўсырма) сөзин пайда етиуши bras хәм ket сөзлеринен келип шыққан.

$\langle n|m\rangle$  белгилеуиниң  $\langle n|\hat{I}|m\rangle$  белгилеуиниң әпиуайыластырылған жазылыуы деп қарауға болады. Бул аңлатпада  $\hat{I}$  арқалы бирлик вектор белгиленген. Оның ушын  $\hat{I}\Psi_n = \Psi_n$ . Сонлықтан

$$\langle n|m\rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & \text{егер } n = m \text{ болса} \\ 0, & \text{егер } n \neq m \text{ болса.} \end{cases}$$

Солай етип  $A$ -елеслетиуде  $f$  физикалық шамасының  $\hat{\Phi}$  операторы  $\Phi$  матрицасының жәрдемінде анықланады екен. Бул матрицаның элементлери  $\Phi_{nm}$  (2.3.88)-аңлатпаның жәрдемінде анықланады. Усының менен бирге хәр бир Эрмит операторы ушын Эрмит матрицасы сәйкес келеди. Бундай матрицаның элементлери ушын  $\Phi_{nm} = \Phi_{nm}^*$  теңлиги орынлы болады.

Гейзенберг матрицасы үстинен исленетуғын базы бир алгебралық операцияларды анықлаймыз:

1. Матрицаларды қосыу. Егер  $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$  болса, онда  $C = A + B$  матрицасының матрицалық элементлери ушын

$$C_{nm} = A_{nm} + B_{nm}$$

теңлиги орынланады.

2. Матрицаларды көбейтiу. Егер  $\hat{C} = \hat{A} \cdot \hat{B}$  болса, онда  $C = A \cdot B$  матрицалық элементтерин матрицаларды көбейтiу қағыйдасы

$$C_{nm} = \sum_k A_{nk} B_{km}$$

тийкарында есапланады. Бундай жағдайда матрицаларды көбейтiу де, операторларды көбейтiу сыяқлы коммутативлик емес, яғный  $A \cdot B \neq B \cdot A$ .

3. Матрицаларды қосыу хәм көбейтiу қағыйдалары анықланғаннан кейин матрицалардың ең әпиұайы функцияларын да анықлау мүмкин. Мысалы,  $\exp \Phi$  функциясы сыпатында матрицалардан туратуғын

$$\exp \Phi = 1 + \Phi + \frac{1}{2} \Phi^2 + \dots + \frac{1}{n!} \Phi^n + \dots$$

қатарын түсиниу керек.

Квантлық механикадағы физикалық шамалардың Гейзенберг матрицасының бир әхмийетли қәсийетин атап өтемиз. Егер  $\hat{\Phi}$  матрицасының  $\Phi_{nm}$  матрицалық элементтерин өзиниң меншикли  $\Phi$ -елеслетиуінде анықлайтуғын болсақ, онда  $\hat{\Phi} \Psi_m = f_m \Psi_m$  хәм (1.38)-аңлатпадан

$$\Phi_{nm} = \langle n | \hat{\Phi} | m \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \hat{\Phi} \Psi_m dV = f_m \int_{\mathbb{R}^N} \Psi_n^* \Psi_m dV = f_m \delta_{nm}$$

аңлатпасын аламыз Бул аңлатпа  $\hat{\Phi}$  операторының матрицасының өзиниң меншикли елеслетиуінде диагоналық матрица болып табылатуғынлығын аңғартады. Демек бул матрицаның  $n = m$  элементтеринен басқа элементтериниң барлығының да нолге тең екенлигин аңғартады. Соның менен бирге бул диагоналық элементлер  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли мәнислери болып табылады.

Солай етип квантлық механиканың  $\hat{\Phi}$  операторының меншикли мәнислерин анықлау ҳаққындағы әхмийетли мәселеси матрицалық формулировкада диагоналық түрге алып келетуғын матрицаның түрлендирилиуин табыу болып табылады екен.

Квантлық механикан матрицалық формада елеслеткенде (матрицалық формада жазғанда) толқын функциялары қатнаспайды. Ал теңлемелер болса формалары бойынша классикалық механикасының теңлемелериниң формасындай болады. Бирақ квантлық механикадағы жағдай менен классикалық механикадағы жағдайдың принципиаллық айырмашылыққа ийе екенлигин умытпау керек. Квантлық механиканың бул теңлемелеринде физикалық шамалар сәйкес матрицалар менен алмастырылған.

Базы бир жағдайларда квантлық механиканың мәселелерин матрицалық усулда шешиу операторлық усулда шешкенге салыстырғанда қолайлырақ болады. Бирақ биз курсымызда квантлық механиканың мәселелерин шешкенимизде квантлық механиканың тек операторлық формасынан, яғный толқын функциясын хәм Шредингердиң толқынлық теңлемесин пайдаланамыз. Квантлық механиканың бир қатар мәселелерин матрицалық формада шешиуге мысалларды теориялық физика ямаса квантлық механика бойынша оқыу қолланбаларында табыуға болады.

## 2-4-1. Стационар халлар ушын Шредингер теңлемеси

Ўақытқа ийе

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi. \quad (2.4.1)$$

Шредингер теңлемеси релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарығы теңлемеси болып табылады. Бул аңлатпада  $\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z, t)$  арқалы бөлекшениң толық энергиясының операторы болған Гамильтон операторы белгиленген. Бул теңлеме координаталар менен ўақыттың функциясы болған  $\Psi(x, y, z, t)$  функциясын табыўға мүмкиншилик береді. Нәтийжеде бөлекшени кеңисликтің қалеген ноқатында қалеген ўақыт моментинде табыўдың итималлығының тығызлығы есапланады. Нәтийжеде күш майданында қозғалыўшы бөлекшениң квантлық халды тәрийиплеў мүмкиншилиги туўылады.

Квантлық механикада күш майданындағы қозғалыс ҳаққындағы мәселелердің пүтин классы бар болып, бундай мәселелерде  $\Psi(x, y, z, t)$  толқын функциясы ўақыттан ғарезли емес болады. Сонлықтан  $\Psi(x, y, z, t) \equiv \Psi(x, y, z)$  теңлиги орынланады. Бундай күш майданларын стационар күш майданлары деп атаймыз ҳәм бундай ўақытлары  $U(x, y, z)$  күш функциясы бөлекшениң потенциал энергиясы мағанасына ийе болады. Стационар майданларда квантлық система энергия  $E$  ниң белгили бир мәнисине ийе халларда тура алады. Бундай халларды стационар халлар деп атаймыз. Ал усындай халларда туратуғын бөлекшелердің қозғалысы ҳаққындағы мәселелерди квантлық механиканың стационар мәселелери деп атайды. Квантлық системалардың стационар халларын таллаўға усы бап арналған.

Стационар халға сәйкес келиўши толқын функциясының улыўмалық түрин табамыз. (2.4.1)-теңлемедегі  $\hat{H}$  операторы анық ўақыттан ғарезсиз болғанлықтан  $\Psi(x, y, z, t)$  толқын функциясын еки функцияның көбеймеси түринде жазыўға болады

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)\varphi(t). \quad (2.4.2)$$

Бул функциялардың бири  $\psi(x, y, z)$  тек координатадан, ал екиншиси  $\varphi(t)$  тек ўақыттан ғарезли. (2.4.2) функциясын (2.4.1)-теңлемеге қойып ҳәм буннан кейин теңлемениң еки бөлимин де  $\psi(x, y, z)\varphi(t)$  көбеймесине бөлсек

$$\frac{i\hbar d\varphi}{\varphi dt} = \frac{1}{\psi} \hat{H}\psi \quad (2.4.3)$$

теңлемесин аламыз. (2.4.3)-теңлемениң шеп тәрәпи тек ўақыттан, ал оң тәрәпи тек координаталардан ғарезли. Егер теңлемениң оң ҳәм шеп тәрәплери турақлы шамаға тең болса бундай теңликтің орынланыўы мүмкин. Бул турақлы шаманы  $E$  арқалы белгилеймиз. Усындай жоллар менен (2.4.3)-теңлемеден еки теңлеме аламыз. Олардың бирейи  $\psi(x, y, z)$  функциясы, ал екиншиси тек  $\varphi(t)$  функциясы ушын. Оларды былайынша жазамыз:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (2.4.4a)$$



$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = E\psi. \quad (2.4.4b)$$

(2.4.4a) теңлемесі толық энергия операторының (яғный  $\hat{H}$  гамильтонианның) меншикли функцияларын хәм меншикли мәнислерин анықлайды. Сонлықтан  $E$  шамасы квантлық механикалық системаның толық энергиясы болып табылады. (2.4.4a) теңлемесін  $\hat{H}$  операторының түрін есапқа алған ҳалда көширип жазамыз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi = E\psi. \quad (2.4.5)$$

Бул теңлемедә  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  арқалы Лаплас операторы белгиленген. (2.4.5)-теңлемесі стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемесі деп аталады. Оның шешимлери болған  $\psi(x, y, z)$  функциялары хәм энергия  $E$  ниң сәйкес мәнислери бөлекшениң потенциал энергиясы болған  $U(x, y, z)$  функциясының айқын түринен ғәрезли. Стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемесін

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\psi = 0 \quad (2.4.6)$$

формада жийи жазады.

Енди ўақытлық функция  $\varphi(t)$  ны таллаўға өтемиз. (2.4.4b) функциясының шешими

$$\varphi(t) = \varphi_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (2.4.7)$$

түрине ийе болады. Бул жерде  $\varphi_0$  арқалы базы бир константа белгиленген. Улыўмалықты жойтпастан  $\varphi_0 = 1$  деп есаплаў мүмкин. Себеби  $\varphi(t)$  функциясы барлық аңлатпаларға тек  $\psi(x, y, z)$  функциясы менен көбейме түрінде қатнасады. Соның менен бирге  $\psi(x, y, z)$  функциясының өзи турақлы көбейтиўши дәллигинде анықланады. Соның ушын  $\varphi(t)$  функциясы ушын және де бир ықтыярлы алынған турақлыны киргизип отырыўдың зәрүрлиги жоқ.

Солай етип стационар квантлық ҳалда турған бөлекше ушын толқын функциясы төмендегидей түрге ийе болады

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x, y, z) e^{-i\omega t} \quad (2.4.8)$$

(2.4.8)-аңлатпадан стационар ҳалдың толқын функциясының жийилик пенен ўақыттан ғәрезли екенлиги көринип тур

$$\omega = \frac{E}{\hbar}.$$

Бул нәтийже дәслепп еркин бөлекше ушын қолланылған де Бройлдин  $E = \omega\hbar$  формуласының бөлекше стационар күш майданында қозғалғанында да дурыс екенлигин көрсетеди.

Стационар ҳаллар ушын бөлекшениң турған орнын табыўдың итималлығының тығызлығының ўақыттан ғәрезсиз екенлигин атап өтемиз. Ҳақыйқатында да

$$\begin{aligned}\omega &= |\Psi(x, y, z, t)|^2 = |\psi(x, y, z)|^2 \left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = \\ &= |\psi(x, y, z)|^2 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{i\frac{E}{\hbar}t} = |\psi(x, y, z)|^2.\end{aligned}\quad (2.4.9)$$

Стационар ҳалларда итималлықлар ағысының тығызлығы векторының да, физикалық шамалардың орташа мәнислерининң де ўақыттан ғәрезсиз екенлигин көрсетиўге болады.

(2.4.9)-формуланы есапқа алғанда толқын функциясының нормировка шәрти

$$\int_{\mathbb{R}^N} |\Psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1$$

мынадай түрге енеди

$$\int_{\mathbb{R}^N} |\psi(x, y, z)|^2 dV = 1. \quad (2.4.10)$$

Стационар мәселелердеги толқын функцияларының координаталық бөлими болған  $\psi(x, y, z)$  функциясын әдетте толқын функциясы деп атайды. Усының менен бирге ўақытқа байланыслылық (2.4.8)-аңлатпа менен берилетуғынлығын есапқа алыў керек.

**4.1-мәселе.** Операторы ўақыттан анық түрде ғәрезли емес физикалық шаманың орташа мәнисининң турақлы шама болатуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими:** Операторы  $\hat{A}$  ўақыттан ғәрезсиз болған  $a$  шамасын қараймыз. (3.75)-аңлатпаға сәйкес орташа мәнис  $\langle a \rangle$

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \Psi^*(x, y, z, t) \hat{A} \Psi(x, y, z, t) dV$$

аңлатпасының жәрдеминде бериледи. (2.4.8)-толқын функциясының түрин есапқа алған ҳалда

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \psi(x, y, z) e^{i\frac{E}{\hbar}t} \hat{A} \psi(x, y, z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} dV$$

аңлатпасын аламыз.  $\hat{A}$  операторы ўақыттан анық түрде ғәрезсиз болғанлықтан ўақытлық көбейтиўши  $e^{i\frac{E}{\hbar}t}$  шамасын қаўсырмадан сыртқа шығарыў мүмкиншилигин береді

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \psi(x, y, z) e^{i\frac{E}{\hbar}t} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \hat{A} \psi(x, y, z) dV.$$

$e^{i\frac{E}{\hbar}t} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = 1$  теңлиги орынланатуғын болғанлықтан ақыр-аяғында

$$\langle a \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \psi(x, y, z) \hat{A} \psi(x, y, z) dV$$

аңлатпасын аламыз.

Солай етип орташа мәніс ұақыттан ғәрезсиз болып шығады екен.

**4.2-мәселе.** Егер бөлекше стационар ҳалда турса ҳәм дискрет спектрге ийе болса, онда оның импульсиниң орташа мәніси  $\langle p_x \rangle$  тың нолге тең екенлигин дәлиллеңиз. Мәселени бир өлшемли жағдай ушын шешиңиз ( $N = 1$ ).

**Шешими:** Дәслеп координата операторы  $\hat{x}$ , импульс проекциясы  $\hat{p}_x$  ҳәм гамильтониан  $\hat{H}$  операторлары арасында төмендегидей коммутациялық байланыстың бар екенлигин көрсетип өтемиз

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x.$$

$[\hat{H}, \hat{x}]$  коммутаторы менен базы бир  $\psi$  функциясына тәсир етемиз

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}] \psi &= \hat{H}(\hat{x} \psi) - \hat{x}(\hat{H} \psi) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x \psi) + U x \psi - x \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U \psi \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x \psi) + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \end{aligned}$$

$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (x \psi) = 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$  екенлигин есапқа алып

$$[\hat{H}, \hat{x}] \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \psi$$

аңлатпасына, яғный  $[\hat{H}, \hat{x}] \psi = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_x \psi$  екенлигине ийе боламыз. Буннан

$$\hat{p}_x = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}]$$

екенлиги келип шығады.

Енди импульс проекциясы  $\langle p_x \rangle$  шамасының орташа мәнісин табамыз.  $\psi$  толқын функциясының жәрдемінде тәрийипленетуғын ҳалдағы физикалық шаманың орташа мәніси

$$\langle p_x \rangle = \int_{\mathbb{R}^N} \psi^* \hat{p}_x \psi dx$$

формуласының жәрдемінде анықланады. Бул аңлатпаға  $\hat{p}_x$  операторы ушын аңлатпаны қойсақ

$$\langle p_x \rangle = \frac{im}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} (\psi^* \hat{H} \hat{x} \psi - \psi^* \hat{x} \hat{H} \psi) dx = \frac{im}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} (\psi^* \hat{H} x \psi - \psi^* x \hat{H} \psi) dx$$

аңлатпасына ийе боламыз. Енди  $\hat{H}$  операторының эрмитли екенлигинен, яғный

$$\int_{\mathbb{R}^N} \psi_1^* \hat{H} \psi_2 dx = \int_{\mathbb{R}^N} \psi_2 (\hat{H} \psi_1)^* dx$$

екенлигинен пайдаланамыз. Бул аңлатпаларда  $\psi_1$  хәм  $\psi_2$  лер арқалы жүдә кең класстағы ықтыярлы функциялар белгиленген. Бул функциялардың интегралланыуы хәм интегралланыу шегараларында нолге тең болыуы керек.  $\hat{H}$  операторының Эрмитли екенлигин есапқа алсақ

$$\langle p_x \rangle = \frac{im}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} [x\psi(\hat{H}\psi)^* - x\psi^*\hat{H}\psi] dx$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бөлекшениң қалы стационар болғанлықтан

$$\hat{H}\psi = E\psi \text{ хәм } (\hat{H}\psi)^* = (E\psi)^* = E\psi.$$

Солай етип

$$\langle p_x \rangle = \frac{im}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^N} (xE\psi\psi^* - xE\psi\psi^*) dx = 0.$$

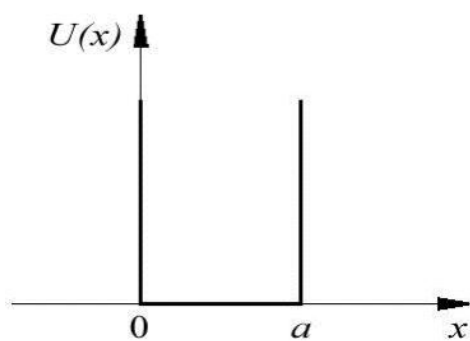
## 2-4-2. Өткермейтуғын дийұалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше

Квантлық механиканың стационар мәселелерин қарауды таллау ушын ең әпиұайы болған мәселеден баслаймыз. Бул мәселе өткермейтуғын дийұалларға ийе (яғный дийұаллары шексиз бийик болған) потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысы болып табылады. Үш өлшемлі мәселелер қаралғанда бундай шуқырларды потенциал қуты деп те атайды. Бундай жағдайдағы қозғалыстың өзине тән өзгешеликleri [энергияның квантланыуы, энергия қәддилериниң азғыныуы (вырождение энергетических уровней) хәм басқалар)] шекли тереңликке ийе потенциал шуқыр ушын да қарап өтиледі

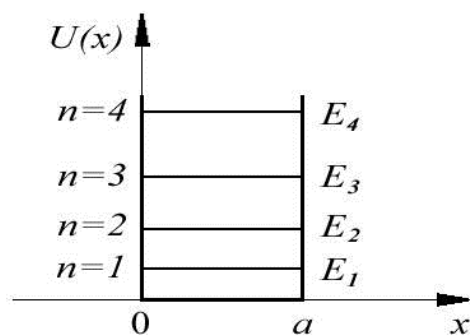
**Бир өлшемлі потенциал шуқыр.** Бир өлшемлі дийұалларының бийиклиги шексиз туұры мүйешли потенциал қутыдағы бөлекшени қараймыз. Бул жағдайда бөлекшениң энергиясы  $U(x)$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x > a \end{cases}$$

шамаларына тең болады. Шуқырдың ишинде  $U(x)$  тың шамасы турақлы хәм нолге тең, ал шуқырдың сыртларында шексизликке айланады. (2.4.1-сұұрет).



4.1-сүрөт.



4.2-сүрөт.

Бөлекшенин  $x$  көшери бағытындағы бир өлшемли қозғалысы үшін Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)]\psi = 0. \quad (2.4.11)$$

Потенциал шуқырдың сыртында потенциал энергия шексизликке айланатуғын болғанлықтан (2.4.11)-теңлемениң орынланыўы ушын  $\psi(x)$  функциясының нолге айланыўы керек, яғный  $\psi(x) \equiv 0$ . Бул жағдай дийўаллары шексиз бийик болған шуқырдан бөлекшениң шыға алмайтуғынлығын аңғартады (демек бундай шуқырдың дийўаллары арқалы бөлекше өте алмайды деген сөз). Үзликсизлик шәрти шуқырдың шегараларында толқын функциясының нолге тең болатуғынлығын аңғартады, яғный  $\psi(x)$  функциясы  $x = 0$  ҳәм  $x = a$  ноқатларында нолге айланады.

Солай етип шуқырдағы бөлекшениң қозғалысы мәселеси

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0, \quad 0 < x < a \quad (2.4.12)$$

теңлемесин шешиўге алып келинеди. Шегаралық шәртлери

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0.$$

Жаңа белгилеў киргиземиз

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (2.4.13)$$

Бундай жағдайда (2.4.12)-теңлеме тербелислер теориясынан белгили болған теңлемеге айланады

$$\psi' + k^2\psi = 0.$$

Бул теңлемениң шешими

$$\psi(x) = A \sin(kx + a) \quad (2.4.14)$$

түрінде жазылады.

$\psi(0) = 0$  шегаралық шәртин пайдалансақ

$$A \sin \alpha = 0$$

аңлатпасын аламыз. Буннан  $\alpha = \pm \pi m$  екенлиги келип шығады.  $m = 1, 2, \dots$   $m$  ниң жуп мәнислеринде  $\psi(x) = A \sin kx$ , ал тақ мәнислеринде  $\psi(x) = A \cos kx$  функцияларын алатуғынымызды атап өтемиз. Бирақ физикалық мәниске  $\psi(x)$  толқын функциясының өзи емес, ал оның модулиниң квадраты  $|\psi(x)|^2$  ийе. Модульдиң квадраты  $m$  шамасын сайлап алыўдан, яғный  $\psi(x)$  функциясының белгисинен ғәрезли емес. Сонлықтан  $\alpha = 0$  деп есаплаўымызға болады.

Екинши шегаралық шәрт  $\psi(a) = 0$

$$A \sin ka = 0$$

теңлигине алып келеди. Бул теңлик  $A \neq 0$  болған жағдайлар ушын

$$ka = \pm \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.15)$$

(2.4.14)-шешимге кириўши  $n = 0$  болған жағдайдың мәселениң шәртин қанаатландырмайтуғынлығын атап өтемиз. Себеби  $n = 0$  болғанда  $\psi \equiv 0$  шәртиниң орынланыўы керек, ал бул жағдай бөлекшениң шуқырда жоқ екенлигине сәйкес келеди. Сонлықтан  $n$  шамасының нолге тең болыўын мәселеден шығарып таслаў керек.

(2.4.13)-аңлатпаны (2.4.15)-аңлатпаға қойып дийўаллары өткермейтуғын потенциал шуқырдың ишинде қозғалыўшы бөлекшениң  $E_n$  толық энергиясы ушын аңлатпа аламыз

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.16)$$

Алынған энергия спектри (2.4.16) ның әҳмийетли өзгешелиги оның дискретлиги болып табылады. Потенциал шуқырдың ишиндеги бөлекше (2.4.16)-аңлатпа жәрдеминде анықланған энергияның тек дискрет, квантланған мәнисине ийе болады (2.4.2-сүүрет). Шредингер теңлемесиниң шешиминиң өзинен өзи энергияның квантланыўына алып келмейтуғынлығын атап өтемиз. Квантланыў толқын функциясы ушын жазылған шегаралық шәртлерден, яғный потенциал шуқырдың шегараларында толқын функциясының нолге тең екенлигинен келип шығады.

(2.4.16)-аңлатпадағы шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясын анықлайтуғын  $n$  санын квантлық сан, ал сол  $n$  ге сәйкес келиўши энергияның мәниси болған  $E_n$  шамасын энергияның қәдди деп атайды. Бөлекшениң ең киши энергияға ийе қалын (бундай қалда  $n = 1$ ) оның тийкарғы қалы деп атаймыз. Басқа барлық қаллар қозған қаллар болып табылады.  $n = 2$  шамасы биринши қозған қалға,  $n = 3$  шамасы екинши қозған қалға сәйкес келеди (хәм тағы басқалар).

Тийкарғы қалда турған бөлекшениң энергиясының мәниси нолден өзгеше екенлигин атап өтемиз. Бул нәтийже анықсызлық қатнастарына сәйкес келеди хәм квантлық механиканың барлық мәселелери ушын улыўмалық болып табылады. Классикалық физикада болса нолге тең болған минималлық энергияға шуқырдың

ишіндегі тынышлықта тұрған бөлекше иіе болады. Квантлық механикада бундай тынышлықтағы ғал пүткиллей орын алмайды.

Энергия спектринің дискретлигин толығырақ таллаймыз.  $n$  – хәм  $(n + 1)$  – қәддилер арасындағы энергия қәддилеринің айырмасы  $\Delta E_n$  шамасын табамыз

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n + 1).$$

$\Delta E_n$  шамасының мәнисин айқын жағдайлар ушын бақалаймыз.

**1-жағдай.** Массасы  $m \approx 10^{-27}$  кг хәм өлшеми  $a \approx 0,1$  м болған ыдыстағы газдың молекуласын қараймыз. Бундай жағдайда

$$\Delta E_n \approx 6,8 \cdot 10^{-20} \cdot n \text{ эВ}$$

шамасына иіе боламыз. Қоңсылас энергия қәддилери арасындағы айырма молекулалардың жыллылық қозғалысларының энергиясы болған  $kT$  шамасынан жүдә киши болып шықты (өжире температураларында  $kT \approx 2,6 \cdot 10^{-2}$  эВ). Бундай жағдайда қозғалыұшы молекулалардың тутас энергия спектри хаққында айта аламыз.

**2-жағдай.** Металлдағы еркин электронды қараймыз ( $m = 0,9 \cdot 10^{-30}$  кг,  $a \approx 0,01$  м). Бул жағдайда

$$\Delta E_n \approx 7,5 \cdot 10^{-15} \cdot n \text{ эВ}$$

хәм бул жағдайда да қәддилер арасындағы энергияның айырмасы металдағы электронлардың энергиясына салыстырғанда (энергиясының шамасы  $\sim 1$  эВ ке тең) жүдә киши. Бирақ (бул VI бапта көрсетиледи) макроскопиялық өлшемлердеги потенциал шуқырдағы электрон ушын дискрет қәддилердің болыұы принципиаллық әхмийетке иіе.

**3-жағдай.** Атомдағы еркин электронды қараймыз ( $a \approx 10^{-10}$  м). Бундай жағдайда қоңсылас қәддилер арасындағы айырма

$$\Delta E_n \approx 0,75 \cdot 10^2 \cdot n \text{ эВ}.$$

Бул атомдағы электронның байланыс энергиясына ( $E_{\text{байл.}} \sim 10$  эВ) салыстырғанда әдеұир сезилерликтей шама болып табылады. Сонлықтан бул жағдайдағы энергия спектринің дискретлигин есапқа алмаұға болмайды.

Потенциаллық шуқырдағы бөлекшениң энергиясының спектрин таллаұды жуұмақлаұ алдында оның және бир қәсийетин қараймыз.  $\Delta E_n$  шамасының  $E_n$  шамасына қатнасын есаплаймыз.

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n + 1}{n^2}.$$

$n$  квантлық санның үлкейіұи менен бул қатнастың мәниси кемейеди ( $\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n}$ ). Сонлықтан энергиялық спектрдің дискретлиги  $n$  ниң өсиұи менен кемейеди. Бул нәтийже сәйкЕгерк принципи деп аталатуғын әхмийетли болған физикалық принциптің көриніұи болып табылады. Бул сәйкЕгерк принципи бойынша  $n$  квантлық санның үлкен мәнислерінде, яғный  $n \rightarrow \infty$  шеклерінде квантлық механика классикалық механикаға өтеди.

**Бир өлшемлі шуқырдағы бөлекшениң толқын функциялары.** Енди бир өлшемлі потенциал шуқырда жайласқан бөлекшениң толқын функцияларын талқылаўға өтемиз. (2.4.15)-аңлатпаны есапқа алып (2.4.14)-аңлатпадан мынаған ийе боламыз

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}.$$

$A$  көбейтиўшиси (2.4.10)-толқын функциясының нормировка шәртинен табылады

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = A^2 \frac{a}{2} = 1.$$

Солай етип  $A$  ушын

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

аңлатпасына ийе боламыз ҳәм сонлықтан дийўалларының бийиклиги шексиз болған бир өлшемлі потенциал шуқырдағы бөлекше ушын

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \quad (2.4.17)$$

түрдеги толқын функцияларын аламыз. Бул аңлатпада  $0 < x < a$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  Улыўмалық теорияға сәйкес (3.5 ти қараў керек) бул функциялар ортонормировкаланған функциялар болып табылады. Яғный

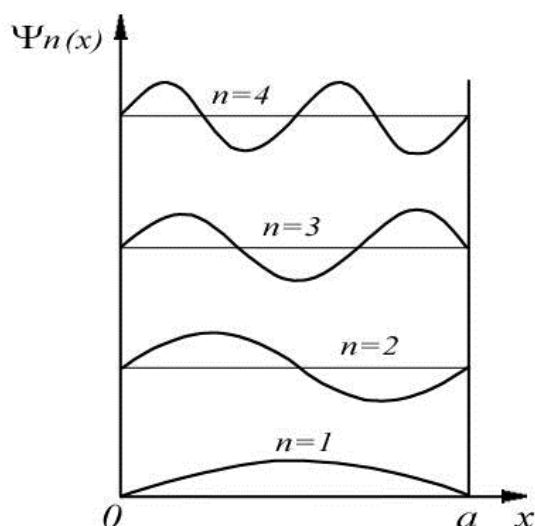
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}.$$

Бул аңлатпада  $\delta_{mn}$  арқалы 1 ҳәм 0 мәнислерине ийе болатуғын Кронекер символы белгиленген

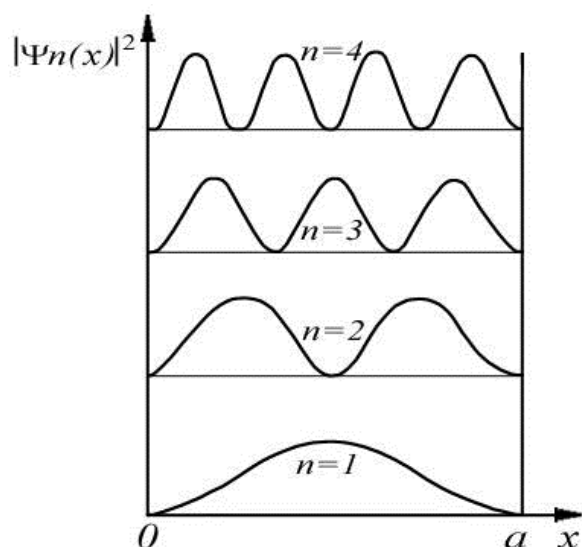
$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & (\text{егер } m = n \text{ болса}) \\ 0 & (\text{егер } m \neq n \text{ болса}). \end{cases} \quad (2.4.18)$$

$n$  квантлық санның төрт мәнисине сәйкес келетуғын  $\psi_n(x)$  толқын функциялары 2.4.3-сүўретте келтирилген.  $n$  квантлық санның ҳәр қыйлы мәнислерине сәйкес келиўши толқын функциялары бир биринен үлкен айырмаға ийе болады. Егер координата басын шуқырдың ортасына көширсек  $n$  квантлық санның тақ мәнисине сәйкес келиўши толқын функцияларының координаталардың жуп функциясы, ал  $n$  квантлық санның жуп мәнисине сәйкес келиўши толқын функцияларының координаталардың тақ функциясы болатуғынлығын көремиз.  $n$  квантлық санның мәниси бир шамасына өзгерсе толқын функциясының  $x$  көшерин кесип өтетуғын ноқатларының саны да 1 ге артады.





2.4.3-сүрет.



2.4.4-сүрет.

Табылған толқын функцияларының өзлеріне тән қасиетлерінің бири шуқырдың шегарасындағы туындының үзіліске түсіуінде (секиріуге ушырауында) көрінеді. Бул секиріу бөлекшениң потенциал энергиясы болған  $U(x)$  шамасының шексіздікке айланыуы менен байланысly. Шекли тереңдікке ийе болған шуқырда (бул жағдай 2-4-4-параграфта талланады) толқын функциясының туындысы шуқырдың шегарасында секиріуге ушырамайды, яғный толқын функциясы бир қәліпте өзгереді.

2.4.4-сүретте толқын функциясының модулинің квадратының (яғный  $|\psi_n(x)|^2$  шамасының) графиги көрсетілген.  $|\psi_n(x)|^2$  шамасының бөлекшени шуқырдың ишінде табыудың итималлығының тығызлығын беретуғынлығын еске салып өтеміз.

Хәр қыйлы  $n$  лер ушын бөлекшелердің хәр қыйлы халлары ушын итималлықтың тығызлықлары хәр қыйлы болатуғынлығы көринип тур. Мысалы тийкарғы халда турған бөлекшени (яғный  $n = 1$  болған жағдайда) шуқырдың орайында табыудың итималлығы ең үлкен мәніске ийе болады. Ал биринши қозған халда (яғный  $n = 2$  болғанда) бөлекшени шуқырдың орайында табыудың итималлығы нолге тең. Соның менен бирге бөлекшени шуқырдың орайының оң хәм шеп тәреплерінде бирдей итималлық пенен табыу мүмкин. Бул жағдай классикалық бөлекшениң шуқырда жайласуынан пүткиллей басқа. Классикалық бөлекшени шуқырдың қәлеген ноқатында табыудың итималлығы бирдей.

Шуқырдың ишіндеги  $x_1 \leq x \leq x_2$  областта бөлекшени табыудың итималлығы

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx \quad (2.4.19)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Математикалық көз-қарастан өткізбейтуғын дийуалларға ийе бир өлшемли потенциал қутыдағы бөлекшениң қозғалысы хаққындағы мәселе ушлары бекитілген тардың (струнаның) тербелиси хаққындағы мәселеге усайды. Еки жағдайда да шуқырдың кеңлігінде (тардың узынлығында) пүтин сан еселенген ярым толқын узынлығы жайласуы керек ( $a = n \frac{\lambda}{2}$ ). Биз қарап атырған жағдайда  $\lambda$

хаққында гәп етилгенде шуқырдың ишиндеги бөлекшениң де Бройль толқын узынлығы болған  $\psi_{db}$  шамасын түсинемиз.

**Еки өлшемли потенциал шуқыр.** Дийўалларының бийиклиги шексиз болған (дийўаллары шексиз бийик, сонлықтан бөлекшени өткермейтуғын) еки өлшемли туўры мүйешли потенциал шуқырды қараймыз. Бундай жағдайда бөлекшениң потенциал энергиясы  $U(x, y)$  төмендегидей түрге ийе болады

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & \text{егер } (x, y) \in \Omega \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } (x, y) \notin \Omega \text{ болса.} \end{cases}$$

Бул аңлатпада  $\Omega = \{(x, y): 0 < x < a_1, 0 < y < a_2\}$  арқалы  $(x, y)$  тегислигиндеги туўры мүйешли область белгиленген (2.4.5-сүўрет). Бир өлшемли жағдайдағыдай потенциал шуқырдың сыртында  $\psi(x, y) \equiv 0$ . Шуқырдың ишинде  $x$  хәм  $y$  көшерлери бағытындағы қозғалыслар бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан  $\psi(x, y)$  функциясын

$$\psi(x, y) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \quad (2.4.20)$$

көбеймеси түринде излеймиз. Бул аңлатпада  $\psi_1(x)$  арқалы тек  $x$  координатасына ғәрезли болған толқын функциясы, ал  $\psi_2(y)$  арқалы тек  $y$  координатасынан ғәрезли болған толқын функциясы белгиленген. (2.4.20) толқын функциясын (2.4.6) Шредингер теңлемесине қойсақ

$$\Delta\psi(x, y) + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x, y) = 0$$

ямаса

$$\psi_2(y) \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x) \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi_1(x)\psi_2(y)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпасын еки тәрәпин де  $\psi_1(x)\psi_2(y)$  көбеймесине бөлсек

$$\frac{1}{\psi_1(x)} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{1}{\psi_2(y)} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \quad (2.4.21)$$

аңлатпасына өтемиз. (2.4.21) диң шеп тәрәпиндеги биринши қосылыўшы тек  $x$  координатасынан, ал екинши қосылыўшы тек  $y$  координатасынан ғәрезли. Олардың қосындысы турақлы шамаға тең болғанлықтан қосылыўшылардың өзлери де турақлы шамаға тең болады, яғный

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_1(x)} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_1, \\ \frac{1}{\psi_2(y)} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_2. \end{aligned}$$

Бул аңлатпаларда  $E_1$  хәм  $E_2$  арқалы бирликлери энергияның бирлигиндей болған шамалар белгиленген. Қала берсе  $E_1 + E_2 = E$ . Солай етип еки өлшемли мәселе ушын Шредингер теңлемеси еки бир өлшемли теңлемеге айрылады екен

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_1 \psi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_2 \psi_2(y) &= 0.\end{aligned}\quad (2.4.22)$$

Бундай теңлемелердің шешімлерін биз жоқарыда алған едик. Демек  $\psi_1(x)$  хәм  $\psi_2(y)$  функциялары

$$\begin{aligned}\psi_{1,n_1}(x) &= \sqrt{\frac{2}{a_1}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1}, \\ \psi_{1,n_2}(y) &= \sqrt{\frac{2}{a_2}} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2}\end{aligned}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпалардағы  $n_1$  хәм  $n_2$  квантлық санлар  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$  мәнислерін қабыл етеди. Демек еки өлшемлі туўры мүйешли шексиз бийик дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекшениң толқын функциясы былайынша жазылады екен:

$$\psi_{n_1, n_2}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{a_1 a_2}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2}. \quad (2.4.23)$$

Бул аңлатпада  $0 < x < a_1$ ,  $0 < y < a_2$  хәм  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$   
Еки өлшемлі шуқырда жайласқан бөлекшениң энергиясы

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left( \frac{n_2}{a_2} \right)^2 \right] \quad (2.4.24)$$

аңлатпасының жәрдемінде есапланады. Бул аңлатпада да  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$

Бөлекшениң энергиясының спектри (2.4.24) дискрет болып табылады хәм  $n_1$  және  $n_2$  квантлық санларнан ғәрезли.

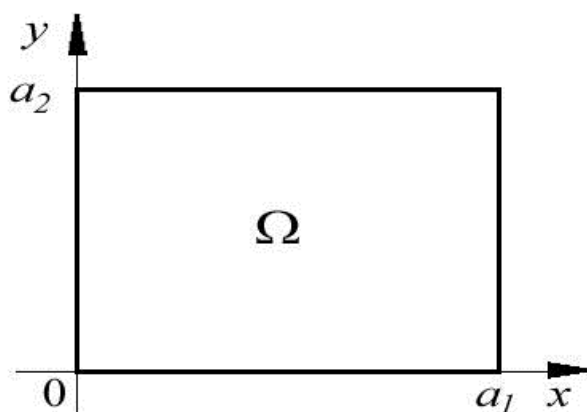
Енди квадрат потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысын қараймыз. Бул жағдайда  $a_1 = a_2 = a$ . Бундай жағдайда бөлекшениң энергия спектри

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2) \quad (2.4.25)$$

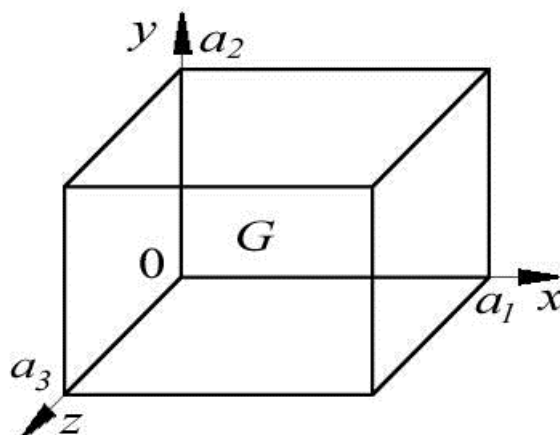
түрине ийе. Бул аңлатпада да  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$

(2.4.25)-аңлатпадан энергия қәддилериниң айныўы ҳаққындағы дәслепки түсиниклерге ийе бола аламыз. Бул аңлатпада  $n_1$  хәм  $n_2$  квантлық санларна байланыслы болған бир  $E_{n_1, n_2}$  энергия қәддине  $n_1 \neq n_2$  болған жағдайда бөлекшениң хәр қыйлы еки ҳалының (бул еки ҳал  $\psi_{n_1, n_2}$  хәм  $\psi_{n_2, n_1}$  толқын функциялары менен тәрийипленеди) сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Бөлекшениң бир неше ҳаллары сәйкес келетуғын энергия қәддин айныған ҳал (вырожденный уровень), ал бир қәддиге сәйкес келетуғын ҳаллардың санын айныў саны (кратность вырождения) деп атайды. Еки өлшемлі квадрат потенциал шуқырда  $n_1 \neq n_2$  болған шәрти орынланатуғын энергия қәддиниң айныў саны екиге тең. Бөлекшениң тек бир ҳалы сәйкес келетуғын энергияның қәддине айнымаған

деп атаймыз. Еки өлшемлі квадратлық потенциал шуқырда  $n_1 = n_2$  болған энергия қәддилери айнымаған қәддилер болып табылады.



2.4.5-сүрөт.



2.4.5-сүрөт.

**Үш өлшемлі потенциал шуқыр.** Дийўаллары шексиз бийик болған үш өлшемлі потенциал шуқырдағы (потенциал қутыдағы) бөлекшени қараймыз. Туўры мүйешли параллелоипедтиң ишки областын  $G = \{(x, y, z): 0 < x < a_1, 0 < y < a_2, 0 < z < a_3\}$  арқалы белгилеймиз (2.4.6-сүрөт). Бул мәселеде  $U(x, y, z)$  потенциалы

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{егер } (x, y, z) \in G \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } (x, y, z) \notin G \text{ болса.} \end{cases}$$

түрине ийе болады. Потенциал шуқырдың сыртында бөлекшениң толқын функциясы  $U(x, y, z) \equiv 0$ . Еки өлшемлі жағдайды қараған жағдайдағыдай бул жағдайда да толқын функциясын

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) + \psi_2(y) + \psi_3(z)$$

түрінде излеймиз. Бул аңлатпада  $\psi_1(x)$  функциясы тек  $x$  координатасынан,  $\psi_2(y)$  функциясы тек  $y$  координатасынан, ал  $\psi_3(z)$  функциясы тек  $z$  координатасынан ғәрезли.

Еки өлшемлі шуқырдағы мәселени шешиўдин усылындағыдай үш өлшемлі жағдайда үш бир өлшемлі теңлеме аламыз

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_1 \psi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_2 \psi_2(y) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_3 \psi_3(z) &= 0. \end{aligned}$$

Бул аңлатпада  $E_1 + E_2 + E_3 = E$ .  $G$  областының шегараларында (ямаса потенциал ящиктиң өткермейтуғын дийўалларында) бул теңлемелердин шешимлери нолге айланады. Усы жағдайдың жәрдемінде (яғный потенциал қутының өткизбейтуғын дийўалларында) бөлекшениң толқын функциясының түри

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a_1 a_2 a_3}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2} \sin \frac{\pi n_3 z}{a_3} \quad (2.4.26)$$

хәм оның энергиялық спектри

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{n_1}{a_1} \right)^2 + \left( \frac{n_2}{a_2} \right)^2 + \left( \frac{n_3}{a_3} \right)^2 \right] \quad (2.4.27)$$

анықланады. Бул аңлатпаларда  $n_1, n_2$  хәм  $n_3$  квантлық санлар  $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$  мәніслерин қабыл етеди. Үш өлшемлі потенциал шуқырда бөлекшениң толқын функциясы да, энергиясы да үш квантлық саннан ғәрезли болатуғынлығын атап өтеміз.

Енди бөлекшениң кублық потенциал шуқырдың ишиндеги қозғалысын қараймыз. Бул жағдайда  $a_1 = a_2 = a_3 = a$ . Усыған сәйкес энергия спектри

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (2.4.28)$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада да  $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$

Кублық шуқырда  $n_1 = n_2 = n_3$  болған жағдайда энергия қәддилери айнымаған болады. Энергияның басқа қәддилериниң барлығы да айныған болып шығады. Кублық шуқырдағы энергия қәддилериниң айныу саны хаққындағы мәселе 4.4-мәселеде шешиледи.

**4.3-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше шексиз терең еки өлшемлі потенциал шуқырда екинши қозған халда жайласқан. Усы бөлекшени  $0 < x \leq \frac{a}{3}$ ,  $0 < y \leq \frac{a}{3}$  областында табыудың итималлығын хәм биринши және екинши қозған халлардың энергияларының айырмасын табыңыз. Жоқарыда  $a$  арқалы шуқырдың өлшеми белгиленген.

**Шешими:** (2.4.23)-аңлатпаға сәйкес еки өлшемлі квадрат потенциал шуқырдың ишиндеги бөлекшениң толқын функциясы

$$\psi_{n_1, n_2}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{a^2}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{a},$$

ал оның энергиясы спектри (2.4.25)-аңлатпаға сәйкес

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2)$$

түрине ийе болады ( $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$ ). Биринши қозған халға  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  (ямаса керисинше  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 1$ ) квантлық санлар сәйкес келеди. Демек сәйкес энергияның қәдди еки рет айныған болып шығады. Екинши қозған халға  $n_1 = n_2 = 2$  квантлық санлар сәйкес келеди. Оған сәйкес энергия қәдди айныған емес.

Бөлекшени  $0 < x \leq \frac{a}{3}$ ,  $0 < y \leq \frac{a}{3}$  областында табыудың итималлығы

$$P = \int_0^{a/3} \int_0^{a/3} |\psi_{2,2}(x, y)|^2 dx dy = \frac{4}{a^2} \int_0^{a/3} \int_0^{a/3} \sin^2 \frac{2\pi x}{a} \sin^2 \frac{2\pi y}{a} dx dy = \left( \frac{1}{3} - \frac{\sqrt{3}}{8\pi} \right)^2 \approx 0,07$$

аңлатпасының жәрдемінде анықланады. Бөлекшениң екінші хәм бирінші қозған халларына сәйкес келетуғын энергияның айырмасы

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (8 - 5) = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

**4.4-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше дийўаллары абсолют өткізбейтуғын (яғный шексиз бийик) үш өлшемлі кублық потенциал шуқырда жайласқан. Кубтың қабырғаларының ұзынлығы  $a$  шамасына тең.

**Табыңыз:** а) 6- хәм 5-қәдди энергияларының айырмасын;

б) 6-қәддинің энергиясын;

с) 6-қәддинің айныў санын.

**Шешими:** Үш өлшемлі, кублық, абсолют өтиўге болмайтуғын дийўалларға ийе потенциал шуқырдың ишинде жайласқан бөлекшениң халы

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{a} \sin \frac{\pi n_3 z}{a}$$

толқын функциясы менен тәрийипленеди. Ал бөлекшениң энергиясы (2.4.28)-аңлатпаға сәйкес

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

шамаларына тең болады. Бөлекшениң тийкарғы халына, яғный бөлекшениң ең киши энергияға ийе халына  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$  квантлық санларна жуўап беретуғын хал сәйкес келеди. Қозған халлардың энергиялық қәддилери  $E_{n_1, n_2, n_3}$  шамасы ушын келтирилген аңлатпаның жәрдемінде анықланады. Соның менен бирге  $E_{n_1, n_2, n_3}$  энергиясы шамасының квантлық санларның квадратларының суммасының ( $\sum_{i=1}^3 n_i^2$  суммасының) артыўы менен үлкейетуғынлығын көремиз. Бул жағдай төмендеги кестеде келтирилген:

| Қәдди-<br>лердің<br>қатар<br>саны | Квантлық санлар $(n_1, n_2, n_3)$                       | $\sum_{i=1}^3 n_i^2$ |
|-----------------------------------|---------------------------------------------------------|----------------------|
| 1                                 | (1,1,1)                                                 | 3                    |
| 2                                 | (1,1,2), (1,2,1), (2,1,1)                               | 6                    |
| 3                                 | (1,2,2), (2,1,2), (2,2,1)                               | 9                    |
| 4                                 | (1,1,3), (1,3,1), (3,1,1)                               | 11                   |
| 5                                 | (2,2,2)                                                 | 12                   |
| 6                                 | (1,2,3), (1,3,2), (2,1,3), (2,3,1),<br>(3,1,2), (3,2,1) | 14                   |

Кестеден көринип турғанындай, энергияның алтыншы қаддине квантлық санларның квадраттарының қосындысы 14-ке тең болған сан сәйкес келеді. Ал бесінші қадди үшін бұл сумманың мәнісі 12-ге тең. Солай етіп алтыншы және бесінші қаддилерге сәйкес келіуші энергиялардың айырмасы

$$\Delta E = E_6 - E_5 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(14 - 12) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$$

шамасына тең болады. Ал алтыншы қаддинің энергиясы үшін

$$E_6 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} 14 = 7 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

шамасын аламыз.

Енді үш өлшемлі потенциал шуқырдағы бөлекшениң энергиясының қаддилерінің айныу санлары хақында гәп етемиз. Егер  $n_1, n_2, n_3$  квантлық санлар бир бирине тең болса, онда сәйкес энергияның қадди айнымаған қадди болып табылады. Бундай қаддилерге сәйкес келетуғын квантлық санларның (1,1,1), (2,2,2) және басқа да жыйнақтарын көрсетиуге болады. Егер үш квантлық санның екеуі бир бирине тең, ал үшіншісі оларға тең болмайтуғын жағдайда энергияның қадди үшін айныу саны үшке тең. Мысалы үш қайтара айныған қаддилерге екінші, үшінші және төртінші энергия қаддилерін көрсетиуге болады. Егер квантлық санлар бир бирине тең болмайтуғын болса, онда айныу санының мәнісін үш санның орынларын өзгертип қойыу операцияларының санына, яғнай алтыға тең болады. Тап усындай ситуация алтыншы қаддиде жүзеге келеді. Солай етіп алтыншы қаддинің айныу саны  $K_6 = 6$ .

**4.5-мәселе.** Атом ядросындағы нуклон ядролық күшлердің тәсирінде радиусы  $a = 10^{-14}$  м болған сфералық потенциал шуқырда жайласады. Потенциаллық шуқырдың дийуаллары нуклонды өткермейди деп есаплаймыз (шексиз бийик дийуал). Ядролық күшлер майданындағы бөлекшениң тийкарғы қалын сфералық симметрияға ийе деп есаплап, нуклонның ядродағы ең төменги энергиялық қаддин анықлаңыз. Нуклонның массасы  $m = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг.

**Шешими:** Атомлардың ядролары протонлар менен нейтронлардан турады. Ядролық тәсирлесіуде бұл бөлекшелер бирдей қәсийет көрсетеді. Сонлықтан ядродағы протонлар менен нейтронларды нуклонлар деп атайды.

Жақыннан тәсир етиуші қууатлы ядролық күшлер нуклонларды ядрода услап турады. Мәселениң шәрти бойынша ядро күшлерінің майданы болған  $U(r)$  шамасын өткермейтуғын дийуалға ийе сфералық потенциал шуқырдың жәрдемінде моделлестириу мүмкин.

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{егер } r < a \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } r > a \text{ болса.} \end{cases}$$

Бұл аңлатпада  $r$  арқалы нуклон менен ядроның орайы арасындағы қашықтық, ал  $a$  арқалы потенциал шуқырдың радиусы белгиленген. Бұл шаманы ядроның радиусына тең деп есаплаймыз.

Биз қарап атырған ядроның орайынан  $r = a$  қашықтығындағы потенциал шуқырдың дийуалларының бийиклиги шексиз үлкен. Бұл олардың энергиясының бийиклигинің шексиз үлкен екенлиги менен байланысly. Сонлықтан шуқырдан сыртта, яғнай  $r > a$  болған областларда, нуклонның толқын функциясы нолге тең.

Бул жағдай нуклонның ядроның ишіндегі  $0 \leq r < a$  областында жайласады дегенді аңлатады.

Сфералық потенциал шуқырдағы нуклонның энергиясын табыу үшін стационар халлар үшін жазылған (2.4.6)-Шредингер теңлемесін шешіу керек. Жоқарыда қарап өтілген мәселелердегідей, шуқырдың ишінде нуклонның потенциал энергиясын нолге тең деп есептейміз ( $U = 0$ ). Бұндай жағдай үшін Шредингер теңлемесі былайынша жазылады

$$\Delta\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, \quad 0 \leq r < a$$

Мәселе сфералық симметрияға ийе болғанлықтан сфералық координаталар системасына өтемиз хәм толқын функциясы  $\psi$  ди радиаллық координата  $r$  диң, мүйешлік өзгеріушілер  $\vartheta$  менен  $\varphi$  диң функциясы деп қараймыз, яғный  $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$ . Мәселенің шәрті бойынша сфералық шуқырдағы бөлекшениң халы сфералық симметрияға ийе болғанлықтан (яғный  $\vartheta, \varphi$  координаталарынан ғәрезсиз) бөлекшениң толқын функциясын тек радиаллық координата  $r$  ден ғәрезли деп есептейміз. Бул жағдайда Лаплас операторы мынадай түрге енеди:

$$\Delta\psi(r) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{d\psi(r)}{dr} \right) = \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi(r)}{dr}.$$

Солай етип сфера тәрізли ядродағы бөлекше үшін Шредингер теңлемесін

$$\frac{d^2\psi(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi(r)}{dr} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0.$$

түрінде жазамыз. Бул теңлеменің биз ізлеп атырған шешими төмендегідей еки шәртти қанаатландырады:

$$|\psi(0)| < \infty \text{ хәм } \psi(a) = 0.$$

Бул шәртлердің бириншиси толқын функциясының кеңисликтің қәлеген ноқатындағы шекленгенлигинің, ал екіншиси потенциал шуқырдың шегараларының өткізбейтуғынлығын есапқа алғандағы толқын функциясының үзликсизлигинің нәтийжеси.

$\psi(r)$  толқын функциясын  $\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$  түрінде ізлейміз.  $\psi(r)$  функциясының координата бойынша туындылары

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dr} &= \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{1}{r^2} u, \\ \frac{d^2\psi}{dr^2} &= \frac{1}{r} \frac{d^2u}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \frac{du}{dr} + \frac{2}{r^3} u. \end{aligned}$$

Бул туындыларды Шредингер теңлемесине қойып  $u(r)$  функциясы үшін теңлеме аламыз:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u = 0, \quad 0 \leq r < a.$$



Бул теңleme ушын шегаралық шертлер

$$u(0) = 0 \text{ хәм } u(a) = 0.$$

Бул мәселе формаллық жақтан бөлекшениң кеңлиги  $a$  болған, дийўаллары өткермейтуғын, бир өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысы ҳаққындағы мәселеге уқсас (2.4.2-параграфты қараңыз). Сонлықтан (2.4.16)- хәм (2.4.17)- аңлатпаларды есапқа алғанда оның шешимлерин былайынша жаза аламыз:

$$u_n(r) = A \sin \frac{n\pi r}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$\psi(r)$  функциясына қайтып келип нормировкаланбаған ( $A = \text{const}$ ) толқын функцияларын жазамыз

$$\psi_n(r) = A \frac{\sin \frac{n\pi r}{a}}{r}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Бул функциялар биз қарап атырған потенциал шуқырдағы бөлекшениң барлық мүмкин болған сфералық симметрияға ийе болатуғын квантлық ҳалларды тәрийиплейтуғын мәселениң шешими болып табылады. Бул квантлық ҳалларды бөлекшениң толық энергиясының төмендегидей мәнислери сәйкес келеди

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$n = 1$  болған жағдайда биз қарап атырған ядродағы нуклонның мүмкин болған ең киши (минималлық) энергиясын аламыз.  $m = 1,67 \cdot 10^{-27}$  кг,  $a = 10^{-14}$  кг мәнислерин қойып, биз  $E_{\min} = 3,3 \cdot 10^{-33}$  Дж =  $2,1 \cdot 10^6$  эВ = 2,1 МэВ шамасын аламыз.

Энергияның бул мәниси атомдағы электронның энергиясына салыстырғанда әдеўир үлкен. Усының нәтийжесинде ядролық процесслерде бөлинип шығатуғын энергияның муғдары химиялық реакцияларда бөлинип шығатуғын энергияның мәнисинен миллионлаған есе үлкен болады. Аўыр ядролардың бөлиниў хәм жеңил ядролардың синтези реакцияларының жүзеге келиўи квантлық механика нызамларының нәтийжеси сыпатында алынған бул жуўмақлардың дурыс екенлигин тастыйықлайды.

### 2-4-3. Потенциал табалдырық хәм дийўал областындағы бөлекшениң қозғалысы

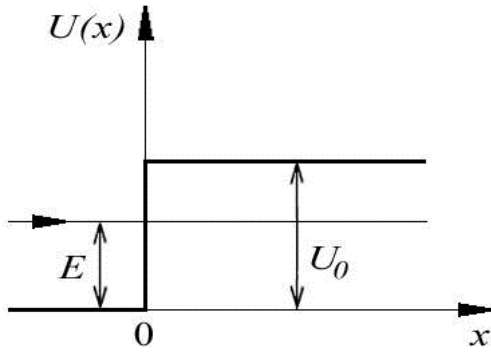
Жоқарыдағы параграфта кеңисликтің шекленген областындағы бөлекшениң қозғалысы қарап өтилди. Бундай қозғалысты финитлик қозғалыс деп атаймыз. Енди күш майданында жайласқан бөлекшениң шексизликке кете алатуғын қәбилетликке ийе болатуғын жағдайды қараймыз. Басқа сөз бенен айтқанда енди бөлекшениң инфинитлик қозғалысын үйренемиз.

**Потенциал табалдырық областындағы бөлекшениң қозғалысы.** Потенциал энергиясы

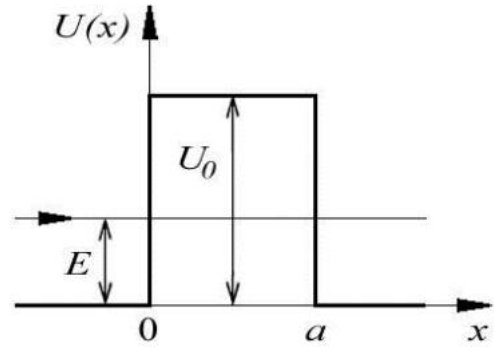
$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{егер } x < 0 \text{ болса} \\ U_0, & \text{егер } x < 0 \text{ болса.} \end{cases}$$

түрине ийе күш майданындағы бөлекшениң қозғалысын қараймыз.

Бундай жағдайда бөлекше потенциал табалдырық областында жайласқан деп атайды. Табалдырықтың шегарасында, яғни  $x = 0$  болған жағдайда, бөлекшениң потенциал энергиясын шекли болған  $U_0$  шамасына бірден өзгереді (секирмели түрде өзгереді) (2.4.7-сұйрет).



2.4.7-сұйрет.



2.4.8-сұйрет.

Табалдырықтың шеп тәрепин I саны менен белгилеймиз ( $x \leq 0$ ). Соның менен бирге усы область ушын алынған барлық шешимлерди де 1 индекси жәрдемінде айырып көрсетемиз. Табалдырықтың оң тәрепин ( $x \geq 0$ ) II саны менен, ал сәйкес шешимлерди айырып көрсетиу ушын 2 индексин пайдаланамыз.

Бундай күш майданында Шредингер теңлемеси төмендегидей түрлерге ийе болады:

I областта

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 = 0.$$

II областта

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi_2 = 0.$$

Мейли бөлекшениң энергиясы  $E$  потенциал табалдырықтың бийиклиги  $U_0$  шамасынан киши болсын (яғни  $E < U_0$ ). Бундай жағдайды бийик потенциал табалдырық жағдайы деп атайды.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \text{ хәм } k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad (2.4.29)$$

белгилеулерин пайдаланып I хәм II областлары ушын Шредингер теңлемелерин аламыз

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad (2.4.30a)$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0. \quad (2.4.30b)$$

(2.4.30)-теңлемелердің шешімлері

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad (2.4.31a)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x} \quad (2.4.31b)$$

функциялары болып табылады.

Жоқары потенциал табалдырық бар болған жағдайда I хәм II областларындағы бөлекшениң қалларын тәрийиплейуши  $\psi_1$  хәм  $\psi_2$  функцияларының пүткиллей хәр қыйлы түрге ийе болатуғынлығын атап өтемиз.  $\psi_1$  толқын функциясындағы биринши қосылыўшыға  $x$  көшериниң бойы менен  $-\infty$  тен табалдырық областына, яғный шеп тәрептен оң тәрепке тарқалатуғын тегис де Бройль толқыны сәйкес келеди.  $\psi_1$  толқын функциясындағы екинши қосылыўшы  $x$  көшериниң бойы кери тәрепке (оң тәрептен шеп тәрепке) тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди.

Тап сол аңлатпадағы  $e^{ikx}$  аңлатпасының ҳақыйқатында да тегис толқынды тәрийиплейтуғынына исениў ушын стационар ҳалдағы (2.4.8) толқын функциясы ушын жазылған ўақытқа байланыслы болған  $e^{-i\omega t}$  көбейтиўшисин еске түсириў керек.  $e^{ikx}$  ны  $e^{-i\omega t}$  ға көбейтсек  $e^{-i(kx-\omega t)}$  аңлатпасын аламыз. Бул  $x$  көшери бойлап оң бағытта тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди. Тап сол сыяқлы  $e^{-ikx}$  аңлатпасы  $x$  көшери бойлап кери тәрепке қарай тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди.

Солай етип (2.4.31a) аңлатпасындағы  $\psi_1(x)$  толқын функциясы табалдырыққа келип түсиўши хәм табалдырықта шағылысқан тегис де Бройль толқынларының қосындысынан турады екен. Ал  $\psi_2(x)$  толқын функциясы болса (бул толқын функциясының бөлекшениң II областтағы қозғалысын тәрийиплейтуғынын еске түсиремиз) дәреже көрсеткишлери ҳақыйқый сан болған (2.4.31b) еки экспонентаның қосындысынан турады.

Енди толқын функцияларына қойылатуғын шәртлерди пайдаланамыз. Толқын функциясының мәниси шекли болыўы керек. Ал  $x$  тың мәниси шексизликке умтылғанда  $\psi_2(x)$  толқын функциясының мәниси де шексизликке умтылады. Сонлықтан бул қосылыўшының алдында турған коэффициент  $A_2$  ниң мәнисиниң нолге тең болыўы талап етиледі. Табалдырықтың бийиклиги  $U_0$  шекли болғанлықтан I хәм II областларды бөлип турған шегарада толқын функциясы тек ғана үзликсиз болып қалмастан, тегис те болыўы шәрт (яғный үзликсиз туўындыға ийе болыўы керек). Сонлықтан еки областты бир биринен айырып турған шегараның еки тәрепинде толқын функцияларының хәр қыйлы түрлерге ийе болатуғынлығын көрдик. Ал еки орталықты бир биринен ажыратып турған шегарадағы толқын функцияларының хәм олардың туўындыларының мәнислерин бир бирине теңлестириў толқын функцияларын хәм олардың туўындыларын бир бирине жалғастырыў атамасын (сшивка волновых функций хәм их производных) алды. Бул жағдайда жалғастырыў шәрти

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0), \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0) \end{aligned}$$

ямаса

$$A_1 + B_1 = B_2, \quad ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -k_2 A_2. \quad (2.4.32)$$

түрлеріне ийе болады. (2.4.32)-теңлемелер системасы  $B_1$  хәм  $B_2$  коэффициентлерин  $A_1$  коэффициенті арқалы аңлатыўға, яғный табалдырыққа келип түсетуғын де Бройль толқынының амплитудасы арқалы аңлатыўға мүмкиншилик береді. Бундай мәселелерде физикалық мәниске ийе барлық шамалар (бундай шамалар қатарына бөлекшениң табалдырықтан шашыраў коэффициенті, өтиў коэффициенті хәм басқалар киреди)  $B_1$  хәм  $B_2$  коэффициентлериниң  $A_1$  коэффициентіне қатнасы түринде көрсетиле алады. Сонлықтан улыўмалықты жоғалтпай  $A_1 = 1$  деп ала аламыз. Бундай жағдайда (2.4.32)-аңлатпадан  $B_1$  хәм  $B_2$  ушын

$$B_1 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}, \quad B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \quad (2.4.33)$$

аңлатпаларын аламыз.

Солай етип бийик табалдырық жағдайында бөлекшениң толқын функциялары төмендегидей түрге ийе болады екен

$$\psi_1(x) = e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \quad (2.4.34a)$$

$$\psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-ik_2 x}, \quad x > 0. \quad (2.4.34b)$$

(2.4.32)-теңлемелер системасының  $k_1$  менен  $k_2$  коэффициентлериниң қәлеген мәнисинде, яғный энергия  $E$  ниң қәлеген мәнислеринде ( $E < U_0$  екенлигин еске саламыз) шешімге ийе болатуғынлығын атап өтеміз. Бул бөлекшениң үзликсиз энергия спектрине ийе болатуғынлығын аңғартады.

Бөлекшениң бийик табалдырықта кери қарай шағылысыўының итималлығын анықлаўшы шағылысыў коэффициентин анықлаймыз. Өзиниң физикалық мәнисі бойынша шағылысыў коэффициенті  $R$  былайынша есапланады:

$$R = \frac{|\vec{j}_{\text{шағ}}|}{|\vec{j}_{\text{к.т.}}|}. \quad (2.4.35)$$

Бул аңлатпада  $\vec{j}_{\text{шағ}}$  (шағылысыўшы) хәм  $\vec{j}_{\text{к.т.}}$  (келип түсиўши) арқалы итималлық ағысы тығызлығы белгиленген. Олар сәйкес табалдырыққа түсиўши [(2.4.34a) аңлатпадағы биринши қосылыўшы] хәм табалдырықта шашыраўшы [(2.4.34a) аңлатпадағы екінши қосылыўшы] толқынларға тийисли. Итималлық ағысының тығызлығы векторының толқын функциясының жәрдемінде қалай анықланатуғынлығын еске саламыз [(3.19)-аңлатпаға қараңыз]

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} [\psi \text{ grad } \psi^* - \psi^* \text{ grad } \psi]. \quad (2.4.36)$$

(2.4.34a) хәм (2.4.36)-аңлатпаларды есапқа алып

$$|\vec{J}_{\text{к.т.}}| = \frac{\hbar k_1}{m},$$

$$|\vec{J}_{\text{шағ}}| = \frac{\hbar k_1}{m} \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Бул аңлатпаларды (2.4.35)-аңлатпаға қойып

$$R = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 = 1$$

формуласын аламыз.

Бөлекшениң II областқа өтиуінің итималлығын анықлаушы табалдырық арқалы өтиу коэффициенті D

$$D = \frac{|\vec{J}_{\text{өтиүші}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада  $\vec{J}_{\text{өтиүші}}$  арқалы табалдырық арқалы өтиүші (2.4.34b)  $\psi_2(x)$  толқын ушын итималлықтың ағысының тығызлығы векторы белгиленген.  $\psi_2(x)$  толқын функциясын (2.4.36)-аңлатпаға қойсақ  $\vec{J}_{\text{өтиүші}} = 0$ , хәм усы жағдайға сәйкес  $D = 0$  болып шығады.

Солай етип бийик табалдырық ушын  $R = 1$  хәм  $D = 0$  хәм  $R + D = 1$  шәрти орынланады.

Енди бийик потенциал табалдырықтың II областындағы бөлекшениң қасиетлерін көреміз. Бөлекшениң толқын функциясы  $\psi_2(x)$  [(2.4.34b) аңлатпасына қараңыз] нолге тең емес хәм  $x$  пенен бирлікте экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди. Ал бул жағдай бөлекшениң табалдырық астында болуы (бул жағдайда бөлекшениң энергиясы  $E$  оның  $U_0$  потенциал энергиясынан кем болады) итималлығының нолге тең емес екенлигин билдиреди. Классикалық механиканың көз-қараслары бойынша бөлекше ушын бул область қадаған етилген болады. Себеби  $E < U_0$  шәрти кинетикалық энергияның мәнисинің терис мәниске ийе болатуғынлығын аңғартады. Бирақ квантлық механиканың көз-қараслары бойынша бул жерде хеш қандай қарама-қарсылық жоқ. Кинетикалық энергия  $p$  импульстиң функциясы, ал потенциал энергия оның  $x$  координатасының функциясы болып табылады. Ал анықсызлық принципі бойынша координата менен импульсти бир ұақытта дәл анықлау мүмкин емес. Сонлықтан квантлық механикада бөлекшениң толық энергиясын бир ұақытта дәл анықланған кинетикалық хәм потенциал энергиялардың қосындысы деп қарауға болмайды (бул хәкқында 2.3-параграфта айтылып өтилген еді).

Алынған нәтийже макроскопиялық бөлекшелер ушын өтиу қадаған етилген областларға микробөлекшелердің өте алатуғынлығын көрсетеди. II областта бөлекшени табыудың итималлығының тығызлығы

$$w_2(x) = \frac{dP}{dx} = |\psi_2(x)|^2 = \left| \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \right|^2 e^{-2k_2x} =$$

$$= \left| \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \right|^2 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}x} \quad (2.4.37)$$

аңлатпасының жәрдемінде анықланады хәм оның шамасы бөлекшениң  $m$  массасынан, энергиялардың  $U_0 - E$  айырмасынан хәм табалдырықтың шегарасынан қашықтық  $x$  тан ғәрезли.

(2.4.37)-аңлатпадағы экспоненциаллық көбейтиўшениң мәнисин электрон ушын баҳалаймыз.  $U_0 - E = 1$  деп алайық.  $x = 10^{-10}$  м болғанда (яғный табалдырықтан қашықтық атомның өлшеміндей болғанда)

$$e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x} \approx 0,29$$

шамасына ийе боламыз. Демек бул жағдайда экспоненциаллық көбейтиўши сезилерликтей мәниске ийе болады екен хәм бул өз гезегінде II областта бийик потенциал табалдырықтан тап сондай аралықта электронды табыўдың итималлығының мәнисиниң жеткилики дәрежеде үлкен екенлигин көрсетеди.  $x = 10^{-9}$  м болғанда

$$e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x} \approx 4,54 \cdot 10^{-8}.$$

Бул жағдайда табалдырықтан  $x = 10^{-9}$  м қашықтықта электронның болыўының итималлығының оғада киши екенлигин билдиреди. Алынған баҳалар электронның табалдырық арқалы II областқа атомның өлшемлери менен барабар болған ( $x = 10^{-10}$  м) қашықтыққа шекем кире алатуғынлығын көрсетеди.

Солай етип бийик табалдырықтан бөлекшениң шағылысыў коэффиценти  $R = 1$  болса да, яғный шағылысыў толық болса да, шағылысыўдың табалдырықтың өзінде (яғный I хәм II областлар арасындағы шегарада) жүзеге келиўиниң шәрт емес екенлигин көрсетеди. Базы бир шамаға тең итималлық пенен бөлекше II областқа кирип, кейин қайтып шыға алады.

Биз қарап атырған қубылыстың классикалық физикада да аналогының бар екенлигин атап өтиў қызықты. Бул толқын оптикасындағы толық ишки шағылысыў қубылысы болып табылады. Толық ишки шағылысыў қубылысы жақтылық оптикалық жақтан тығызырақ областтан оптикалық жақтан кем тығызлыққа ийе орталыққа өткенде бақланады. Усы қубылыста жақтылық оптикалық тығызлығы кем орталыққа өте алады. Бирақ бундай жағдайда оның амплитудасы  $\psi_2(x)$  сыяқты экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди.

Енди табалдырыққа келип түсиўши бөлекшениң энергиясы  $E$  потенциал табалдырықтың бийиклиги  $U_0$  ден жоқары болған, яғный  $E > U_0$  болған жағдайды қараймыз. Бундай табалдырықты пәс потенциал табалдырық деп атайды хәм I менен II областлар ушын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \quad (2.4.38a)$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0. \quad (2.4.38b)$$

Бул аңлатпалардағы  $k_1$  менен  $k_2$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \text{ хәм } k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} \quad (2.4.39)$$

формулалары менен анықланады. (2.4.38)-формуларды шешип

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \quad (2.4.40a)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad x > 0 \quad (2.4.40b)$$

функцияларына ийе боламыз. Табалдырыққа бөлекше  $x$  тың терис мәнісли тәрәпинен жақынлайды деп есаплаймыз (яғный шеп тәрәптен оң тәрәпке қарай қозғалады). Бундай жағдайда  $\psi_1(x)$  функциясының биринши қосылыўшысы табалдырыққа келип түсиўши де Бройль толқынын, ал  $\psi_2(x)$  функциясының екинши қосылыўшы табалдырықтан шағылысқан де Бройль толқынын береді. Тап сол сыяқлы  $\psi_2(x)$  функциясының биринши қосылыўшысы табалдырық арқалы өткен де Бройль толқынына сәйкес келеді. II областта шағылысқан толқын болмағанлықтан (2.4.40b) аңлатпасындағы  $B_2$  коэффициентин нолге тең етип алыў керек болады, яғный  $B_2 = 0$ .

Шегарадағы толқын функцияларын хәм олардың туўындыларын жалғастырыў шәрти  $A_1, B_1$  хәм  $A_2$  коэффициентлери ушын төмендегидей теңлемелерге алып келеді

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2, \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2. \end{aligned} \quad (2.4.41)$$

Биз жоқарыда қарап өткен жағдайдағыдай  $A_1 = 1$  деп есапласақ, онда  $B_1$  хәм  $A_2$  ушын

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

аңлатпаларын аламыз. Солай етип пәс потенциал табалдырық областында қозғалыўшы бөлекшениң толқын функциялары ушын

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x}, \\ \psi_2(x) &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} \end{aligned} \quad (2.4.42)$$

аңлатпаларын алады екенбиз. Бул аңлатпалардағы  $k_1$  менен  $k_2$  (2.4.39)-аңлатпаларда берилген.

Табалдырықта шағылысыў ( $R$ ) хәм табалдырықтан өтиў ( $D$ ) коэффициентлерин табыў ушын келип түсиўши, шағылысқан хәм табалдырықтан өткен (сынған) де Бройль толқынлары ушын итималлықтың ағысының тығызлығын табамыз. Биз тапқан толқын функцияларын (2.4.36)-аңлатпаға қойсақ

$$\begin{aligned} |\vec{j}_{\text{к.т.}}| &= \frac{\hbar k_1}{m}, \\ |\vec{j}_{\text{шағылысыўшы}}| &= \frac{\hbar k_1}{m} \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2, \\ |\vec{j}_{\text{өтиўши}}| &= \frac{\hbar k_1}{m} \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2 \end{aligned} \quad (2.4.43)$$

формуларын аламыз. (2.4.35) пенен (2.4.43) лерди есапқа алғанда пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыу коэффициенті ушын мына формуланы аламыз:

$$R = \left| \frac{\vec{j}_{\text{шағылысыушы}}}{\vec{j}_{\text{к.т.}}} \right| = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2. \quad (2.4.44)$$

(2.4.44)-формуладан  $E > U_0$  болған жағдайда пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыуының итималлығының нолге тең емес екенлиги көринеди. Яғный бундай жағдайда дийуал үстиндеги шағылысыу (надбарьерное отражение) деп аталатуғын шағылысыудың жүзеге келиуі мүмкин. Бул нәтийже квантлық механиканың нәтийжеси болып табылады хәм бөлекшелерде толқынлық қасийеттиң бар екенлиги менен түсиндириледі. Классикалық механика нызамларына бағынатуғын макроскопиялық бөлекше пәс потенциал табалдырық арқалы өткенде шағылыспайды, ал табалдырық арқалы өткенде оның кинетикалық энергиясының шамасы кемейеді.

Қызықлы жағдайды атап өтемиз. Егер I областтағы потенциалды  $U(x) = U_0$ , ал II областтағы потенциалды  $U(x) = 0$  деп алсақ, онда берилген энергияға ийе бөлекше ушын шағылысыу коэффициентінің мәнісі  $R$  өзгермейді. Бундай жағдайда келип түсиуші хәм шағылысыушы де Бройль толқынлары арасындағы фазалар айырмасы ғана өзгеріске ушырайды. (2.4.42)-аңлатпада  $\psi_1(x)$  функциясының биринши  $e^{ik_1x}$  хәм екінши  $\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{ik_1x}$  қосылыушыларының мәніслери бирдей. Сонлықтан  $k_1$  менен  $k_2$  лердің орынларын алмастырған менен нәтийже өзгеріске ушырамайды, яғный шағылыстыру коэффициенті  $R$  диң мәнісі өзгермейді. Бул нәтийжени басқа сөз бенен де айтыу мүмкин: пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыу коэффициенті бөлекшениң қозғалыс бағытына ғәрезли емес.

"Төңкерилип қойылған" табалдырықта келип түсиуші хәм шағылысқан толқынлардың амплитудаларының белгилери хәр қыйлы. Бул фазалар айырмасы  $\pi$  ге тең болған жағдайға сәйкес келеді. Яғный "Төңкерилип қойылған" табалдырықта шағылысқанда толқынның фазасы секирмели түрде  $\pi$  шамасына өзгереді. Оптика менен салыстыруды дауам етип де Бройль толқыны ушын I область II областқа салысырғанда тығызырақ орталық болып табылады.

(2.4.37)- хәм (2.4.44)-аңлатпаларға сәйкес бөлекшениң табалдырық арқалы өтиу коэффициенті

$$D = \frac{|\vec{j}_{\text{өтиуші}}|}{|\vec{j}_{\text{к.т.}}|} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 4 \frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - U_0/E})^2} \quad (2.4.45)$$

шамасы болып табылады. Солай етип пәс потенциал табалдырық жағдайында да  $R + D = 1$ . Бундай нәтийжени итималлықларды қосыу көз-қарасы бойынша күтиу тәбийй. Себеби келип түсиуші бөлекше табалдырықтан шашырайды ямаса II областқа өтеді.

Бөлекшениң табалдырық областында қозғалысын тәрийиплейтуғын де Бройль толқынының I хәм II областлар шегарасында сынатуғынлығын атап өтиу керек. Бул сыныу бөлекшениң тезлигиниң өзгериуі хәм де Бройль толқынының узынлығы  $\lambda_{ab}$  шамасының өзгериуі менен байланысly. Сыныу көрсеткиши  $n$  мынадай түрге ийе болады (2.1-параграфты қараңыз):



$$n = \frac{\lambda_{db}^{(1)}}{\lambda_{db}^{(2)}} = \frac{v_1}{v_2}.$$

Бул аңлатпада  $\lambda_{db}^{(1)}$  хәм  $\lambda_{db}^{(2)}$  арқалы I хәм II областлардағы де Бройль толқынларының узынлықлары, ал  $v_1$  хәм  $v_2$  арқалы сол областлардағы де Бройль толқынларының тезликлери белгиленген.  $v_1$  хәм  $v_2$  шамаларынан бөлекшелердин кинетикалық энергияларына өтсек

$$n = \sqrt{\frac{E - U_0}{E}} = \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Биз қарап атырған пәс табалдырық жағдайында ( $E > U_0$ ) сыныў көрсеткиши  $n < 1$ . Бул жағдай бөлекше ушын I областтың II областқа салыстырғанда оптикалық жақтан тығызырақ екенлигин және бир рет дәлиллейди. "Төңкерилген" табалдырық жағдайында сыныў көрсеткиши

$$n' = \frac{1}{n} = \frac{1}{\sqrt{1 - U_0/E}}$$

шамасына хәм бул шама бирден үлкен болады.

**Бөлекшениң потенциал барьер арқалы өтиўи.** Биз бул бөлимде рус тилиндеги "потенциальный барьер" сөзин қарақалпақ тилине "потенциал дийўал" ямаса "потенциал тосқынлық" деп аўдармаймыз хәм "потенциал барьер" сөзин толығы менен қабыл етеміз.

Бөлекшениң потенциал энергиясын  $U$  арқалы белгилейміз. Егер кеңісликтің бир областында  $U$  шамасының мәніси басқа областлардағы потенциал энергияның шамасынан үлкен болса, онда сол областты потенциал барьер деп атаймыз. Потенциал барьер областындағы бөлекшениң қозғалысын изертлеўди бир бир өлшемлі туўры мүйешлі потенциал шуқырды қараў менен баслаймыз (2.4.8-сүүрет).

Мейли, бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(x) = \begin{cases} 0, & (x < 0 \text{ болғанда}), \\ U_0, & (0 < x < a \text{ болғанда}), \\ 0, & (x > a \text{ болғанда}). \end{cases}$$

I арқалы барьердин шеп тәрәпиндеги областты II арқалы  $0 < x < a$  областын хәм III арқалы барьердин оң тәрәпин белгилейик. Бөлекше барьерге  $x$  тың терис мәніслери тәрәпинен жақынлайды, яғный шептен оң тәрәпке қарай қозғалады деп есаплаймыз. Бөлекшениң энергиясы  $E$  барьердин бийиклиги  $U_0$  шамасынан киши болған жағдайды, яғный  $E < U_0$  теңсизлиги орынланатуғын жағдайды үйренеміз. ( $E > U_0$  теңсизлиги орынланатуғын жағдай усы параграфтың 4.7-мәселесинде шешилген).

I, II хәм III областлар ушын Шредингер теңлемелери былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0,$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_3(x) &= 0.\end{aligned}\tag{2.4.47}$$

Бул аңлатпаларда  $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  хәм  $k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$ .

Толқын функциялары (2.4.47)-теңлемелердің шешимлери болады

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}.\end{aligned}\tag{2.4.48}$$

Әдеттегидей барьерге келип түсіуші толқынның амплитудасы  $A_1 = 1$  хәм  $B_3 = 0$  деп есаплаймыз. Себеби бөлекшениң қозғалысында III областта шептен оң тәрепке қарай тек өтиуші толқын тарқалады.

Барьердің шегараларында (яғный  $x = 0$  хәм  $x = a$  нокатларында) толқын функцияларын хәм олардың тууындыларын жалғастырыу шәрти

$$\begin{aligned}1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ ik_1 - ik_1 B_1 &= k_2 A_2 - k_2 B_2, \\ A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} &= A_3 e^{k_1 a}, \\ k_2 A_2 e^{k_2 a} + k_2 B_2 e^{-k_2 a} &= ik_1 A_3 e^{k_1 a}\end{aligned}\tag{2.4.49}$$

теңлемелери системасының пайда болыуына алып келеди. (2.4.49)-теңлемелер системасы төрт  $B_1, A_2, B_2, A_3$  белгисизлерге ийе төрт теңлемеден турады. Бул система  $k_1$  менен  $k_2$  шамаларының, яғный энергия  $E$  ниң қәлеген мәнислеринде шешимлерге ийе болады. Демек энергия спектри үзликсиз спектр болып табылады деген сөз.

Бул мәселеде тийкарғы дыққатты бөлекшениң барьер арқалы өтиуине аударамыз. (2.4.49)-системаны барьер арқалы өткен толқынның амплитудасы  $A_3$  ушын шешип

$$A_3 = \frac{4ik_1 k_2 e^{ik_1 a}}{(k_1 - ik_2)^2 e^{k_2 a} - (k_1 + ik_2)^2 e^{-k_2 a}}$$

аңлатпасын аламыз. Барьерге келип түсетуғын хәм барьер арқалы өтетуғын толқын ушын итималлықтың ағысының тығызлығын табамыз. (2.4.36)- хәм (2.4.48)-аңлатпаларды есапқа алған қалда

$$\begin{aligned}|\vec{j}_{\text{к.т.}}| &= \frac{\hbar k_1}{m}, \\ |\vec{j}_{\text{өтиуши}}| &= \frac{\hbar k_1}{m} |A_3|^2.\end{aligned}$$

формулаларына ийе болмыз.  $|\vec{j}_{\text{к.т.}}|$  хәм  $|\vec{j}_{\text{өтиуши}}|$  шамаларының мәнислерин (2.4.37)-аңлатпаға қойсақ барьер арқалы өтиу коэффициентин табамыз

$$D = \frac{|\vec{J}_{\text{өтиуші}}|}{|\vec{J}_{\text{к.т.}}|} = |A_3|^2 = \left[ 1 + \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \right)^2 \text{sh}^2 k_2 a \right]^{-1}. \quad (2.4.50)$$

Бұл аңлатпадағы гиперболалық синус

$$\text{sh}(k_2 a) = \frac{1}{2}(e^{k_2 a} - e^{-k_2 a}).$$

Егер барьердің кеңлігі  $a$  үшін  $k_2 a \gg 1$  шәрти орынланатуғын болса (жоқарыда келтирилген есаплаулар бұл шәрттің  $a$  ның мәніси бир неше атомлық қатламның қалыңлығындай болған жағдайларда орынланатуғынлығын көрсетеді)  $e^{-k_2 a} \ll 1$  хәм сонлықтан гиперболалық синусты экспонента менен алмастырыу мүмкин

$$\text{sh}(k_2 a) \approx \frac{1}{2} e^{k_2 a}.$$

Бұл жағдайда барьер арқалы өтиу коэффиценти төмендегіше анықланады:

$$D \approx \frac{16k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2} e^{-k_2 a}.$$

Бұл аңлатпаға  $k_1$  менен  $k_2$  ниң мәніслерин қойып

$$D \approx D_0 \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\}$$

формуласын аламыз. Бұл формуладағы

$$D_0 = 16 \frac{E}{U_0} \left( 1 - \frac{E}{U_0} \right)$$

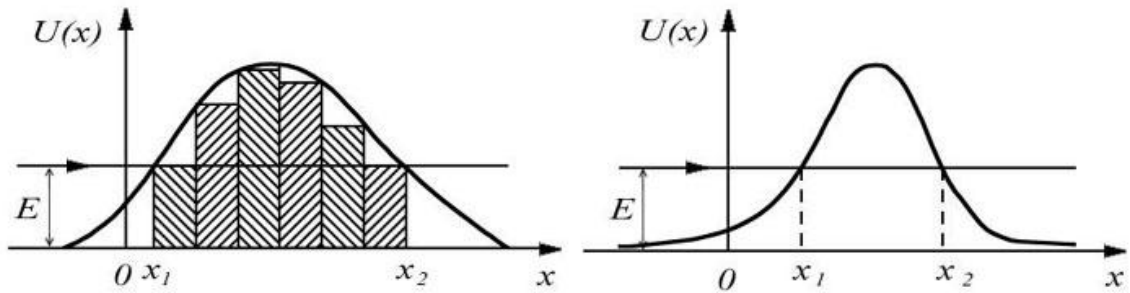
шамасы  $\frac{E}{U_0}$  ге қарата әстелик пенен өзгеретуғын функция болып табылады. Оның ( $D_0$  диң) сан мәніси 1 ге жақын.  $D$  шамасының мәселениң параметрлеринен тийкарғы ғәрезлигин экспонента береді. Сонлықтан потенциал барьер арқалы өтиу коэффицентиниң мәнісин есаплағанда  $D_0 \approx 1$  мәніси қабыл етиледі. Бундай жағдайда  $D$  үшін жазылған аңтатпа

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right\} \quad (2.4.51)$$

түрине енеді. (2.4.51)-формуладан  $D$  өтиу коэффицентиниң барьердің кеңлігі  $a$  дан, бөлекшениң массасы  $m$  нен хәм энергиялар айырмасы ( $U_0 - E$ ) шамасынан күшли экспоненциаллық байланысқа ийе екенлигин көреміз.

Алынған нәтижелерди ықтыярлы формаға ийе потенциал барьер үшін улуымаластырамыз. Буның үшін потенциал барьерди биринен соң бири жайласқан көп сандағы енсіз туұры мүйешли потенциал барьерлерден турады деп есаплаймыз (2.4.9а сүүрет). Барьердің формасы жеткиликли дәрежеде бир тегис өзгереді деп есаплаймыз (яғный барьердің бийиклиги де Бройль толқын узынлығындай қашықлықтарда көп өзгеріске ушырамайды деп есаплаймыз). Бундай жағдайда

туұры мүйешли барьерлердің бийиклиги жоқарылайтуғын участкалардағы толқынлардың шағылысуын есапқа алмауға хәм толқынның әззилеуін тек жутылуыдың есабынан жүзеге келеди деп есаплауға болады.



4.9-сүүрет. Ықтыярлы формадағы потенциал барьердің схемалық сүүрети.

$i$ -туұры мүйешли барьер арқалы өтиуши де Бройль толқынын  $i + 1$  барьерге келип түсиуши толқын деп қараймыз. Бөлекшениң избе-из жайласқан барьерлер арқалы өтиуиниң итималлығы хәр бир барьер арқалы өтиудің итималлықларының көбеймесине тең. Сонлықтан өтиу коэффициенти  $D$  хәр бир барьер арқалы өтиу коэффициентлери  $D_i$  шамаларының көбеймесине тең

$$D = \prod_i D_i \approx \prod_i \exp \left\{ -\frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m[U(x_i) - E]} \right\} = \exp \left\{ -\sum_i \left[ -\frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m[U(x_i) - E]} \right] \right\}. \quad (2.4.52)$$

Бул аңлатпада  $\Delta x_i$  хәм  $U(x_i)$  арқалы  $i$  – барьердің кеңлиги менен бийиклиги белгиленген. (2.4.52)-аңлатпада суммалаудан интеграллауға өтсек

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\} \quad (2.4.53)$$

формуласына ийе боламыз. Бул аңлатпада  $x_1$  менен  $x_2$  арқалы  $U(x) = E$  шәрти орынланатуғын координаталардың мәнислери белгиленген (2.4.9б сүүрет).

**Туннель эффектi.** Бийиклиги бөлекшениң энергиясынан үлкен болған потенциал барьер арқалы бөлекшениң өтиуин туннель эффектi атамасын алды (бөлекше барьердің асты менен өтиу барысында туннельде өткен сыяқлы болып қозғалады). Туннель эффектиниң таза квантлық эффект екенлигин атап өтемиз. Классикалық бөлекше өзиниң толық энергиясынан бийик болған барьерге келип, бул барьерде шағылысады. Бундай барьер арқалы классикалық бөлекше өте алмайды. Себеби оның кинетикалық энергиясының мәниси нолден киши бола алмайды. Квантлық бөлекше болса бундай барьерден өте алады. Соның менен бирге оның барьер арқалы өтиу итималлығының шамасы бөлекшениң массасынан хәм потенциал барьердің түринен (яғный  $U(x)$  функциясынан) күшли экспоненциялық ғәрезликке ийе. Бөлекше барьер арқалы өткенде оның  $E$  толық энергиясының өзгериске ушырамайтуғынлығын атап өтемиз.

Туннеллик эффект бир қатар әхмийетли физикалық қубылысларды аңсат түсіндире алады. Олардың қатарына металлардан электронлардың салқын

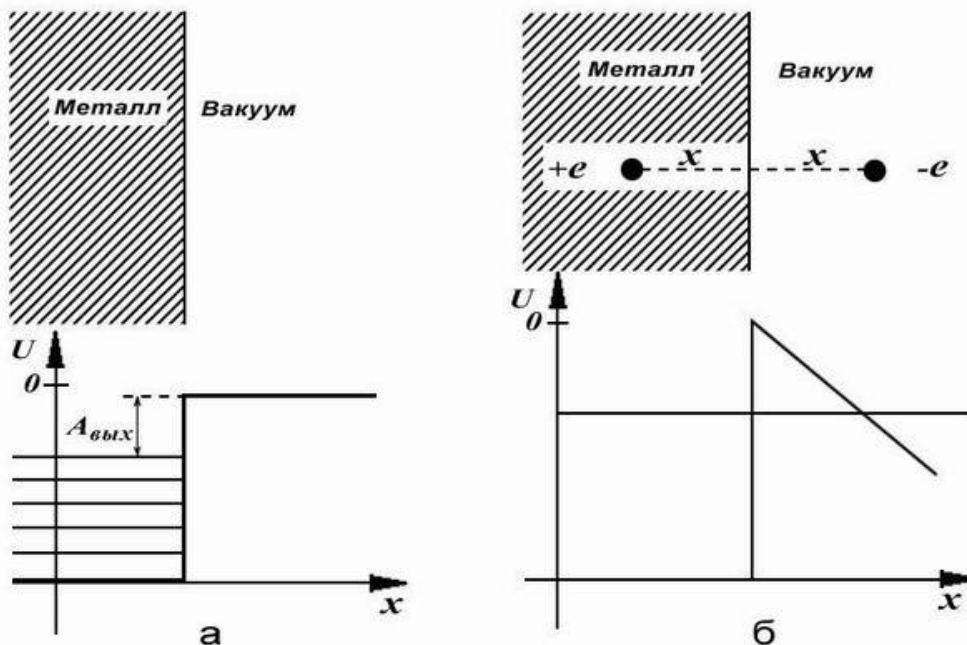
эмиссиясы, ядролардың радиоактивтік  $\alpha$ -ыдырауы, потенциаллардың контактлық айырмасы және басқалар киреди. Соның менен бирге туннель эффекти қазіргі заман техникасында көп қолланылып атыр. Мысалы оның тийкарында сканнерлеуші электрон микроскопы дөретилди. Нәтижеде беттің физикасы менен техникасында революциялық өзгерістер жүз берди, бул нанотехнологиялардың рауажланыуы менен үлкен перспективаларға ийе бола бастады.

**Металдан электронлардың салқын эмиссиясы.** Электронды металдан суырып алу үшін оған шамасы  $A_{\text{шығыу}}$  шығыу жұмысына тең қосымша энергия беріуіміз керек. Бул өз гезегінде электронның металда тереңлигі  $U_0 = A_{\text{шығыу}}$  шамасына тең потенциал шұқырда жайласқанлығын билдиреди (2.4.10a сұрет).

Мейли металдың бетіне жақын аралықта кернеулігі  $\varepsilon$  шамасына тең болған электр майданы пайда етилген болсын. Бул майдан электронның металдан шығыуын тәмийинлейди. Бундай жағдайда металдың бетінің қасында электронның потенциал энергиясы

$$U(x) = U_0 - eEx = A_{\text{шығыу}} - e\varepsilon x \quad (2.4.54)$$

шамасына тең болады. Басқа сөз бенен айтқанда метал-вакуум шегарасында үш мүйешли формаға ийе болған потенциал барьер пайда болады (2.4.10b сұрет). Бул барьер арқалы электронлардың туннеллениуі салқын ямаса автоэлектронлық эмиссия қубылысын түсіндиреди. Салқын ямаса автоэлектронлық эмиссия қубылысы деп металдан электронлардың жүдә төменгі температураларда шығыуына айтамыз.



2.4.10-сұрет.

Бул мәселени қатаң түрде шешиу үшін ушып шығыушы электронға метал тәрөпинен тәсир ететуғын айналық сұрет күшин де (сила зеркального изображения) есапқа алудың керек екенлигин атап өтеміз. Бирақ бундай күшти есапқа алу ақырғы нәтижеге тәсирин тийгизбейди және есаплауларды күшли қурамаластырады. Сонлықтан сұрет күшинің потенциал барьердің түрине қосатуғын үлесин биз есапқа алмаймыз.

Классикалық физика шеклерінде салқын эмиссия қубылысын түсіндириу мүмкін емес. Ұақықатында да электр майданы металдың ишине кирмейди. Сонлықтан бундай майдан металдың сыртындағы электронның потенциал энергиясын өзгерте алады. Ал бул жағдай потенциал барьердің пайда болыуын тәмийинлейди хәм бундай барьер арқалы электрон өте алмайды.

Квантлық механикада болса металдан электронлардың туннеллениу итималлығы үш мүйешли потенциал барьер арқалы өтиу коэффициенти  $D$  ның жәрдемінде анықланады (2.4.10b сүүрет)

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}.$$

Бундай жағдайда мәселе

$$I = \frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx$$

интегралын есаплауға алып келинеди. Бул аңлатпадағы  $U(x)$  шамасы (2.4.54)-аңлатпаның жәрдемінде анықланады, ал интеграллаудың жоқарғы шеги  $U(x_0) = E$  шәртинен анықланады. Интеграллап

$$I = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar\epsilon} (A_{\text{шығыу}} - E)^{3/2}$$

аңлатпасын аламыз.

$$\epsilon_0 = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} (A_{\text{шығыу}} - E)^{3/2}$$

аңлатпасын киргиземиз. Бул аңлатпадағы  $\epsilon_0$  мәниси бойынша металлдағы эффектив майданды береди. Бундай жағдайда барьер арқалы электронлардың өтиу коэффициенти

$$D \approx \exp \left( -\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right)$$

түрине енеди. Салқын эмиссия тоғының тығызлығы  $j$  барьер арқалы өтиу коэффициенти  $D$  ға тууры пропорционал. Демек тоқтың тығызлығы электр майданы  $\epsilon$  ниң функциясы сыпатында былайынша жазылады

$$j = j_0 \exp \left( -\frac{\epsilon_0}{\epsilon} \right).$$

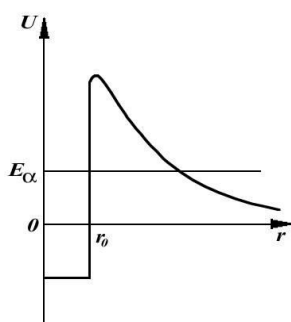
$\epsilon_0$  шамасының мәнисин бақалаймыз.  $A_{\text{шығыу}} - E \sim 1$  эВ болған жағдай ушын

$$\epsilon_0 \sim 10^8 \text{ В/м.}$$

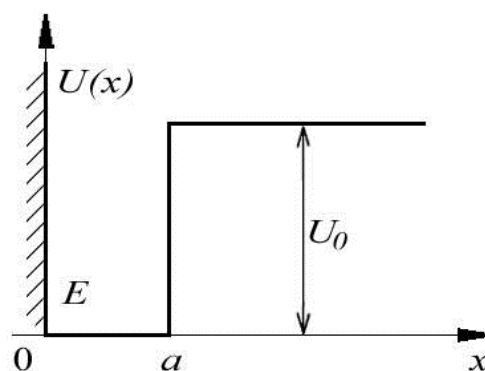
Демек салқын эмиссияның сезилерликтей тоғының металлға тек  $\epsilon \sim \epsilon_0 \sim 10^8$  В/м шамасындағы электр майданын түсиргенде ғана бақланатуғынлығын көремиз.

Электронлардың салқын эмиссиясы металлардың бетлерінің физикалық қасиеттерін, газлардың адсорбциясын, катализ хәм коррозия құбылыстарын изертлегенде кеңнен қолланылады. Салқын эмиссиялы эмиттерлер (автоэлектронлық эмиттерлер) үлкен тығызлыққа ийе  $j$  тоқтарды алыу процесслерінде қолланылады. Металлдың бетіне жақын орындарда жүде үлкен болған  $\varepsilon$  электр майданын пайда етіу үшін автоэлектронлық эмиттерлерди қыйсықлығы киши радиусқа ийе бетлер түрінде соғады.

**Радиоактивли  $\alpha$ -ыдырау.** Бөлекшелердің потенциал барьер арқалы өтіуіне және бир мысал радиоактивли ядролардың  $\alpha$ -ыдырауы болып табылады. Бундай ыдырауда радиоактивли ядро өзіннен  $\alpha$ -бөлекшелерін шығарады.  $\alpha$ -бөлекшеси гелий атомының ядросы болып табылады хәм ол еки протоннан хәм еки нейтроннан турады.  $\alpha$ -бөлекшесін шығаратуғын ядроны ана ядро деп атайды.  $\alpha$ -бөлекшесін шығарған ядроның майданындағы усы  $\alpha$ -бөлекшесінің потенциал энергиясы 4.11-сүўретте келтирилген.



4.11-сүўрет.



4.12-сүўрет.

$\alpha$ -бөлекше менен ядро арасындағы қашықлық үлкен болғанда олар арасында Кулон ийтерисиўши күши тәсир етеди хәм бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze \cdot 2e}{r}$$

түрінде жазылады. Бул аңлатпада  $Ze$  арқалы  $\alpha$ -бөлекше шығарған ядроның заряды,  $2e$  арқалы  $\alpha$ -бөлекшесінің заряды белгиленген.  $\alpha$ -бөлекшеси менен оны шығарған ядро арасындағы Кулон күши ядроның өлшемлери менен салыстырарлықтай қашықлықтарға шекем тәсир етеди (яғный  $r_0 \sim 10^{-14} - 10^{-15}$  м аралыққа шекем).  $r \leq r_0$  қашықлықларында  $\alpha$ -бөлекшелери менен ядро арасында күшлирек болған ядролық тартысу күшлери тәсир етеди. Ядроның ишинде  $\alpha$ -бөлекшеси потенциал шуқырдың ишинде жайласқан болады хәм ол ядродан тек туннель эффекти есабынан шыға алады. Туннелеудің итималлығын есаплаулардың нәтийжелери шуқырдың формасынан күшли ғәрезли емес. Сонлықтан шуқырды туўры мүйешли деп есаплауға хәм оның кеңлиги ядроның радиусы  $r_0$  арқалы анықланады деп есаплауға болады.

Эксперименталлық изертлеулердің нәтийжелери  $\alpha$ -ыдыраудағы потенциал шуқырдың бийиклиги шама менен 20-30 МэВ шамасына тең екенлигин, ал нурландырылған  $\alpha$ -бөлекшелерінің энергияларының мәнислери 5-6 МэВ шамасында екенлигин көрсетеди. Бул шама барьердің бийиклигинен әдеуір киши хәм сонлықтан  $\alpha$ -бөлекшелери ядро тәрепинен тек туннель эффектинің салдарынан шығарылады.

Ядро физикасында радиоактивли ыдырау нызамы белгили. Бул нызам еле ыдырамаған ядролардың санының уақытқа байланысly өзгеріуін сыпатлайды хэм

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (2.4.55)$$

түрінде жазылады. Бул формулада  $N_0$  арқалы дәслепки уақыт моментіндеги (яғный  $t = 0$  уақыт моментіндеги) еле ыдырамаған (еле  $\alpha$ -бөлекшелерин шығармаған) ядролардың саны белгиленген. Ал еле ыдырамаған ядроларды биз жоқарыда ана ядролар деп атаған едик.  $\lambda$  шамасы ыдырау турақлысы деп аталады хэм ядролардың ыдырау тезлигин сыпатлайды.

Ыдырау турақлысы  $\lambda$  менен  $\alpha$ -бөлекшесиниң потенциал барьер арқалы  $D$  өтиу коэффициенти арасындағы байланысты табамыз. Мейли ядроның радиусы  $r_0$  шамасына тең, ал  $\alpha$ -бөлекшесиниң тезлиги  $v$  болсын. Бундай жағдайда  $\alpha$ -бөлекшесиниң потенциал барьердиң дийуалына уақыт бирлигиндеги соқлығысуларының саны  $\frac{v}{2r_0}$  шамасына тең болады. Хэр бир соққыдағы туннеллениу итималлығы  $D$  шамасына, ал ядролардың улымалық саны  $N(t)$  болғанлықтан,  $t$  дан  $t + dt$  уақыт моментлерине шекемги  $\alpha$ -бөлекшелерин шығарған ядролардың саны  $dN$  шамасына тең болады хэм оның мәнисин

$$dN = -N(t) \frac{v}{2r_0} D dt$$

формуласының жәрдемінде анықлаймыз. Бул формуладағы (-) белгиси  $dN$  ядролар санының еле ыдырамаған ядролардың есабынан қуралатуғынлығы менен байланысly.

Екинши тәрәптен (2.4.55)-аңлатпаны дифференциаллап

$$dN = -\lambda N(t) dt$$

аңлатпасын аламыз. Бул еки аңлатпаны бир бири менен салыстырып

$$\lambda = \frac{v}{2r_0} D$$

формуласына ийе боламыз.

Демек ыдырау турақлысының мәниси потенциал барьер арқалы өтиу коэффициентине ( $D$  шамасына) тууры пропорционал екен.

## 2-4-4. Шекли тереңликке ийе потенциал шуқырдағы бөлекше

2-4-2 параграфта биз бөлекшениң дийуалларының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырдағы қозғалысын талқыладық. Тереңлиги шекли болған потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысын таллауды биз басқышпа-басқыш алып барамыз хэм дәслеп тек бир дийуалының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырды қараймыз (2.4.12-сүүрет). Бундай мәселе әмелий жақтан әхмийетке ийе. Себеби арасында тартылыс күшлери тәсир ететуғын еки бөлекше (буған мысал



ретінде молекуланы пайда етиўши еки атомды қараўға болады) өзиниң түри бойынша биз қарайын деп атырған моделге жақын.

**Тек бир шексиз бийик дийўалға ийе бир өлшемли шуқыр.**

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_0, & x > a. \end{cases}$$

түриндеги бир өлшемли потенциал шуқырда қозғалыўшы бөлекшени қараймыз.

$x < 0$  болған жағдайда бөлекшениң потенциал энергиясы шексиз үлкен хәм сонлықтан оның толқын функциясы  $\psi(x)$  нолге айланады. Сонлықтан бул мәселени шешкенде тийкарғы дыққатты  $x > 0$  областтағы бөлекшениң қозғалысын үйрениўге қаратамыз.

$0 < x < a$  болған областты I, ал  $x > a$  болған областты II арқалы белгилеймиз. Дәслеб бөлекшениң толық энергиясы  $E < U_0$  болған жағдайды изертлеймиз (яғный бөлекшени потенциал шуқырда жайласқан деп есаплаймыз). I область ушын Шредингер теңлемеси (2.4.6)

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \psi_1(x) = 0, \quad (2.4.56)$$

ал II область ушын

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi_2(x) = 0 \quad (2.4.57)$$

түрине енеди. Белгилеўлер киргиземиз:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad \text{хәм} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}. \quad (2.4.58)$$

Усы аңлатпаларды пайдаланып (2.4.56)- хәм (2.4.57)-аңлатпаларды

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_1(x) = 0, \quad (2.4.59a)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2 \psi_2(x) = 0 \quad (2.4.59b)$$

түрине келтиремиз. (2.4.59)-теңлемелерди шешип  $\psi_1(x)$  хәм  $\psi_2(x)$  функцияларын табамыз

$$\psi_1(x) = A \sin(k_1 x + \alpha), \quad (2.4.60a)$$

$$\psi_2(x) = B e^{k_2 x} + C e^{-k_2 x}. \quad (2.4.60b)$$

Толқын функциялары ушын қойылатуғын шәртлерди пайдаланамыз. Толқын функциясы барлық ўақытта да шекли болыўы керек. Ал (2.4.60b)-аңлатпадағы биринши қосылыўшы  $x \rightarrow \infty$  шегинде шексиз өседі. Сонлықтан  $B$  коэффициентиниң нолге тең болыўын талап етиў керек болады. Буннан  $\psi_2(x) = C e^{-k_2 x}$  теңлемесине ийе боламыз.

Енди шегаралық шәртлерди таллаўға өтемиз. Шуқырдың шеп шегарасындағы  $\psi_1(x)$  толқын функциясының үзликсизлиги жоқарыда биз көрип өткендей  $\psi_1(x) = 0$  теңлигин тәмийинлейди. Буннан  $\alpha = 0$  екенлигине ийе боламыз.  $x = a$  ноқатындағы толқын функцияларын хәм оның туўындыларын жалғастырыў шәрти

$$\begin{aligned} A \sin k_1 a &= C e^{-k_2 a}, \\ k_1 A \cos k_1 a &= -k_2 C e^{-k_2 a} \end{aligned} \quad (2.4.61)$$

теңлемелер системасын береді. (2.4.61)-теңлемелердеги биринши теңлемени екіншисине бөлсек

$$\frac{1}{k_1} \operatorname{tg} k_1 a = -\frac{1}{k_2} \quad (2.4.62)$$

қатнасына өтемиз. Бул қатнас болса шуқырдағы бөлекшениң энергия спектрин анықлайды.

(2.4.62)-теңлеме трансцендент теңлеме болып табылады. Сонлықтан  $E$  энергиясының мәнісін анық түрде есаплаўдың мүмкиншилиги жоқ. Усы жағдайға байланысly (2.4.58)-аңлатпаны есапқа алған (2.4.62)-аңлатпа жәрдеминде бөлекшениң энергиясының спектриниң дискрет екенлигин, яғный шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясының квантланатуғынлығын көрсетиўге болады.

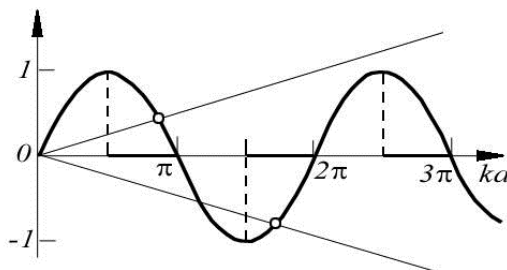
(2.4.62)- трансцендент теңлеме

$$\sin k_1 a = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} k_1 a \quad (2.4.63)$$

түрине аңсат алып келинеди. (2.4.63)-теңлемениң оң хәм шеп тәреплерин  $k_1 a$  көбеймесиниң функциялары деп есаплап олардың графиклерин сызамыз (2.4.13-сүүрет). Синусоида менен туўрының кесилисиў ноқатлары биз излеп атырған толық энергия  $E$  ниң мәніслерине сәйкес келетуғын (2.4.63)-теңлемениң коренлерин береді. (2.4.62)-аңлатпаға сәйкес  $\operatorname{tg} k_1 a < 0$  болғанлықтан биз  $k_1 a$  көбейтиўшисиниң тек

$$\frac{\pi}{2} + \pi m < k_1 a < \pi + \pi m$$

шәртин қанаатландыратуғын мәніслерин ғана есапқа аламыз.  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$  4.13-сүүретте  $k_1 a$  ның мәніслериниң сәйкес областлары абсцисса көшеринде жуўан сызықлар менен көрсетилген.



2.4.13-сүүрет

Келтирилген графиклер бөлекшениң энергия спектриниң дискрет екенлигин көрсетеди. Потенциал шуқырдың тереңлиги  $U_0$  хәм кеңлиги  $a$  қаншама үлкен болса (2.4.63)-теңлемениң оң тәрәпине сәйкес келиўши графиктеги туўры сызықтың қыялығы сонша төмен хәм бул туўры синусоида менен көп санлы кесилисиў ноқатларына ийе болады. Демек потенциал шуқырда соншама көп энергия қәддилери жайласады деген сөз.

Шуқырда ең кеминде энергияның бир қәдди болатуғын шәртти табамыз. Бундай жағдайда (2.4.63)-теңлемениң оң тәрәпине сәйкес келиўши туўрының қыялығын анықлайтуғын

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}} < \frac{1}{\pi/2}$$

теңсизлигин қанаатландырыўы керек. Буннан  $U_0a^2$  ушын

$$U_0a^2 > \frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \quad (2.4.64)$$

шәртине ийе боламыз.

Бул аңлатпаны толығырақ таллаймыз. Усы шәрт орынланғанда ғана шуқыр ишиндеги бөлекше ушын Шредингер теңлемеси шешимге ийе болады, яғный шуқырдың ишинде кеминде бир қәдди болады. Бундай жағдайда шуқырдың ишиндеги бөлекшениң байланысқан ҳалы болады деп айтады. (2.4.64)-теңсизликтің шеп тәрәпине тек потенциал шуқырдың параметрлери ғана киреди (оның кеңлиги  $a$  хәм тереңлиги  $U_0$ ). Ал биз қарап атырған бөлекшениң типі ушын (яғный оның массасы ушын) теңлемениң оң тәрәпи константаға айланады.

Егер потенциал шуқыр жеткиликли дәрежеде терең ямаса жеткиликли дәрежеде кең болмаса (2.4.64)-шәрт орынланбайды. Бундай жағдайда шуқырдағы бөлекше ушын Шредингер теңлемеси шешимге ийе бола алмайды хәм усыған сәйкес потенциал шуқырға бирде бир энергия қәдди орналаса алмайды. Физикада усындай жағдайлар көп ушырасады. Мысалы еки нейтрон хәм еки протон арасында ядролық тартысыў күшлери тәсир етеди. Бирақ тәбиятта еки протоннан ямаса еки нейтроннан туратуғын байланысқан ҳал ушыраспайды. Себеби бундай бөлекшелердиң бир бири менен тәсирлесиўине сәйкес келетуғын потенциал шуқыр жеткиликли емес тереңликке хәм кеңликке ийе.

Протон менен нейтрон арасындағы тәсир етисиў күшиниң шамасы еки протон ямаса еки нейтрон арасындағы тәсир етисиў күшиниң шамасынан азмаз ғана үлкен. Усы азмаз айырма протон менен нейтрон арасындағы байланысқан ҳал – дейтронның пайда болыўы ушын жеткиликли. Протон менен нейтрон арасындағы тәсирлесиўге сәйкес келетуғын потенциал шуқырда энергияның тек бир қәдди жайласады. Демек дейтрон барлық ўақытта да тийкарғы ҳалда жайласады, оның қозған ҳаллары пүткиллей жоқ.

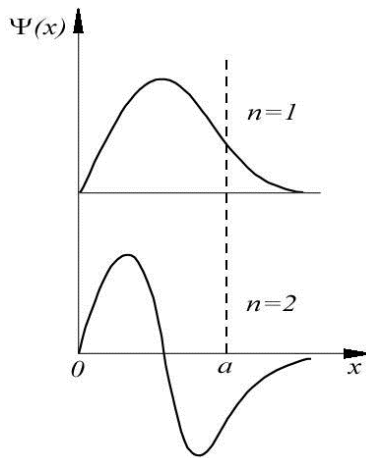
Биз қарап атырған мәселениң толқын функцияларын таллаўға қайтып келемиз. Жоқарыда  $x < 0$  болғанда  $\psi(x) \equiv 0$  теңлигиниң орынланатуғыны айтып өтилген еди. I областта, яғный потенциал шуқырда толқын функциясы

$$\psi_1(x) = A \sin k_1x$$

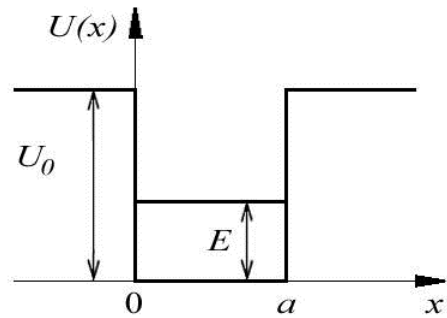
түрине ийе. Бул еки шексиз бийик дийўалға ийе шуқырда толқын функциясының осуилляцияланыўшы шешимге ийе болатуғынлығын көрсетеди. II областтағы толқын функциясының түри үлкен қызығыўшылық пайда етеди

$$\psi_2(x) = C e^{-k_2 x}.$$

$\psi_2(x)$  толқын функциясы потенциал шуқырдың сыртында нолге тең емес, ал  $x$  қашықтығына байланысly экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Бул жағдай өз гезегинде бөлекшени табыўдың итималлығының потенциал шуқырдың сыртында да нолге тең болмайтұғынлығын аңғартады (2.4.7-мәселеге қараңыз). А хәм  $C$  константалары арасындағы қатнас нормировка шәртинин жәрдеминде анықланады. Бул мәселе ушын толқын функцияларының сапалық түрлери 4.20-сүүретте келтирилген.



4.14-сүүрет. (2.4.20-



4.15-сүүрет. (2.4.21)

Енди  $E > U_0$  болған жағдайды қараймыз. I хәм II областлар ушын Шредингер теңлемесин сәйкес

$$\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_1(x) = 0 \quad (2.4.65a)$$

хәм

$$\frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2 \psi_2(x) = 0 \quad (2.4.65b)$$

түринде жазамыз. Бул аңлатпаларда  $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  хәм  $k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$ .

Шуқырдың шегарасында  $\psi_1(0) = 0$  екенлигин есапқа алғанда (2.4.65a) теңлемесиниң шешими

$$\psi_1(x) = A' \sin k_1 x = \frac{A'}{2i} (e^{ik_1 x} - e^{-ik_1 x}) \quad (2.4.66)$$

түрине ийе. (2.4.65b) теңлемесиниң шешимин былайынша жазамыз:

$$\psi_2(x) = D \sin(k_2 x + \varphi) = B' e^{ik_2 x} - C' e^{-ik_2 x}. \quad (2.4.67)$$

$x = a$  нокатында функцияларды хәм олардың туўындыларын жалғастырыў операциясын орынласақ төмендегидей теңлемелер системасына өтеміз:

$$\begin{aligned}\frac{A'}{2i}(e^{ik_1a} - e^{-ik_1a}) &= B'e^{ik_2a} - C'e^{-ik_2a}, \\ \frac{A'}{2i}ik_1(e^{ik_1a} - e^{-ik_1a}) &= ik_2(B'e^{ik_2a} - C'e^{-ik_2a}).\end{aligned}$$

Бул теңлемелер системасын  $B'$  хәм  $C'$  амплитудаларына қарата шешсек, онда олардың  $A'$  амплитуда арқалы аңлатпаларын аламыз:

$$\begin{aligned}B' &= \frac{A'}{4i}e^{-ik_2a} \left[ e^{ik_1a} \left( \frac{k_1}{k_2} + 1 \right) - e^{-ik_1a} \left( \frac{k_1}{k_2} - 1 \right) \right], \\ C' &= \frac{A'}{4i}e^{ik_2a} \left[ e^{ik_1a} \left( \frac{k_1}{k_2} - 1 \right) - e^{-ik_1a} \left( \frac{k_1}{k_2} + 1 \right) \right].\end{aligned}\tag{2.4.68}$$

(2.4.68)-аңлатпалардың  $k_1$  менен  $k_2$  ниң қәлеген мәнислериндеги (яғный бөлекшениң энергиясының қәлеген мәнисиндеги)  $B'$  хәм  $C'$  амплитудаларының мәнислерин анықлайтуғынлығын атап өтеміз.

$E > U_0$ . Бул  $E > U_0$  шәрти орынланғанда бөлекшениң энергиясының үзликсиз спектрге ийе болатуғынлығын көрсетеди.

(2.4.66)- хәм (2.4.67)-толқын функцияларын таллаймыз. Олардың хәр қайсысы де Бройльдинің еки толқынының қосындысы болып табылады:  $e^{ikx}$  толқыны шеп тәрәптен оң тәрәпке қарай, ал  $e^{-ikx}$  толқыны оң тәрәптен шеп тәрәпке қарай.  $+\infty$  тен келген толқынның (2.4.67-аңлатпадағы екинши қосылыўшы) бир бөлеги  $x = a$  шуқырдың шегарасында шағылысады хәм (2.4.67)-аңлатпаның биринши қосылыўшысына үлес қосады. Қалған бөлеги сынады (2.4.66-аңлатпадағы екинши қосылыўшы). Буннан кейин толқын  $x = 0$  дийўалында шағылысады (2.4.66-аңлатпадағы биринши қосылыўшы) хәм шуқырдың  $x = a$  шегарасында қайтадан сынады. Усының нәтийжесинде (2.4.57)-аңлатпаның биринши қосылыўшысына үлес қосады хәм шексизликке кетеди.

**Шекли тереңликке ийе туўры мүйешли потенциал шуқыр.** Шекли тереңликке ийе туўры мүйешли потенциал шуқырдың ишинде жайласқан бөлекшени қараймыз (2.4.14-сүүрет). Бундай модель атомның этирапындағы электронның қасындағы электронның қозғалысын сапалық түрде тәрийиплей алады. Сонлықтан атом физикасы менен қатты денелер физикасында кеңнен қолланылады.

Мейли бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0, \text{ I область} \\ 0, & 0 < x < a, \text{ II область} \\ U_0, & x > a, \text{ III область.} \end{cases}$$

түрине ийе болсын.

Дәслеп  $E < U_0$  болған жағдайды қараймыз (яғный бөлекше шуқырдың ишинде жайласқан деген сөз). I хәм III областлар ушын (потенциал шуқырдан сыртта) Шредингер теңлемесин былайынша жазамыз

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi_{1,3} = 0$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \text{ белгилейін қабыл етемиз хәм}$$

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} - k_1^2\psi_{1,3} = 0$$

теңлемесін аламыз.

Бұл теңлеме

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x}, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{k_1 x} + B_3 e^{-k_1 x}\end{aligned}$$

түріндегі шешімлерге ийе болады. Толқын функциясының шеклі болыуы үшін  $B_1 = 0$  хәм  $A_3 = 0$  болыуы шәрт.

II областта, яғный потенциал шуқырдың ишінде Шредингер теңлемеси

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_2 = 0$$

түрине ийе болады хәм  $\psi_2(x) = C \sin(k_2 x + \alpha)$  осцилляциаланыушы шешімге ийе.

Бұл формулада  $k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ .

Солай етип бұл мәселе үшін бөлекшениң толқын функциялары төмендегидей түрлерге ийе болады:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{k_1 x}, \\ \psi_2(x) &= C \sin(k_2 x + \alpha), \\ \psi_3(x) &= B_3 e^{-k_1 x}.\end{aligned} \tag{2.4.69}$$

$x = 0$  хәм  $x = a$  нәқатларында толқын функцияларын хәм олардың тууындыларын жалғастыруы барысында

$$\begin{aligned}tg \alpha &= \frac{k_2}{k_1}, \\ tg(k_2 a + \alpha) &= -\frac{k_2}{k_1}\end{aligned}$$

еки аңлатпасын аламыз. Оларды

$$\begin{aligned}\sin \alpha &= \frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}}, \\ \sin(k_2 a + \alpha) &= -\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}}\end{aligned}$$

түрине алып келиу қыйын емес. Бұл еки аңлатпадан  $\alpha$  ны жоғалтып

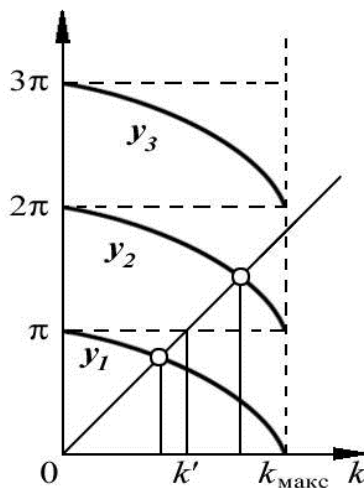
$$k_2 a = \pi n - 2 \arcsin \left( \frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.70)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпа болса шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергия спектрин анықлайды.  $n$  ниң терис мәнислери ямаса оның  $n = 0$  болған мәниси мәселениң шәртин қанаатландырмайды. Себеби (2.4.70)-аңлатпаның шеп тәрепи терис мәниске ийе бола алмайды.

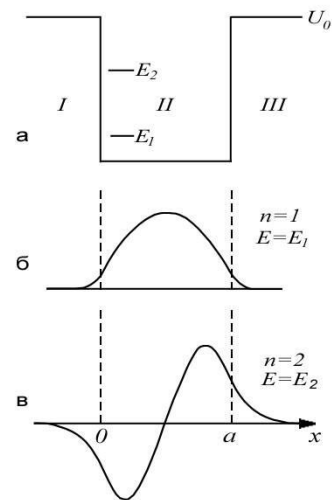
$\arcsin$  функциясының аргументиниң мәниси 1 ден үлкен бола алмайды. Сонлықтан

$$\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU_0}} \leq 1$$

хәм  $k_2$  шамасының мәниси  $k_{2max} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0}$  шамасы менен шекленген.



2.4.16-сүүрет.



2.4.17-сүүрет.

Бул жағдайда да графикалық усыллардың жәрдеминде де шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясының квантланған, яғный (2.4.70)-аңлатпаның жәрдеминде анықланған энергия спектриниң дискрет екенлигин көрсетемиз. Буның ушын (2.4.70)-теңлемениң шеп хәм оң тәрептериниң  $k_2$  шамасынан байланысының графиклерин сызамыз. Шеп тәрепиниң графиги  $y = k_2 a$  туўры сызығы болып табылады. Оның қыялығы шуқырдың кеңлиги  $a$  ның өсиўи менен өседі. (2.4.70)-теңлемениң шеп тәрийипиниң  $n = 1, 2, 3$  мәнислери ушын сызылған графиклери  $y_1$ ,  $y_2$  хәм  $y_3$  иймекликлери менен берилген.  $y = k_2 a$  туўры сызығы менен  $y_i$  иймеклериниң кесилисиў ноқатлары (2.4.70)-теңлемениң коренлери болып табылады. Демек  $k_2$  шамасының мәнислери, яғный оның менен байланыслы болған  $E$  энергияның мәнислериниң спектри дискрет болып шығады. Шуқырдың кеңлиги  $a$  қаншама үлкен болса, яғный  $y = k_2 a$  туўры сызығы тик болса, онда ол  $y_i$  иймекликлери менен көп ноқатта кесилеседи. Хәр бир кесилисиў ноқаты энергияның белгили бир қәддине сәйкес келеди.  $k_{2max} a < \pi n$  шәрти орынланса шуқырда  $n$  дана энергия қәдди болады. Демек бул жағдайда бөлекшениң  $n$  дана байланысқан ҳалы жүзеге келеди деген сөз.

Шуқырдың тереңлиги  $U_0$  киширейгенде  $k_{2max}$  шамасы да, усыған сәйкес шуқырдағы энергия қәддилери саны да киширейеди.  $k_{2max} < \pi/a$  шәрти орынланғанда, яғный

$$U_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

шәрти орынланғанда шуқырда тек бир энергия қәдди қалады. Тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциал шуқырда ең кеминде бир энергия қәддиниң, яғный бир байланысқан ҳалдың болатуғынлығын атап өтемиз.

Шуқырдың тереңлиги шексиз үлкейгенде (яғный  $U_0 \rightarrow \infty$  шәрти орынланғанда) (2.4.70) энергия спектриниң шексиз терең потенциал шуқыр ушын алынған (яғный дийўаллары шексиз бийик болған) (2.4.16)-спектрге өтетуғынлығына аңсат көз жеткерийўге болады.

Биз қарап атырған мәселедеги (2.4.69)-толқын функцияларының сапалық түри 4.17-сүүретте келтирилген. Потенциал шуқырдың ишинде толқын функциялары синусоида түрине ийе, ал шуқырдан сыртта экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Үлкен энергияға ийе ҳаллар ушын (яғный  $U_0 - E$  айырмасы киши болғанда) толқын функциялары шуқырдың шетлеринде үлкен мәнислерге ийе болады ҳәм шуқырдан қашықласқанда әстелик пенен киширейеди.

Енди бөлекшениң энергиясы үлкен, яғный  $E > U_0$  шәрти орынланатуғын жағдайды қараймыз. (2.4.6) Шредингер теңлемеси I, II ҳәм III областларда төмендегидей шешимлерге ийе болады:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 e^{i\tilde{k}_1 x} + B_1 e^{-i\tilde{k}_1 x}, \quad x < a, \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad 0 < x < a, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{i\tilde{k}_1 x} + B_3 e^{-i\tilde{k}_1 x}, \quad x > a.\end{aligned}\tag{2.4.71}$$

Бул аңлатпада

$$\tilde{k}_1 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.\tag{2.4.72}$$

(2.4.71)-аңлатпаға сәйкес бул толқын функцияларының ҳәр қайсысы еки де Бройль толқынының қосындысынан турады: бирейи  $+x$  бағытында, ал екіншиси оған қарама-қарсы бағытта қозғалады. Анықлық ушын бөлекше шуқырға  $x$  тың терис мәнислери тәрептен жақынласады деп есаплайық (бул бөлекшениң шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалатуғынлығына сәйкес келеди). Бундай жағдайда  $\psi_3(x)$  ушын жазылған аңлатпадағы екінши қосылыўдың болмаўы керек. Себеби бул қосылыўшы бөлекшениң  $+\infty$  тен шуқырға қарай қозғалыўына, яғный оң тәрептен шеп тәрепке қарай қозғалыўына сәйкес келеди. Демек  $B_3$  коэффициентин нолге тең деп есаплаў керек.

$\psi_1(x)$  функциясындағы биринши қосылыўшы шуқырға  $-\infty$  тен келип түсетуғын толқынға, екіншиси шуқырда шағылысқан толқынға сәйкес келеди.  $\psi_2(x)$  функциясындағы биринши қосылыўшы  $A_2 e^{ik_2 x}$  толқыны  $x = 0$  шегарасында шағылысқан толқынды, екінши қосылыўшы  $x = a$  шегарасында шағылысқан толқынды береді.  $\psi_3(x)$  толқын функциясы болса бир қосылыўшыға ийе ҳәм ол өтийўши толқынға сәйкес келеди. Бул мәселеде де келип түсийўши толқынның амплитудасын 1 ге тең деп есаплаймыз (яғный  $A_1 = 1$ ).

$x = 0$  ҳәм  $x = a$  ноқатларында толқын функцияларын ҳәм олардың туўындыларын жалғастырыў шәртлери төмендегидей теңлемелер системаларына алып келеди

$$1 + B_1 = A_2 + B_2,$$



$$\begin{aligned} i\tilde{k}_1 - i\tilde{k}_1 B_1 &= ik_2 A_2 - ik_2 B_2, \\ A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} &= A_3 e^{i\tilde{k}_1 a}, \\ ik_2 A_2 e^{ik_2 a} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 a} &= ik_1 A_3 e^{i\tilde{k}_1 a}. \end{aligned}$$

Бул алгебралық теңлемелерди шешиў жолы менен  $B_1$ ,  $A_2$ ,  $B_2$  хәм  $A_3$  коэффициентлерин табамыз. Бул теңлемелер системасы  $\tilde{k}_1$  менен  $k_2$  параметрлериниң қәлеген мәнисинде шешимге ийе болғанлықтан (яғный энергия  $E$  ниң қәлеген мәнислеринде шешимге ийе болғанлықтан) бөлекше үзликсиз энергия спектрине ийе болады деген жуўмаққа келемиз.

Өткен толқынның амплитудасы  $A_3$  ушын төмендегидей аңлатпа аламыз:

$$A_3 = \frac{4\tilde{k}_1 k_2 e^{i\tilde{k}_1 a}}{(\tilde{k}_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (\tilde{k}_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}}.$$

Бөлекшениң шуқырдың үсти менен өтиўи итималлығын характерлейтуғын  $D$  өтиў коэффициентини (2.4.37)-аңлатпаның жәрдемінде есапланады. Келип түсиўши хәм өткен толқынлар ушын итималлық ағысы тығызлығы векторы (2.4.36)-, (2.4.37)- хәм (2.4.70)-аңлатпаларға сәйкес

$$|\vec{j}_{\text{к.т}}| = \frac{\hbar \tilde{k}_1}{m}, \quad |\vec{j}_{\text{өтиўши}}| = \frac{\hbar \tilde{k}_1}{m} |A_3|^2$$

түрине ийе болады. Солай етип

$$D = |A_3|^2 = \left| \frac{4\tilde{k}_1 k_2 e^{i\tilde{k}_1 a}}{(\tilde{k}_1 + k_2)^2 e^{ik_2 a} - (\tilde{k}_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}} \right|^2 \quad (2.4.73)$$

формуласына ийе боламыз. (2.4.73)-аңлатпаға (2.4.72)-аңлатпадан  $\tilde{k}_1$  менен  $k_2$  шамаларының мәнислерин қойсақ

$$D = \left[ 1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \right]^{-1} \quad (2.4.74)$$

формуласын аламыз. (2.4.74)-аңлатпадан өтиў коэффициентини  $D$  ның бөлекшениң энергиясы  $E$  менен потенциал шуқырдың тереңлиги  $U_0$  арасындағы айырмаға байланыслы екенлиги көринип тур.  $E - U_0$  айырмасы улыўма жағдайларда 1 ден киши. Бул жағдай хәтте  $E > U_0$  болған ситуацияларда да бөлекшениң потенциал шуқырдағы шағылысыўының итималлығының нолге тең емес екенлигин аңғартады. Классикалық физикада пүткиллей жоқ бундай қубылыс бөлекшеде толқынлық қәсийетлердиң бар болыўы менен түсиндириледі.

$\sin^2 k_2 a = 0$  болғанда өтиў коэффициентини  $D$  бирге тең болады. Бундай жағдайда бөлекше шуқырдың шегараларында шағылыспайды. Бул шәрт  $k_2 a = \pi n$  болғанда, яғный бөлекшениң энергиясы

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.75)$$

шамаларына тең болған жағдайларда орынланады.

Жоқарыда келтирилген таллау 2-бапта келтирилген Рамзауэр тәжірийбесин квантлық механика түсіндіре алады. Бул тәжірийбеде инерт газы атомларының энергиясы белгили бир мәнислерге ийе болған электронлар ушын мөлдір екенлигин көрсетти. Рамзауэр тәжірийбесинің нәтийжелерин үш өлшемлі потенциал шуқыр областындағы электронның қозғалысын қарап болғаннан кейін толығырақ түсіндіріуіге болатуғынлығы сөзсиз. Бирақ бир өлшемлі мәселени шешкенде алынған нәтийжелер де Рамзауэр тәжірийбесинің нәтийжелерин тек сапалық жақтан емес, ал санлық жақтан да түсіндіріуі мүмкиншилигине ийе.

$k_2 a = \pi n$  шәртин былайынша да жазыуға болады

$$2a = \lambda_{db} n. \quad (2.4.75)$$

(2.4.75)-аңлатпада  $\lambda_{db}$  арқалы шуқырдың ишиндеги бөлекшениң де Бройль толқын узынлығы белгиленген. Бул шәрт шуқырдың еки шегарасында шағылысқан толқынлардың интерференциясының салдарынан толқынлардың бир бирин сөндириуіне сәйкес келеди. Толқын оптикасында бақланатуғын тап усындай кубылысты оптиканы жақтыландырыу деп аталады.

**4.8-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше бир өлшемлі, дийуалларының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырда жайласқан. (2.4.12-сүүрет). Шуқырдың тереңлиги  $U_0$ , ал кеңлиги  $a$  шамасына тең. Бөлекшеде тек бир  $E = \frac{U_0}{2}$  шамасына тең энергияның қәдди бар деп есаплап мыналарды табыңыз:

а) бундай шуқырдағы  $U_0 a^2$  шамасын;

б) бөлекшениң координатасының ең итимал болған мәнисин (оны  $x_{\text{ең итимал}}$  деп белгилеймиз;

в)  $x > a$  областында бөлекшени табыудың итималлығын.

**Шешими:**  $E < U_0$  теңсизлиги орынланғанда бөлекшениң энергиясының мүмкин болған мәнислерин анықлайтуғын шәрт (2.4.63)-аңлатпа түрінде болады

$$\sin k_1 a = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} k_1 a.$$

Бул аңлатпада  $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ . Бул аңлатпаға  $E = \frac{U_0}{2}$  мәнисин қойсақ

$$\sin \frac{a\sqrt{mU_0}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

аңлатпасын аламыз. Шуқырда тек бир энергия қәдди жайласатуғын болғанлықтан синустың аргументинің мәниси  $\pi/2$  ден  $\pi$  ге шекемги шеклер ишинде жайласқан болыуы керек. (2.4.63-формуладан кейинги таллауды қараңыз). Демек теңлемениң шешими

$$\frac{a\sqrt{mU_0}}{\hbar} = \frac{3\pi}{4}$$

түрінде болады. Буннан шуқырдың тереңлиги менен кеңлигинің

$$a^2 U_0 = \frac{9}{16} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m}$$

шәртин қанаатландырыуының керек екенлигин көреміз. Енди бөлекшениң координатасының ең итимал болған  $x_{\text{ең итимал}}$  мәнісін табамыз.

Бөлекшени шуқырдың ишинде табыўдың итималлығының тығызлығы толқын функциясының модулинің квадратының жәрдемінде анықланатуғынлығын билеміз. Бул шаманы  $|\psi(x)|^2$  арқалы белгилейміз. Шуқырдың ишинде (2.4.60a аңлатпаға қараңыз)  $|\psi(x)|^2 \sim \sin^2 k_1 x$  болғанлықтан, экстремум мәселесін шешиў арқалы

$$\frac{d|\psi(x)|^2}{dx} \sim \sin 2 k_1 x = 0$$

теңлемесін аламыз. Буннан  $2k_1 x_{\text{ең итимал}} = \pi m$  теңлигине ийе боламыз (бул аңлатпада  $m = 1, 2, 3, \dots$ ).  $k_1 a < \pi$  теңсизлигинен алынған шешимде тек  $m = 1$  мәнісін ғана қалдырыуымыз керек болады. Солай етип

$$x_{\text{ең итимал}} = \frac{\pi}{2k_1} = \frac{\pi \hbar}{2\sqrt{mU_0}}.$$

$a^2$  пенен  $U_0$  арасындағы байланысты есапқа алсақ

$$x_{\text{ең итимал}} = \frac{\pi \hbar}{2\sqrt{m \frac{9}{16} \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}}} = \frac{2}{3} a$$

түріндегі ең ақырғы аңлатпаны аламыз.

Енди бөлекшени  $x > a$  областында табыўдың итималлығын табамыз.  $P_1$  хәм  $P_2$  арқалы бөлекшени сәйкес шуқырдың ишинде хәм сыртында табыўдың итималлығын белгилейик. (2.4.60a) хәм (2.4.60b) толқын функцияларының түрлерін есапқа алсақ

$$P_1 = \int_0^a A^2 \sin^2 k_1 x \, dx, \quad P_2 = \int_a^\infty C^2 e^{-2k_2 x} \, dx$$

формулаларын аламыз. Бул жерде  $k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} = k_1 = \frac{3\pi}{4a}$ .

$A$  хәм  $C$  амплитудалары арасындағы байланысты  $x = a$  ноқатында толқын функцияларын жалғастырыў шәртинен аламыз

$$A \sin k_1 a = C e^{-k_2 a}.$$

$k_1 = \frac{3\pi}{4a} = k_2$  екенлигин хәм  $\sin k_1 a = \frac{\sqrt{2}}{2}$  екенлигин есапқа алсақ, онда

$$\frac{A}{C} = \frac{e^{-\frac{3\pi}{4}}}{\frac{\sqrt{2}}{2}} = \sqrt{2} e^{-\frac{3\pi}{4}}$$

аңлатпасына ийе боламыз.  $P_1$  хәм  $P_2$  итималлықтарының қатнасы

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{A^2}{C^2} \cdot \frac{\int_0^a \sin^2 \frac{3\pi}{4a} x dx}{\int_a^\infty e^{-\frac{3\pi}{2a} x} dx} = 2e^{-\frac{3\pi}{2}} \frac{a(3\pi + 2)}{6\pi \frac{2a}{3\pi} e^{-\frac{3\pi}{2}}} = \frac{3\pi + 2}{2}$$

шамасына тең болып шығады.  $P_1 + P_2 = 1$  екенлигин есапқа алсақ, онда  $P_2$  үшін

$$P_2 = \frac{2}{3\pi + 4} = 0,149$$

шамасына ийе боламыз. Бул алынған нәтиже  $\sim 15\%$  шамасына тең жеткиликли дәрежедеги итималлық пенен бөлекше потенциал шуқырдың сыртында бола алады деген жуўмақты аңғартады.

**4.9-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше тереңлиги  $U_0$  болған туўры мүйешли потенциал шуқырға шептен оң тәрепке қарай келип түседі (2.4.15-сүўрет). Бөлекшениң толық энергиясы  $E > U_0$  белгили деп есаплап бөлекшениң шуқырдан шағылысыў коэффициенті максималлық мәниске ийе болатуғындай шуқырдың кеңлиги  $a$  ның мәнисин есаплаңыз.

Шешими: Потенциал шуқырдағы бөлекшениң шағылысыўы квантлық эффект болып табылады. Классикалық бөлекше шуқырда шағылыспайды. Шуқыр областында оның кинетикалық энергиясы менен тезлиги өседі. Толқынның қалеген тосқынлықтан шағылысатуғынлығы сыяқлы квантлық бөлекше толқынлық қасиетке ийе болғанлықтан шуқырда шағылысады.

$R$  шағылысыў коэффициенті менен  $D$  өтиў коэффициенті бир бири менен  $R = 1 - D$  қатнасы менен байланысқан болғанлықтан шағылысыўдың максимумы өтиў коэффициенті  $D$  минималлық мәниске ийе болғанда бақланады. (2.4.74)-аңлатпаға сәйкес өтиў коэффициенті  $D$  мынадай түрге ийе болады

$$D = \left[ 1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \right]^{-1}$$

Бул аңлатпада  $k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ . Шуқырдың кеңлиги  $a$  шамасының хәр қандай мәнислеріндеги  $D$  ның мимимумы  $|\sin^2 k_2 a| = 1$  болған жағдайда орын алады. Буны былайынша жазамыз

$$k_2 a = (2m + 1) \frac{\pi}{2}, \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Буннан бөлекшениң шағылысыўы максималлық болатуғын шуқырдың кеңлиги  $a$  ны табамыз

$$a = \frac{(2m + 1)\pi \hbar}{\sqrt{8mE}}.$$

Бул шәртти былайынша көширип жазыўға болатуғынлығын атап өтемиз

$$a = \frac{2m + 1}{4} \lambda_{ab}.$$

Бул аңлатпада  $\lambda_{db} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}$  арқалы шуқырдағы бөлекшениң де Бройль толқыны ұзындығы белгиленген.

## 2-4-5. Квантлық гармоникалық осциллятор

Гармоникалық осциллятор деп гармоникалық тербеле алатуғын системаға айтады. Физикада гармоникалық осциллятор модели әсиресе системалардың орнықты орны әтирапындағы киши тербеліслерін изертлегенде әхмийетли орынды ийелейди. Бундай тербеліслерге мысал ретінде қатты денелердеги, молекулалардағы атомлардың тербеліслерін келтириу мүмкин.

$x$  көшери бойлап квазисерпимли  $F = -kx$  күшиниң тәсирінде жүзеге келетуғын бир өлшемли гармоникалық осцилляторды қараймыз. Бундай осциллятордың потенциал энергиясы

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \quad (2.4.77)$$

түрінде жазылады. Бул аңлатпада  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  арқалы классикалық гармоникалық осциллятордың меншикли тербеліс жийилиги белгиленген.

Солай етип гармоникалық осциллятордың квантлық механикалық мәселеси бөлекшениң (2.4.77)-параболалық потенциал шуқырдағы қозғалысы мәселесине алып келинеди.

Дәслеп классикалық гармоникалық осциллятордың қәсийетлерін қарап өтеміз. Мейли толық энергиясы  $E$  болған бөлекше (2.4.77) күш майданында тербелсин (2.4.18-сүүрет). 2.4.18-сүүреттеги  $a_0$  хәм  $-a_0$  ноқатларында бөлекшениң толық энергиясы потенциал энергияға ийе болады [яғный  $E = U(x)$ ] хәм сонлықтан бул ноқатлар бурылыу ноқатлары да болып табылады. Бөлекше потенциал шуқырдың ишинде оның дийуаллары арасындағы  $[-a_0, a_0]$  кесиндисинде тербелмели түрде қозғалады. Оның шеклеринен бөлекше шығып кете алмайды. Тербеліс амплитудасы  $a_0$  ның мәніси  $a_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}$  формуласының жәрдемінде анықланады.

Квантлық механикада гармоникалық осциллятор ҳаққындағы мәселени шешкенде (2.4.77)-потенциал энергиясы қойылған (2.4.6)-Шредингер теңлемесин шешиу керек болады

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right] \psi = 0, \quad -\infty < x < +\infty. \quad (2.4.78)$$

Төмендегидей шамаларды киргиземиз

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega_0} \text{ хәм } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} \quad (2.4.79)$$

және  $\xi = \frac{x}{x_0}$  бирликлери жоқ жаңа өзгеріушиге өтсек (2.4.78)-аңлатпаны

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [\eta - \xi^2] \psi = 0 \quad (2.4.80)$$

түрине алып келеміз. Таллаулар (2.4.80)-теңлемениң шешімлериниң  $\eta$  шамасының барлық мәніслерінде емес, ал

$$\eta = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

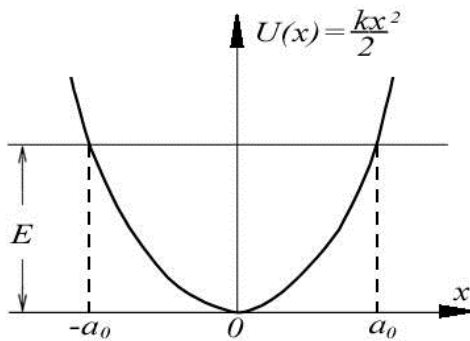
мәніслерінде ғана үздіксіз хәм шекли болатуғынлығын көрсетеди.

(2.4.79)-аңлатпаға сәйкес осциллятордың энергиясы болған  $E$  шамасын  $\eta$  арқалы аңғартсақ, онда

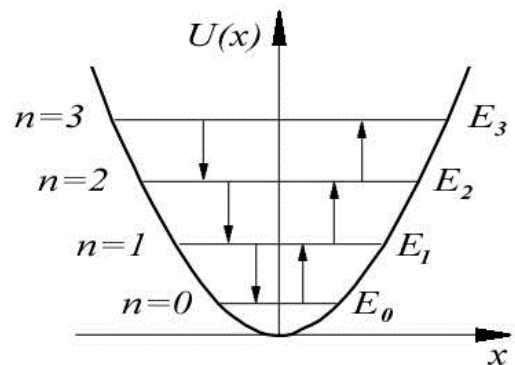
$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.81)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул формула гармоникалық осциллятордың энергиясының квантланыуы нызамын анықлайды. Биз бул жерде гармоникалық осциллятордың энергиясының қаддилериниң эквидистантлық екенлигин көреміз (яғный бир биринен бирдей  $\Delta E = \hbar\omega_0$  қашықлықларында жайласады). Тууры мүйешли потенциал шуқырда жайласқан бөлекше ушын биз басқаша нәтийже алғанлығымызды атап өтеміз (2.4.19-сүүрет).

(2.4.81)-спектрдиң және бир әхмийетли өзгешелиги ноллик тербеліслер деп аталатуғын тербеліслердиң бар екенлигинде. Оның энергиясы  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$  шамасына тең хәм  $n = 0$  болған хал ушын алынады. Гармоникалық осциллятордың нолге тең емес минималлық энергиясының болыуы барлық квантлық системалар ушын тән хәм анықсызлық қатнастарының нәтийжеси болып табылады. Хәқыйқый квантлық системаларнда, мысалы кристалларда бундай тербеліслердиң абсолют нол температурасына жүдә жақын температураларда да сақланатуғынлығын көп санлы тәжірийбелер көрсетеди. Абсолют нол температурада жыллылық тербеліслериниң толық сөнийі керек.



2.4.18-сүүрет.



2.4.19-сүүрет.

Ноллик тербеліслер физикада оғада үлкен орын ийелейди. Мысалы нормал басымларда суйық гелий абсолют нол температурада да кристалланбайды. Ноллик тербеліслердиң бар екенлигин көп санлы тәжірийбелер дәлиллейди.

Ноллик тербеліслериниң энергиясы  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$  шамасының мәнісиниң қандай болатуғынлығын анықсызлық қатнастары тийкарында бахалайық (басқа сөз бенен айтқанда анықсызлық қатнастарының талаптары бойынша ноллик энергияның мәнісиниң қандай болатуғынлығын көрейік).

Гармоникалық осциллятор  $x = x_0 \cos \omega_0 t$  нызамы бойынша тербелетуғын болсын. Координата басын гармоникалық осциллятордың тең салмақлық ауқалы

орынланатуғын ноқатта жайластырамыз. Бундай жағдайда координатаның анықсызлығы  $\Delta x$

$$\Delta x = \sqrt{x^2} = \sqrt{a_0^2 \cos^2 \omega_0 t} = \sqrt{\frac{1}{2}} a_0$$

шамасына тең болады. Тербелислер амплитудасы  $a_0$  энергия  $E$  менен  $E = \frac{1}{2} m a_0^2 \omega_0^2$  аңлатпасы арқалы байланысқан. Сонлықтан

$$\Delta x = \sqrt{\frac{E}{m \omega_0^2}}.$$

Тап сол сыяқлы импульстің анықсызлығы үшін төмендегі аңлатпаға ийе боламыз

$$\Delta p = \sqrt{p^2} = \sqrt{m^2 a_0^2 \omega_0^2 \sin^2 \omega_0 t} = \sqrt{\frac{1}{2}} m a_0^2 \omega_0^2 = \sqrt{mE}.$$

$\Delta x$  пенен  $\Delta p$  шамаларын  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  анықсызлық қатнасына қойсақ, онда

$$E \geq \frac{\hbar \omega_0}{2}$$

шәртин аламыз. Соның менен бирге биз жоқарыда алған гармоникалық осциллятордың минималлық энергиясы  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$  шамасына тең еді.

Гармоникалық осциллятордың энергия қәддилеринің эквидистантлығы (2.4.83) биринши рет қарағанда осциллятордың  $\omega = \Delta n \cdot \omega_0$  жиілигиндегі нурларды шығаратуғынлығын хәм жутатуғынлығын көрсетеді. Бул аңлатпада  $\Delta n$  арқалы осциллятордың дәслепки хәм соңғы қәддилери арасындағы айырма белгиленген. Бирақ бул дурыс емес. Бул курстың шеклеринен шығып кететуғын дәл есаплаулар гармоникалық осциллятор тәрәпинен электромагнит нурларды жутыу менен шығарыуда тек қоңсылас қәддилер арасындағы өтиулердің мүмкин екенлигин көрсетеді, яғный

$$\Delta n = \pm 1. \quad (2.4.82)$$

Системаның бир қалдан екинши қалға өткендегі квантлық санларның өзгеріуін анықлайтуғын шәртлерді таңлау қағыйдалары деп атайды. Солай етип гармоникалық осциллятор тәрәпинен электромагнит нурларын шығарыу хәм жутыуды характерлейтуғын таңлау қағыйдасы (2.4.82)-аңлатпа болып табылады.

Енді гармоникалық осциллятордың толқын функцияларын таллауға өтеміз. Өзгеріуші коэффициентлерге ийе дифференциаллық теңлемелер теориясында (2.4.80) теңлемениң шешімлеринің мына түрге ийе болатуғынлығы көрсетиледі:

$$\psi_n(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.4.83)$$

Бул аңлатпада  $H_n(\xi)$  арқалы  $n$ -тәртіпті Чебышев-Эрмит полиномы белгіленген. Ол төмендегі формула бойынша есепланады:

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (2.4.84)$$

Бундай полиномлар үшін

$$H_{n+1}(\xi) + 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi) = 0$$

рекуррентли аңлатпаның дурыс екенлігін атап өтемиз. Бул рекуррентли аңлатпа  $H_0(\xi) \equiv 1$  екенлігі тийкарында барлық  $n$  лер үшін  $H_n(\xi)$  шамаларының мәнісін анықлауға мүмкіншілік береді. Мысалы

$$\begin{aligned} H_2(\xi) &= 2\xi H_1(\xi) - 2H_0(\xi) = 4\xi^2 - 2. \\ H_3(\xi) &= 2\xi H_2(\xi) - 4H_1(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \end{aligned}$$

хәм тағы басқалар. (2.4.83) тиң толқын функциялары ортонормировкаланған, яғный

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{mn}$$

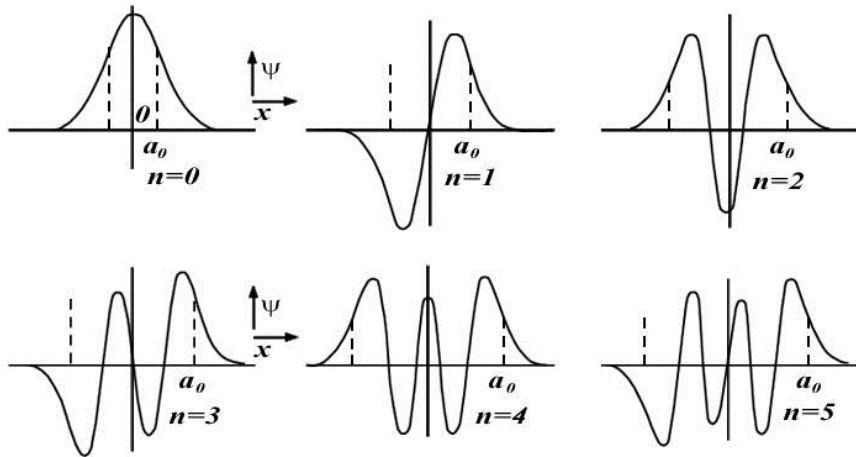
шәртин қанаатландырады. Бул аңлатпада  $\delta_{mn}$  арқалы (2.4.18) Кронекер символы белгіленген.

Гармоникалық осциллятордың биринші үш энергия қәдді үшін толқын функцияларын келтиремиз

$$\begin{aligned} n = 0, \quad \psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \\ n = 1, \quad \psi_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{2x_0 \sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \\ n = 2, \quad \psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{8x_0 \sqrt{\pi}}} \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right). \end{aligned} \quad (2.4.85)$$

$n$  квантлық санның 0 ден 5 ке шекемгі мәнісіндегі толқын функцияларының графиклери 2.4.20-сүүретте келтирилген.  $[-a_0, a_0]$  кесиндиси классикалық осциллятор тербелетуғын областты анықлайды. Бул областтың кеңлігі  $n$  квантлық санның хәр бир мәнісі үшін хәр қыйлы болып шығады. Себеби осциллятордың энергиясы да хәм оның тербелісінің амплитудасы да  $n$  нен ғәрезли болады.





(2.4.83) – (2.4.85) аңлатпалардан гармоникалык осциллятордың толқын функцияларының белгили бир жуплыққа ийе екенлиги келип шығады. Бул толқын функциялары  $n$  квантлық санның мәнісін жуп хәм  $n = 0$  болғанда  $x$  координатасының жуп функциялары болып табылады. Квантлық сан  $n$  ниң мәнісін толқын функциясының  $x$  көшери кесип өтиў нокатларының санын да анықлайды. Тийкарғы ҳалда, яғный  $n = 0$  болғанда параболалық шұқырдың ишинде бир де кесилисиў нокаты болмайды,  $n = 1$  болғанда бир кесилисиў нокаты, ал  $n = 2$  теңлиги орынланғанда еки кесилисиў нокаты бар болады. Солай етип квантлық сан  $n$  ниң мәнісін бир бирликке артқанда гармоникалык осциллятордың толқын функциясы жуплығын өзгертеди хәм  $x$  көшери менен кесилисиў нокатын 1 ге арттырады.

Классикалык  $[-a_0, a_0]$  областынан сыртта  $\psi_n$  толқын функциялары нолге тең емес екенлигин атап өтемиз. Бул квантлық гармоникалык осциллятордың белгили бир итималлық пенен параболалық потенциал областының сыртында да тура алатуғынлығын билдиреди. 4.10-мәселеде тийкарғы ҳалда турған гармоникалык осциллятордың классикалык областының сыртында тура алыў итималлығы есапланған.

$n$  квантлық санының киши мәніслеринде толқын функциясының модулиниң квадраты  $|\psi_n(x)|^2$  арқалы анықланатуғын бөлекшени табыўдың итималлығы 2.4.21-сүрөтте пунктир сызық пенен көрсетилген классикалык осцилляторды табыўдың итималлығының тығызлығы болған

$$\frac{dP}{dx} = \frac{1}{\pi\sqrt{a_0^2 - x^2}} \quad (2.4.86)$$

шамасына тең болады.

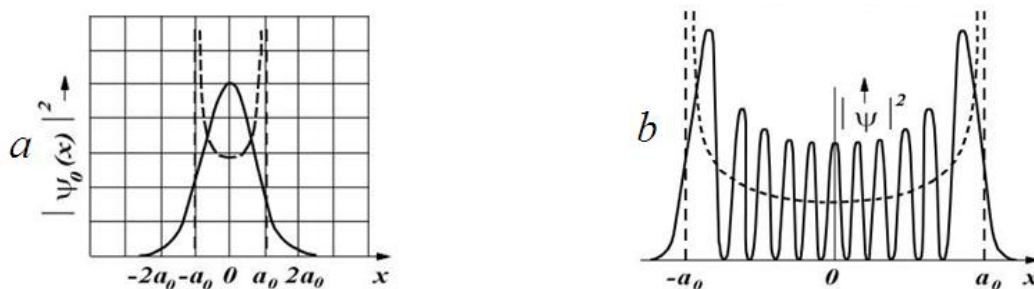
Классикалык осциллятордың итималлығының тығызлығы болған (2.4.86)-аңлатпаны былайынша алыў мүмкин. Мейли  $dt$  ўақыты ишинде бөлекше координатасы  $x$  болған нокаттан координатасы  $x+dx$  болған нокатқа өтетуғын болсын. Яғный оның координатасы кеңлиги  $dx$  болған шамаларға өзгеретуғын болсын. Гармоникалык тербелислер ушын  $x = a_0 \sin \frac{2\pi}{T}t$  болғанлықтан  $dx = a_0 \frac{2\pi}{T} \cos \frac{2\pi}{T}t dt$ . Сонлықтан бөлекше бир тәрепке қарай қозғалғанда кеңлиги  $dx$  болған интервалда болыўының итималлығы  $dP = \frac{dt}{T/2} = \frac{dx}{a_0 \pi \cos \frac{2\pi}{T}t} = \frac{dx}{\pi\sqrt{a_0^2 - x^2}}$  болып

шығады хәм буннан (2.4.86)-формула келип шығады.

$n = 0$  болған жағдайда квантлық осцилляторды табыудың итималлығы  $|\psi_n(x)|^2$  максимумы  $x = 0$  нокатында жайласқан Гаусс иймеклигинің формасындай формаға ийе болады (2.4.21-сүүреттеги тутас сызық). Ал классикалық осцилляторды табыудың итималлығының тығызлығы  $x = 0$  нокатында минималлық мәніске ийе хәм бурылыұ нокатларында (бундай нокатларда бөлекшелердің тезлиги нолге тең болады, 2.4.21а сүүреттеги пунктир сызық) шексизликке умтылады.

$n$  санының жеткиликли дәрежедеги үлкен мәніслерінде (мысалы  $n = 10$  болғанда)  $|\psi_n(x)|^2$  функциясы классикалық тарқалыұ иймеклигине жақынласады. Бул функция бурылыұ нокаты қасында максимумға жетеди хәм классикалық областтан сыртта кескин түрде төменлейди (2.4.21б сүүрет).  $n \rightarrow \infty$  шегінде  $|\psi_n(x)|^2$  иймеклиги итималлық тығызлығының классикалық тарқалыұ функциясына өтеди.

Биз қарап өткен гармоникалық осциллятор модели хәм усы модель менен байланысly болған бөлекшениң параболалық потенциал шуқырдағы қозғалысы хаққындағы мәселе идеалластырыұ болып табылады. Бундай мәселени шешиұ тербелиұшы бөлекшениң тең салмақлық аұхалы этирапындағы киши тербелислерінде ғана хақыйқатлыққа жақын нәтийжелерди береди. Барлық хақыйқый ситуацияларда өзиниң тең салмақлық аұхалы этирапында тербелиұшы бөлекшениң  $U(x)$  потенциал энергиясы (2.4.79) ға салыстырғанда әдеұир құрамалы түрге ийе болады. Сонлықтан амплитуда үлкейген жағдайда амплитуданың базы бир шамасынан баслап бөлекшениң қозғалысы гармоникалық тербелислерден көбирек айырмаға ийе бола баслайды. Бундай қозғалысты ангармоникалық қозғалыс, ал сәйкес осцилляторды ангармоникалық осциллятор деп атайды. Бирақ киши тербелислерде ангармонизмнің тәсири жүдә киши. Сонлықтан бундай жағдайда квантлық механикалық системалардың тербелмели қозғалысын тәрийиплеұ ушын гармоникалық осциллятор моделинен пайдаланыұ имканиятын береди.



2.4.21-сүүрет

Бул бапта туұры мүйешли хәм парабола тәризли потенциал шуқырлардағы бөлекшениң қозғалысларын талладық хәм шуқырдың формаларының хәр қыйлы болыұына қарамастан шуқырлардағы бөлекшениң қәсийетлерінде көп улыұмалықлардың бар екенлигин көрдик:

1. Шуқырдың ишинде қозғалыұшы бөлекшениң энергия спектри дискрет спектр болып табылады, яғный энергия квантланады.

2. Тийкарғы халда турған бөлекшениң, яғный ең төменги энергия қәддинде турған бөлекшениң энергиясы нолге тең емес.

3. Бөлекшени табыудың итималлығының тығызлығы  $|\psi(x)|^2$  классикалық бурылыұ нокатлары арасында максимумге ийе хәм классикалық областтың сыртында экспоненциал нызам бойынша киширейеди. Бул жағдай бөлекшениң белгили бир итималлық пенен шуқырдың сыртында да жасай алатуғынлығын көрсетеди (дийұалларының бийиклиги шексиз болған, яғный өткермейтуғын дийұаллары бар потенциал шуқырда бул жағдай орын алмайды).

4. Квантлық сан  $n$  ниң мәнісін бирге өзгергенде шуқырдағы бөлекшени тәрийиплейтуғын толқын функциясының  $x$  көшери менен кесилисиу ноқатларының саны 1 ге артады..

Жоқарыда келтирилген қасиетлердің барлығының потенциал шуқырдың қасиетлерінен ғарезсиз, яғный  $U(x)$  потенциал энергияның түрінен байланыссыз екенлігін атап өтеміз.

Және бир аўхалды атап өтеміз: бөлекше тек потенциал шуқырдың ишінде турған жағдайда ғана оның энергиясының спектри дискрет болады (энергия квантланады). Егер бөлекше потенциал табалдырық, барьер ямаса потенциал шуқырдың үстіннен қозғалатуғын болса ( $E > U_0$  болған жағдайда) оның энергия спектри үзликсиз спектрге айланады (энергияның квантланыуы орын алмайды). Бул нәтийже квантлық механиканың улыўмалық теориясына сәйкес келеди: бул теорема бойынша энергия шексизлікке шекем кете алмайтуғын системаларда квантланады, ал шексизлікке шекем кете алатуғын системаларда энергияның квантланыуы бақланбайды.

**4.10-мәселе.** Гармоникалық осциллятор тийкарғы ҳалда тур. Классикалық областтың сыртында (яғный  $-a_0 \leq x \leq a_0$  областының сыртында,  $a_0$  арқалы классикалық тербеліслердің амплитудасы белгиленген) бөлекшени табыўдың итималлығын табыңыз.

**Шешими:** Осциллятор тийкарғы ҳалда турғанлықтан (2.4.81)- ҳәм (2.4.83)- аңлатпаларға сәйкес оның энергиясы  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$ , ал бөлекшениң ҳалын тәрпийлейтуғын толқын функциясы  $\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$  түріне ийе болады.

$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  арқалы классикалық осциллятордың жийилигі белгиленген. Ал  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$  аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Классикалық осциллятор өзиниң тең салмақлық орнынан максимал аўысқанда оның толық энергиясының шамасы потенциал энергияның шамасына тең болады, яғный

$$\frac{ka_0^2}{2} = \frac{\hbar\omega_0}{2}.$$

Буннан классикалық тербеліслердің амплитудасының мәнісін ала аламыз

$$a_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_0 m}} = x_0.$$

Бөлекшени классикалық областта табыўдың итималлығын табамыз

$$P_{\text{кл}} = \int_{-a_0}^{a_0} |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{x_0 \sqrt{\pi}} \int_{-a_0}^{a_0} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^1 e^{-y^2} dy = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy.$$

Бул аңлатпада  $y = \frac{x}{x_0}$ . Интеграл астында  $y$  өзгеріушисиниң жуп функциясы турғанлықтан

$$P_{\text{кл}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy$$

аңлатпасына ийе боламыз.

$$I(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-y^2} dy$$

интегралын итималлықтар интегралы деп атаймыз. Бул интеграл итималлықтар теориясында, теориялық хәм математикалық физикада кеңнен қолланылады. Хәзирги заман универсаллық программалау пакетлери бул интегралдың мәнисин аңсат есаплап бере алады. Мысалы Mathematica 8.0 тилинде  $N[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-y^2} dy]$  командасы менен есаплау жүргизгенде 0.8427007929497149 нәтийжесин береді. Демек

$$P_{\text{кл}} = 0,8427 \approx 0,84.$$

Демек бөлекшениң классикалық областының сыртында табыудың итималлығы

$$P = 1 - P_{\text{кл}} \approx 0,16$$

шамасына тең екен.

Солай етип тийкарғы халдағы гармоникалық осциллятордың классикалық областтан сыртта табылуының итималлығы 16 процентке тең, яғный әдеуір үлкен шаманы қурайды.

**4.11-мәселе.** Жийилиги  $\omega_0$  болған квантлық гармоникалық осциллятор биринши қозған халда тур. Осциллятордың кинетикалық энергиясының орташа мәниси  $\langle E_k \rangle$  менен потенциал энергиясының орташа мәниси  $\langle U \rangle$  шамасының мәнисин анықлаңыз.

**Шешими:** Осциллятор биринши қозған халда турғанлықтан оның энергиясы (2.4.81)-аңлатпа бойынша  $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$  шамасына тең, ал сәйкес толқын функциясы болса (2.4.85)-аңлатпаларға сәйкес  $\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$  түрінде жазылады.

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}.$$

Биз қарап атырған мәселедеги потенциал хәм кинетикалық энергия операторлары былайынша жазылады:

$$\hat{U} = \frac{m_0\omega_0^2 x^2}{2} \text{ хәм } \hat{E}_k = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}.$$

(3.62)-аңлатпаға сәйкес кинетикалық энергиясының орташа мәниси  $\langle E_k \rangle$  менен потенциал энергиясының орташа мәниси  $\langle U \rangle$  былайынша анықланады

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{U} \psi_1(x) dx, \quad \langle E_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{E}_k \psi_1(x) dx$$

Гармоникалық осциллятордың потенциал энергиясының орташа мәнісін табамыз

$$\langle U \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \frac{m_0 \omega_0^2 x^2}{2} \psi_1(x) dx = \frac{m_0 \omega_0^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi_1(x)|^2 dx.$$

$\psi_1(x)$  функциясының анық түрін есепке алсақ

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \frac{m_0 \omega_0^2 x_0^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{x}{x_0}\right)^4 e^{\frac{x^2}{x_0^2}} d\left(\frac{x}{x_0}\right) = \frac{m_0 \omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \\ &= \frac{2m_0 \omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \frac{2m_0 \omega_0^2 x_0^2}{\sqrt{\pi}} I_1 \end{aligned}$$

аңдатпасына ийе боламыз. Бұл аңдатпада  $y = \frac{x}{x_0}$ .  $I_1 = \int_0^{+\infty} y^4 e^{-y^2} dy = \frac{3}{8} \sqrt{\pi}$ .

Солай етип, биринши қозған халда тұрған гармоникалық осциллятордың потенциал энергиясының орташа мәнісін

$$\langle U \rangle = \frac{2m_0 \omega_0^2}{\sqrt{\pi}} \frac{\hbar}{m \omega_0} \frac{3}{8} \sqrt{\pi} = \frac{3}{4} \hbar \omega_0$$

шамасына тең екен. Енді кинетикалық энергиясының орташа мәнісін табамыз.

$$\langle E_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \hat{E} \psi_1(x) dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x) \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} dx.$$

$\psi_1(x)$  функциясының координата  $x$  бойынша екінші туыңдысы

$$\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2x_0 \sqrt{\pi}}} \frac{2}{x_0} \left( -\frac{3x}{x_0^2} + \frac{x^3}{x_0^4} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}$$

түріне ийе болады.  $\psi_1^*(x)$  хәм  $\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2}$  шамаларын  $\langle E_k \rangle$  ушын алынған аңдатпаға қойсақ

$$\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2x_0 \sqrt{\pi}} \frac{4}{x_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left( -\frac{3x^2}{x_0^2} + \frac{x^4}{x_0^4} \right) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} dx = \frac{2\hbar \omega_0}{\sqrt{\pi}} (3I_2 - I_1)$$

аңдатпасын аламыз.  $I_2 = \int_0^{+\infty} y^2 e^{-y^2} dy = \frac{1}{4} \sqrt{\pi}$ .  $I_1$  менен  $I_2$  шамаларын  $\langle E_k \rangle$  ушын жазылған аңдатпаға қойсақ

$$\langle E_k \rangle = \frac{2\hbar \omega_0}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{3}{4} \sqrt{\pi} - \frac{3}{8} \sqrt{\pi} \right) = \frac{3}{4} \hbar \omega_0$$

формуласын аламыз.

Солай етип гармоникалық осциллятордың биринши қозған халы ушын кинетикалық энергиясының орташа мәнісін  $\langle E_k \rangle$  менен потенциал энергиясының орташа мәнісін  $\langle U \rangle$  бир бирине хәм гармоникалық осциллятордың толық энергиясы

$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega_0$  шамасының ярымына тең екенлигин көрдик. Тап усындай тастыйықлаудың гармоникалық осциллятордың басқа да қалеген халы ушын да дурыс екенлигин көрсетиуге болады. Биз 2.3-параграфта квантлық механикада бөлекшениң толық энергиясының кинетикалық хәм потенциал энергиялардың қосындысынан туратуғынлығы хаққында гәп еткенде тек ғана энергияның орташа мәнислери нәзерде тутылатуғынлығын атап өткен едик. Хәзир алынған нәтийжелер де бундай тастыйықлаудың дурыс екенлигин және бир рет дәлиллейди.

**4.12-мәселе.** Массасы  $m$  болған бөлекше

$$U(x, y, z) = \frac{k}{2} (x^2 + y^2 + z^2)$$

үш өлшемли потенциал шуқырда қозғалатуғын болсын. Бул аңлатпада  $k$  арқалы турақлы шама белгиленген. Бөлекшениң энергиясының меншикли мәнислерин хәм  $n$  –қаддиниң айныў санын табыңыз.

**Шешими:**  $x, y$  хәм  $z$  көшерлери бойындағы қозғалыслар бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан толқын функциясын

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$$

түриндеги көбейме түринде излеймиз. Бул аңлатпада  $\psi_1(x)$  тек  $x$  тан ғәрезли,  $\psi_2(y)$  тек  $y$  тен ғәрезли, ал  $\psi_3(z)$  тек  $z$  координатасынан ғәрезли толқын функциялары.  $\psi(x, y, z)$  толқын функциясын (2.4.6)-Шредингер теңлемесине қойып

$$\begin{aligned} \psi_2(y)\psi_3(z) \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x)\psi_3(z) \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \psi_1(x)\psi_2(y) \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x, y, z)] \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) = 0 \end{aligned}$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемени  $\psi(x, y, z)$  қа бөлип хәм мәселениң шәртинде берилген  $U(x, y, z)$  функциясының түрин пайдаланып

$$\begin{aligned} \left[ \frac{1}{\psi_1(x)} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{kx^2}{2} \right] + \left[ \frac{1}{\psi_2(y)} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{ky^2}{2} \right] + \\ + \left[ \frac{1}{\psi_3(z)} \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{kz^2}{2} \right] = -\frac{2m}{\hbar^2} E \end{aligned}$$

аңлатпасына келемиз. Бул теңликтің шеп тәрәпиндеги квадрат қаўсырманың ишиндеги биринши аңлатпа тек  $x$  координатасының функциясы, квадрат қаўсырма ишиндеги екинши аңлатпа тек  $y$  координатасының функциясы, ал үшіншиси тек  $z$  координатасының функциясы болып табылады. Олардың қосындысы турақлы шамаға тең болғанлықтан олардың хәр бири де турақлы шамаға тең болыўы керек

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_1(x)} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{kx^2}{2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_1, \\ \frac{1}{\psi_2(y)} \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{ky^2}{2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_2, \\ \frac{1}{\psi_3(z)} \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{kz^2}{2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_3. \end{aligned}$$

Бул аңлатпалардағы  $E_1$ ,  $E_2$  хәм  $E_3$  константалары энергияның бирлигине ийе хәм  $E_1 + E_2 + E_3 = E$  шәртин қанаатландырады. Солай етип бир өлшемли гармоникалық осциллятор ушын жазылған үш теңлемени алдық. Олардың шешимлери бизге (2.4.81)- хәм (2.4.83)-аңлатпалардан белгили.

Үш өлшемли гармоникалық осциллятордың толқын функциясы бир өлшемли гармоникалық осциллятор ушын үш толқын функцияларының көбеймесинен турады хәм  $n_1$ ,  $n_2$  хәм  $n_3$  квантлық санларнан ғәрезли екен.

$$\psi_{n_1, n_2, n_3} = \psi_{n_1}(x) \cdot \psi_{n_2}(y) \cdot \psi_{n_3}(z), \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Үш өлшемли гармоникалық осциллятордың энергиясы ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{3}{2} \right).$$

бул аңлатпада  $n = n_1 + n_2 + n_3$ ,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Үш өлшемли гармоникалық осциллятордың  $n$  – қәдди ушын айныў санын табамыз.  $n$  ниң берилген мәниси ушын айныў саны қосындысы  $n$  ге тең болған  $n_1, n_2, n_3$  санларын қойып шығыўлардың мүмкин болған санына тең. Дәслеп берилген  $n_1$  саны ушын қойып шығыў санын табамыз. Оның мәниси  $n_2$  квантлық санның мүмкин болған мәнислерине тең ( $n_3$  саны ушын да тап сондай мәнис алынады). Берилген  $n_1$  диң мәнисинде  $n_2$  саны 0 ден  $(n - n_1)$  ге шекем өзгереді, яғный  $n - n_1 + 1$  дана мәниске ийе болады. Демек берилген  $n_1$  ушын мүмкин болған қайта қойып шығыўлар саны  $n - n_1 + 1$  ге тең болады. Бул аңлатпаны  $n_1$  бойынша суммалап  $n$  – қәддиниң айныў саны  $K_n$  ди аламыз

$$K_n = \sum_{n_1=0}^n (n - n_1 + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

Үш өлшемли гармоникалық осциллятордың тийкарғы ҳалы ( $n = 0$ ) айнымаған болып шығады, яғный  $K_1 = 1$ . Биринши қозған ҳал ( $n = 1$ ) ушын айныў саны  $K_1 = 3$ . Бул ҳалға квантлық санларның (100), (010), (001) мәнислери сәйкес келеди.

## 2-5-1. Атомлардың квантлық қәсийетлери

**Атомлардың нурланыўы.** Атомлар ҳаққындағы оғада әҳмийетли болған информацияларды физиклер олардың электромагнит нурланыўын изертлеўлердиң барысында алады. Тәжирийбелер атомлардың оптикалық спектрлериниң сызықлы спектрлер екенлигин көрсетеди. Бул атомлардың нурланыў спектриниң айырым спектраллық сызықлардан туратуғынлығын аңғартады. Хәр бир атом өзине тән болған сызықлы оптикалық спектрге ийе болады.

Атомлардың ишиндеги ең эпийайысы болған водородтың нурланыўы ушын 1885-жылы Бальмердиң улыўмаласқан формуласы деп аталатуғын эмперикалық формула келтирилип шығарылды. Водород атомының барлық спектраллық сызықлары ушын толқын узынлықларының мәниси үлкен дәллик пенен төмендеги формуланың жәрдеминде анықланады екен

$$\frac{1}{\lambda_{nk}} = \tilde{R} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right), \quad k > n. \quad (2.5.1)$$

Сәйкес жийиліклер

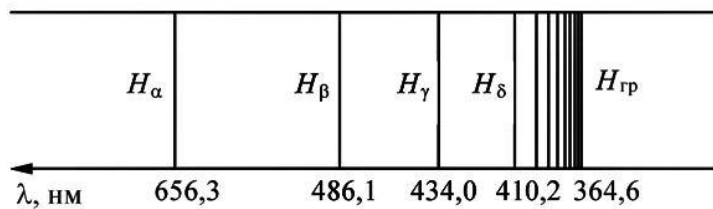
$$\omega_{nk} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right), \quad k > n \quad (2.5.1a)$$

формуласының жәрдемінде есапланады. Бул формулаларда  $R = 2,067 \cdot 10^{16} \text{ сек}^{-1}$  арқалы Ридберг турақлысы белгиленген.  $\tilde{R} = \frac{R}{2\pi c} = 109678 \text{ см}^{-1}$ ,  $n$  менен  $k$  лар турақлы шамалар

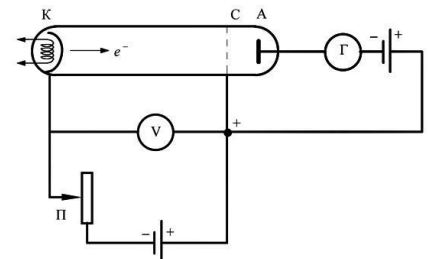
Водород атомларының нурланыуының төмендегидей спектраллық сериялары белгили (бул сериялардың атамалары оларды биринши ашқан физиклердің атлары менен аталған):

- $n = 1$  – Лайман сериясы (ультрафиолет нурланыу),
- $n = 2$  – Бальмер сериясы (көзге көринетуғын жақтылық),
- $n = 3$  – Пашен сериясы (инфрақызыл нурланыу),
- $n = 4$  – Брэкетт сериясы (инфрақызыл нурланыу),
- $n = 5$  – Пфунд сериясы (инфрақызыл нурланыу) хәм басқалар.

Водород атомының спектринің көзге көринетуғын бөлиминдеги Бальмер сериясы сызықтарының схемасы 2.5.1-сүўретте берилген. Сүўретте  $H_\alpha$ ,  $H_\beta$ ,  $H_\gamma$  хәм  $H_\delta$  арқалы нурланыу спектринің характерли сызықлары көрсетилген. Ал  $H_{\text{шег.}}$  сызығы болса (2.5.1)-формуладағы  $n = 2$  хәм  $k = \infty$  шамаларына сәйкес келиўши серияның қысқа толқынлы шегарасына сәйкес келеди.



2.5.1-сүўрет.



2.5.2-сүўрет.

(2.5.1a) формуласында водород атомының нурланыуы спектринің қәлеген сызығының жийилигин бир типтеги еки аңлатпаның айырмасы сыпатында көрсетиўдің мүмкин екенлигин атап өтемиз. Бул бир типтеги аңлатпалар пүтин санларға ғәрезли хәм оларды спектраллық термлер деп атайды. Хәқыйқатында да (2.5.1a) аңлатпасын былайынша жаза аламыз

$$\omega_{nk} = T(n) - T(k). \quad (2.5.2)$$

Бул аңлатпа ушын терм

$$T(n) = \frac{R}{n^2}$$

формуласының жәрдемінде анықланады.



Басқа қурамалырақ атомлардың нурланыуының оптикалық спектрин изертлеулер (2.5.2)-формуланы олардың нурланыуының жиіліктерін есептеу үшін пайдаланыуға болатуғынлығын көрсетеді. Бірақ ондай атомлар үшін термлер водород атомларының термлеріне салыстырғанда әдейі қурамалы.

(2.5.1) менен (2.5.2) қатнастары атомларға тән болған квантлық тәбиғатты сәулелендіреді. Ғақыйқатында да Планктің формуласы бойынша атомның нурланыуы жиілігін оның энергиясы менен байланыстырамыз. Спектрдің сызықтылығынан болса биз атомның энергиясының дискретлігі, яғный атомның энергиясының квантланғанлығы ғаққындағы жуымаққа келеміз.

**Франк хэм Герц тәжірийбеси.** Атомлардың энергиясының дискретлігі менен байланысly болған атомлардың квантлық қасиетін тастыйықлаушы ең әпийайы тәжірийбелердің бирин 1913-жылы Дж.Франк хэм Г.Герц тәрeпинен орынланды. Бул тәжірийбенің схемасы 5.2-сүўретте келтирилген. Эксперименталлық дүзилістің тийкарғы элементі хызметін газ бенен толтырылған үш электродлы электрон лампа атқарады. Газ сыпатында басымы шама менен 1 мм сынап бағанасы басымындағы сынаптың пуўларын пайдаланыу мүмкин. Франк хэм Герц тәжірийбесінде С торға катод К ға салыстырғанда шамасы оң болған V потенциалы бериледи. Сонлықтан С торы тезлетіуші потенциалдың орнын ийелейді.

Термоэлектронлық эмиссияның есабынан катодтан ушып шығатуғын электронлар V тезлетіуші потенциаллар айырмасында тезленеди, бул тезленіудің шамасын П патенциометри менен өзгертиледі хэм V вольтметри менен өлшенеди.

Тор хэм А анод арасына шама менен 1 в кернеу түсіриледі. Бул кернеу тормозлаушы майданды пайда етиу үшін керек. Тор арқалы ушып өткен хэм тормозлаушы майдан арқалы өте алатуғын электронлардың бир бөлими коллекторға келип түседі хэм Г гальванометри менен өлшенетуғын базы бир тоқты пайда етеді.

Катодтан торға қозғалыу барысында электронлар тийкарғы энергетикалық халда турған сынап атомлары менен соқлығысады. Егер атомның энергиясы тек белгили бир дискрет мәнислерге ийе бола алатуғын, усының менен бир қатарда атомның тийкарғы хэм биринши қозған халы арасындағы энергияның мәнисі бойынша қашықтық  $\Delta E$  шамасына тең болса, онда электронлардың атомлар менен соқлығысуларының характери электронның кинетикалық энергиясының мәнисі  $W_k = eV$  менен тиккелей байланысly болады. Бул жерде V арқалы катод менен тор арасындағы тезлетіуші потенциаллар айырмасы белгиленген.

Егер  $W_k < eV$ , яғный  $V < V_1 = \Delta E/e$  болса, онда электрон атом менен соқлығысқанда атомға өзинің энергиясының көп бөлегін бере алмайды. Бундай жағдайда электронның атом менен соқлығысуы серпимли соқлығысу болып табылады. Бундай соқлығысууды электронның кинетикалық энергиясы атомның ишки энергиясына айлана алмайды хэм нәтийжеде электрон катод пенен тор арасындағы газ арқалы энергиясын жоғалтпай қозғалады. Бундай электронлар үш электродлы лампаның торы арқалы өтип анод-коллектор арасындағы әззи тормозлаушы майдан арқалы өте алады хэм коллектор шынжырындағы тоқты пайда етиуге қатнасады. Әдеттеги вакуумлы лампадағыдай V артқанда коллектор шынжырындағы тоқтың мәнисі монотонлы түрде артады.

Бирақ тезлетіуші майданда қозғалыудың барысында электрон атомды қоздыруу үшін жететуғындай кинетикалық энергияға ийе бола алатуғын болса, онда бундай электронның атом менен соқлығысуы серпимли емес соқлығысуға айланады. Енди электронның кинетикалық энергиясының көпшилик бөлеги атомның ишки энергиясына айланады, яғный атомды қоздыруу үшін жумсалады.

Электронлардың атомлар менен серпимли емес соқлығысулары электронлар торға жақынлағанда жүзеге келеді. Соқлығысқаннан кейин энергиясын жоғалтқан

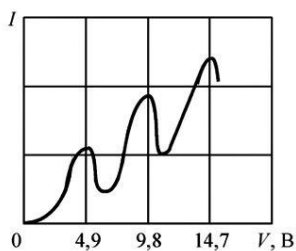
электронлар тормозлаушы майдан арқалы өте алмайды. Нәтиьеде ол анод-коллекторға жетип келе алмайды. Нәтиьеде тордағы тезлетіуші кернеудің мәнісі  $V_1$  ге тең болғанда коллектор шынжырындағы  $I$  тоқтың күші кескин түрде киширейіуі керек.

Тезлетіуші потенциалдың шамасы буннан былай артқанда гальванометр жәрдеминде өлшенетуғын тоқтың шамасы және де артады. Бирақ кернеудің мәнісі  $V_2 = 2V_1$  болғанда коллектор шынжырындағы тоқтың шамасы және кескин түрде кемейеди. Себеби бундай жағдайда газ орталық арқалы өткенде электрон атомлар менен еки рет серпимли емес соқлығысуға ушырай алады. Тап сол сыяқлы  $V_3 = 3V_1$  үш, төрт хәм басқа да серпимли емес соқлығысу режиминің де орын алыуы мүмкин.

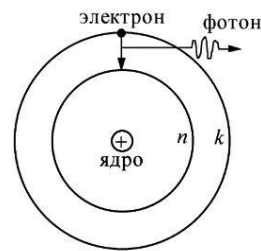
Солай етип атомның энергиясы квантланатуғын болса, онда тезлетіуші потенциал  $V$  шамасының пүтин сан еселенген  $V_1$  мәніслеринде коллектор шынжырындағы  $I$  тоғының иймеклигинде анық көринетуғын кемейіулердің орын алыуы керек. Бундай жағдайда бундай кемейіулердің тезлетіуші кернеу шкаласындағы басланған участкалары арасындағы қашықлық  $\Delta V$  шамасы атомның қозыу энергиясы  $\Delta E$  менен  $\Delta E = e\Delta V$  аңлатпасы арқалы байланысқан.

Франк хәм Герцтің тәжирийбелеринде алынған  $I = I(V)$  ғәрезлиги бул жуумақты жүдә жақсы тастыйықлады (2.5.3-сүүрет). Бундай ғәрезлик атомлардың энергиялық халларының дискретлигинің айқын эксперименталлық дәлили болып табылады. Мысалы 5.3-графикте сынап атомның биринши қозған халы оның тийкарғы халынан 4,9 эВ қашықлықта турғанлығы көринип тур.

Лампаны басқа да газлер менен толтырғанда да (мысалы гелий ямаса неон менен толтырғанда) жоқарыда сынап атомлары ушын келтирилген нызамлықлардай нызамлықлар бақланады. Егер тәжирийбелер жүдә пұқталық пенен өткерилсе, онда  $I = I(V)$  ғәрезлигинде атомның басқа да қозған халларына, хәтте атомлардың ионларға айланыуына сәйкес келиуші де тоқтың кемейіулерин бақлауға болады.



2.5.3-сүүрет.



2.5.4-сүүрет.

Франк хәм Герц тәжирийбесинің екинши әхмийетли нәтиьеси лампаның  $\lambda = 253$  нм улынлықтағы ультрафиолет жақтылықты шығарыуында. Бундай нур шығарыу катод пенен тор арасындағы кернеудің мәнісі 4.9 В шамасына жеткен моментте басланады. Егер лампаның колбасын кварцтан ямаса ультрафиолет нурларды өткеретуғын шийшеден таярлаған жағдайларда бундай нурланыуды айқын түрде сезиуге болады.

Бундай нурланыудың пайда болыуын аңсат түсиндириуге болады. Электронлар менен соқлығысудың нәтиьесинде қозған сынап атомлары тийкарғы халға нурланыу менен қайтады. (1.41)-аңлатпаға сәйкес бундай нурланыу ушын толқын улынлығының мәнісин есаплай аламыз. Хәқыйқатында да  $\varepsilon = \Delta E = 4,9 \text{ эВ} = 7,84 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ . Демек  $\lambda = \frac{hc}{\varepsilon} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{7,84 \cdot 10^{-19}} \text{ м} = 2,53 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 253 \text{ нм}$ .

## 2-5-2. Водород атомының Бор теориясы

**Бор постулаттары.** 1911-жылы атомлардағы  $\alpha$ -бөлекшелеринің шашырауын изертлеу бойынша өткерилген тәжірийбелерінде алынған нәтижелер тийкарында Дж.Резерфорд атомның планетарлық моделин ұсынды. Бул модель бойынша атом оң зарядланған, аўыр хәм жүдә киши болған өлшемлерге ийе ( $\sim 10^{-14}$  м) ядроның дөгерегинде базы бир орбиталар бойынша электронлар қозғалып жүреди. Бул орбиталардың радиусы шама менен  $10^{-9}$  м ге тең. "Планетарлық" сөзи атомның Қуяш системасына ұқсаслығынан алынған. Қуяш системасында планеталар базы бир орбиталар бойлап үлкен массаға ийе орайлық дене болған Қуяштың дөгерегинде айланады. Тап сол сыяқлы атомларда электронлар үлкен массаға ийе оң зарядланған ядроның дөгерегинде белгили орбиталар бойынша айланады.

Бирақ классикалық физиканың көз-қараслары менен қарағанда атомның модели ишки қарама-қарсылықларға ийе болып шығады. Бул жағдай биринши гезекте электронда зарядтың бар екенлиги менен байланыслы.

Классикалық электродинамиканың ыызамлары бойынша ядроның дөгерегинде айланыўшы электрон қәлеген басқа тезлениў менен қозғалыўшы зарядланған бөлекше сыяқлы электромагнит толқынларын нурландырыўы керек. Бундай нурланыўдың спектри үзликсиз болады, яғный нурланыў қәлеген толқын узынлығындағы электромагнит толқынлардан турыўы керек. Бул тәжірийбеде бақланатуғын атомлардың спектриниң сызықлы екенлигине қайшы келеди.

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда үзликсиз нурланыў электронның энергиясын кемейтеди. Сонлықтан нурланыўдың есабынан қозғалыўшы электронның орбитасының радиусының киширейиўи керек. Нәтийжеде ақыр-аяғында электронның ядроға қулап түсиўи талап етиледі. Басқа сөз бенен айтқанда классикалық физикада атомның планетарлық модели орнықлы емес.

1913-жылы Н.Бор атомның планетарлық моделин қорғап қалыў ушын квантланыў идеясын қолланыўдың кереклигин, биринши гезекте электронлардың қозғалыўы ушын руқсат етилген базы бир орбиталарды айырып алыўдың зәрурлигин көрсетти. Әлбетте, квантланыў қағыйдаларында Планктың квантлық турақлысының қатнасыўы керек. Тәсир кванты  $\hbar$  импульс моментиниң бирлигине ийе болғанлықтан Бор теорияға ядроның этирапында қозғалыўшы электронның импульс моментиниң квантланыўын қосты.

Водород атомы ең әпиўайы атом болып табылады. Бундай атомда бир электрон ядроның Кулон майданында туйық орбита бойынша қозғалады. Биринши жақынласыўда ядроны тынышылықта турады, ал электронлардың орбитасын шеңбер тәризли орбиталар деп есаплаўға болады.

Усындай болжаўлар тийкарында Н.Бор водород атомының теориясын үш постулат түринде дөретти.

1. Атомдағы электрон тек базы бир стационар орбиталар бойынша қозғалады. Сол орбиталардың хәр бири ушын  $n = 1, 2, 3, \dots$  түриндеги қатар санын жазыў мүмкин. Бундай қозғалыс атомның стационар халына сәйкес келеди. Хәр бир стационар халға өзгермейтуғын  $E_n$  толық энергиясы сәйкес келеди. Бул айтылғанлар стационар туйық орбита бойынша қозғалатуғын электронлардың энергияны нурландырмайтуғынлығын билдиреди.

2. Руқсат етилген стационар орбиталардағы электронның импульс моментиниң мәниси  $L$  пүтин сан еселенген Планк турақлысы  $\hbar$  қа тең болыўы керек. Сонлықтан - стационар орбита ушын

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5.3)$$

квантланыу шәртиниң орынланыуы керек.

3. Нурланыу квантының нурланыуы (шығарылыуы) ямаса жутылыуы атом бир стационар ҳалдан екинши стационар ҳалға өткенде жүзеге келеди (2.5.4-сүўрет). Атомның нурланыуының жийилиги  $\omega$  атомның еки стационар ҳалына сәйкес келетуғын энергиялардың айырмасының жәрдеминде анықланады. Сонлықтан

$$\hbar\omega_{nk} = E_k - E_n, \quad k > n. \quad (2.5.4)$$

**Атомның энергиясының квантланыуы.** Электронның массасын  $m$  арқалы белгилеймиз. Биз дәслеп усындай массаға ийе электронның ядро дөгерегинде Кулон күшиниң тәсиринде радиусы  $r$  болған шеңбер тәризли орбита бойынша айланыу шәрти менен Бордың электрон ушын импульс моментиниң квантланыу формуласын жазамыз

$$\begin{cases} \frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}, \\ mvr = n\hbar. \end{cases} \quad (2.5.5)$$

Бул теңлемелер системасын шешип водород атомындағы стационар орбиталардың радиуслары ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2 n^2}{me^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5.6)$$

Теорияның универсаллық константасы сыпатында Бор радиусын ала аламыз

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \quad (2.5.7)$$

Бул радиус водород атомындағы биринши стационар орбитаның радиусы болып табылады. Усы тийкарда (2.5.6)-формуланы

$$r_n = an^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5.8)$$

түринде жазамыз.

(2.5.7)- ҳәм (2.5.8)-формулалар тийкарында алынған водород атомының өлшемлери ( $\sim 10^{-10}$  м) газлердиң кинетикалық теориясында алынған нәтийжелерге сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз.

$n$  – стационар орбитадағы электронның тезлиги ушын (2.5.5)-аңлатпадан

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar n} \quad (2.5.9)$$

формуласын аламыз. Буннан биринши стационар орбитада қозғалыушы электронның тезлигиниң  $2,2 \cdot 10^6$  м/сек екенлигине ийе боламыз. Демек бул

электрон  $T_1 = 1,5 \cdot 10^{-16}$  сек ишінде ядроның дөгерегин бир рет айланып шығады екен.

$n$  – стационар орбитада қозғалыушы электронның толық энергиясы оның кинетикалық хәм потенциал энергияларының қосындысынан турады. Электронның кинетикалық энергиясы

$$E_K = \frac{mv^2}{2} = \frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2}. \quad (2.5.10)$$

Электронның ядро менен кулон тәсир етисиуине сәйкес келиуіш потенциал энергиясы

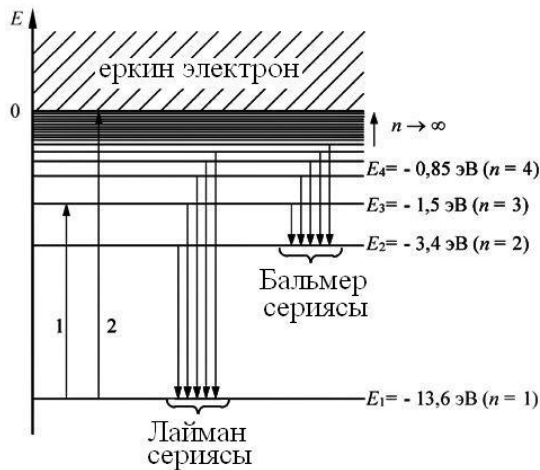
$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0r_n} = -\frac{me^2}{16\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2n^2}. \quad (2.5.11)$$

(2.5.10)- хәм (2.5.11)-формуларды есапқа алған халда Бор теориясының оғада әхмийетли болған формуласын – водород атомындағы электронның энергиясының квантланыу формуласын аламыз

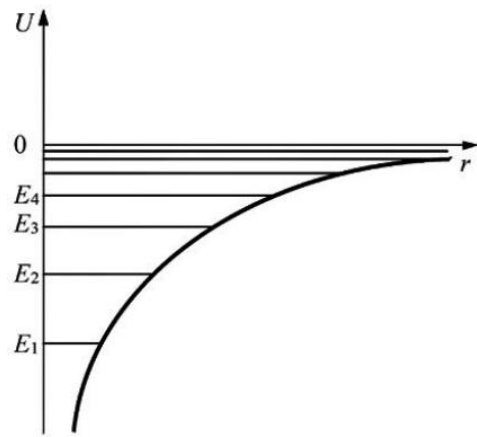
$$E = E_K + U = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ эВ}. \quad (2.5.12)$$

Атомдағы электронның толық энергиясы терис мәниске ийе болып шықты. Себеби анықламасы бойынша электронның ядро менен тәсирлесиуінің электростатикалық энергиясының мәниси нолден киши. Орбитаның қатар санының (номериниң) үлкейиуі менен атомдағы электронның толық энергиясының мәниси өседі. Соның менен бирге орбитаның қатар саны бул теорияда квантлық сан болып табылады.

5.5-сүүретте (2.5.12)-формулаға сәйкес водород атомындағы электронның энергиясының спектри келтирилген. Оң мәнисли энергиялар областында еркин электронның энергия спектри тутас спектр болып табылады. Толық энергияның мәниси терис болған жағдайларда атом менен байланысқан электронның энергия спектри дискрет характерге ийе. Көрсетпелилик ретинде 5.5-сүүретте энергияның мүмкин болған хәр бир мәнисине энергия қәдди сәйкес келетуғынлығын сәўлелендирилген. Стационар халда электрон сол дискрет энергия қәддилериниң биринде тура алады. Электронның бир қәддиден екинши қәддиге өтиуі бул сүүретте стрелканың жәрдемінде көрсетилген. Бул стрелканың басы менен ушы электронның өтиуі жүзеге келетуғын энергияның қәддилерине сәйкес келеді.



2.5.5-сүрөт.



2.5.6-сүрөт

Атом эдетте энергиясының мәнісін ең киши  $E_1$  болған тийкарғы ҳалда турады. Атомның бундай ҳалында электрон биринши стационар орбитада қозғалады. Бул орбитаның радиусы болса ең минималлық радиус болып табылады ҳәм оны биз жоқарыда  $a$  арқалы белгиледик.

Егер атомға қосымша энергия берилетуғын болса, онда ол биринши қозған ҳалға өте алады (2.5.4-сүрөттегі 1 өтиўи). Бундай жағдайда электрон үлкенирек радиусқа ийе болған орбитаға өтеди. Атомды қоздырыўдың ҳәр қыйлы усыллары бар (газ атомының хаотик жыллылық тербелислериндегі соқлығысыўлары, газ арқалы жоқары энергияға ийе бөлекшелерди жиберий (электронларды, альфа-бөлекшелерин ҳәм тағы басқалар), атомларды ультрафиолет нурлар менен нурландырыў.

Егер электронға берилген энергияның муғдары жеткиликти дәрежеде үлкен болса, онда электронды атомнан айырып алыўға да болады. Бундай процессти атомның ионизациясы деп атайды. 5.4-сүрөтте водород атомының ионизациясы ушын зәрүрли болған энергияның ең киши мәнісін (2 өтиўи)

$$E_i = |E_1| = 13,6 \text{ эВ} \quad (2.5.13)$$

шамасына тең. Бул шама водород атомының ионизациясы бойынша өткерилген тәжирийбелердің нәтийжелерине толық сәйкес келеди.

Қозған ҳалда атом көп ўақыт жасай алмайды (тура алмайды). Қәлеген система сыяқлы атом да ең киши энергияға ийе ҳалды ийелеўге умтылады. Сонлықтан  $10^{-8}$  сек ўақыттан кейин қозған атом өзи-өзинен (спонтан түрде) киши энергияға ийе ҳалға өтеди. Бул өтиў нурланыў менен бирге жүреді. Атом тийкарғы ҳалға өткенше бундай процесс даўам етеди.

Энергия қәдилериниң структурасы анықланған болса, онда водород атомының нурланыў спекриниң структурасын да есаплаўға болады. Ҳақыйқатында да электрон ядродан үлкенирек қашықлыққа ийе  $k$  – орбитадан  $n$  – орбитаға өтетуғын болса ( $k > n$ ), онда Бордың үшінши постулатын пайдаланып нурландырылған электромагнит толқынының жийилигин аңсат есаплаў мүмкин. (2.5.4)- ҳәм энергияның квантланыў формуласы (2.5.12) ни пайдаланып водород атомындағы  $k \rightarrow n$  өтиўиндегі нурланыўдың жийилигин

$$\omega_{nk} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \quad (2.5.14)$$

формуласының жәрдеминде есаплай аламыз. Бул формуладағы

$$R = \frac{me^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ 1/сек} \quad (2.5.15)$$

шамасы оптикалық эксперименттерде алынған Ридберг турақлысының мәнісине дәл сәйкес келеді.

Водородтың нурланыуының жийиліктері үшін алынған формула Бальмердің улыұмаласқан формуласы менен бірдей (2.5.1а формуласы). Сонлықтан тийкарында (2.5.3) квантланыу постулаты жатырған водород атомының Бор теориясының 1922-жылы физика бойынша халық аралық Нобель сыйлығын алыуға миясар болғаны таң қаларлық емес.

Жоқарыда баянланған теорияны эллипс тәрізлі орбиталар 1915-жылы дәретілген Бор-Зоммерфельд теориясы үшін улыұмаластырыуға хәм қәлеген "водород тәрізлі" атомлардың қәсийетлерін сыпатлау үшін қолланыуға болады. Водород тәрізлі атомлар деп заряды  $+Ze$  болған ядроның этирапында тек бир электрон қозғалатуғын атомлық системаларға айтады. Бундай атомлар қатарына бир рет ионластырылған гелий  $He^+$  ( $Z = 2$ ), еки рет ионластырылған литий  $Li^{++}$  ( $Z = 3$ ), үш рет ионластырылған бериллий  $Be^{+++}$  ( $Z = 4$ ) хәм тағы басқалар киреди. Әпиұайы есаплаулар водород тәрізлі атомлардың энергия спектри (2.5.12)-аңлатпасын  $Z^2$  қа көбейтиу менен алынатуғынлығын көрсетеди. Ал бундай атомлардағы электронның орбиталарының радиусы водород атомындағы электронның сәйкес орбиталарының радиусларынан  $Z$  есе киши болып шығады.

Н.Бор өз теориясында биринши рет күш майданында қозғалыушы бөлекшениң энергиясының квантланыуын жүзеге келтирди. Бирақ бул теория атомлық кубылыстардың ақырына жеткерилген теориясы бола алмайды. Бор атомды классикалық физиканың нызамлары менен тәрийиплеп стационар орбита бойынша қозғалатуғын электронның электромагнит нурларын нурландырыуын "қадаған етти". Электронның импульс моментиниң квантланыуы болған (2.5.3) шәрти физикалық тийкарға ийе емес, ал водород атомы үшін ойлап табылды (кейинирек бул ойлап табыудың толық дурыс емес екенлиги көрсетиледи). Бордың бул теорияны құрамалы атомлар үшін улыұмаластырыу хәм усындай құрамалы атомлар үшін квантланыу постулаттарын табыуға болған тырысулары сәтсизлик пенен питти.

Хәзирги заман физикасының көз-қараслары бойынша атом электронның толқынлық қәсийетлерін есапқа алмайтуғын классикалық физика нызамларының жәрдеминде тәрийиплениуі мүмкин емес физикалық система болып табылады.

Бул баптың буннан кейинги параграфларында хәзирги заман квантлық механиканың атомлық системаларды қалай тәрийиплейтуғыны көрсетиледи.

**5.1-мәселе.** Бор теориясында электронның импульс моментиниң квантланыуы шәртин электронда толқынлық қәсийетлердің бар екенлиги хаққындағы де Бройль гипотезасын есапқа алып келтирип шығарыуға болатуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими:** Радиусы  $r$  болған шеңбер тәрізлі орбитада қозғалыушы электрон үшін импульс моменти  $L$  импульс  $p$  менен  $L = pr$  формуласы бойынша байланысқан. Сонлықтан (2.5.3) квантланыу шәртин

$$2\pi r = n \frac{2\pi \hbar}{p}$$

түрине алып келиуі мүмкін. Де Бройль гипотезасы бойынша электронның қозғалысын толқынлық процесс пенен байланыстыруы мүмкін. Оның толқын ұзындығы

$$\lambda_{db} = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

Сонлықтан Бордың квантланыу шәртин былайынша жазыуға болады

$$2\pi r = n\lambda_{db}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Бул аңлатпада әҳмийетли жағдайды көреміз: ұзындығына пүтин сан еселенген де Бройль толқыны ұзындығы жайласатуғын орбиталар стационар орбиталар болып табылады.

**5.2-мәселе.** Водород атомының нурланыуының жийилигиниң ядроның массасының шекли екенлигине байланысly қалай өзгеретуғынлығын анықлаңыз.

**Шешими:** Мәселе тап усындай етип қойылғанда электрон ядроның дөгерегинде емес, ал электрон менен ядро қозғалмайтуғын массалар орайы дөгерегинде айланады. Егер  $r_e$  хәм  $r_{yadro}$  арқалы электрон менен ядроның шеңбер тәризли орбиталарының радиусларын белгилесек, онда масса орайының анықламасы бойынша  $mr_e = Mr_{yadro}$  формуласына ийе боламыз. Бул аңлатпада  $m$  хәм  $M$  арқалы сәйкес электрон менен ядроның массалары белгиленген.

Электрон менен ядроның тезлениулериниң теңлиги шәртинен олардың айланбалы қозғалысының мүйешлик тезликлериниң бир бири менен тең екенлиги келип шығады

$$\frac{v_e}{r_e} = \frac{v_{yadro}}{r_{yadro}} = \omega.$$

Бул аңлатпада  $v_e$  хәм  $v_{yadro}$  арқалы сәйкес электронның хәм ядроның тезликлери белгиленген

Ядроның қозғалысын есапқа алсақ, атомның импульсиниң моменти ушын

$$L = mv_e r_e + Mv_{yadro} r_{yadro} = m\omega r_e^2 + M\omega r_{yadro}^2$$

аңлатпасын аламыз. Теорияның тийкарғы теңлемелери сыпатында электронның шеңбер тәризли орбита бойынша қозғалыу хәм Бордың атомның импульсиниң моментиниң квантланыуы шәртин аламыз

$$\begin{cases} m\omega r_e^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r_e + r_{yadro})^2}, \\ m\omega r_e^2 + M\omega r_{yadro}^2 = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Егер ядро менен электрон арасындағы қашықтықты  $r = r_e + r_{yadro} = r_e \left(1 + \frac{m}{M}\right)$  арқалы белгилесек, онда  $\mu = \frac{mM}{m+M}$  белгилеуін қабыл еткеннен хәм базы бир түрлендириулерден кейин бул қатнас былайынша жазылады



$$\begin{cases} \mu\omega^2 r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \\ \mu\omega r^2 = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Бул аңлатпада  $\mu$  арқалы "электрон-ядро" системасының келтирилген массасы белгиленген.

Биз келтирип шығарған теңлемелер системасын шешіп атомның стационар халлары үшін төмендегідей формулаларды аламыз:

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{\mu e^2},$$

$$\omega_n = \frac{\mu e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3 n^3},$$

Атомның толық энергиясы

$$E = \frac{mv_e^2}{2} + \frac{Mv_{yadro}^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r_e + r_{yadro})} = \frac{\mu\omega^2 r}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

формуласының жәрдемінде есапланады. Бул аңлатпаға  $r_n$  менен  $\omega_n$  шамаларының мәніслерін қойсақ биз ізлеп атырған водород атомының энергиясының квантлануы формуласын аламыз

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Бул формуладан водород атомының спектраллық сызықтарының жийиликлерін табамыз:

$$\omega_{nk} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} = R_m \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right).$$

Бул аңлатпада  $R_m$  арқалы Ридбергтің модификацияланған турақлысы белгиленген.

$$R_m = \frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3} = \frac{R}{1 + \frac{m}{M}}.$$

Есаплаулар ядроның қозғалысын есапқа алғандағы жийилик (ямаса толқын ұзындығы) үшін киргизілген дүзетіу проценттен әдеуір кем екенлигин көрсетеді. Бірақ спектроскопиялық ұсылардың оғада жоқары дәллігінен водородтың изотоптарының (бір элементтің массасы хәр қыйлы болған атомлары) спектріндегі айырманы экспериментте табыуға мүмкіншілік береді. Тап ұсындай жоллар менен аұыр водородтың изотопы дейтерий  $D$  ашылған еді. Дейтерий үшін  $M_D = 2M_H$ . Бул жерде  $M_H$  арқалы биз водород атомының массасын белгиледік.

## 2-5-3. Водород тәризли атомлардың квантлық механикадағы тәрийиплениүйи

5.1-мәселени шешкенде биз атомда қозғалыушы электронлардың де Бройль толқын ұзынлығы атомның өзиниң өлшемлери менен салыстырарлықтай екенлигин көрдик. Бундай жағдайларда электронлық толқынлық қасиетлериниң бар екенлигин есапқа алмауға болмайтуғынлығын биз жақсы билемиз. Себеби бундай электронлардың атомлардағы қозғалысын классикалық физиканың нызамлары тийкарында тәрийиплеуға болмайды. Сонлықтан атомлық системалар квантлық механиканың нызамларын пайдаланыу керек болған физика илиминиң әхмийетли объектлериниң бири болып табылады. Атомларды тәрийиплеу ушын квантлық механиканың қандай да бир қосымша болжауларды ямаса Бор теориясының постулатлары сыяқлы постулатларды талап етпейтуғынлығын атап өтемиз

Водород сыяқлы атомлар ушын квантлық механиканың мәселесин келтирип шығарамыз. Электрон заряды  $Ze$  болған қозғалмайтуғын ядроның дегерегинде қозғалады деп есаплаймыз. Водород атомы ушын  $Z = 1$ . Басқа водород тәризли атомлар (ионлар) ушын  $Z = 2, 3, 4, \dots$ . Бундай модель атом физикасының әхмийетли моделлериниң бири болып табылады. Бундай модель ушын электрон қозғалатуғын электростатикалық майданның потенциалын дәл жаза аламыз. Сонлықтан водород тәризли атомлардың квантлық теорияның барлық жуўмақларын экспериментте тексерип көриу мүмкин.

Ядроның электр майданындағы электронның потенциал энергиясы

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.5.16)$$

аңлатпасының жәрдемінде есапланады. Бундай майдандағы электронның қозғалысын базы бир сфералық потенциал майдандағы қозғалыс сыпатында қарай аламыз. Оның формасы 5.6-сүўретте көрсетилген.

4.2-параграфта әпиуайы формаға ийе потенциал шуқырда қозғалатуғын бөлекшениң энергиясының спектриниң дискрет екенлигин көрген едик. Тап сол сыяқлы атомдағы электронның энергиясы да дискрет спектрге (яғный электронның толық энергиясының қәддилери  $E_1, E_2, E_3$  хәм басқа да шамаларға тең) ийе болады деп болжауға болады. Водород атомы ушын алынған спектр дурыслығы оптикалық тәжирийбелерде тастыйықланатуғын Бор теориясында алынған энергиялар спектри менен бирдей болыуы керек.

Солай етип водород тәризли атомлардағы электронның квантлық ҳалларды хәм усы ҳаллардағы электронның толық энергиясының спектрин табыу ушын

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.5.17)$$

Шредингер теңлемесиниң шешимлерин табыуымыз керек болады. Бул теңлемедеги гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U} \quad (2.5.17a)$$

түрінде жазылады. Бул аңлатпадағы  $m$  электронның массасы,  $E$  арқалы  $\psi$  толқын функциясы менен тәрийипленетуғын оның қалындағы толық энергиясы белгиленген. Потенциал энергияның операторы  $\hat{U}$  болса (2.5.16)-аңлатпада берілген  $U(r)$  функциясына көбейтiу болып табылады.

Шредингер теңлемесиниң биз излеп атырған шешимлери  $\hat{H}$  толық энергия операторының меншикли функциялары болып табылады. Бундай шешимлерди табыу жеткиликти дәрежеде қурамалы болған дифференциал теңлемени шешиу менен байланысly. Бул мәселениң квантлық механикадағы ең әҳмийетли мәселелердиң бири екенлиги есапқа алып бундай шешимлерди табыу схемасын толық баянлаймыз. Бул схеманы баянлаудың барысында математикалық физиканың арнаулы функцияларының бири болған сфералық функциялардан пайдаланыуға тууры келеди. Базы бир айқын квантлық қаллар ушын сфералық функциялар белгили элементар функциялардың комбинациясы түрінде анық аналитикалық формада жазылады. Сфералық функциялардың қәсийетлери ҳаққында толығырақ мағлыұматларды математика бойынша справочниклерде табыу мүмкин.

Атомдағы электронның қозғалысын тәрийиплеу ушын координаталардың сфералық системасын пайдаланған қолайлы. Бундай координаталардың басы сыпатында атом ядросының орайы қабыл етиледи. Бундай координаталар системасында электронның толқын функциясы  $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ , ал Лаплас операторы

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}$$

түрине ийе болады.  $\Delta_r$  арқалы толқын функциясының радиал бөлегинен ибарат

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad (2.5.18)$$

ал мүйешлик бөлеги болған

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (2.5.19)$$

оператор белгиленген. (3.32)-формулаға сәйкес сфералық координаталар системасындағы импульс моменти квадраты операторы  $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi}$  түрінде жазылады. Сонлықтан (2.5.17)-Шредингер теңлемеси

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 \psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \psi = E\psi \quad (2.5.20)$$

түрине енеди. Бул теңлемениң шешимин ажыратылыушы өзгериушилери бар еки функцияның көбеймеси түрінде излеймиз

$$\psi = X(r) \cdot Y(\theta, \varphi). \quad (2.5.21)$$

$\hat{L}^2$  операторы гамильтониан  $\hat{H}$  пенен коммутацияланады. Сонлықтан 3-бапта баянланған квантлық механиканың улыұмалық қағыйдалары бойынша атом қәлеген квантлық қалда импульс моментиниң модулиниң белгили бир мәнисине

ийе бола алады. Ал  $Y(\theta, \varphi)$  функциясы  $\hat{L}^2$  операторының меншикли функциясы болып табылады. Бул шәрт төмендегі теңлемени қанаатландырады:

$$\hat{L}^2 Y_{l,m} = l(l+1)Y_{l,m}. \quad (2.5.22)$$

$Y_{l,m} = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  функциялары сфералық ямаса шар функциялар деп аталады. Бул функциялар  $l$  хәм  $m$  пүтин мәниске ийе параметрлериниң жәрдемінде анықланады. Бул пүтин санларды квантлық санлар деп атаймыз.

$l$  орбиталық (азимуталлық) квантлық сан  $l = 0, 1, 2, \dots$  мәнислерин қабыл етеди.  $m$  квантлық сан магнит квантлық сан деп атайды хәм ол  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  мәнислерине ийе бола алады. Бул квантлық санларның физикалық мәнислерин биз төменде талқылаймыз.

Базы бир нормировкаланған сфералық функциялар ушын анық формулаларды келтиремиз:

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \varphi, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(\pm i\varphi); \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta \exp(\pm i\varphi); \\ Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{5}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm i2\varphi), \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} \cos \theta (5 \cos^2 \theta - 3). \end{aligned}$$

(5/20)-аңлатпаға (2.5.21)-формадағы толқын функциясын қойсақ [бул аңлатпада  $Y(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ ] хәм бул мүйешлик көбейтiушиге бөлсек радиал функция  $X(r)$  ушын:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dX}{dr} \right) + \left[ \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \cdot X = EX \quad (2.5.23)$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемениң шешимин

$$X(r) = \frac{R(r)}{r} \quad (2.5.24)$$

түрінде излеймиз. Бундай жағдайда усындай түрге ийе болған биз излеп атырған  $X(r)$  функциясын (2.5.23)-теңлемеге қойсақ  $R(r)$  функциясы ушын әпиұайырақ теңлемеге ийе боламыз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 R}{dr^2} + \left[ \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \cdot R = ER. \quad (2.5.25)$$

Бул теңлемеді ұзынлықтың характерли өлшеми ретінде  $a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$  Бор радиусын, ал характерли энергия ретінде водород атомының ионизация энергиясы болған  $W = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{me^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}$  шамасын қабыл етип бирлиги жоқ шамаларға өтемиз

$$\rho = Z \frac{r}{a} \quad \text{хәм} \quad \epsilon = -\frac{1}{Z^2} \frac{E}{W} \quad (\epsilon > 0) \quad (2.5.26)$$

Бундай жағдайда (2.5.25)-теңлеме

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \varepsilon \right) \cdot R = 0 \quad (2.5.27)$$

түрине ийе болады. Өзгермели коэффициентлерге ийе бул теңлемениң дәл шешимин еки функцияның көбеймеси түрінде ізлеу керек болады:

$$R(\rho) = v(\rho) \cdot \exp(-\alpha\rho), \quad \alpha = \sqrt{\varepsilon}. \quad (2.5.28)$$

(2.5.28)-аңлатпаны (2.5.27)-аңлатпаға қойсақ изленип атырған жаңа  $v(\rho)$  функциясы ушын теңлемени табамыз. Құрамалы емес есаплаулардан кейин

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{dv}{d\rho} + \left( \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) v = 0 \quad (2.5.29)$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемениң шешими болған  $v(\rho)$  функциясын дәрежели қатар түрінде ізлеймиз

$$v(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^{k+l+1}. \quad (2.5.30)$$

Бул қатардың  $a_k$  коэффициентлерин табыу ушын (2.5.30) ды (2.5.29) ға қоямыз хәм  $\rho$  шамасының бирдей дәрежеге ийе ағзаларын жыйнаймыз. Бундай әмеллер

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} a_k [(k+l+1)(k+l) - l(l+1)] \rho^{k+l+1} + \\ + \sum_{k=0}^{\infty} [2 - 2\alpha(k+l+1)] \rho^{k+l} = 0 \end{aligned} \quad (2.5.31)$$

түріндеги теңлемениң пайда болыуына алып келеди. Биринши қосылыушыда  $k=0$  теңлиги орынланғанда квадрат қаўсырмадағы аңлатпа нолге айланады. Сонлықтан суммалау  $k=1$  мәнисинен басланады. Демек биринши суммадағы суммалау индексин бирге жылыстырып (2.5.31)-формулань

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{a_{k+1} [(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1)] + a_k [2 - 2\alpha(k+l+1)]\} \rho^{k+l} = 0$$

түрине шекем түрлендириу мүмкин. Бул теңликтин барлық  $\rho$  лар ушын орынланыуы ушын оның хәр бир дәрежесинин алдындағы коэффициенттин нолге тең болыуы керек. Сонлықтан (2.5.30)-аңлатпадағы қатар (2.5.29)-теңлемениң шешими бола алады, егер оның коэффициентлери ушын төмендегидей рекуррентли қатнас орынланатуғын болса:

$$a_{k+1} = a_k \frac{2\alpha(k+l+1) - 2}{(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1)}. \quad (2.5.32)$$

(2.5.29)-теңлемесінің бір теклиги (2.5.32)-теңлемедегі  $a_0$  коэффициентін сайлап алыудан кейін дәслеп  $a_1$  ди, кейін  $a_2$  ни, буннан кейін басқа да коэффициентлерди анықлауға мүмкиншилик береді. Усындай жоллар менен барлық  $a_k$  коэффициентлерин есаплап болғаннан кейін (2.5.29)-теңлемениң биз излеп атырған шешимлерин  $\rho$  ның дәрежелери бойынша белгили коэффициентлери бар (2.5.30)-қатар түрінде табамыз.

(2.5.32)-аңлатпадан  $k$  ның жеткиликли дәрежедеги үлкен мәнислери ушын (2.5.30)-қатардың коэффициентлери арасындағы қатнастың  $a_{k+1} \approx \frac{2\alpha}{k} a_k$  түрине ийе болатуғынлығы келип шығады. Бирақ тап усындай байланыс

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\alpha)^k}{k!} \rho^k = \exp(2\alpha\rho)$$

қатарының коэффициентлери арасында да орын алады. Бул қатар экспонентаның  $2\alpha\rho$  дәрежеси бойынша жайыуды көрсетеді.

Демек (2.5.30)-аңлатпадағы қатар шексиз көп қосылыұшылардан турса, онда  $\rho$  ның жеткиликли дәрежедеги үлкен мәнислери ушын  $v(\rho)$  функциясы төмендегидей асимптотикаға ийе болады

$$v(\rho) \approx \rho^{l+1} \cdot \exp(2\alpha\rho).$$

Бирақ (2.5.28)-аңлатпадан хәтте  $\exp(2\alpha\rho)$  көбейтиұшисине көбейткеннен кейін де  $\rho \rightarrow \infty$  шегинде  $R(\rho)$  радиаллық қураұшының шексиз өсетуғынлығы келип шығады. (2.5.21) менен (2.5.24)-аңлатпаларды есапқа алғанда да усындай шексиз өсиұ биз излеп атырған Шредингер теңлемесінің шешиминде де бақланады. Бундай функция нормировка шәртин қанаатландырмайды хәм сонлықтан оны электронның толқын функциясы сыпатында қарай алмаймыз.

Бирақ егер (2.5.39)-аңлатпадағы қатар қандай да бир ағзада үзиліп (бөлиніп) қалса, яғный шекли дәрежели көп ағзалы болса, онда биз дүзген Шредингер теңлемесінің шешими  $\rho \rightarrow \infty$  шегинде кемедейди хәм регулярлықтың барлық шәртлерин қанаатландырады. Тек усындай жағдайда ғана (2.5.28)-аңлатпадағы экспоненциаллық көбейтиұши шексизликте толқын функциясының модулинің квадратының киширейиұин тәмийинлейди.

(2.5.32)-аңлатпадан (2.5.30)-аңлатпадағы қатардың  $k = n_r$  ағзасындағы үзиліп қалыұы

$$2\alpha(n_r + l + 1) = 2 \quad (2.5.33)$$

шәрти орынланғанда орын алады.  $n_r + l + 1$  пүтин санын  $n$  арқалы белгилеймиз (яғный  $n = n_r + l + 1$ ). Бундай жағдайда  $n_r$  ди радиаллық квантлық сан, ал  $n$  ди бас квантлық сан деп атаймыз.  $n \geq l + 1$ , яғный  $l \leq n - 1$  екенлиги көринип тур.

Бундай жағдайда (2.5.33) шәрти  $\alpha n = 1$  ямаса  $\varepsilon = 1/n^2$  түрине енеди. (2.5.26)-шәртти есапқа алғанда бул шәртти атомдағы электронның толық энергиясын квантлаұдың шәрти сыпатында қабыл етиұге болады

$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.5.34)$$

Солай етип толқын функциясының регулярылығы шәрти атомның энергиясының квантланыў шәртине алып келди. Бул шәрт  $Z = 1$  болған жағдайда Бор теориясындағы водород атомындағы энергияның квантланыўына дәл сәйкес келеди. Сонлықтан (2.5.34)-формуладан экспериментлерде тексерилип көрилген (2.5.14) Бальмер формуласы келип шығады.

Солай етип электронның водород тәризли атомлардағы толқын функциясы  $n$  хәм  $k$  квантлық санларнан ғәрезли болады екен хәм былайынша жазылады

$$X_{nl}(\rho) = \rho^l \cdot \exp\left(-\frac{\rho}{n}\right) \cdot \sum_{k=0}^{n_r} \alpha_k \rho^k. \quad (2.5.35)$$

Бул аңлатпада  $\rho = Z \cdot r / a$ ,  $n_r = n - (l + 1)$ ,  $l \leq n - 1$ , ал  $\alpha_k$  коэффициентлери болса  $k > 0$  болған жағдайларда (2.5.12)-аңлатпаның жәрдемінде анықланады.  $a_0$  коэффициентиниң мәниси ең ақырында толқын функциясының нормировка шәртинен анықланады. Бул шәрти сфералық координаталар системасында былайынша жазамыз

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi = 1. \quad (2.5.36)$$

Бул формулада  $dV = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$  арқалы сфералық координаталардағы көлемнің элементи белгиленген.

Солай етип атомдағы электронның квантлық халды анықлайтуғын толқын функциясы табылды. Ол мынадай түрге ийе:

$$\psi_{nlm}(\rho, \theta, \varphi) = X_{nl}(\rho) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

хәм ол  $n$ ,  $t$  және  $l$  санларынан ғәрезли.

Орбиталық квантлық сан болған  $l$  санының берилген мәнисине сәйкес келиўши квантлық халларды белгилеў ушын төмендегидей спектроскопиялық символлар қолланылады:

|                |   |   |   |   |   |   |   |     |
|----------------|---|---|---|---|---|---|---|-----|
| $l$ диң мәниси | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | ... |
| Халдың белгиси | s | p | d | f | g | h |   |     |

$l = 0$  болған халды s-хал, ал усындай халдағы электронды s-электрон деп атаймыз.  $l = 1$  болған халды p-хал деп атайды.

Электронның уивнт халын толығырақ белгилеў ушын  $n$  бас квантлық санның мәнисин де бериў керек. Бул квантлық сан халдың белгисиниң алдында жазылады. Мысалы  $n = 2$  хәм  $l = 0$  болған квантлық халдағы электронды 2s белгиси менен белгилеймиз, ал  $n = 4$  хәм  $l = 2$  болған квантлық халдағы электронды 4d арқалы белгилеймиз. Бундай мысалларды көплеп келтириў мүмкин.

Барлық ўақытта  $l \leq n - 1$  теңсизлиги орынланатуғын болғанлықтан

$$\begin{aligned} n = 1 &\rightarrow 1s, \\ n = 2 &\rightarrow 2s, 2p, \\ n = 3 &\rightarrow 3s, 3p, 3d \\ n = 4 &\rightarrow 4s, 4p, 4d, 4f \end{aligned}$$

хәм тағы басқаларды жазыўымыз мүмкин.

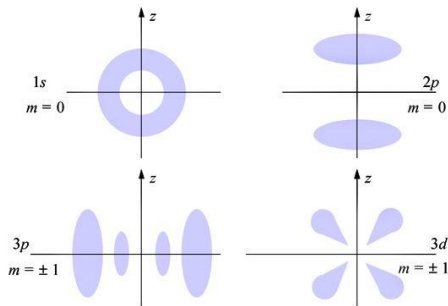
$Y_{lm}(\theta, \varphi)$  сфералық функцияларының қасиеттерін таллау барлық s-электронлардың, яғни  $l = 0$  және  $m = 0$  халлардың сфералық симметрияға ие халлар екендігін көрсетеді. Бұл халлардағы толқын функциясының мәнісі  $\theta$  және  $\varphi$  мүйешлік өзгеріушілерінің мәнісінен гәрезли емес.

Параграфтың ақырында водород тәрізлі бір қатар атомлардағы нормировкаланған толқын функцияларын жазамыз.

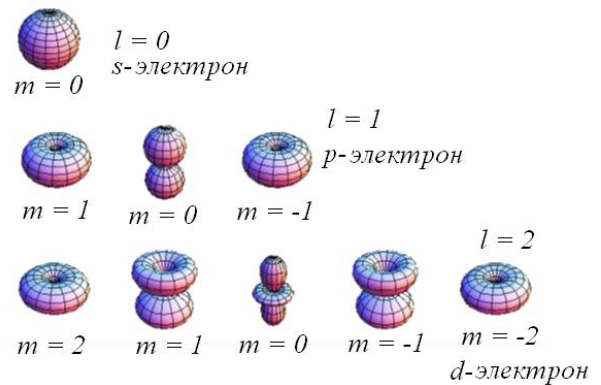
| $n$ | $l$ | $m$ | $\psi_{nlm}$                                                                                              | Хал |
|-----|-----|-----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1   | 0   | 0   | $\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \exp(-\rho)$                                         | 1s  |
| 2   | 0   | 0   | $\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} (2 - \rho) \exp(-\frac{\rho}{2})$                  | 2s  |
| 2   | 1   | 0   | $\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp(-\frac{\rho}{2}) \cos \theta$            | 2p  |
| 2   | 1   | +1  | $\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp(-\frac{\rho}{2}) \sin \theta \exp(-i\pi)$ | 2p  |
| 2   | 1   | -1  | $\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \rho \exp(-\frac{\rho}{2}) \sin \theta \exp(-i\pi)$ | 2p  |

2.5.7a-сүрете водород атомындағы бір қатар квантлық халлар үшін биз жоқарыда тапқан толқын функцияларының жәрдеминде итималлықтың радиаллық электронлық тығызлығы "думан" түріндегі көрсетілген. Бұл "думан"ның тығызлығы кеңістіктің хәр қыйлы нокатларында усы итималлықтың тығызлығына тууры пропорционал. Квантлық теорияда тап усындай итималлық тығызлығының тығызлығы думаны түрінде атомның образы тап усындай усылда бериледи.

2.5.7b сүрете болса Mathematica 8.0 универсаллық программалау тилинде алынған сәйкес сүреттер берілген.



2.5.7a сүрет. Водород атомындағы бір қатар квантлық халлар үшін толқын функцияларының жәрдеминде итималлықтың радиаллық электронлық тығызлығы "думан" түріндегі көринісі.



2.5.7b сүрет. Mathematica 8.0 универсаллық программалау тилинде есапланған водород атомындағы бір қатар квантлық халлар үшін толқын функцияларының жәрдеминде итималлықтың радиаллық электронлық тығызлығы "думан" түріндегі көринісі.



**5.3-мәселе.** Водород атомындағы 1s хәм 2p халлардағы электронды ядродан қандай қашықтықларда ең үлкенірек итималлық пенен табыўдың мүмкин екенлигин анықлаңыз.

**Шешими:** Мәселениң шәртинде берилген халлардағы электронды ядродан хәр қыйлы қашықтықларда табыў мүмкин. Бундай жағдайда электронды ядродан  $r$  қашықтығында табыўдың итималлығы радиуслары  $r$  шамасынан  $r+dr$  шамасына шекемги жуқа шар қатламында табыўдың итималлығына тең. Бул итималлық былайынша анықланады

$$dP = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\theta d\varphi.$$

Бул итималлық қатламның қалыңлығы  $dr$  ге пропорционал, яғный

$$dP = \omega(r)dr.$$

Ядродан ең итимал қашықтықты  $r^{(\text{итимал})}$  арқалы белгилейик. Бундай қашықтық ушын итималлықтың радианлық тығызлығы  $\omega(r)$  шамасы максималлық мәниске ийе болыўы шәрт.

Жоқарыда келтирилген кестеден водород атомының электронының толқын функцияларын алып, 1s хал ушын

$$\omega_1(r) = A r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right), \quad A = \text{const}$$

екенлигин, ал 2p халы ушын

$$\omega_2(r) = B r^4 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right), \quad B = \text{const}$$

екенлигине ийе боламыз. Бул функциялардың туўындыларын нолге теңеп 1s халы ушын  $r_1^{(\text{итимал})} = a$  мәнисин аламыз. Демек бул халдағы электронды ядродан биринши Бор орбитасының радиусына теңдей қашықтықларда табыўдың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады деген сөз.

2p халлары ушын  $r_2^{(\text{итимал})} = 4a$  шамасына ийе боламыз. Демек 2p халда турған электронды табыўдың итималлығы ядродан  $4a$  шамасына тең қашықтықта, яғный ядродан екинши Бор орбитасының радиусына тең қашықтықта табыўдың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады.

Солай етип квантлық механикада электронның белгили бир орбита бойынша қозғалыўы ҳаққындағы көз-қарас пайдаланылмайтуғын болса да бул теорияда Бор орбитасының радиуслары белгили бир физикалық мәниске ийе болады екен.

**5.4-мәселе.** Тийкарғы халда турған водород атомы ушын ядродан хәр қыйлы қашықтықлардағы электр майданының потенциалын анықлаңыз.

**Шешими:** Биз излеп атырған потенциал ядроның майданының потенциалынан хәм электронның ядроның дөгеррегінде айланыўы менен байланыслы болған электронлық "думанның" потенциалының қосындысынан турады:  $\varphi = \varphi_n + \varphi_e$ . Бул аңлатпада  $\varphi_n$  арқалы ядро майданының потенциалы белгиленген.

Толқын функциясының итималлықлық мәниси бойынша электрон "бултындағы" электр зарядының көлемлик тығызлығы  $\rho_e = -e|\psi_{100}|^2$  шамасына

тең. Кеңісlikте тап усындай болып тарқалған зарядтың майданының потенциалын потенциал ушын жазылған Пуассон теңлемесин шешіу жолы менен анықланады:

$$\Delta\varphi_e = -\frac{\rho_e}{\varepsilon_0}.$$

Егер водород атомында қашықлықтың масштабы хәм характерли потенциал ушын Бор радиусы  $a$  ны хәм усындай қашықлықтағы ядроның потенциалы  $\varphi_0 = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a}$  шамасын қабыл етсек, онда бирликлери жоқ түрде Пуассон теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\varphi_e}{dr} \right) = 4 \exp(-2r).$$

Бул теңлемени

$$\frac{1}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} (r \varphi_e) = 4 \exp(-2r).$$

түрине алып келиу мүмкин. Бул бир текли емес дифференциал тенлемениң шешиминиң

$$\varphi_e = \left( \frac{1}{r} + 1 \right) \exp(-2r) - \frac{1}{r}$$

функциясы екенлигине аңсат көз жеткерийге болады. Биз пайдаланып атырған бирлиги жоқ өзгерийушилердеги ядроның майданының потенциалы  $\varphi_n = \frac{1}{r}$  болғанлықтан атомдағы электр майданының потенциалы ушын

$$\varphi = \varphi_n + \varphi_e = \left( \frac{1}{r} + 1 \right) \exp(-2r)$$

аңлатпасын аламыз. Өлшем бирлиги бар шамаларға қайтып келип водород атомнының тийкарғы халы ушын электр майданының потенциалының кеңісlikтеги тарқалыуы ушын

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a} \left( \frac{a}{r} + 1 \right) \exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$$

формуласын аламыз. Бул аңлатпаны талласақ, онда ядроның қасында (бундай жағдайда  $r \ll a$ ) потенциалдың

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

шамасына тең болатуғынлығын көремиз. Демек кеңісlikтиң бул областында электр потенциалы тек ядроның оң мәниске ийе заряды тәрeпинен пайда етиледі екен.

Ядродан қашықласқан сайын терис зарядқа ийе электронлық "думанның" майданы ядроның майданын экранлай баслайды. Сонлықтан ядродан жеткиликли дәрежедеги үлкен қашықлықтарда, яғный  $r \gg a$  шәрти орынланғанда

$$\varphi(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right),$$

яғный ядродан қашықлаған сайын потенциал экспоненциаллық нызам менен тез кемейеди.

## 2-5-4. Квантлық санлар хәм олардың физикалық мәніси

Биз Шредингер теңлемеси водород атомы ушын шешкенимизде бундай атомдағы электронның квантлық халының (яғный атомның өзиниң квантлық халының) үш квантлық санн бериў менен толық анықланатуғынлығын көрдик. Демек квантлық санларның мәніслери берилген болса атомның қәсийетлерин толық тәрийиплеўге болады деген сөз.

Квантлық санларның бәриниң мәніслери пүтин санға тең хәм олар атомның берилген квантлық халдағы тийкарғы физикалық шамаларды өлшегенде алынатуғын нәтийжелерди болжаўға мүмкиншилик береді.

1. Бас квантлық сан  $n$ . Бул квантлық сан  $n = 1, 2, 3, \dots$  мәніслерине тең болады хәм қәлеген квантлық халдағы электронның толық энергиясын анықлайды

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{13,6}{n^2} \text{ эВ.} \quad (2.5.37)$$

Энергияның бул мәніслериниң (2.5.17а) гамильтонианның меншикли мәніслери екенлигин атап өтемиз. Сонлықтан водород атомындағы байланысқан халда терис мәнісли дискрет энергия спектрине ийе болады, Энергия қәддилери арасындағы айырма  $E = 0$  шамасына жақынласқанда қойыўласады хәм дискретлик жоғалады.

2. Орбиталық (азимуталлық) квантлық сан  $l$ . Бас квантлық санның мәніси берилген квантлық халлардыда азимуталлық квантлық сан

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

мәніслерине ийе болады.

Жоқарыдағы параграфта исленген жуўмақлар бойынша атомның хәр қыйлы квантлық халларды тәрийиплейтуғын  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  толқын функциялары тек толық энергия операторы  $\hat{H}$  тың ғана емес, ал  $\hat{L}^2$  импульс моментиниң квадраты операторының да меншикли функциялары болып табылады. Усының менен бирге

$$\hat{L}^2\psi_{nlm} = l(l + 1)\hbar^2\psi_{nlm}.$$

Демек қәлеген квантлық халда атом белгили бир импульс моментиниң квадратының мәнісине ийе болады. Соның менен бирге атомда қозғалатуғын электронның импульсиниң орбиталық моменти азимутал квантлық санның жәрдемінде анықланады:

$$L = \hbar\sqrt{l(l + 1)}. \quad (2.5.38)$$

Импульс моментинің квантланыуының бул формуласын таллаймыз. Бор теориясындағы қозғалыушы электронның импульс моментинің квантланыуы (2.5.3) пенен бул шәрттің сәйкес келмейтуғынлығы айқын көринеди. Мәселе бул формулалар жәрдеминде санлық мәнислердің хәр қыйлы екенлигинде емес. Принципиаллық айырма мынадан ибарат: квантлық механикада атомның импульс моменти нолге тең болған халларының да бар болыуы мүмкин. Барлық  $s$  халларда, мысалы  $1s$  халда  $l = 0$  хәм (2.5.38)-аңлатпа бойынша  $L = 0$ .

Атомда белгили бир траектория (яғный орбита) бойынша қозғалыушы электронды классикалық физика көз-қараслары менен қарағанда импульс моментинің нолге тең болыуы мүмкин емес.

Тәжірийбелер ноллик орбиталық моментке ийе халлардың бар екенлигин тастыйықлайды. Демек атомдағы электронның қозғалысын тәрийиплеудің классикалық усылынан бас тартқанда ғана атомның қәсийетлерин дурыс есаплауға хәм болжауға болатуғынлығын көрсетеди. Квнат механикасындағы бөлекшелердің қозғалысын тәрийиплеудің итималлықлық усылы атомлық системаларды тәрийиплеудің бирден бир дурыс усылы болып табылады. Хәзирги заман физикасының жуўмақларының мәниси усыннан ибарат.

Ядроның әтирапында қозғалыушы электрон зарядланған бөлекше болғанлықтан, бундай қозғалыс атомда базы бир туйық тоқтың болатуғынлығына сәйкес келеди. Бундай туйық тоқты орбиталық магнит моменти  $\vec{p}^m$  арқалы тәрийипленеди.

Бор теориясында электронның орбиталық механикалық моменти  $L = mvr$  шамасына тең. Егер электронның ядроның әтирапын бир рет айланып шығыуы ушын кеткен ўақытты  $T$  арқалы белгилесек, онда усындай қозғалысқа мәниси

$$i = \frac{e}{T} = \frac{ev}{2\pi r}$$

шамасына тең туйық тоқ сәйкес келеди. Бул тоққа

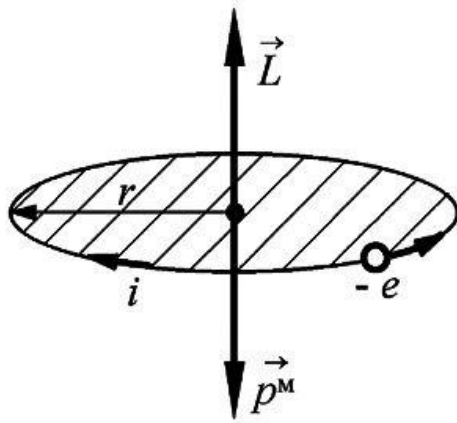
$$p^m = i\pi r^2 = \frac{2vr}{2}$$

магнит моменти сәйкес келеди. Бундай жағдайда механикалық хәм магнит моментлери арасындағы байланыс

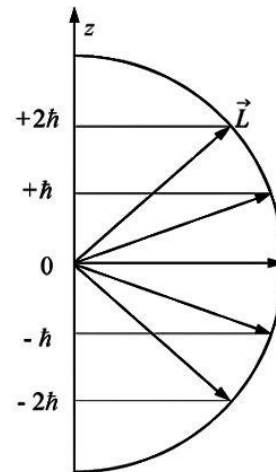
$$\Gamma_0 = \frac{p^m}{L} = \frac{e}{2m} \quad (2.5.39)$$

гиромангнитлик қатнастың жәрдеминде анықланады. Электронның заряды терис болғанлықтан магнит моменти векторы  $\vec{p}^m$  менен механикалық момент векторы  $\vec{L}$  бир бирине қарама-қарсы бағытланған (2.5.8-сүўрет).

Квантлық механикада орбиталық магнит моментин табыу ушын электр тоғының кеңисликтеги тығызлығы  $\vec{j}_e$  шамасын итималлықлардың ағысының тығызлығы  $\vec{j}$  арқалы  $\vec{j}_e = -e\vec{j}$  формуласы бойынша анықлап алыу керек болады. Итималлықлар ағысы тығызлығын атомның берилген квантлық халдыа сәйкес келетуғын толқын функциясын билиу арқалы (3.23)-формуланың жәрдеминде есаплайды. Гиромангнит қатнастың дәл квантлық механикалық есаплаулары да (2.5.39)-формулаға алып келеди.



2.5.8-сүрөт.



2.5.9-сүрөт.

Солай етип қалеген квантлық ҳалда водород атомы тек механикалық моментке емес [оның шамасын (2.5.38)-формуланың жәрдеминде есаплаймыз], ал магнит моментине де ийе болады екен

$$p^m = \Gamma_0 L = \mu_b \sqrt{l(l+1)}. \quad (2.5.40)$$

Бул аңлатпадағы универсаллық турақлы

$$\mu_b = \frac{e\hbar}{2m} = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/Тл}$$

шамасы атомлардың магнит моментлерин өлшеу бирлиги сыпатында хызмет етеди хэм оны Бор магнетоны деп атайды.

Егер атом бир ҳалдан екінши ҳалға фотонды нурландырыу ямаса жутыу менен өтсе, онда орбиталық квантлық сан  $l$  диң тек бирге өзгеретуғын өтиулердиң болыуы мүмкин, яғный  $\Delta l = \pm 1$ . Демек оптикалық өтиулер ушын айтылған  $\Delta l = \pm 1$  өтиулері таңлап алыу қағыйдасы (правило отбора) деп аталады. Бундай таңлап алыу қағыйдасының орын алыуына тиккелей себеп бар. Нурландырылған электромагнит нурлары (фотон) өзи менен бирге тек энергияны ғана емес, ал белгили бир импульс моментин де алып кетеди. Сонлықтан фотон нурланғанда электронның орбиталық квантлық сан бирге өзгеріуи шәрт.

3. Магнит квантлық сан  $m$ . Орбиталық квантлық сан  $l$  берилген квантлық ҳалда магнит квантлық сан  $(2l + 1)$  түрли мәниске ийе бола алады. Олар мыналар

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Магнит квантлық сан  $m$  ниң физикалық мәниси төмендеги жағдайлар менен байланыслы:

Водород атомындағы электронның квантлық ҳалды сыпатлайтуғын  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  толқын функциясы импульс моментиниң проекциясы операторы  $\hat{L}_z$  тиң меншикли функциясы болып табылады. Қала берсе

$$\hat{L}_z \psi_{nlm} = m\hbar \psi_{nlm}.$$

Сонлықтан квантлық механиканың улыўмалық қағыйдаларынан (3.5-параграфты қараңыз) электронның импульсинің моментинің айырып алынған  $z$  көшерине түсірілген проекциясының тек белгили бир мәнислерге ийе болатуғынлығы келип шығады. Бул мәнислер мыналар:

$$L_z = m\hbar. \quad (2.5.41)$$

Кеңисликтеги  $z$  бағытын усы бағытта электр ямаса магнит майданын пайда етиў жолы менен айырып алыўға болады.

(2.5.41)-формулань кеңисликтеги квантланыў формуласы деп атайды. Механикалық моменттиң проекциясы формуласы болған (2.5.41)-формула  $\vec{L}$  векторының кеңисликте белгили бир бағытларға ийе болатуғынлығын көрсетеди (2.5.9-сүүрет). Электронлық орбиталар ҳаққындағы классикалық көз-қараслар бойынша  $\vec{L}$  векторы барлық ўақытта орбита тегислигине перпендикуляр бағытланған. Демек (2.5.41)-аңлатпа кеңисликтеги орбиталардың сырттан түсірилген майданның бағытына салыстырғанда дискрет түрде жайласатуғынлығын сәўлелендиреди екен.

Жоқарыда гәп етилген атомның магнит хәм механикалық моментлери арасындағы байланыс (2.5.41)-аңлатпаны есапқа алғанда атомның магнит моментинің айырып алынған  $z$  бағытына түсірилген проекциясының мүмкин болған мәнислерин анықлаўға мүмкиншилик береди екен:

$$p_z^m = \Gamma_0 L_z = m\mu_b. \quad (2.5.42)$$

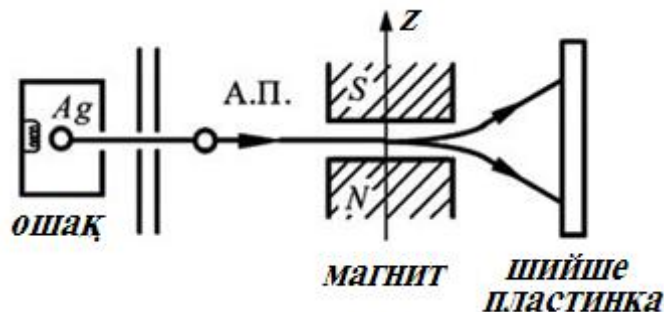
Демек атомның магнит моментинің айырып алынған  $z$  бағытына түсірилген проекцияларының мүмкин болған мәнислери магнит квантлық саннан ғәрезли болады екен.

## 2-5-5. Штерн хэм Герлах тэжирийбеси. Электронның спини хаққындағы гипотеза

**Штерн хэм Герлах тэжирийбеси.** Оптикалық экспериментлер атомлардың энергиясының квантланатуғынлығы хаққындағы жеткилики болған мағлыұматларды береді. Енди квантланыұдың басқа түри болған кеңисликтеги квантланыұды қараймыз. Бул квантланыұ атомның магнит моментиниң сыртқы магнит майданы бағытына түсирилген проекциясының дискрет мәнислерге ийе болыуынан ибарат. Кеңисликтеги квантланыұ экспериментте 1922-жылы О.Штерн хэм В.Герлах тэрепинен ашылды.

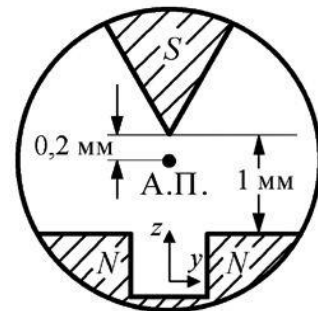
Водород атомы ушын орбиталық магнит моментиниң кеңисликтеги квантланыұы (2.5.42)-формуланың жәрдеминде сыпатланады. Қурамалырақ атомлар ушын бул формуланың түри өзгерислерге ушырайды (2.5.6-параграфты қараңыз). Бирақ бундай атомлар ушын да квантлық механиканың тийкарғы жуўмағы өз күшинде қалады: атомның магнит моментиниң сырттан түсирилген майданның бағытына түсирилген проекциясы тек дискрет квантлық мәнислерге ийе болады.

Штерн хэм Герлах тэжирийбесинде атомлық система ушын кеңисликтеги квантланыұ былайынша демонстрацияланады. Вакуум ошағында пуўландырыұ хэм енсиз саңлақлар арқалы өткеріұ жолы менен гүмистиң ямаса басқа металдың атомларының жиңишке дәстеси алынады. (2.5.10а-сұўрет). Бул дәсте бир текли емес магнит майданы арқалы өткериледи. Бул майданда магнит индукциясының үлкен градиентиниң болыуы шэрт. Тэжирийбеде магнит майданының индукциясы  $\vec{B}$  үлкен мәниске ийе хэм  $z$  көшери бағытында бағытланған.



2.5.10а сұўрет.

Штерн хэм Герлах тэжирийбесиниң схемасы.



2.5.10b сұўрет.

Бундай магнит майданын пайда етиұ ушын пышақтың жүзи сыяқлы полюске ийе магнит қолланылады (2.5.10b-сұўрет). Бул магниттен жүдэ жақын қашықлықтан атомлар дәстеси өткериледи.

Магнит полюслери арасынан өтиұши атомларға магнит майданы бағытында

$$F_z = p_z^m \frac{\partial B}{\partial z} \quad (2.5.43)$$

күши тэсир етеди. Бул күш бир текли емес магнит майданының индукциясының градиентиниң есабынан пайда болады хэм атомның магнит моментиниң майданның бағытына түсирилген проекциясының шамасынан ғэрезли. Усы күштиң тэсиринде атомлар дәстеси  $z$  көшери бағытында аұысыұға ушырайды. Бул

ауысыудың шамасы атомға тәсир етиуіші (2.5.43)-күшке байланысly. Нәтийжеде бир қанша атомлар жоқарыға, бир қанша атомлар төменге қарай ауысады.

Классикалық физика көз-қараслары бойынша тәртипсиз жыллылық қозғалыслары орын алатуғын болғанлықтан магнит майданына кирип келгенде атомлардың магнит моментлери қәлеген бағытқа қарай бағытланған болады. Усындай жағдай хәр қандай атомлар ушын  $F_z$  күшиниң үзликсиз тарқалыуына, яғный атомлар дәстесиниң кеңисликтеги үзликсиз ауысыуына сәйкес келеди. Нәтийжеде магнит арқалы ушып өткен гүмис атомлары шийше пластинкада тутас дақты пайда етиуі керек (гүмис атомлары шийше пластинкаға келип түсип оған қатады, бундай процессти "напыление" – шаңландырыу деп атайды).

Егер квантлық механиканың көрсеткениндей кеңисликтеги квантланыу орын алатуғын болса атомның магнит моментиниң проекциясы  $p_z^m$  тек дискрет мәнислерге ийе болады хәм (2.5.43)-күштиң тәсиринде атомлар дәстеси дәстелердиң дискрет санына бөлиниуі керек. Нәтийжеде шийше пластинкада атомлардың айналық дискрет жолақлары пайда болады. Штерн хәм Герлах тәжирийбесинде тап усундай нәтийже бақланды.

Солай етип Штерн хәм Герлах тәжирийбесинде атомлардың магнит моментлериниң кеңисликлик квантланыуы хәққындағы квантлық механиканың жуұмақлары тастыйықланды.

**Электронның спини.** Квантлық механиканың электронлық "думанның" симметриясының бар екенлигиниң нәтийжесинде тийкарғы қозбаған халда турған атомның механикалық хәм магнитлик моментлери нолге тең болатуғынлығы келип шығады. Демек, егер Штерн хәм Герлах тәжирийбелеринде атомлар дәстесинде қозбаған атомлар қозғалатуғын болса, онда бундай атомлар дәстеси магнит майданында бағытын өзгертпеуі керек. Бундай жағдайда шийше экранда тек бир енсиз айналық жолақты бақлаған болар едик.

Бирақ эксперимент квантлық механиканың бундай жуұмағын тастыйықламады. Тәжирийбелер қозбаған атомлар дәстесиниң тек еки дәстеге ажыралатуғынлығын көрсетти. Шийше пластинкада болса жоқарыға хәм төменге қарай симметриялы жайласқан енсиз еки жолақ пайда болды. Бул ауысыуларды өлшеу қозбаған гүмис атомларының магнит моментин анықлауға мүмкиншилик берди. Магнит майданының бағытында түсирилген оның проекциясы  $+\mu_B$  хәм  $-\mu_B$  шамаларына тең болып шықты.

Квантлық механика менен тәжирийбе арасындағы бул қарама-қарсылық биринши қарама-қарсылық емес еди. Тап сондай айырма силтили металлдардың оптикалық спектриниң жүдә жуқа спектрин үйренгенде де бақланған еди. Ферромагнетиклер менен өткерилген тәжирийбелерде гиромангнитлик қатнастың аномаллық мәниси анықланды. Бул мәниси күтилген мәнистен еки есе артық болып шықты.

Квантлық механиканың бул қыйыншылықлары 1925-жылы сапластырылды. Усы жылы С.Гаудсмит хәм Дж.Уленбек электронның өзи "меншикли" механикалық хәм магнит моментлерине ийе болады, бул моментлер электронның кеңисликтеги қозғалысы менен байланысly емес деген батыл теорияны усунды. Бул гипотеза электронның спини хәққындағы гипотеза атамасын алды. Бундай атама инглиз тилиндеги spin сөзи менен байланысly. Бул сөзди қарақалпақшаға аударғанда "айланыу" деген мәнисти береди.

Дәслеп спин электронның өзиниң көшери дөгерегинде айланыуы менен байланысly деген болжау қабыл етилди. Бирақ айланыушы зарядланған шарик модели дурыс болмай шықты. Есаплаулар биринши гезекте электрон қандай тезлик пенен айланса да (яғный жақтылықтың тезлигинен киши тезлик нәзерде тутылады) Бор магнетонына тең магнит моментин пайда етиу мүмкин емес



екенлигин көрсетти. Усының менен бір қатарда айланыушы электрон модели менен есапланған меншикли магнит хәм механикалық моментлердің гиромангнитлик қатнасының мәнісі тәжірийбеде алынған шамадан екі есе киши болып шықты.

Солай етип Жер сыяқлы өз көшери дөгерігінде айланыушы электрон модели дурыс болмай шықты. Бирақ "спин" термини сақланып қалды хәм хәзіргі заман квантлық механиканың тийкарғы терминлеринің бирине айланды.

Электронның спини классикалық аналогына ийе емес. Спин квантлық бөлекшениң ишки квантлық қасиеті болып табылады хәм ол бөлекшеде қосымша еркинлик дәрежесинің бар екенлиги менен байланысly. Бул еркинлик дәрежесинің санлық характеристикасы спин  $s = \frac{1}{2}$  электрон ушын тән болған масса, заряд сыяқлы физикалық шама болып табылады.

Теория менен эксперимент жуымақларын бір бири менен сәйкеслендириуде Гаудсмит хәм Уленбеклер орбиталық моментлерге сәйкес электронның меншикли механикалық хәм магнит моментлеринің шамалары

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \text{ хәм} \quad (2.5.44)$$

$$p_s^m = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}\mu_B \quad (2.5.45)$$

формуласы менен анықланады деп болжады. Бундай моментлер ушын гиромангнитлик қатнас

$$\Gamma_s = \frac{p_s^m}{L_s} = \frac{2\mu_B}{\hbar} = \frac{e}{m} \quad (2.5.46)$$

шамасына тең хәм орбиталық қозғалыс ушын келтирилип шығарылған (2.5.39)-гиромангнитлик қатнастан екі есе үлкен болып шығады.

Бул теорияда меншикли моментлердің берілген  $z$  бағытына түсірилген проекциясы  $m_s = \pm s = \pm \frac{1}{2}$  квантлық санның жәрдемінде анықланады. Бундай жағдайда

$$L_{sz} = m_s \hbar = \pm \frac{\hbar}{2}, \quad (2.5.47)$$

$$p_{sz}^m = 2m_s \mu_B = \pm \mu_B \quad (2.5.48)$$

шамаларына тең болады. (2.5.44 - 5.48) аңлатпалардан электронның спинлик моментлеринің шамаларының турақлы екенлиги келип шығады. Ал электронның қосымша еркинлик дәрежесі менен бул моментлердің  $z$  дана проекциясы байланысly. Бул проекциялар  $m_s$  квантлық санның жәрдемінде анықланады хәм тек екі мәніске ийе болады. Бундай екі квантлық халлар хәққында гәп еткенде спини жоқарыға қарай бағытланған ( $m_s = +\frac{1}{2}$ ) хәм спини төменге қарай бағытланған ( $m_s = -\frac{1}{2}$ ) халлар нәзерде тугылады. Сонлықтан электронның қәлеген системадағы халы хәққында гәп етилгенде спини бағытын да көрсетиу керек болады.

Демек электронның атомдағы квантлық хал төрт квантлық санның жәрдемінде анықланады екен. Оларды төмендегидей кесте түрінде көрсетеміз.

|         |      |               |
|---------|------|---------------|
| Атамасы | Бел- | Мүмкин болған |
|---------|------|---------------|

|                                   | гиси  | мәнислери                           |
|-----------------------------------|-------|-------------------------------------|
| Бас квантлық сан                  | $n$   | 1, 2, 3, ...                        |
| Орбиталық (азимутал) квантлық сан | $l$   | 1, 2, 3, ..., (n-1)                 |
| Магнит квантлық сан               | $m$   | -l, ..., -2, -1, 0, +1, +2, ..., +l |
| Спин квантлық сан                 | $m_s$ | $-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$        |

$n$  бас квантлық санның хәр бир мәнисине басқа квантлық санларның

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (2.5.49)$$

комбинациясы сәйкес келеди.

Электронда спиннің бар екенлигин есапқа алып водород атомының импульсинің толық моментін анықлаймыз. Бул толық момент электронның орбиталық хәм меншикли моментлеринің қосындысынан турады. Квантлық системадағы қәлеген импульс моменти сыяқлы қосынды моменттің шамасы

$$L_j = \hbar \sqrt{j(j+1)} \quad (2.5.50)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпадағы  $j$  квантлық сан

$$j = l + s \text{ хәм } j = |l - s|$$

мәнислерине ийе бола алады. Электронның спини  $s = \frac{1}{2}$  шамасына тең болғанлықтан

$$j = l + \frac{1}{2} \text{ хәм } j = \left| l - \frac{1}{2} \right|$$

ярым пүтин мәнислерін аламыз. Егер  $l = 0$  болса  $j$  квантлық санның мәниси тек  $\frac{1}{2}$  ге тең болады. Егер  $l$  диің мәниси нолге тең болмаса  $j$  квантлық санның  $j = l + \frac{1}{2}$  хәм  $j = l - \frac{1}{2}$  мәнислери болып, олар орбиталық моментке салыстырғанда спин моментлеринің хәр қыйлы бағытларына сәйкес келеди.

Атомның толық импульс моментинің квантлық сан ушын төмендегидей таңлап алыў қағыйдасы орын алады:

$$\Delta j = 0, \pm 1.$$

Механикалық моментлер менен магнит моментлери байланысқан. Олар еки туйық тоқ сыяқлы бир бири менен тәсир етиседи. Бундай тәсирлесиў спин-орбиталық тәсирлесиў деп аталады. Бундай тәсирлесиў атомның толық энергиясын өзгертеди хәм сонлықтан хәр қыйлы  $j$  квантлық санна ийе ҳалларда атом хәр қыйлы энергияға ийе болыўы керек. Бундай айырманың болыўы атомның оптикалық спектриндеги сызықлардың бир неше сызықларға айрылыўын тәмийинлейди. Оптикалық спектр сызықларының бир неше сызықларға айрылыўы жүдә кишкене мәниске ийе болып, ол водород атомының оптикалық спектринің жуқа қурылысының пайда болыўына алып келеди. Бундай спектрде спектр сызықлары

дублетлик (қос) структураға ийе. Бундай жуқа структурадағы сызықтар арасындағы қашықтықтар тийкарғы сызықтар арасындағы қашықтықтардан жүзлеген мың есе киши болса да экспериментаторлар бундай жуқа структураның бар екенлигин тәжирийбелериниң барысында жүдә сезгир хәм жоқары ажырата алыўшылық қәбилетликке ийе оптикалық әсбаплардың жәрдеминде анықлады.

Электронның спинге ийе болыўының физикалық тәбияты нелерден ибарат? Бул сораўға жуўап классикалық физикада да жоқ, релятивистлик емес квантлық механикада да жоқ. Релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарында Шредингер теңлемесиниң жататуғынлығын биз жақсы билемиз. Бундай теорияда спин қосымша гипотезаның жәрдеминде киргизиледи. Бул гипотеза теорияның тийкарғы қағыйдаларынан келип шықпайды, ал эксперимент пенен теорияның нәтийжелерин бир бири менен сәйкеслендириў мақсетинде пайдаланылады.

1928-жылы П.Дирак квантлық механикан бөлекшениң релятивистлик қозғалысы ушын улыўмаластырды. Релятивистлик квантлық теорияның (квант механикасының) тийкарында дәслеп релятивистлик электрон ушын жазылған Дирак теңлемеси жатады. Бул теңleme өзиниң структурасы хәм математикалық аппараты бойынша Шредингер теңлемесине салыстырғанда әдеўир қурамалы. Бизниң курсымызда Дирак теңлемесин таллай алмаймыз. Бирақ Шредингер теңлемесин шешиўдиң барысында үш квантлық санна ийе болғанымыздай, Дирак теңлемесин шешиўдиң барысында төртинши, спин квантлық санның тәбийий түрде пайда болатуғынлығын атап өтемиз.

Релятивистлик квантлық теория водород атомының жуқа спектрин пайда ететуғын энергия қәддилери арасындағы қашықтық ушын

$$\Delta E = \frac{\alpha^2}{16} E_i$$

шамасын береді. Бул аңлатпада  $E_i$  арқалы водород атомының ионизация энергиясы белгиленген.  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$  шамасы универсаллық дүньялық константа болып табылады. Ол жуқа структура турақтысы атамасына ийе болды.

Солай етип улыўмалық сөзлер менен электронның меншикли механикалық хәм магнит моментлериниң квантлық механикадағы релятивистлик эффект сыпатында пайда болатуғынлығын айтып өтемиз.

Тек электрон емес, ал басқа да көп санлы элементар бөлекшелер  $s$  спинге ийе болады. Бир қатар бөлекшелер ушын спин пүтин мәниске ийе, ал басқа бөлекшелер ушын ярым пүтин мәниске ийе. Мысалы ядроның қурамлық бөлекшелери болған нейтрон менен протонның спинлери  $s = \frac{1}{2}$ . Сонлықтан водород атомының ядросы да механикалық хәм магнит моментлерине ийе. Электрон менен ядроның магнит моментлериниң өз-ара тәсирлесиўиниң салдарынан водород атомларының оптикалық спектриниң аса жуқа структурасы жүзеге келеді. Бул спектр сызықтарының "аса киши" бөлеклерге бөлиниўи (бир сызықтың бир бирине аса жақын жайласқан сызықтарға ажыралыўы) түринде көринеди.

**5.5-мәселе.** Водород атомы тийкарғы ҳалда радиусы  $R = 5$  м хәм тоқ күши  $I = 10$  А болған дөңгелек тоқтың көшеринде жайласқан. Атомның дөңгелек тоқтың орайына шекемги қашықтық  $z = 10$  см. Магнит майданы тәрәпинен спинди есапқа алғанда водород атомына тәсир ететуғын күшти анықлаңыз. Ядроның магнит моментин есапқа алмаңыз.

**Шешими:** Магнитостатиканың белгили формуласының жәрдеминде дөңгелек тоқтың көшериндеги оның орайынан  $z$  қашықтықта жайласқан орындағы магнит майданының индукциясын есаплаймыз

$$B(z) = \frac{\mu_0 I R^2}{2(R^2 + z^2)^{3/2}}.$$

$B$  шамасын өзгериўши  $z$  бойынша дифференциаллап дөңгелек тоқтың орайынан  $z$  қашықтығындағы магнит майданының индукциясының градиентин табамыз

$$\left| \frac{\partial B}{\partial z} \right| = \frac{3}{2} \frac{\mu_0 I R^2 \cdot z}{(R^2 + z^2)^{5/2}}.$$

Егер ядроның магнит моментин есапқа алмасақ, онда  $1s$  халдағы водород атомының магнит моменти ( $l = 0$ ) тек электронның спини тәрәпинен пайда етиледі. Сонлықтан

$$p_z^m = p_{zs}^m = \pm \mu_B.$$

Демек магнит майданы тәрәпинен атомға модули

$$F = \mu_B \left| \frac{\partial B}{\partial z} \right| = \frac{3}{2} \frac{\mu_0 I R^2 \cdot z}{(R^2 + z^2)^{5/2}} \cdot \mu_B$$

шамасына тең болған күш тәсир етеді. Егер электронның магнит моменти магнит майданына параллель болса, онда бул күш дөңгелек тоқтың көшери бойлап орайына қарай бағытланған. Ал спиннің бағыты қарама-қарсы тәрәпке қарай бағытланған болса, онда бул күш дөңгелек тоқтың көшери бойлап қарама-қарсы тәрәпке қарай бағытланған. Санлық мәнислерин қойып  $F = 2,5 \cdot 10^{-26}$  Н мәнисин аламыз.

## 2-6-6. Шредингер теңлемесин жуўық түрде шешиў усыллары

### Уйытқыў теориясының тийкарғы теңлемелери

Квантлық механиканың мәселелериниң барлығын дәл шешиў мүмкин емес. Көпшилик жағдайларда энергия менен толқын функцияларының мәнислерин тек жуўық түрде ғана анықлаўға болады. Сонлықтан квантлық механикада Шредингер теңлемесин жуўық түрде есаплаў усыллары кеңнен қолланылады. Бундай усыллардың ең кең тарқалған түри уйытқыў теориясы болып табылады.

Квантлық механикада атомдағы электронлардың қозғалысларын изертлеў ушын тийкарғы күш сыпатында ядро менен электронлар арасындағы электростатикалық тәсир етисиў күши алынады. Ал уйытқыў сыпатында электролардың бир бири менен тәсирлесиў (ийтерисиў) күшлерин алыўға болады. Егер атом сыртқы электр ямаса магнит майданына жайластырылған болса, онда бул майданлар шамасы бойынша ядро пайда еткен электр майданының шамасынан әдеўир киши болады. Бул жағдайда уйытқыў сыпатында электронлардың сыртқы электр ямаса магнит майданындағы қозғалысын қарай аламыз.

Системаның гамильтонианы уақытқа байланыссыз болмауына стационар жағдайлар үшін уйытқыу теориясын қараймыз. Бұндай жағдайда системаның гамильтонианы:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \hat{T} + \hat{V}_0 + \hat{V}' = \hat{H}^0 + \hat{V}' \quad (2.6.1)$$

түрінде жазылады. Бұл аңлатпадағы уйытқыу операторы  $V' \ll V$ , ал потенциаллық энергияның тийкары бөлігі  $V^0$  дәл шешімге ие

$$\hat{H}^0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 \quad (2.6.2)$$

Шредингер теңлемесін қанаатландырады. Егер  $V' = 0$  теңлігі орынланатынын болса бұл теңлемесінің энергия  $E_n^0$  және толқын функциясы  $\Psi_n^0$  менен тәрікпенетуге дәл шешімдері болады. Бірақ  $V'$  нөлге тең болмағанда бизің мынадай теңлемесі шешіміміз керек болады:

$$(\hat{H}^0 + \hat{V}')\Psi = E\Psi. \quad (2.6.3)$$

Бизің уақытпамыз (2.6.3)-теңлемесіндегі  $V'$  уйытқыу энергиясын есепке алып жууық түрде болса да  $(\hat{H}^0 + \hat{V}')$  операторының меншіктері меншіктері  $E_n$  менен  $\Psi_n$  меншіктері функцияларын табыудан ибарат.

Уйытқыу теориясы бойынша энергия  $E$  менен толқын функциясы  $\Psi$  дің меншіктері төмендегідей қатарлар түрінде ізленеді:

$$\Psi = \Psi^0 + \Psi' + \Psi'' + \dots \quad (2.6.4)$$

$$E = E^0 + E' + E'' + \dots \quad (2.6.5)$$

Бұл аңлатпадағы  $E', \Psi'$  менен  $E'', \Psi''$  шамалары  $\Psi^0, E^0$  шамаларына салыстырғанда кішілігі бойынша бірінші және екінші тәртіпті шамалар болып табылады. Уйытқыу энергиясын  $V^0$  потенциалының энергиясы менен кіші  $\lambda$  шамасының ( $\lambda \ll 1$ ) көбейтесі түрінде жазамыз:

$$V' = V^0 \cdot \lambda.$$

(2.6.4)- және (2.6.5)-теңліктердегі бірінші тәртіпті кіші шамалар менен шекленіп, оларды (2.6.3)-теңлемесіне қойсақ  $\Psi'$  және  $E'$  шамаларының меншіктерін анықлау үшін төмендегідей теңлемесі аламыз:

$$(E^0 + E' - \hat{H}^0 - \hat{V}')(\Psi^0 + \Psi') = 0. \quad (2.6.6)$$

Бұл теңлемесіне қатынасуына ағзаларды меншіктерінің үлкенлігіне қарай жыйнасақ төмендегідей теңлемесі аламыз:

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi^0 + [(E' - \hat{V}')\Psi^0 + (E^0 - \hat{H}^0)\Psi'] + (E' - \hat{V}')\Psi' = 0. \quad (2.6.7)$$

Уйытқыу теориясының бірінші тәртіпті жууық шешімдерін табу үшін кішілігі бойынша екінші тәртіпті  $(E' - \hat{V}')\Psi'$  шамасын нөлге тең деп есептеп дәл

шешимнің  $(E^0 - \hat{H}^0)\Psi^0$  көбеймеси үшін алынуатынлығын аңғарамыз. Бундай жағдайда (2.6.7)-теңleme ноллик жууықлауда

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi_n^0 = 0 \quad (2.6.8)$$

теңлемесине айланады хәм бул теңлемени шеший арқалы Гамильтон операторының

$$E_1^0, E_2^0, E_3^0, \dots, E_n^0, \dots$$

меншикли мәнислери менен

$$\Psi_1^0, \Psi_2^0, \Psi_3^0, \dots, \Psi_n^0, \dots$$

меншикли функцияларын анықлауға болады. Бундай жағдайда (2.6.7)-теңлемениң орнына

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi' = -(E' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (2.6.9)$$

түріндеги теңлемени аламыз.

Мейли басланғыш моментте система  $n' = n$  квантлық халда турған болсын. Дәл шешимде  $E^0 = E_n^0, \Psi^0 = \Psi_n^0$  теңликлери орынланатуғын болғанлықтан биринши тәртипли жууықлауда  $E' = E_n', \Psi' = \Psi_n'$  теңликлерин қабыл етсек болады. Бундай жағдайда (2.6.9)-теңлемени былайынша жазуға болады:

$$(E_n^0 - \hat{H}^0)\Psi_n' = -(E_n' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (2.6.10)$$

Қәлеген функцияны ортонормировкаланған функциялардың толық системасы бойынша қатарға жайыуға болғанлықтан  $\Psi_n^0$  функциясын төмендегидей қатар түрінде излеймиз:

$$\Psi_n' = \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^0. \quad (2.6.11)$$

Ендиги ўазыйпа усы Фурье қатарындағы белгисиз  $C_{n'}$  коэффициентлерин анықлаудан ибарат болады. (2.6.11)-аңлатпаны (2.6.10)-теңлемеге қойсақ

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - \hat{H}^0)\Psi_{n'}^0 = -(E_n' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (2.6.12)$$

теңлемесин аламыз, ал (2.6.8)-теңлемени есапқа алсақ, онда (2.6.12)-теңleme былайынша жазылады:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0)\Psi_{n'}^0 = -(E_n' - \hat{V}')\Psi_n^0. \quad (2.6.13)$$

### Энергия қәддилери азғынбаған жағдай

Егер берилген система азбаған болса, яғный энергияның хәр бир  $E_n^0$  меншикли мәнисине  $\Psi_n^0$  меншикли функциялардың тек бир ғана мәниси сәйкес келетуғын

болса, онда (2.6.13)-теңлемениң шеп тәрепин  $\Psi_n^{0*}$  ге көбейтип пүткил кеңислик бойынша интегралласақ төмендегидей қатнасқа келемиз:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \delta_{nn'} = -E' + \int \Psi_n^{0*} \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x. \quad (2.6.14)$$

Бул аңлатпада  $\Psi_n^0$  меншикли функциясының ортонормалық шәрти

$$\int \Psi_n^{0*} \Psi_{n'}^0 d^3x = \delta_{nn'} \quad (2.6.15)$$

пайдаланылған.

(2.6.14)-теңликтиң шеп тәрепи нолге тең болғанлықтан  $n' = n$  болғанда  $(E_n^0 - E_{n'}^0) = 0$ , ал  $n' \neq n$  болған жағдайда  $\delta_{nn'} = 0$  хәм изленип атырған энергия ушын

$$E_n' = \overline{V'_{nn}} \quad (2.6.16)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада

$$\overline{V'} = \int \Psi_n^0 \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x. \quad (2.6.17)$$

Демек системаның уйытқыў нәтийжесинде алатуғын энергиясы уйытқыў энергиясының орташа мәнисине тең екен.

Енди уйытқыў теориясының биринши тәртипли жуўықлаўын тәрийиплейтуғын (2.6.13)-Шредингер теңлемесин түрлендирип жазайық:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \Psi_{n'}^0 = -(E_n' - V') \Psi_n^0. \quad (2.6.18)$$

Бул теңлемениң шеп тәрепин  $\Psi_n^{0*}$  (бул жерде  $n' \neq n$ ) функциясына көбейтип хәм ортонормалық шәртти есапқа алып пүткил кеңислик бойынша интегралласақ  $C_{n'}$  коэффициенти ушын мынадай қатнас аламыз:

$$C_{n'} = \frac{\overline{V'_{n'n}}}{E_n^0 - E_{n'}^0}. \quad (2.6.19)$$

Бул аңлатпада

$$\overline{V'} = \int \Psi_n^0 \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x. \quad (2.6.20)$$

Бундай жағдайда  $\Psi_n'$  функциясы ушын

$$\Psi_n' = C_n \Psi_n^0 + \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^0 \quad (2.6.21)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпадағы сумма белгисиндеги штрих белгиси қосыў операциясының  $n' = n$  мәнисинен басқа барлық индекслер бойынша жүргизилетуғынлығын аңғартады. (У21)- теңликтеги белгисиз  $C_{n'}$  коэффициенти ноллик жуўықлаўдағы

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \Psi_n' = C_n^0 \Psi_n^0 + \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^0 \quad (2.6.22)$$

түрінде жазылатуғын ноллик жууықлаудағы толық толқынлық функцияларды нормалау (нормировка) шәртинен алынады:

$$\int \Psi_n^* \Psi_n d^3x = 1. \quad (2.6.23)$$

(2.6.22)- аңлатпада

$$C_n^0 = 1 + C_n. \quad (2.6.24)$$

(2.6.22)-толқынлық функцияны (2.6.23)-нормалау шәртине қойып кишилиги бойынша тек биринши тәртіпли шамалар менен шекленсек, онда

$$|C_n^0|^2 \int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 d^3x + \sum_{n'} \left\{ C_n^{0*} C_{n'} \int \Psi_n^{0*} \Psi_{n'}^0 d^3x + C_{n'}^* C_n^0 \int \Psi_{n'}^{0*} \Psi_n^0 d^3x \right\} = 1 \quad (2.6.25)$$

түріндеги аңлатпаға ийе боламыз. Бундай жағдайда толқынлық функцияның ортонормалық шәртинен

$$C_n^0 = 1, \quad (2.6.26)$$

ал (2.6.24)-теңлемеден  $C_n = 0$  мәнислерин аламыз. Демек уйытқыу теориясының биринши тәртіпли жууықлауы бойынша толқынлық функция

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \sum_{n'} \frac{\overline{V_{n'n}}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \Psi_{n'}^0 \quad (2.6.27)$$

түрінде болады. Усының менен бир қатарда  $\Psi_{n'}$  толқынлық функциясы энергияның меншикли мәнисі  $E_{n'}$  сыяқлы уйытқыу энергиясының биринши дәрежесине пропорционал болады.

### Энергия қәддилеринің азғын жағдайы ушын уйытқыу теориясы

Енди энергияның  $E_n^0$  меншикли мәнисине  $j$  дана  $\Psi_{n_1}^0, \Psi_{n_2}^0, \dots, \Psi_{n_j}^0$  меншикли функцияларының сәйкес келетуғын уйытқыу теориясын қараймыз.

Бул функциялардың қәлеген

$$\Psi_n^0 = \sum_{i=1}^j C_i^0 \Psi_{n_i}^0$$

сызықлық түрлениуі де энергиясының меншикли мәнислери  $E_n^0$  болған ноллик жууықлаудағы

$$(E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_n^0 = 0$$



Шредингер теңлемесінің шешімі болып табылады. Егер системаға энергиясы  $V'$  болған уйытқы қосылса  $C_i^0$  коэффициенттерінің арасында байланыстың пайда болатуғынлығын көрсетейік. Бұның үшін (2.6.10)-теңліктің шеп тәрепін  $\Psi_{n_i}^{0*}$  функциясына көбейтіп барлық кеңістік бойынша интеграллаймыз. Сонда

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_n' d^3x = - \int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') \Psi_n^0 d^3x \quad (2.6.28)$$

теңлемесін аламыз. Туұындыларды ауыстырыу теориясынан пайдалансақ, онда кейінгі теңліктің орнына

$$\int \Psi_n' (E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_{n_i}^{0*} d^3x = - \int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - \hat{V}') \Psi_n^0 d^3x \quad (2.6.29)$$

теңлігін аламыз. Бұл теңліктегі  $\Psi_{n_i}^{0*}$  функциясының  $(E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_{n_i}^{0*} = 0$  Шредингер теңлемесінің шешімі екенлігін есепке алсақ мынадай теңлікке ийе боламыз:

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') \sum_{i'=1}^j C_{i'}^0 \Psi_{n_i}^0 d^3x = 0. \quad (2.6.30)$$

$\Psi_{n_i}^0$  меншікті функциясын  $\int \Psi_{n_i}^{0*} \Psi_{n_i}^0 d^3x = \delta_{n_i n_i}$  түрінде ортонормаланған деп есепласақ, онда (2.6.30)-теңліктің орнына төмендегідей теңleme жазамыз:

$$C_i^0 (E_n' - \bar{V}_{ii}') = \sum_{i'=1}^j C_{i'}^0 \bar{V}_{ii'}'. \quad (2.6.31)$$

Бұл теңлікте

$$\bar{V}_{ii}' = \int \Psi_{n_i}^{0*} \hat{V}' \Psi_{n_i}^0 d^3x, \quad (2.6.32)$$

$$\bar{V}_{ii'}' = \int \Psi_{n_i}^{0*} \hat{V}' \Psi_{n_{i'}}^0 d^3x. \quad (2.6.33)$$

(2.6.31)-теңліктегі сумма белгисінің жоқарысындағы штрих қосыу суммалау процедурасының индекстің  $i = j$  мәнінен басқа барлығы бойынша жүргізілетуғынлығын аңғартады. (2.6.31)-формуладағы индекс  $i$  дің бірден (1 ден)  $j$  шамасына шекемгі аралықтағы қалеген мәніске ийе болатуғынлығынан  $E_n'$  энергияның хәм  $C_i^0$  коэффициенттерінің белгисіз мәніслері үшін  $j$  дана бир теклі теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned} C_i^0 (E_n' - V_{11}') - C_2^0 V_{12}' - \dots - C_j^0 V_{1j}' &= 0, \\ -C_1^0 V_{21}' + C_2^0 (E_n' - V_{22}') - \dots - C_j^0 V_{2j}', \\ \dots, \\ \dots, \\ -C_1^0 V_{j1}' - C_2^0 V_{j2}' - \dots + C_j^0 (E_n' - V_{jj}') &= 0. \end{aligned} \quad (2.6.34)$$

Егер  $\Psi_n^0$  толқынлық функциясының

$$\int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 d^3x = 1 \quad (2.6.35)$$

нормалау шәртин қанаатландыратуғынлығын есапқа алсақ, онда уйытқыу энергиясы  $E'_n$  менен  $C_i^0$  белгисиз коэффициентлерин анықлаудың қыйын емес екенлигин аңғарамыз.

(2.6.34)-системаның нолге тең емес шешимлеринің болыуы ушын оның детерминатнының нолге тең болыуы керек. Бундай жағдайда  $E'_n$  энергиясының мәнислерин табыу ушын төмендегидей теңлеме аламыз:

$$\begin{vmatrix} (E'_n - V'_{11}), V'_{12}, \dots, -V'_{1j} \\ -V'_{21}, (E'_n - V'_{22}), \dots, -V'_{2j} \\ \dots \\ -V'_{j1}, -V'_{j2}, \dots, (E'_n - V'_{jj}) \end{vmatrix} = 0. \quad (2.6.36)$$

Бул теңлемени әсирлик теңлеме деп атайды. Бул термин аспан механикасынан алынған.

Егер әсирлик теңлемениң бир неше түбири болса ( $j$  ға тең болыуы шәрт емес), онда ҳәр бир түбир ушын (2.6.34)-теңлемеден пайдаланып табылған  $C_i^0$  коэффициентлер сәйкес келеди. Яғный  $E'_n$  қосымша энергияның мәнислерине сәйкес келетуғын меншикли энергиялар да ҳәр қыйлы болады. Соның менен бирге энергиясы  $V'$  шамасына тең уйытқыуға қосылғанға шекем системаның ҳалы  $j$  рет азған болса, уйытқыудың тәсиринде азғынлықтың ретлиги кемейеди, ал гейпара жағдайларда азғынлықтың түткіллей жоғалыуы да мүмкин.

## Штарк эффекти

Егер атомды сырттан түсірилген электр майданына орналастырса, онда атомның энергия қәддилери қосымша қәддилерге ажыралады. Улыұма физика курсынан бул эффектти Штарк эффекти деп аталатуғынлығын хәм оның 1913-жылы ашылғанлығын билемиз. Энергия қәддилеринің магнит майданы тәсиринде қосымша қәддилерге ажыралыуын Зеeman эффекти деп атайтуғын едик. Тәжірийбелерге электр майданының водород хәм басқа да атомларға ҳәр қыйлы тәсир ететуғынлығы анықланған. Мысалы электр майданының кернеулиги киши болғанда водород атомларының энергиясының қәддилеринің бир неше қәддилерге ажыралыуы кернеуликтің биринши дәрежесине (сызықлы Штарк эффекти), ал басқа атомларды кернеуликтің екинши дәрежесине (квадратлық Штарк эффекти) пропорционал болып шықты.

Классикалық физика көз-караслары бойынша Штарк эффектін түсиндириу мүмкин болмады. Кватлық механика ғана бул қубылысты түсиндире алды.

Водород атомы ушын сызықлы Штарк эффектін үйренейик хәм екинши энергия қәдди менен шекленемиз ( $n = 2$ ). Сырттан түсірилген майданның кернеулигинің шамасы  $10^4 - 10^5$  В/см. Ал водород ядросы тәрәпинен пайда етилген электр майданының кернеулиги шама менен  $5 \cdot 10^9$  В/см шамасына тең. Демек сырттан түсирлиген электр майданын уйытқыу сыпатында қарай алады екенбиз.

Уйытқыу энергиясы сыпатында электронның сыртқы электр майданындағы

$$V' = e_0 \varepsilon z$$

потенциал энергиясын ала аламыз. Уйытқыў болмаған жағдайдағы электронны потенциал энергиясы

$$E_2^0 = -\frac{R\hbar}{4}$$

хәм энергияның усы мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциялар

$$\Psi_1^0 = \Psi_{2,0,0} = R_{20}(r)Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r), \quad (2.6.38)$$

$$\Psi_2^0 = \Psi_{2,1,0} = R_{21}(r)Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21} \cos \theta, \quad (2.6.39)$$

$$\Psi_3^0 = \Psi_{2,1,1} = R_{21}(r)Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} e^{i\varphi}, \quad (2.6.40)$$

$$\Psi_4^0 = \Psi_{2,1,-1} = R_{21}(r)Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi}. \quad (2.6.41)$$

$\theta$  хәм  $\varphi$  мүйешлерин декарт координаталары менен алмастырсақ жоқарыдағы функциялар төмендегидей түрге енеди:

$$\Psi_1^0 = f_1(r), \quad (2.6.43)$$

$$\Psi_2^0 = f_2(r)z, \quad (2.6.44)$$

$$\Psi_3^0 = f_2(r) \frac{x+iy}{\sqrt{2}}, \quad (2.6.45)$$

$$\Psi_4^0 = -f_2(r) \frac{x-iy}{\sqrt{2}}. \quad (2.6.46)$$

Бул аңлатпалардағы

$$f_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r), \quad (2.6.47)$$

$$f_2(r) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{R_{21}(r)}{r}, \quad (2.6.48)$$

ал электронның улыўмалық толқын функциясын

$$\Psi^0 = \sum_{i=1}^4 C_i^0 \Psi_i^0 \quad (2.6.49)$$

түринде жазамыз.

Биз қарап атырған жағдайда системаның азғыныўының еселиги 4 ке тең (яғный  $j = 4$ ) болғанлықтан белгисиз  $C_i^0$  коэффициентлер менен системаның уйытқымаған

қалын тәрийиплейтуғын  $E_2^0$  энергияға мәнис беріу ушын (2.6.34)-қатнастан төмендегидей теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned} C_1^0(E_2' - \overline{V}_{11}') - C_2^0 \overline{V}_{12}' - C_3^0 \overline{V}_{13}' - C_4^0 \overline{V}_{14}' &= 0, \\ -C_1^0 \overline{V}_{21}' + C_2^0(E_2' - \overline{V}_{22}') - C_3^0 \overline{V}_{23}' - C_4^0 \overline{V}_{24}' &= 0, \\ -C_1^0 \overline{V}_{31}' - C_2^0 \overline{V}_{22}' + C_3^0(E_3' - \overline{V}_{33}') - C_4^0 \overline{V}_{34}' &= 0, \\ -C_1^0 \overline{V}_{41}' - C_2^0 \overline{V}_{42}' - C_3^0 \overline{V}_{43}' + C_4^0(E_4' - \overline{V}_{44}') &= 0. \end{aligned} \quad (2.6.49)$$

Бул аңлатпада

$$\overline{V}_{i'i} = \int \Psi_i^{0*} \hat{V}' \Psi_i^0 d^3x = e_0 \varepsilon \int \Psi_i^{0*} \hat{Z}' \Psi_i^0 d^3x. \quad (2.6.50)$$

Көлем бойынша интеграллауда  $\overline{V}_{11}', \overline{V}_{22}', \overline{V}_{33}', \overline{V}_{13}', \overline{V}_{23}', \overline{V}_{14}', \overline{V}_{24}', \overline{V}_{34}'$  матрицалық элементлер нолге тең болады. Себеби бул матрицалық элементтиң интегралына  $z, x$  хәм  $y$  координаталарының тақ функциялары киреди. Усы үш координаталардың жуп функцияларын өз ишине алатуғын  $\overline{V}_{12}'$  хәм  $\overline{V}_{21}' = \overline{V}_{12}'$  матрицалық элементлери ғана нолге тең болмайды:

$$\overline{V}_{12}' = \overline{V}_{21}' = e_0 \varepsilon \int f_1(r) f_2(r) z^2 d^3x. \quad (2.6.51)$$

Бул теңликке (2.6.46)- хәм (2.6.47)-қатнастардан  $f(r), f(r)$  функцияларының мәнислерин қойып,

$$R_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2}a_0^{3/2}} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{\frac{r}{2a_0}} \quad \text{және} \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{5/2}} r e^{\frac{r}{2a_0}}$$

екенлигин есапқа алып  $\theta$  хәм  $\varphi$  мүйешлери бойынша интеграллағаннан кейин төмендегидей теңликти аламыз:

$$V_{21}' = V_{12}' = \frac{e_0 \varepsilon}{24a_0^4} \int_0^\infty r^4 \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{\frac{r}{a_0}} dr. \quad (2.6.52)$$

Егер  $\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^s d\rho = s!(s+1)$  екенлигин есапқа алсақ, онда матрицалық элементлер ушын

$$V_{12}' = V_{21}' = -3e_0 \varepsilon a_0 \quad (2.6.53)$$

шамаларына ийе боламыз.  $V_{i'i}'$  матрицалық элементлериниң усы мәнислерин есапқа алған жағдайда энергияның  $E_2'$  мәнислери ушын төмендегидей әсирлик теңleme аламыз:

$$\begin{vmatrix} E'_2 & 3a_0 & 0 & 0 \\ 3a_0e_0\varepsilon & E'_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E'_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E'_2 \end{vmatrix} = 0. \quad (2.6.54)$$

Бул теңлемени  $E'_2(E'^2_2 - 9a_0^2e_0^2\varepsilon^2) = 0$  түрінде жазыуға болады:

$$\begin{aligned} E'^{(1)}_2 &= -3a_0e_0\varepsilon, \\ E'^{(2)}_2 &= -3a_0e_0\varepsilon, \\ E'^{(3)}_2 &= E'^{(4)}_2 = 0. \end{aligned} \quad (2.6.55)$$

Ал бул энергияның ҳәр бир мәнисине (2.6.49)-теңлик бойынша ҳәр түрли  $C_i$  коэффициентлери сәйкес келеди:

$$\begin{aligned} C_1^{(1)} &= C_2^{(1)}; C_3^{(1)} = C_4^{(1)} = 0, \\ C_1^{(2)} &= -C_2^{(2)}; C_3^{(2)} = C_4^{(2)} = 0, \\ C_1^{(3)} &= -C_2^{(3)}; C_3^{(3)}, C_4^{(3)} \neq 0, \\ C_1^{(4)} &= C_2^{(4)}; C_3^{(4)}, C_4^{(4)} \neq 0. \end{aligned} \quad (2.6.56)$$

Усының менен бирге энергиясы

$$E_2^{(1)} = E_2^0 + E'^{(1)}_2 = -\frac{R\hbar}{4} - 3e_0a_0\varepsilon \quad (2.6.57)$$

шамасына тең қәддиге ноллик жууықлауда

$$\Psi^{0(1)} = C_1^{(1)}(\Psi_{2,0,0} + \Psi_{2,1,0}) \quad (2.6.58)$$

меншикли функция сәйкес келеди.

Егер толқынлық функцияның нормаллау шәртин болған  $\int \Psi^{0(1)*} \Psi^{0(1)} d^3x = 1$  шәртин есапқа алсақ (2.6.58)-функцияны

$$\Psi^{0(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{2,0,0} + \Psi_{2,1,0}) \quad (2.6.59)$$

түрінде жаза аламыз. Ал келеси квантлық ҳал ушын

$$E_2^{(2)} = E_2^0 + E'^{(2)}_2 = -\frac{R\hbar}{4} + 3e_0a_0\varepsilon. \quad (2.6.60)$$

Ноллик жууықлаудағы толқынлық функция

$$\Psi^{0(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{2,0,0} - \Psi_{2,1,0}). \quad (2.6.61)$$





### III бөлім

## Паули теориясы

### 3-1. Электронның қозғалыс мұғдарының моменти (импульс моменти)

**Ескертіу:** Биз төменде операторлардың үстине «қалпақ» белгисін қоймаймыз. Бірақ қандай шаманың оператор екенлігі текстіте атап өтіледі.

Қосымшалар: Электронның импульс моментіне мәселелеріне тийісли болған коммутацияланбайтуғын операторлар жаққында гәп еткенде әдетте төмендегидей үш операторды көрсетіуіге болады (бул жерде  $\hbar = 1$  бирлігі қолланылған):

$$\left. \begin{aligned} m_x &= y p_z - z p_y, \\ m_y &= z p_x - x p_z, \\ m_z &= x p_y - y p_x. \end{aligned} \right\} \quad (3.1.1)$$

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

$$\hat{m}_x = y \hat{p}_z - z \hat{p}_y, \quad \hat{m}_y = z \hat{p}_x - x \hat{p}_z, \quad \hat{m}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x.$$

Электронның квантлық қозғалыс теңлемесін қарағанда (3.1.1)-аңлатпалардың жақыйқатында да импульс моменти ушын жазылған операторлар екенлігіне исеніуіге болады.

Жоқарыдағы операторлардың координата хәм импульслер операторлары менен Пуассон қаўсырмаларын дүземіз. Биз мынаған ийе боламыз

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

Себеби  $m_x$  операторы  $x$  бойынша дифференциаллауды өз ишине алмайды хәм сонлықтан  $x$  қа көбейтіуіге коммутативли. Буннан кейін мынаған ийе боламыз:

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

Буз бул жерде Пуассон қаўсырмаларының қәсіетлерінен пайдаландық. Тап усындай жоллар менен төмендегі аңлатпаларға ийе боламыз:

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

(3.1.1\*)-хәм (3.1.1\*\*)-формулардың жәрдеминде импульс моментінің хәр қыйлы болған еки құраушысы ушын Пуассон қаўсырмаларын аламыз:



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

Солай етип

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

Биз алған аңлатпалардың барлығы да классикалық аңлатпаларға сәйкес келеді.

Жоқарыда келтирилген формулалардың айырымдарын көп тарқалған әдебиятта былайынша да жазады:

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

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

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

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

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

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

Спин моментиниң қураўшылары ушын операторларды

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

түрінде жазылады деп болжаў керек. Бул аңлатпада  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  арқалы меншикли мәнислери  $\pm 1$  ге тең болған өзи өзине түйинлес оператор белгиленген.  $\frac{1}{2}$  шамасына тең көбейтиўши (3.1.3)-операторлардың (3.1.2)- қатнастарды қанаатландырыўының керек екенлигинен келип шығады.

Спинди  $\hbar$  бірліклерінде есептегенде (ал  $\hbar/2$  бірліклерінде емес)  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  операторларының орнына

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

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

$\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  операторлары үшін орын алмастырыу қатнастары мына түрге ийе

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

Бирақ биз

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

аңлатпасына ийеміз хәм оннан алдыңғы қатнастардан

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

аңлатпасын аламыз.

Бизің гипотезамызға сәйкес  $\sigma_x$  операторының меншикли мәніслери  $\pm 1$  ге тең. Сонлықтан  $\sigma_x^2$  операторы тек бир ғана меншикли мәніске ийе болады, яғный  $\sigma_x^2 = 1$ . Демек бул шама енди оператор болып табылмайды. Ол енди қәлеген оператор менен, соның ишинде  $\sigma_z$  пенен де коммутацияланады. Сонлықтан соңғы теңлемениң оң тәрәпи нолге тең. Бул теңдикти соған усаған еки теңлик пенен жазсақ, төмендеги аңлатпалар системасын аламыз

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

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

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

Усының менен бирге биз

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad (3.1.7)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Енди  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  операторларын еки қатар хәм еки бағанадан туратуғын матрица деп қарай аламыз. Соның менен бирге бул операторларды тек  $\sigma = \pm 1$  мәніслерине тең (координаталарға қосымша болған) жаңа өзгериушиниң функциясына тәсир ететуғын операторлар деп те қарай аламыз.

Бул функцияны  $\psi(\mathbf{r}, \sigma)$  арқалы белгилеп ( $\mathbf{r}$  арқалы барлық кеңістік координаталардың жыйнағы белгиленген) хәм

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

деп болжап биз (3.1.6)- хәм (3.1.7)-қатнастарды қанаатландыра аламыз.

Егер  $\psi$  функциясын

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \quad (3.1.9)$$

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

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

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

$$\sigma_x = \sigma_1, \quad \sigma_y = \sigma_2, \quad \sigma_z = \sigma_3 \quad (3.1.11)$$

матрицалары формасын қабыллайды. Бул аңлатпада

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.1.12)$$

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

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

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

векторлық характерге ийе болады. Бул аңлатпаларда  $l_k$ ,  $m_k$ ,  $n_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) шамаларының мәниси туўры мүйешли еки координаталар системасы арасындағы

мүйешлердің косинусларына сәйкес келеді. Бірақ жаңа  $\sigma'_x$ ,  $\sigma'_y$ ,  $\sigma'_z$  операторлары ески  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  операторлар сыяқлы (3.1.6)- хәм (3.1.7)- қәсийетлерге ийе болады. Буннан әхмийетли жуўмақ келип шығады: егер биз бул шамаларады вектордың қураўшылары деп қарайтуғын болсақ, онда бул вектордың қәлеген бағытқа түсирилген проекциялары  $\pm 1$  ге тең меншикли мәнислерге ийе болады. Егер биз (3.1.11) ге сәйкес  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  лар сыпатында (3.1.12)-матрицаларды алатуғын болсақ, онда (13)-аңлатпалар (3.1.6)- хәм (3.1.7)-шәртлерди қанаатландыратуғын еки бағанаға хәм еки қатарға ийе матрицалардың ең улыўмалық түрин береді.

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

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

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

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

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

(3.1.15)-теңликтің дурыс екенлигин  $m_x$ ,  $m_y$ ,  $m_z$  хәм  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  шамалары ушын жазылған (3.1.2)- хәм (3.1.4)-аңлатпалардан, соның менен бирге қозғалыс муғдарының орбиталық хәм спин моментлериниң бир бири менен коммутацияланыў фактинен тиккелей тексерип көриў мүмкин.

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

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

ямаса тап усының өзи

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

деп болжаймыз. Биз  $m_x, m_y, m_z$  семействосы бойынша

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

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

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

аңлатпаларына ийеміз. Бул теңліктерди бир бирине қоссақ оң тәрәпинде нолди аламыз. Шеп тәрәпиндеги аңлатпаны  $y$  пенен  $z$  бойынша құраушыны

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

түрінде жазыуға болады.

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

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

Екинши тәрәптен қозғалыс муғдарының толық моментиниң құраушылары ушын (3.1.14)-операторлардың квадратларының суммасын (қосындысын) алатуғын болсақ хәм (3.1.18)-аңлатпадан пайдалансақ, мынаны аламыз

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

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

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

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

аңлатпасына ийе боламыз хәм буннан берилген  $l$  ушын

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

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

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

теңлемеси нолге тең болған меншикли мәніске ийе бола алмайды. Бұл  $l = 0$  болғанда  $k$  ның бирден бир мүмкін болған мәнісі 1 ге тең, ал  $l \geq 1$  болғанда  $k$  ның (3.1.21)-формула менен берилетуғын екі мәнісі болады.

### 3-2. Сфералық координаталардағы қозғалыс муғдарының толық муғдарының операторлары

Шредингер теориясында орайлық симметрияға ийе мәселени қарағанымызда қозғалыс муғдарының орбиталық моменти операторлары ушын аңлатпалар алынған еди.  $r, \vartheta, \varphi$  сфералық координаталар усы координаталар менен байланысly болған туўры мүйешли  $x, y, z$  координаталары менен

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta \quad (3.2.1)$$

аңлатпалары арқалы байланысқан.

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

деп болжап биз

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

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

Қозғалыс муғдары моментинің хәм оның  $z$  көшери бойынша құраўшылары операторларының меншикли функциялары Шредингер теориясында

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

$$m_z \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = m \psi \quad (3.2.5)$$

теңлемелерин хәм шардың бетиндеги бир мәніслик талабын қанаатландырады.

Қозғалыс муғдарының толық моментине (бул толық момент спинди өз ишине алады) өтиў ушын биз өткен параграфтың (3.2.14)- хәм (3.2.16)-формулаларына  $\mathcal{M}_z$  хәм  $\mathcal{M}$  лерди қосамыз.  $p_\vartheta$  хәм  $p_\varphi$  шамаларында аңлатылған ҳалда бул операторлар

$$\mathcal{M}_z = p_\varphi + \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (3.2.6)$$

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

түрине ийе.

$\mathcal{M}_z$  хәм  $\mathcal{M}$  операторларының улыўмалық меншикли мәніслерин табамыз. Бул функциялар

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

$$\mathcal{M}\psi = \hbar k\psi \quad (3.2.9)$$

теңлемелерін хәм шардың бетиндеги бир мәнислик талабын қанаатландырады.

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

$\mathcal{M}_z$  хәм  $\mathcal{M}$  операторлары ушын жазылған (3.2.6)- хәм (3.2.7)- аңлатпаларды әпиұайыластырыў ушын

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

каноникалық түрлендириўлерин қолланамыз. Бул аңлатпада

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

Егер түрлендириўге шекем

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

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

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

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

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

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

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

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

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

түрінде аламыз. Бул аңлатпада  $p_\varphi$  менен  $p_\vartheta$  шамалары (3.2.2)-операторлар болып табылады.

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

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

белгилеўин қабыл етеміз. Бул жерде

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

Нәтиьжеде мынаны аламыз:

$$\mathcal{M}'' = -\frac{\sigma_1}{\sin \vartheta} p_\varphi + \sigma_2 \left( p_\vartheta - \frac{i\hbar}{2} \operatorname{ctg} \vartheta \right). \quad (3.2.20)$$

Екиншиден

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

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

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

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

$$\mathcal{M}'_z = p_\varphi \quad (3.2.23)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

$\psi$  толқын функциясын

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

түриндеги шардың бетиндеги еки қураўшыға ийе толқын функциясы деп қарап хәм

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

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

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

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

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

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



деген сөз.

### 3-3. Спинге ийе шар функциялары

Егер еки құраушыға ийе толқын функциясын

$$\psi^* = \begin{pmatrix} Y \\ Z \end{pmatrix} \quad (3.3.1)$$

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

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

ал (3.2.29)- теңleme

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

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

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

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

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

ал олар ушын нормировка шәрти

$$\frac{1}{2} \int_0^\pi (A^2 + B^2) d\vartheta = 1 \quad (3.3.6)$$

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

$$P_l^m(x) = P_l^m(\cos \vartheta) \quad (3.3.7)$$

функциясы

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

теңлемесін қанаатландырады және  $x = \pm 1$  болған жағдайдағы оның шешимін көрсетеді.  $m = 0$  болғанда  $P_l^m(x)$  Лежандр полиномына алып келинеді

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

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

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

$m$  ниң терис мәніслерінде  $P_l^m(x)$  функциясы оң  $m$  ниң мәнісі қойылатуғын функциялар арқалы

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

формуласының жәрдемінде анықланады.

Биз қарап атырған  $\vartheta$  мүйешинің функциялары  $P_l^m(\cos \vartheta)$  және  $P_l^{m+1}(\cos \vartheta)$  төмендегидей бирінші тәртіпті теңлемелер системасын қанаатландырады:

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

Усы системаға  $A$  және  $B$  функциялары үшін (3.3.5)-теңleme де алып келинеді. (3.3.5)-аңлатпадан (3.3.12)-аңлатпаға өтiу үшін дәслеп

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

түрлендириуін орынлауымыз керек [усыған уқсас болған  $\psi$  функциясынан ден  $\psi^*$  функциясына түрлендириуді өткен параграфтың (3.2.18)- және (3.2.21)-формулардың жәрдемінде иследик].  $y_1$  менен  $y_2$  үшін теңлемелер былайынша жазылады:

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

Егер биз

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

ямаса

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

деп алсақ хәм (3.3.20)-формулаға сәйкес

$$k(k-1) = l(l+1) \quad (3.3.17)$$

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

$l$  сыпатында биз терис болмаған

$$-k, k-1$$

санларының бирин алыўымыз мүмкин. Буны былайынша жазыўға болады:

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

(3.3.16)- хәм (3.3.16)-аңлатпаларды теңлестирип, буннан кейин (3.3.11)-формулань пайдалансақ  $c'$  пенен  $c$  шамаларының қатнасы ушын

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

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

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

Буннан кейин биз мыналарды ала аламыз:

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

Егер биз

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

шәртине сәйкес нормировкаланған

$$P_l^m(x) = \sqrt{2l+1} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(x) \quad (x = \cos \theta), \quad (3.3.23)$$

шар функциясын киргизетуғын болсақ, онда төмендеги аңлатпаларға ийе боламыз:

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3-4. Спинге ийе шар функцияларының bazı бир қәсийетлери

Өткен параграфтағы

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

түрінде жазылған (3.3.5)-теңлемелерди өзи өзине түйинлес

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

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

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

хәм функциялардың туйық системасын өз ишине алады.

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

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

ямаса қысқаша

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

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

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

$$u(\vartheta) = \sum_k c(k) y(k, m, \vartheta) \quad (3.4.6)$$

түрінде жайыў мүмкин. (3.4.6)-аңлатпаның астында еки теңлик тур деп түсиний керек:

$$u_p(\vartheta) = \sum_k c(k) y_p(k, m, \vartheta) \quad (p = 1, 2) \quad (3.4.6^*)$$

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

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

ямаса толығырақ

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

формуласының жәрдемінде есапланады. Бул жерде

$$u(\vartheta) = \cos \vartheta \cdot y(k_0, m, \vartheta) \quad (3.4.8)$$

деп аламыз.

(3.4.7\*) түріндеги интегралды есаплау үшін  $y(k, m, \vartheta)$  функцияларын (3.4.25)-хәм (3.4.25\*)-формулар бойынша шар функциялары арқалы аңлатыуға хәм квантлық механикада шар функцияларына тийисли болған мағлыұматлар ишинде кеңнен белгили болған

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

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

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

түрине ийе болатуғынлығын көрсетеди.

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

Егер

$$u(\vartheta) = \sin \vartheta y(k_0, m-1, \vartheta) \quad (3.4.8^*)$$

түріндеги белгилейди алсақ, онда жоқарыдағыдай есаплаулардың нәтийжесінде төмендеги теңлемени аламыз:

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

Бұл формуланың дұрыслығы шар нормировкаланған функцияларына тийисли көп қолланылатуғын

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

рекуррентли формуланың жәрдемінде тексерилип көриледі [(3.4.10)-формуланың өзі соңғы формуланың ұлыұмаластырылған түрі болып табылады].

(3.4.9)- хәм (3.4.10)-аңлатпалардың тек  $y_1$  хәм  $y_2$  функциялары үшін ғана емес, ал  $A$  хәм  $B$  функциялары үшін да дұрыс болып табылады. Себеби олардың бири екіншисиниң  $k$  хәм  $m$  шамаларынан ғәрезсиз коэффициентлерге ийе сызықлы комбинациялары болып табылады.

Биз жоқарыда туйықлық теоремасына тийкарланып рекуррентлик қатнастарды келтирип шығарыў усылын баянладық. Бұл жағдай әдеттеги шар функциялары, Легардың ұлыұмаласқан полиномлары үшін қолланылатуғын ұлыұмалық жағдай болып табылады.

### 3-5. Паулидің толқын теңлемеси

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

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

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

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}}, \quad p_y = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}}, \quad p_z = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{z}} \quad (3.5.2)$$

«моментлер» қозғалыс муғдарының қураўшылары болған

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

шамаларына сәйкес келмейди, ал

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

қатнастары арқалы байланысқан. Бөлекшениң энергиясы

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

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

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

Магнит майданы жоқ болғанда векторлық потенциалды нолге тең деп есаплай мүмкин хәм алдыңғы аңлатпа

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

түрине ямаса

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

түрине енеди. Бул аңлатпада

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

шамасы бөлекшениң потенциал энергиясы болып табылады.

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

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

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

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

операторын дүзиўге хәм оны энергия операторын дүзиў ушын пайдаланыўға мүмкиншилик береді.

$P$  операторының 1-параграфта қарап өтилген

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

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

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

теңлигине ийе боламыз.

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

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



қатнастары қолланылады.

Биз бул жерде есаплаулар жүргізбейміз, бірақ есаплауларды декарт координаталарында емес, ал сфералық координаталарда жүргізсек есаплаулардың әдеуір әпиұайыласатуғынлығын аңғарамыз. Бундай есаплаулар келеси параграфта әмелге асырылады.

Егер биз электрон тек материаллық бөлекшениң  $x, y, z$  координаталары кеңислигиндегі қозғалысына сәйкес келетуғын еркінлік дәрежелерине ғана ийе болатуғын болса, онда биз энергия операторы ушын Шредингер аңлатпасына қайтып келеміз. Электронның спин менен байланысly болған еркінлік дәрежесин киргизиў классикалық механиканың шамаларынан квантлық механиканың шамаларына өтиўге жаңа мүмкиншиликлер ашып береді.

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

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

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

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

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

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

орын алмастырыў қатнастарын қанаатландырады. Бул аңлатпада  $\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y, \mathcal{H}_z$  лар арқалы магнит майданының құраўшылары белгиленген. Сонлықтан магнит майданы болғанда  $p_x, p_y, p_z$  операторларынан  $P_x, P_y, P_z$  операторларына өтиў бундай алмастырыўдың (3.5.8)- ямаса (3.5.15)-теңлемде әмелге асырылғанлығына байланысly ҳәр қандай нәтижени береді. Егер  $p_x, p_y, p_z$  операторларынан  $P_x, P_y, P_z$  операторларына өтиў (3.5.8)-теңлемде өтилсе, онда (3.5.6)-аңлатпаға қайтып келеміз. Оны  $H^0$  арқалы белгилейміз, сонлықтан

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

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

$$H^* = H^0 + \mu^0 (\sigma_x \mathcal{H}_x + \sigma_y \mathcal{H}_y + \sigma_z \mathcal{H}_z) \quad (3.5.19)$$

операторын аламыз. Биз бул жерде қысқалық ушын

$$\mu^0 = \frac{\hbar e}{2mc} \quad (3.5.20)$$

аңлатпасынан пайдаландық.  $\mu^0$  турақлысын биз электронның магнит моменти деп қарай аламыз.

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

$$H^* \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.5.21)$$

толқын теңлемесин Паули толқын теңлемеси деп атаймыз.

## IV бөлім

### Квантлық механиканың көп электронлық мәселесі хәм атомның құрылысы

#### 4-1. Толқын функциясының симметриялық қасиеттері

Биз жоқарыда бир электронның халын тәрийиплейтуғын толқын функциясын қарадық. Стационар халлар ушын толқын функциясы Шредингер теңлемесін қанаатландырыуы керек.  $n$  электроннан туратуғын системаның халын анықлау мәселесінде толқын функциясы электронлардың координаталарын алмастырыу менен спинлік өзгеріушілерге қарата базы бир симметрия шәртин (дурысырағы антисимметрия шәртин) қанаатландырыуы керек. Бул шәрт Паули шәрти деп аталады. Усының менен бир қатарда көплеген мәселелерде электронлар системасының толық спині (қозғалыс муғдарының меншикли моменти) берілген деп есаплауға болады. Бундай жағдайда толқын функциясы және де бир қосымша шәртти қанаатландырыуы керек болады.

Бир электронның толқын функциясының үш кеңісликлик координата  $x, y, z$  хәм тек еки мәніске ийе болатуғын (мысалы  $\sigma = +1$  хәм  $\sigma = -1$ ) спинлік өзгеріушіге байланысly екенлигин биз билеміз. Үш кеңісликлик координатаның жыйнағын  $r$  арқалы белгилеп электронның толқын функциясын

$$\psi(x, y, z, \sigma) = \psi(r, \sigma) \quad (4.1.1)$$

түрінде жаза аламыз.  $n$  электроннан туратуғын системаның толқын функциясы бул электронлардың барлық координаталардан хәм спинлік өзгеріушілеринен ғәрезли болады. Биз мынаған ийе боламыз:

$$\psi = \psi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2; \dots; r_n, \sigma_n). \quad (4.1.2)$$

Көпшилик жағдайда  $i$ -номерли электронға тийисли болған барлық өзгеріушілердің жыйнағын  $x_i$  арқалы белгилеген қолайлы болады (яғный оның кеңісликлик координаталары менен спинлік өзгеріушілеринің жыйнағы).  $n$  электроннан туратуғын системаның толқын функциясын бундай жағдайда мына түрде жазамыз:

$$\psi = \psi(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (4.1.3)$$

Паули принципине мууапық толқын функциясы  $x_1, x_2, \dots, x_n$  өзгеріушілерине қарата антисимметриялық болыуы керек. Яғный толқын функциясы усы өзгеріушілердің қәлеген жубының орынларын алмастырғанда белгисін өзгертиуі керек. Мысалы

$$\psi(x_2, x_1, x_3, \dots, x_n) = -\psi(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n). \quad (4.1.4)$$

Енди  $n$  электроннан туратуғын системаның базы бир (қосынды) спинге ийе болыуы талабын келтирип шығарыуға кирисеміз. Буның ушын спиннің тийкарғы қасиетлерін еске түсиреміз.

Бир электрон жағдайында спинлік өзгеріушіге тәсир ететуғын қәлеген оператордың

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

теңліктері менен анықланатуғын үш  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторларының сызықты комбинациясы түрінде көрсетіліуі мүмкін<sup>1</sup>.

Егер  $\psi$  толқын функциясын екі құраушыдан туратуғын толқын функциясы, солардың бири  $\psi(r, +1)$ , ал екіншиси  $\psi(r, -1)$  ге тең деп есапласақ, онда  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторларының тәсири Паули матрицаларының тәсириндей болады:

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

Ал

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

операторлары

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

орын алмастырыу қатнастарын қанаатландырады. Бул қатнастар ( $\hbar$  бирліклерінде аңлатылған) қозғалыс муғдарының моментинің қасиетлерин тәрийиплейди. Сонлықтан оларды электронның меншикли қозғалыс муғдары моментинің құраушыларының операторлары деп қарауымызға болады. Көп электронларға ийе болған жағдайда (4.1.5)-аңлатпаға сәйкес  $l$ -электронның спинлик өзгеріушисине тәсир етиуши  $\sigma_{lx}, \sigma_{ly}, \sigma_{lz}$  операторлары сыяқты анықлауға болады. Биз мынаған ийе боламыз

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

$\hbar$  бирліклерінде жазылған электронлар системасының қозғалыс муғдарының спинлик моментинің құраушылары ушын жазылған операторлар (4.1.7)-аңлатпадағыдай түрде анықланыуы мумкин. Атап айтқанда

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

<sup>1</sup> Биз бул параграфта хәм буннан кейин операторлардың аңлатпаларының үстине «қалпақ» белгисин қоймай жазамыз. Операторлар белгисинің үстине «қалпақ» қойыу зәрүрлиги пайда болғанда биз ескертеміз.

Бул операторлар (4.1.8)-орын алмастырыу қатнастарын қанаатландырады. (4.1.8)-орын алмастырыу қатнастарынан электронлардың қозғалыс мұғдарының моменти ушын жазылған

$$\mathbf{s}^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 \quad (4.1.11)$$

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

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

$$-s, -s+1, \dots, s-1, s \quad (4.1.12)$$

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

$\mathbf{s}^2$  ушын жазылған (11)-оператордың

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

түринде көрсетилиўи мүмкин. Бул аңлатпадағы  $P_{ij}$  символы  $\sigma_i, \sigma_j$  спинлик өзгериўшилериниң орынларын алмастырыўын аңлатады.

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

$$s^2 \psi = s(s+1) \psi \quad (4.1.14)$$

теңлемеси түринде жазылыўи мүмкин.

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

$$F_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k} = F(\sigma_{\alpha_1} \sigma_{\alpha_2} \dots \sigma_{\alpha_k} | \sigma_{\alpha_{k+1}} \sigma_{\alpha_{k+2}} \dots \sigma_{\alpha_n}) \quad (4.1.15)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \psi(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2; \dots; r_n, \sigma_n) = \\ = \sum_{(\alpha_1 \dots \alpha_k)} \psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}(r_1, r_2, \dots, r_n) F_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \end{aligned} \quad (4.1.17)$$

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

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k} = 0 \quad (4.1.18)$$

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

$s^2$  операторының меншикли меншикли функциясы электронлардың спини берилген системасының физикалық мүмкин болған қалын анықлауы ушын Паули принципін қанаатландырыуы зәрүр (яғный  $x_i$  өзгериушилерине қарата антисимметриялы болыуы керек). Бундай жағдайға

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_k}(r_1, r_2, \dots, r_n) = \\ = \varepsilon(P) \psi(r_{\alpha_1}, r_{\alpha_2}, \dots, r_{\alpha_k} | r_{\alpha_{k+1}}, r_{\alpha_{k+2}}, \dots, r_{\alpha_n}) \end{aligned} \quad (4.1.19)$$

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

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

функциясы менен аңлатыу арқалы жетиуіге болады. (4.1.19)-формулада  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  арқалы ықтыярлы тәртіпте алынған  $1, 2, \dots, n$  санлары, ал  $P$  арқалы

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix} \quad (4.1.21)$$

орын алмастырыуы белгиленген. (4.1.21)-орын алмастырыуы 1 ди  $\alpha_1$  ге, 2 ни  $\alpha_2$  ге хәм сол сыяқлы орны алмастырыуларды орынлайды.  $\varepsilon(P)$  арқалы +1 (егер орны алмастырыу жуп болса) хәм -1 (егер орын алмастырыу тақ болса) белгиленген.

(4.1.20)-функция симметрияның төмендегидей шәртлерин қанаатландырыуы керек:

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

$$\begin{aligned} \psi(r_2, r_1, r_3, \dots, r_k | r_{k+1}, \dots, r_n) = \\ = -\psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_k | r_{k+1}, \dots, r_n), \end{aligned} \quad (4.1.22)$$

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

$$\begin{aligned} \psi(r_1, r_2, \dots, r_k | r_{k+2}, r_{k+1}, r_{k+3}, \dots, r_n) = \\ = -\psi(r_1, r_2, \dots, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, r_{k+3}, \dots, r_n), \end{aligned} \quad (4.1.23)$$

3)  $\psi$  функциясы цикллық симметрия қасиетіне ийе, бұл қасиет төмендегі теңлікте көрінеді

$$\begin{aligned} \psi(r_1, \dots, r_{k-1}, r_k | r_{k+1}, r_{k+2}, \dots, r_n) = \\ = \psi(r_1, \dots, r_{k-1}, r_{k+1} | r_k, r_{k+2}, \dots, r_n) + \dots \\ \dots + \psi(r_1, \dots, r_{k-1}, r_{k+l} | r_{k+1}, \dots, r_{k+l-1}, r_k, r_{k+l+1}, \dots, r_n) + \dots \\ \dots + \psi(r_1, \dots, r_{k-1}, r_n | r_{k+1}, \dots, r_{n-1}, r_k). \end{aligned} \quad (4.1.24)$$

Бұл теңліктің оң тәрепін  $n - k$  ағзадан турады.  $r_k$  аргументі болса сызықтың оң тәрепіндегі  $n - k$  ағзаның хәр биринің орнына избе-из қойылып шығылады.

Цикллық симметрия қасиеті (4.1.18)-қатнастың нәтижесі болып табылады.  $\binom{n}{k-1}$  дана қатнастың хәр бири (4.1.24)-түрдегі теңліктің биреуіне алып келеді. Бұл жағдайды аңсат түрде тексеріп көріу мүмкін [буның ушын (4.1.22)- хәм (4.1.23)- аңлатпалардың антисимметрия қасиетін есапқа алыу керек. Егер  $P$  арқалы  $(r_k, r_{k+1}, \dots, r_n)$  аргументлерінің цикллық орын алмастырыуларын белгилесек [яғный  $(r_k, r_{k+1}, \dots, r_n)$  циклдың хәр бир ағзасы келесі ағза менен, ал ең ақырғы ағза биринші ағза менен алмастырылады], онда (4.1.24)-теңлік  $n - k$  айырмасы жуп болғанда

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

ал  $n - k$  айырмасы тақ болғанда

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

түрінде жазылады.

Спини нолге тең екі электроннан туратуғын дара жағдайда ( $n = 2, k = 1$ ) хал координатаға ғәрезли болған симметриялық функцияның жәрдемінде тәрийипленеді. Ал спини  $s = 1$  болған хал ( $n = 2, k = 0$ ) антисимметриялық функция менен тәрийипленеді.

Жоқарыда келтирилген симметрияның үш талабын қанаатландыратуғын  $n$  дана  $r_1, r_2, \dots, r_n$  аргументлерінің функциясына мысал ретінде екі анықлаушының көбеймесін көрсетиуге болады:

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

Бұл аңлатпада

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

Бул анықлаушылар бир электронның координатасынан ғәрезли болған

$$\psi_1(r), \psi_2(r), \dots, \psi_{n-k}(r) \quad (4.1.29)$$

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

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

Шредингер толқын функциясы спинлик өзгеріушілерден ғәрезли болмаса да қосынды спиннің мәніси оның қасийетлерінде сәуленеди. Себеби сол қасийетлерден оның симметриясы ғәрезли.

Бирден қарағанда парадокс болып көринетуғын факт усы жағдайға байланысly түсіндириледі: Шредингер теңлемеси де, толқын функциясы да спинлик өзгеріушілерге ийе емес. Ал усы жағдайға қарамастан энергияның қәддилери қосынды спиннің мәнісінен ғәрезли. Парадокс былайынша аңсат түрде түсіндириледі: берілген спинге ийе энергияның қәддине сәйкес толқын функциясына қосынды спиннің ҳәр қыйлы мәніслерине сәйкес келиуши симметрия шәртлери қойылады.

## 4-2. Энергия операторы ҳәм оның симметриясы

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

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

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

Системаның энергиясының қәддилери ҳәм стационар ҳаллар



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

теңлемесинің жәрдемінде анықланады. Бул аңлатпадағы  $H$  шамасы (4.2.1)-теңлемедегі энергия операторы болып табылады. Биз жоқарыда  $H$  операторы спинлик өзгеріушілерге ийе болмаса да энергия қәддилери  $E$  ниң  $s$  квантлық санға (қозғалыс муғдарының спинлик моментине) байланысly екенлигин көрсеттик. Бул жағдайдың Шредингер толқын функциясы  $\psi$  диң симметриялық қәсийетиниң  $s$  тиң мәнисинен ғәрезли екенлигинде екенлигин биз билемиз.

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

- 1) энергия операторының,
- 2) орбиталық қозғалыс муғдары моментиниң квадраты операторының,
- 3) спинлик қозғалыс муғдарының квадраты операторының,
- 4) қозғалыс муғдарының толық моментиниң (орбиталық плюс спинлик) квадраты операторының,
- 5) қозғалыс муғдарының толық моментиниң көшерлердиң бирине түсирилген қураўшысы операторының.

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

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

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

#### 4-3. Келисилген майдан усылы

Энергия операторының меншикли функциялары ушын теңлемени вариациялық басламадан алыў мүмкин

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

Бул теңлемедегі  $W$

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

аңлатпаларының жәрдемінде анықланады. Бул формуладағы  $\psi$  4-1 параграфта киргизилген спинлик өзгериўшилерден ғарезсиз координаталық функция болып табылады. Конфигурациялық кеңістіктің көлем элементи  $dV$  барлық электронлардың координаталарының дифференциалларының көбеймесине тең болады

$$dV = dx_1 dy_1 dz_1 \dots dx_n dy_n dz_n. \quad (4.3.3)$$

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

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

$$\delta \int \bar{\psi} H \psi dV = \int \delta \bar{\psi} H \psi dV + \text{түйинлес}. \quad (4.3.4)$$

Усының менен бир қатарда

$$\delta \int \bar{\psi} \psi dV = \int \delta \bar{\psi} \psi dV + \text{түйинлес}. \quad (4.3.5)$$

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

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

Бул теңлик интеграл астындағы  $\delta \psi$  көбейтиўшиси нолге тең болған жағдайда  $\psi$  диң ҳақыйқый ҳәм жормал бөлимлерин ықтыярлы түрдеги вариацияларда ғана орынланады. Буннан

$$H \psi = E \psi \quad (4.3.7)$$

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

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

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

аңлатпаларға сәйкес толқын функциясы бір электронлық функциялардан құралған екі анықлаушының көбеймесінен турыуы талап етіледі. Бұндай жағдайда ең төмендегі қаддінің орнына энергияның бір қанша жоқары мәнісін аламыз. Бірақ энергияның бұл мәнісі ең төменгі қаддіге сәйкес келіуі энергияның мәнісінен азмаз ғана айырмаға ийе болады. Тап ұсындай жоллар менен келесі қадділер үшін оған жақын мәнісін алынады.

W ға 4-2 параграфтағы (4.2.28)-анықлаушылардың көбеймесін қойыудың нәтижесін есептейміз. Бұл жағдайда да  $\psi_p(r)$  функцияларын бір бири менен ортогонал деп есептейміз:

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

Бұл жағдайдың ұлыұмалыққа тәсір етпейтуғынлығы айқын. Бұның үшін 4-2 параграфтағы (4.2.1)-энергия операторын

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

түрінде жазамыз. Бұл аңлатпада

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

Бұндайжағдайда биз мына аңлатпаны аламыз:

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

Бұл аңлатпада биз  $\rho^{(1)}$  хәм  $\rho^{(2)}$  арқалы

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

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

аңлатпаларды белгиледік. Алынған формулалар көргізбелі түрде түсіндіріледі. Биринші гезекте системаның толық толқын функциясын  $\psi_p(r)$  арқалы белгилеу системаның хәр бир электроны үшін өзіннің толқын функциясы жазыу мүмкін деген болжауға сәйкес келеді (биз шәртлі түрде «өзіннің орбитасын» деп айтыуымыз мүмкін). Бұндай жағдайда электронлар екі топарға бөлінеді: бириншісіне  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$  «орбиталарындағы» электронлар, ал екінші топарға  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{n-k}$  «орбиталарында жайласқан» электронлар киреді. Екі

топар бір биринен спинлеринің қарама-қарсы екенлиги менен айрылады.  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$  орбиталарында ҳәр қыйлы спинге ийе болған еки электроннан жайласады. Ал басқа  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{n-k}$  орбиталарында болса бирдей спинге ийе бир электроннан жайласады. Биринши  $k$  орбиталардағы спинлер бір бирин жоқ қылады. Ал қалған  $n - 2k$  орбиталардағы электронлардың спинлери бир бирине қосылады. Ҳәр бир электронның спининің абсолют мәниси  $\frac{1}{2}$  ге тең болғанлықтан системаның толық спини бизиң күткенимиздей  $\frac{n}{2} - k = s$  шамасына тең болып шығады.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

мәнісине ийе хәм оған барлық электронлардың потенциалының е ге көбеймеси мәнісин бериў мүмкин.  $\lambda_{qp}$  шамалары (4.3.8)-ортогоналлық шәртлерине сәйкес келиўши лагранжлық көбейтиўшилер болып табылады. Бул көбейтиўшилер  $\delta W$  вариацияларын қурастырғанда есапқа алыныўы керек.  $\lambda_{qp}$  матрицаларының диагоналық емес элементлери бир индекстин мәніси  $k + 1$  ден үлкен болса, ал екіншісінин мәніси  $k$  ға тең ямаса оннан киши болғанда ғана нолге тең болмайды деп есаплаўға болады.

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

Теңлемениң бул қәсийетин былайынша келтирип шығарыўға болады.

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

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

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

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

түрінде ала аламыз. Нәтийжеде

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

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада

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

хәм

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

Егер енди  $V_p(r)$  ушын жаңа анықлама

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

киргизетуғын болсақ хәм (4.3.18)-аңлатпа сыяқлы белгилесек

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

онда (4.3.20)-теңлемеді былайынша жазылады:

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

Бұл теңлемеді интеграллық ағзаны алып тасласақ, онда оны потенциал энергиясы

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

шамасына тең майдандағы электрон үшін Шредингер теңлемесі деп қарауға болады. Бұл аңлатпада  $U(r)$  арқалы (4.3.10)-аңлатпаға кириуші сыртқы майданның потенциал энергиясы, ал  $V_p(r)$  арқалы белгиленген басқа барлық (берілген электроннан басқа) электронлар пайда еткен майданның потенциал энергиясы белгиленген. Хәқыйқатында да (4.3.22)-формула бойынша есапланған  $V_p(r)$  дың шамасы  $\rho - |\psi_p|^2$  тығызлығына сәйкес келиуші потенциалға пропорционал. (4.3.20)-теңлемеді интеграллық ағзаға классикалық мағана болады. Ол квантлық алмасыу энергиясына дүзетиу атамасын алды.

Интеграллық ағзаға ийе емес (4.3.20)-теңлемелер (дурсырағы дәллігі бір қанша киші теңлемелер) биринши рет англиялы математик Хартри (Hartree) тәрәпинен усынылды. Бирақ ол теңлемеге қанаатландыралық тийкарлама бере алмады. Себеби ол теңлемени келтирип шығарғанда вариациялық басламалардан пайдаланбады хәм электронлар системасының толқын функциясын қарап шықпай, тек ғана хәзир ғана айтылып өтилген көргизбелі көз-қарасларға сүйенді. (4.3.20)-теңлемелер Хартри тәрәпинен өзі өзі менен келистирилген майдан теңлемесі деп аталды (толқын функциялары үшін теңлемелерге кириуші потенциал  $V$  ның өзі толқын функциялар арқалы аңлатылады деген мәністе).

Берілген спин үшін толқын функциясының симметрия қасиетлерін есапқа алыушы интеграллық ағзаларға ийе толық теңлемелерді бизлер вариациялық принциптен келтирип шығардық. Усының менен бирге Хартри теңлемесі де тийкарланды. Бұл теңлемелер әдебиятта квантлық алмасыуға ийе өзі өзі менен келистирилген ямаса келисилген майдан атамасын алды.

Квантлық алмасыуға ийе келисилген майдан теңлемелері үшін басқа да формулировка орынлы болады. Бұл формулировканы Дирак берді хәм онда спинлік өзгеріушілер әуел бастан жоқ етилмейді, ал олар бір электронлық толқын функцияларына киреди. 1-параграфтағы электронлар системасының толқын функциясы

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

түріндегі бір электронлық функцияларға ийе бір анықлаушы арқалы жууық

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

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

## V бөлім

## Дирак теориясы

## I бап. Дирактың толқын теңлемесі

## 5-1. Квантлық механика хәм салыстырмалық теориясы

Шредингер теориясы да, Паули теориясы да релятивисттик емес характерге ийе. Бул теорияларда материаллық бөлекшениң ямаса қандай да бир тәсирдің кеңісliğтегі тарқалыуының жақтылықтың тезлигинен үлкен тезликлерде бола алмайтуғынлығы есапқа алынбаған. Квантлық механиканың релятивисттик улыўмаластырылыуы жаңа физикалық түсиниклерди пайдаланыўды хәм хәтте толқын теңлемесиниң интерпретациясын өзгертиўди талап етеди. Толқын функциясының түрин өзгертиў электрон ушын спиннен басқа және де бир еркинлик дәрежесин киргизиў зәрүрлиги хәм бир дене мәселеси шеклеринде турып оны таллаўдың мүмкин емес екенлигинен ибарат.

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

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

$$H\psi - i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 \quad (5.1.1)$$

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

## 5-2. Классикалық қозғалыс теңлемесі

Салыстырмалық теориясының классикалық қозғалыс теңлемесиниң хәм оған сәйкес келетуғын Лагранж хәм Гамильтон функцияларының қандай болатуғынлығын еске түсірип өтеміз.

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



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

теңлемелери арқалы байланысқан. Бул аңлатпаларда

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

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

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

түрине ийе болады. Бул теңдемелерден

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

теңлемеси келтирилип шығарылады. Бул аңлатпада

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

электронның кинетикалық энергиясы болып табылады.

Бул теңдемелерди Лагранж

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

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

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = \frac{m\dot{x}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{e}{c} A_x = P_x - \frac{e}{c} A_x \quad (5.2.6)$$

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

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

қатнастарының жәрдеминде бериледи [III бөлімнің 5-параграфының (3.5.16)-

формуласына қараңыз]. Электронның энергиясы

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

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

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

### 5-3. Толқын теңлемесін келтиріп шығару

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

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

Салыстырмалық теориясы ушын характерли болған теңлемелердің координаталарға хәм ұақытқа қарата симметриясынан, толқын теңлемеси сызықлы түрде ұақыт бойынша дифференциаллаұ операторын өз ишине қамтыйтуғын болғанлықтан бул теңleme сызықлы түрдеги координаталар бойынша дифференциаллаұ операторына да ийе болыұы керек. Демек энергия квантлық оператор

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

операторларына қарата сызықлы болыұы, яғный

$$H = \beta_1 p_x + \beta_2 p_y + \beta_3 p_z + \beta_4 \quad (5.3.2)$$

түрине ийе болыұы керек. Бул аңлатпада  $\beta_{\hbar}$  арқалы  $p_x, p_y, p_z$  шамаларына ийе емес хәзирше белгисиз болған операторлар белгиленген. Бирақ бул операторлар  $x, y, z$  координаталарына ийе болмаұы керек. Себеби еркин электрон ушын кеңисликтің барлық ноқатлары бирдей хуқыққа ийе болыұы керек. Демек олар Шредингер теориясының толқын функциясы ғәрезли емес қандайда бир жаңа өзгеріұшилерге тәсир етиұи керек. Бул жаңа өзгеріұшилердің мәнисин биз төменде анықлаймыз. Олардың Паули теориясы тәрепинен киргизилетуғын операторлардың улыұмаласқан түри болып табылады.

$\beta_{\hbar}$  операторларының қәсийетлерин анықлаұ ушын квантлық механикадағы электронның энергияның квадраты менен қозғалыс муғдарының квадраты арасындағы қатнас классикалық физикада орын алатуғын қатнастай, атап айтқанда

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

түрінде болыұын талап етемиз.

$\beta_h$  операторларының өз ишине координаталарды алмайтуғынлығы хәм сонлықтан  $p_x$ ,  $p_y$ ,  $p_z$  операторлары менен коммутацияланатуғынлығы есапқа алған ҳалда (5.3.2)-оператордың квадратын есаплаймыз. Бул мынаған ийе боламыз:

$$H^2 = \beta_4^2 + \beta_1^2 p_x^2 + \beta_2^2 p_y^2 + \beta_3^2 p_z^2 + \\ + (\beta_1 \beta_4 + \beta_4 \beta_1) p_x + (\beta_2 \beta_4 + \beta_4 \beta_2) p_y + (\beta_3 \beta_4 + \beta_4 \beta_3) p_z + \\ + (\beta_2 \beta_3 + \beta_3 \beta_2) p_y p_z + (\beta_3 \beta_1 + \beta_1 \beta_3) p_z p_x + (\beta_1 \beta_2 + \beta_2 \beta_1) p_x p_y. \quad (5.3.4)$$

Егер

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

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

Егер биз

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

қатнасларының жәрдемінде  $\beta_h$  операторының орнына оған пропорционал болған  $\alpha_k$  операторын киргизетуғын болсақ, онда  $H$  операторы былайынша жазылады:

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

ал жаңа  $\alpha_k$  операторы

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

шәртин қанаатландыратуғын болады. Бул шәртлерди былайынша жаза аламыз

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

#### 5-4. Дирак матрицалары

Паули матрицаларының еки функция үстинен подстановка болғанлығы сыяқлы  $\alpha_k$  операторын төрт  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  функциялары үстинен подстановка деп қараўға болатуғынлығын биз төменде көремиз. Солай етип  $\alpha_k$  операторының тәсир етиў объекти төрт функцияның жыйнағы болады, ал операторлардың өзлерин подстановка коэффициентлеринен туратуғын матрица түрінде көрсетиў мүмкин.

$\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  функцияларының жыйнағын бир  $\psi$  символы менен жийи белгилеймиз, ал

$$\left. \begin{aligned} \psi'_1 &= \alpha_{11}\psi_1 + \alpha_{12}\psi_2 + \alpha_{13}\psi_3 + \alpha_{14}\psi_4, \\ \psi'_2 &= \alpha_{21}\psi_1 + \alpha_{22}\psi_2 + \alpha_{23}\psi_3 + \alpha_{24}\psi_4, \\ \psi'_3 &= \alpha_{31}\psi_1 + \alpha_{32}\psi_2 + \alpha_{33}\psi_3 + \alpha_{34}\psi_4, \\ \psi'_4 &= \alpha_{41}\psi_1 + \alpha_{42}\psi_2 + \alpha_{43}\psi_3 + \alpha_{44}\psi_4 \end{aligned} \right\} \quad (5.4.1)$$

подстановкасын (орнына қойыўын) қысқа түрде былайынша

$$\psi' = \alpha \psi \quad (5.4.2)$$

жазамыз. Бул аңлатпада  $\alpha$  арқалы

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

матрицасы белгиленген.

5-3 параграфтағы (5.3.9)-қатнастарды қанаатландыратуғын  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  операторларын Паули теориясын қарағанымыздағы матрица сыяқлы матрицалар менен аңғартамыз.

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  матрицаларынан алты матрица құрамыз: бириншіден

$$\sigma_x = -i\alpha_2\alpha_3, \quad \sigma_y = -i\alpha_3\alpha_1, \quad \sigma_z = -i\alpha_1\alpha_2 \quad (5.4.4)$$

матрицаларын, екіншіден

$$\rho_a = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3, \quad \rho_b = \alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4, \quad \rho_c = \alpha_4 \quad (5.4.5)$$

матрицалары.

Паули матрицалары қандай қатнастарды қанаатландыратуғын болса  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  матрицаларының да тап сондай қатнастарды қанаатландыратуғынлығын аңсат тексеріп көріуге болады. Атап айтқанда

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

Олардың ҳәр биринің квадраты 1 ге тең болады:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \quad (5.4.7)$$

Тап усындай қатнастарды  $\rho_a, \rho_b, \rho_c$  матрицалары да қанаатландырады. Олар ушын биз

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

хәм

$$\rho_a^2 = \rho_b^2 = \rho_c^2 = 1 \quad (5.4.9)$$

аңлатпаларына ийе боламыз.

$\rho$  матрицасының  $\sigma$  матрицасына көбеймеси ушын

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

буннан кейін

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

хәм ең ақырында

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

аңлатпаларына ийе боламыз. Солай етип  $\rho$  матрицаларының хәр қайсысы  $\sigma$  матрицаларының хәр қайсысы менен коммутацияланады. Усы жағдайға байланысly  $\rho$  хәм  $\sigma$  матрицаларын электронның хәр қыйлы еркинлик дәрежелери менен байланысқан деп айта аламыз.

$\rho$  хәм  $\sigma$  шамалары арқалы  $\alpha_i$  матрицалары ушын жазылған аңлатпадан пайдаланып 3-параграфтағы энергия операторы ушын жазылған (5.4.7)-аңлатпаны мына түде жазыуымыз мүмкин:

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

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

Жоқарыда қәлиплестирилген қәсийетлерге ийе төрт бағанаға хәм төрт қатарға ийе матрицаны қурыу менен шуғылланамыз. Буның ушын дәслепп Паули теориясында ушырасатуғын еки бағанаға хәм еки қатарға ийе үш матрицаны қараймыз. Оларды  $\sigma_1^0, \sigma_2^0, \sigma_3^0$  арқалы белгилеймиз хәм былайынша жазамыз:

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

Буннан кейін

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

подстановкасы бир шаманың үстинде емес, ал бир ўақытта еки  $\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$  хәм  $\begin{pmatrix} \xi^* \\ \eta^* \end{pmatrix}$  санлары үстинде жүргизиледи деп болжаймыз. Санлардың бул еки жубын  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  санларының төрттен бири деп қарау керек. Соның менен бирге  $\xi, \eta, \xi^*, \eta^*$  санларын  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  санлары менен саластыруды хәр қыйлы жоллар менен әмелге асыруы мүмкин.

Мысалы былайынша болжауға болады:

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

ямаса

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

Биринши жағдайда бизің подставкамызға сәйкес келиўши матрица былайынша жазылады:

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

ал екинши жағдайда болса матрицалар басқаша жазылады

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

Әлбетте өз алдына алынған  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  подстановкалары хәм өз алдына  $\rho_1, \rho_2, \rho_3$  орнына қойыўларды да еки функция үстинен исленген (5.4.15)- орнына қойыў (подстановка) қанаатландыратуғын қатнастарды қанаатландырады. Атап айтқанда

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

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

Екинши тәрептен хәм бир  $\sigma$  подстановкасы хәр бир  $\rho$  подстановкасы менен коммутацияланатуғынлығын тексерип көриў мүмкин

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

$\rho$  хәм  $\sigma$  матрицаларының хәр қайсысы, соның менен олардың (5.4.22)- көбеймелери де +1 хәм -1 болған еки қайтара меншикли мәнислерине ийе болады.

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

Мысалы,  $\rho_i$  хәм  $\sigma_i$  матрицалары арқалы Дирак теңлемесине кириўши

матрицаларды хәм олар менен байланыслы болған  $\rho_a, \rho_b, \rho_c$  хәм  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  матрицаларын аңлатыуымыз мүмкин. Буны хәр қыйлы жоллар менен орынлау мүмкин. Демек берилген физикалық мәниске ийе матрица хәр қыйлы математикалық формаларға ийе болады екен. Әдебиятта Дирак тәрәпинен усынылған жазыу жийи ушырасады. Ол мынадай жазыуды усынды

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

(5.4.15)- хәм (5.4.10)-формуларға сәйкес  $\alpha_k$  матрицасы мынадай түрге ийе

$$\alpha'_1 = \rho_1 \sigma_1, \quad \alpha'_2 = \rho_1 \sigma_2, \quad \alpha'_3 = \rho_1 \sigma_3, \quad \alpha'_4 = \rho_3 \quad (5.4.24)$$

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

Гейпара жағдайларға байланыслы матрицаларды төмендегидей етип сайлап алыу қолайлырақ:

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

ямаса анық түрде

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

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

Буннан  $\alpha_k$  матрицасы ушын төмендегидей мәнислер алынады:

$$\alpha_1 = \sigma_1, \quad \alpha_2 = \rho_3 \sigma_2, \quad \alpha_3 = \sigma_3, \quad \alpha_4 = \rho_2 \sigma_2 \quad (5.4.28)$$

ямаса анық түрде

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

## 5-5. Еркін электрон ушын Дирак теңлемеси

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

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

толқын теңлемеси төрт дифференциал теңleme системасы түрінде жазылады:

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

Егер Дирак теңлемеси (5.5.1)-түрде жазылған болса (бундай жазыуды символлық түрдегі жазыу деп атайды) изертлеу қолайлырақ болады. Сонлықтан (5.5.2)-түрдегі формуланы пайдаланыу ушын зәрүрлик болмайды.

Биз матрицаларды сайлап алыудың еки вариантын қарап шықтық. Олардың бириншиси (Дирак тәрәпинен усынылғаны) 5-4 параграфтағы (5.5.23)-формулаға, екіншиси болса 5-4 параграфтағы (5.5.25)-формулаға сәйкес келеди.

Базы бир мақсетлер ушын еркин электронның төрт құраушыдан туратуғын толқын функциясы ушын жазылған теңлемелер системасы хақықый коэффициентлерге ийе болатуғын  $\alpha_k$  матрицаның көриниси қолайлы. Буның ушын 4-параграфтағы (5.5.25)-формулардағы  $\rho_2$  менен  $\rho_3$  матрицаларының орынларын алмастырыу хәм  $\rho_1$  матрицасының алдындағы белгини өзгертиу керек. Бундай жағдайда 4-параграфтағы (5.5.25)-аңлатпаның орнына:

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

аңлатпаларына ийе боламыз.

Жаңа матрицаларды ескилеринен айырыу ушын «0» значоклары менен тәмийинледик<sup>2</sup>. Барлық (5.5.3)-матрицалар таза жормал элементлерге ийе болады.

Жаңа хәм ески матрицалар арасындағы байланыс матрицалар менен исленетуғын каноникалық түрлендириулердің жәрдемінде әмелге асырылады:

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

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

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

Хақықатында биз

<sup>2</sup> Хәзир гәп төрт қатарлы матрицалар хақында айтылып атыр. Сонлықтан бул матрицаларды 4-параграфтағы (5.4.14)-Паули матрицалары менен алжастыруу мүмкин емес.



$$T\rho_2T = \rho_3, \quad T\rho_3T = \rho_2, \quad T\rho_1T = -\rho_1 \quad (5.5.6)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Жаңа  $\alpha_k$  матрицасы (енди биз оны  $\alpha_k^0$  арқалы белгилейміз) ески матрица менен каноникалық түрлендіріулер менен байланысқан:

$$\alpha_k^0 = T^+ \alpha_k T. \quad (5.5.7)$$

Олар мынаған тең:

$$\alpha_1^0 = \sigma_1, \quad \alpha_2^0 = \rho_2 \sigma_2, \quad \alpha_3^0 = \sigma_3, \quad \alpha_4^0 = \rho_3 \sigma_2. \quad (5.5.8)$$

5-4 параграфтағы (5.4.28)-аңлатпа менен салыстырыу олардың  $\alpha_2$  менен  $\alpha_4$  тиң орын алмасыуы менен айрылатуғынлығы көрсетеді. Биринші үш  $\alpha_k^0$  матрицасының элементтери ҳақыйқый, ал  $\alpha_4^0$  элементтери жормал болады.

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

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

Ең ақырында бизиң толқын функцияларымыз бенен Дирак бойынша [5-4 параграфтағы (5.4.24)-аңлатпа] сайлап алынған  $\alpha'_k$  матрицаларына сәйкес келиуши  $\psi'_k$  толқын функциялары арасындағы байланысты жазамыз. Биз мынадай қатнастарға ийеміз:

$$\left. \begin{aligned} \psi'_1 &= \frac{\psi_1 - \psi_4}{\sqrt{2}}, & \psi'_2 &= \frac{\psi_2 + \psi_3}{\sqrt{2}}, \\ \psi'_3 &= \frac{\psi_1 + \psi_4}{\sqrt{2}}, & \psi'_4 &= \frac{\psi_2 - \psi_3}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \right\} \quad (5.5.10)$$

$$\psi' = S\psi \quad (5.5.11)$$

түрлендіріуіне сәйкес келиуши унитар матрица  $S$  мынаған тең:

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

Ал

$$\psi^0 = T\psi \quad (5.5.13)$$

түрлендіріуіне сәйкес келиуіші  $\psi^0$  хәм  $\psi$  арасындағы байланысқа келетуғын болсақ, онда бундай байланыс

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

формулаларының жәрдемінде жазылады.  $T^2 = 1$  болғанлықтан бундай формулалар  $\psi_i$  ди  $\psi_i^0$  арқалы аңлатыуға мүмкиншилик береді. Биз мынаған ийе боламыз:

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

### 5-6. Лоренц түрлендіріулері

Биз енди толқын теңлемесинің Лоренц түрлендіріулеріне қарата инвариантлығын хәм  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  функцияларының геометриялық қасиетлерін үйрениу менен шуғылланамыз.

$$x = x_1, \quad y = x_2, \quad z = x_3, \quad ct = x_0 \quad (5.6.1)$$

деп болжайық хәм

$$e_0 = 1, \quad e_1 = e_2 = e_3 = -1 \quad (5.6.2)$$

төрт санын киргиземіз. Буны биз төрт өлшемлі қашықтықтың квадратын

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

түрінде жазыу үшін иследик.

Лоренц түрлендіріулерін

$$x'_i = \sum_{k=0}^3 e_k a_{ik} x_k \quad (5.6.4)$$

түрінде жазамыз. Бул аңлатпада  $a_{ik}$  арқалы

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

шәртин қанаатландыратуғын хақыйқый санлар белгиленген. Бул (5.6.4)-түрлендіріудің  $ds^2$  шамасын инвариант етип қалдыратуғынлығынан келип шығады. Бул жағдайлардың орын алыуының себебинен (5.6.4)-теңleme  $x_i$  шамасына қарата былайынша жазылады:

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

Буннан өз гезегинде

$$\sum_{i=0}^3 e_i a_{ki} a_{il} = e_k \delta_{kl} \quad (5.6.7)$$

теңлемеси келип шығады. 5-5 параграфтағы (5.5.1)-теңлемени  $\frac{t}{\hbar c}$  шамасына көбейтип егер  $\alpha_0$  ди бирлик матрица деп түсинсек былайынша жазамыз:

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

ямаса

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

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

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

Сонлықтан

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

Егер бизге

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

$$S^+ \alpha_4 S = \alpha_4 \quad (5.6.12)$$

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

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

түринде жазыўға мүмкин болар еди. Буннан кейин

$$\psi' = S \psi \quad (5.6.14)$$

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

$$\sum_{k=0}^3 \alpha_k \frac{\partial \psi'}{\partial x'_k} + \frac{imc}{\hbar} \alpha_4 \psi' = 0 \quad (5.6.15)$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлеме дәслепки (5.6.9)-теңлеме сыяқлы теңлеме болып табылады. Бул теңлеме бурынғы  $\alpha_k$  матрицаларына, бирақ жаңа  $x'_0, x'_1, x'_2, x'_3$  ғәрезсиз өзгериўшилериине хәм жаңа  $\psi'_1, \psi'_2, \psi'_3, \psi'_4$  функцияларына ийе. Солай етип егер Лоренц түрлендириўлерин функциялары үстинен (5.6.14)-подстановка жәрдемінде исленсе толқын теңлемесиниң өзиниң дәслепки түрин сақлайтуғынлығы дәлилленди. Басқа сөзлер менен айтқанда толқын теңлемесиниң Лоренц түрлендириўлерине қарата инвариантлығы дәлилленеди.

### 5-7. $S$ матрицасының көшерлерди кеңисликлик бурыўға хәм Лоренц түрлендириўлери ушын түри

Биз бизге керек қәсийетлерге ийе  $S$  матрицасының бар екенлигин хәм  $\alpha_k$  матрицаларын бизлер сайлап алған жағдайда

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

түрине ийе болатуғынлығын көрсетемиз. Бул аңлатпада  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  лар арқалы бир бири менен

$$\alpha\delta - \beta\gamma = 1 \quad (5.7.2)$$

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

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

түрине ийе болады.

Ең дәслеп (5.7.2)-қатнасқа байланыслы 5-6 параграфтың (5.6.12)-формуласының орынланатуғынлығын аңсат тексерип көриўге болады. Буның ушын избе-из үш подстановка ислеймиз: дәслеп  $S$ , буннан кейин  $\alpha_4$  хәм ең кейнинен  $S^+$  ти. Усының менен бир қатарда

$$S^+ \alpha_5 S = \alpha_5 \quad (5.7.4)$$

теңлигиниң орныланатуғынлығын да аңғарамыз.

5-6 параграфтың (5.6.11)-аңлатпасының орынланатуғындай етип Лоренцтің қалеген түрлендириуі үшін  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\sigma$  параметрлерин сайлап алыудың мүмкиншилигине исениу мақсетінде Лоренц түрлендириулеринің де,  $S$  потдстановкаларының да группаны пайда ететуғынлығынан пайдаланамыз (яғный избе-из орынланатуғын бир неше түрлендириулер сол типтеги бир түрлендириу менен алмастырылады). Лоренцтің ең улыұмалық түрлендириуін дара типтеги түрлендириулерди избе-из қолланыу менен алыу мүмкин. Мысалы бундай жағдайды әмелге асыруу үшін координаталар системасын  $x, y, z$  көшерлері дөгерегінде буруу хәм

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

түрлендириулерин орынлау мүмкин.

Егер бизлер усы дара түрлендириулердің хәр бири үшін сәйкес  $S$  подстановкасын тапсақ, онда улыұма жағдай үшін болған  $S$  подстановкасы бул дара постановкаларды избе-из қолланыу жолы менен алынады.

Биз дәслепп  $z$  көшери дөгерегіндеги бурууды қараймыз. Себеби бундай жағдайда  $S$  матрицасы ең әпиұайы түрге ийе болады. Көшерлердің бурылыуы үшін формулалар былайынша жазылады:

$$\left. \begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos \varphi - x_2 \sin \varphi, \\ x'_2 &= x_1 \sin \varphi + x_2 \cos \varphi, \\ x'_3 &= x_3, \\ x'_0 &= x_0. \end{aligned} \right\} \quad (5.7.6)$$

Бул бурылыуларға

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

параметрлеринің сәйкес келетуғынлығын көрсетемиз.  $S$  матрицасы мынадай болады:

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

Бул матрицаны

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

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

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

аңлатпасын жазамыз. Жоқарыда келтирилген аңлатпалар тийкарында

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

демек

$$\alpha'_1 = S^+ \alpha_1 S = \alpha_1 \cos \varphi - \alpha_2 \sin \varphi. \quad (5.7.11)$$

Тап сол сыяқлы

$$\left. \begin{aligned} \alpha'_2 &= S^+ \alpha_2 S = \alpha_1 \sin \varphi + \alpha_2 \cos \varphi, \\ \alpha'_3 &= S^+ \alpha_3 S = \alpha_3, \\ \alpha'_0 &= S^+ \alpha_0 S = \alpha_0. \end{aligned} \right\} \quad (5.7.11')$$

теңлиги дәлиллеленеді.

Солай етип  $x'_k$  түрлендірілген координаталарының дәслепки  $x_k$  координаталары арқалы аңлатылғанындай, түрлендірілген  $\alpha'_k$  матрицалары да дәслепки  $\alpha_k$  матрицалары арқалы аңлатылады екен. Басқа сөз бенен айтқанда 5-6 параграфтың (5.6.11)-аңлатпасы орынланады екен.

Енді  $x = x_1$  көшери дөгерегіндегі бурыұды қараймыз:

$$\left. \begin{aligned} x'_1 &= x_1, \\ x'_2 &= x_2 \cos \varphi - x_3 \sin \varphi, \\ x'_3 &= x_2 \sin \varphi + x_3 \cos \varphi, \\ x'_0 &= x_0. \end{aligned} \right\} \quad (5.7.12)$$

Бул аңлатпада

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

хәм  $S$  матрицасы

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

түріне ямаса

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

түріне ийе болады.

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

Ең ақырында  $y = x_2$  көшери дөгерегіндеги бурыўға

$$\left. \begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos \varphi + x_3 \sin \varphi, \\ x'_2 &= x_2, \\ x'_3 &= -x_1 \sin \varphi + x_3 \cos \varphi, \\ x'_0 &= x_0, \end{aligned} \right\} \quad (5.7.15)$$

параметрлердің мәнислери

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

хәм усы параметрлерден қуралған  $S$  матрицасы былайынша жазылады:

$$S = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sin \frac{\varphi}{2} \sigma_2 \quad (5.7.17)$$

ямаса

$$S = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sin \frac{\varphi}{2} \sigma_y. \quad (5.7.17^*)$$

Барлық үш жағдайда да  $x_k$  көшериниң дөгерегінде оң бағытта  $\varphi$  мүйешине бурыўға

$$S = \cos \frac{\varphi}{2} - i \sin \frac{\varphi}{2} \sigma_{x_k} \quad (5.7.18)$$

унитар матрицасы сәйкес келеди. Соның менен бирге бул нәтийже  $\alpha_k$  матрицаларын сайлап алыўдан ғәрезли емес. Бул нәтийжелерди улыўмаластырамыз хәм  $l, m, n$  бағытлаўшы косинусларына ийе көшердің дөгерегінде  $\omega$  мүйешине бурған жағдай ушын

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

матрицасының сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз.

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

$$\left. \begin{aligned} x'_1 &= x_1, & x'_2 &= x_2, \\ x'_3 &= \frac{x_3 - \frac{v}{c} x_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, & x'_0 &= \frac{x_0 - \frac{v}{c} x_3}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \end{aligned} \right\} \quad (5.7.20)$$

$$\frac{v}{c} = \text{th } u \quad (5.7.21)$$

түріндеги белгилеў қабыл етемиз. Усыған байланысly

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

Бул жағдайда параметрлер мыналарға тең болады:

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

хәм  $S$  матрицасы енди унитар матрица болмайды, бірақ  $\alpha_k$  матрицалары бизлердің сайлап алғанымыздай етип сайлап алынса бұрынғысынша (5.7.1)-түрге ийе болады хәм

$$S = \text{ch } \frac{u}{2} - \text{sh } \frac{u}{2} \sigma_3 \quad (5.7.23)$$

ямаса

$$S = \text{ch } \frac{u}{2} - \text{sh } \frac{u}{2} \alpha_3 \quad (5.7.24)$$

түрінде жазылады. Енди 5-6 параграфтағы (5.6.11)-қатнастың орынланатуғынлығын да аңсат тексеріп көріуіге болады.

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

$$S = \text{ch } \frac{u}{2} - \text{sh } \frac{u}{2} \alpha_k, \quad (5.7.25)$$

ал косинуслары  $l, m, n$  болған бағыттағы қозғалыс үшін  $S$  матрицасы былайынша жазылады

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

Солай етип барлық жағдайда да 6-параграфтағы (11)-шәртти қанаатландыратуғын (1)-түрдегі  $S$  матрицасының түрін табыу мүмкін екен. Усының менен толқын теңлемесинің Лоренц түрлендіріулеріне қарата инвариантлығы дәлилленди.

Кэйлей-Клейн параметрлері, демек  $S$  матрицасы да берілген бурылыу үшін белгиге шекемгі дәллікте анықланатуғынлығын аңғарамыз. Бизиң формулаларымызда  $S$  матрицасының белгиси шексиз киши бурыуға ямаса шексиз киши тезлики Лоренц түрлендіріулеріне  $S = +1$  ден шексиз киши шамаға айрылатуғын (парыққа ийе) болатуғындай етип сайлап алынған.

## 5-8. Тоқ векторы

Биз жоқарыда Лоренцтің хәр бир түрлендіріуіне  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$  функцияларының белгили бир (белгиге шекемгі дәлліктегі) түрлендіріуінің сәйкес келетуғынлығын көрдик. «Ярым рангалы тензор» ямаса «ярым вектор» деп атауға болатуғын тензор ямаса вектор сыяқлы бул функциялар өзине тән геометриялық фигураны береді (көрсетеді). Бул атаманың дурыслығы  $\psi$  фунциясының базы бир квадратлық комбинацияларының төрт өлшемлі вектор сыпатында түрленетуғынлығы менен байланысly. Ҳақыйқатында да



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

деп ямаса толығырақ ( $\alpha_k$  шамаларын бизиң сайлап алғыўымыз жағдайында)

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

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

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

ал бул теңлик  $A_0, A_1, A_2, A_3$  лердің төрт өлшемлі вектордың қураўшыларындай болып түрленетуғынлығын көрсетеді. 5-6 параграфтың (5.6.12)- хәм 5-7 параграфтың (5.7.4)-формуласы бул жағдайда

$$A'_4 = A_4, \quad A'_5 = A_5 \quad (5.8.4)$$

екенлигин береді. Бул жағдай  $A_4$  пенен  $A_5$  шамаларының төрт өлшемлі инвариантлар екенлигин аңғартады.  $A_k$  шамалары

$$A_1^2 + A_2^2 + A_3^2 + A_4^2 + A_5^2 = A_0^2 \quad (5.8.5)$$

аңлатпасы арқалы байланысқан.

Егер  $A_k$  шамалары толқын теңлемесін қанаатландыратуғын  $\psi$  функцияларынан туратуғын болса, онда

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

теңлигинің орын алатуғынлығын көрсетеміз. Буның ушын 5-6 параграфтағы (5.6.9)-аңлатпаны хәм оған түйинлесті жазамыз:

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

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

Бул теңлемелердің бириншисинің оң тәрәпин  $\bar{\psi}$  ге, ал екіншисинің оң тәрәпин  $\psi$  ге көбейтеміз хәм нәтижелерді бир бирине қосамыз. Теңлемелердегі екінші ағзалар қысқарады хәм (5.8.6)-теңleme болған

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

теңлемесін аламыз.

(5.8.6)-теңлемени базис бір  $\sigma$  бети менен шекленген  $V$  көлемі бойынша интеграллап

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

аңлатпасын аламыз.

$A_0$  шамасының физикалық мәнісі итималлықтың тығызлығы болып табылады. Бул шама Шредингер теориясындағы  $\bar{\psi}\psi$  көбеймесінің орнын тутады. (5.8.6)- хәм (5.8.9)- формулаларды III баптың II бөлімінің 2-параграфындағы (9)- хәм (7)- формулалар менен салыстырсақ  $cA_k$  векторының Шредингер теориясындағы  $\mathbf{S}$  векторының орнын ийелейтуғынлығын хәм электронлар ағысының тығызлығының аналогы болып табылатуғынлығын көріуге болады. Классикалық электр зарядларының тығызлығы  $\rho$  ның хәм  $\rho^v$  тоқ векторының квантлық аналоглары төмендегилер болып табылады:

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

$$\rho v_k \rightarrow -eS_k = -e c \bar{\psi} \alpha_k \psi = -e c A_k \quad (k = 1, 2, 3). \quad (5.8.11)$$

## 5-9. Майдан бар жағдайдағы Дирак теңлемесі. Қозғалыс теңлемелері

Жоқарыдағы параграфларда еркін электрон үшін келтірилип шығарылған толқын теңлемесі

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

түріне ийе еді. Бул теңлемеден энергия операторы  $H$  мынаған тең

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

Биз усы теңлемени электромагнит майданы бар жағдай үшін улыұмаластырыуымыз керек. Майдан үшін Гамильтон функциясы болған (5.2.9)- функция (5-2 параграфтағы) майданы жоқ функциядан потенциал энергия  $-e\varphi$  шамасын қосыу хәм  $p_x, p_y, p_z$  «моментлерін» 5-2 параграфтағы (5.2.7)-формула бойынша қозғалыс мұғдарының  $P_x, P_y, P_z$  құраушылары менен алмастырыу арқалы алынады. Тап усындай алмастырыуды биз Паули теориясында орынладық. Усындай алмастырыуды (5.9.2)-релятивисттик квантлық операторнда ислеп көреміз хәм

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

деп болжаймыз. Бул аңлатпада

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

хәм бул жерде  $p_x, p_y, p_z$  шамаларын бурынғыдай

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

операторлары деп түсинемиз.

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

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \text{grad } f, \quad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \quad (5.9.5)$$

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

$\mathbf{A}$  менен  $\varphi$  лер  $\mathbf{A}'$  пенен  $\varphi'$  лер менен (5)-формула жәрдемінде алмастырылған (5.9.3)-түрдеги операторды  $H'$  арқалы белгилеймиз.

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

түриндеги теңсизликтинъ тийкарында егер  $\psi$  функциясы (5.9.1)-теңлемени қанаатландыратуғын болса, онда

$$\psi' = e^{-\frac{ie}{\hbar c} f} \psi \quad (5.9.7)$$

функциясының

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

теңлемесиниң шешими болатуғынлығын көрсетиў қыйын емес.

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

Формаллық жақтан қозғалыс теңлемеси жаңа толқын теңлемесин тексерип

көрийші бола алады. Базы бир  $L$  операторының толық туындасы ушын

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

формуласының бар екенлиги еске аламыз хәм сол  $L$  операторының орнына избе-из  $x, y, z, P_x, P_y, P_z$  шамаларын қоямыз. Усындай жол менен Шредингер теориясынан алынғандай классикалық қозғалыс теңлемесинің алынуатығынлығын ямаса алынбайтуғынлығын көреміз.

$$L = x, y, z$$

деп алып

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

аңлатпаларын аламыз. Электронның тезликлеринің құраушылары ушын операторлар усындай болады. Олар бир бири менен коммутацияланбайды хәм олардың хәр биринің квадраты  $c^2$  қа, яғный жақтылықтың тезлигинің квадратына тең. Олардың хәр қайсысының меншикли мәнис  $\pm c$  ға тең. Демек электронның тезлигинің өлшенетуғын хәр бир құраушысы тек  $\pm c$  ға тең болып шығады. Бул парадокслық нәтижениң физикалық мәниске ийе болыу мәселесин ашық қалдырамыз. Бул Дирак теориясының кемшилиги болса керек.

Енди

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

теңлигин аламыз хәм  $\frac{dP_x}{dt}$  туындасын есаплаймыз. Буның ушын дәслеп

$$\left. \begin{aligned} \frac{i}{\hbar} (P_y P_z - P_z P_y) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_x, \\ \frac{i}{\hbar} (P_z P_x - P_x P_z) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_y, \\ \frac{i}{\hbar} (P_x P_y - P_y P_x) &= \frac{e}{c} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \frac{e}{c} \mathcal{H}_z. \end{aligned} \right\} \quad (5.9.11)$$

аңлатпаларын табамыз. Бул аңлатпалар тийкарында

$$\begin{aligned} \frac{dP_x}{dt} &= \frac{e}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{ic}{\hbar} [\alpha_2 (P_y P_x - P_x P_y) + \alpha_3 (P_z P_x - P_x P_z)] - \\ &\quad - \frac{ie}{\hbar} (\varphi P_x - P_x \varphi) = e \left( \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - e\alpha_2 \mathcal{H}_z + e\alpha_3 \mathcal{H}_y \end{aligned}$$

ямаса

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

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

байланыстырамыз. Нәтижеде биз

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

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

### 5-10. Дирак теориясындағы қозғалыс мұғдары моменти хәм спин векторы

Енди улымаласқан Паули операторларын көрсететугын  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  операторларынан ўақыт бойынша туўынды аламыз. Бул туўындыларды есаплаў ушын 5-9 параграфтағы (5.9.3)-энергия операторындағы  $\alpha_k$  матрицаларын 5-4 параграфтағы (5.4.5)- хәм (5.4.10)-формулар бойынша  $\rho$  хәм  $\sigma$  арқалы аңлатып былайынша жазыўға болады

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

$\sigma$  операторының  $\rho$  операторы менен коммутацияланатуғынлығын еске алып 5-9 параграфтағы (5.9.9)-улымалық формула бойынша ўақыт бойынша туўынды ушын

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

Буннан 5-4 параграфтағы  $\sigma$  матрицасының (5.4.6)-қәсийетиниң тийкарында

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

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпаны хәм усы аңлатпаға сәйкес келетугын еки аңлатпаны 5-4 параграфтағы (5.4.10)-аңлатпалар (бул аңлатпаларда  $\alpha_k$  матрицалары  $\rho$  хәм  $\sigma$  лар арқалы аңлатылған) 5-9 параграфтағы қозғалыс теңлемелери тийкарында

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

түринде жазамыз.

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

(5.10.3)-теңлемелердің оң бөлімлеріндегі көбейтіншілердің тәртібінің әрмийетінің жоқ екенлігін аңғарамыз.

(5.10.3)-теңлемелердің бірінші теңлемесінің оң бөлімін былайынша жазу мүмкін:

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

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

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

Тап ұсындай жоллар менен

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

аңлатпаларын да аламыз.

Бұл теңлемелерді классикалық механиканың нызамына аналог сыпатында түсіндіріу мүмкін. Бұл нызам бойынша қозғалыс муғдарының моментинен (импульс моментинен) ұақыт бойынша алынған туұынды тәсир ететуғын күшлердің моментине тең. Бұл жерде қозғалыс муғдарының моменти (импульс моменти) мынадай түрге ийе:

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

Егер вектор-потенциалды нолге тең деп есапласақ (демек  $P_x = p_x$ ,  $P_y = p_y$ ,  $P_z = p_z$  теңліклері орынланады) хәм  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  операторларын Паулидің еки қатарлы матрицалары түрінде жазсақ, онда бұл жағдай Паули теориясын үйренгенимизде алынған нәтижелердің улыұмаластырылыуы болып табылады.

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

операторының сәйкес улыұмаластырылыуын қараймыз (бұл аператорды Паули теориясын баянлағанда үйрендик). (5.10.1)-энергия операторына сәйкес келиуши  $P$  операторынан ұақыт бойынша туұынды аламыз. Энергия операторын  $P$  арқалы былайынша аңлатамыз:

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

Бұл жерде энергия операторында  $P$  менен коммутацияланбайтуғын бірден бір ағзаның скаляр потенциал екенлігі көринип тур. Сонлықтан

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

ямаса

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

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

Паули теориясында биз

$$\mathcal{M} = \sigma_x m_x + \sigma_y m_y + \sigma_z m_z + \hbar \quad (5.10.9)$$

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

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

$$\mathcal{M} = \sigma_x \mathcal{M}_x + \sigma_y \mathcal{M}_y + \sigma_z \mathcal{M}_z - \frac{\hbar}{2}. \quad (5.10.10)$$

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

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

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

## 5-11. Электронның кинетикалық энергиясы

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

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

ямаса

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

операторын аламыз. Бул аңлатпалардағы  $T$  шамасын кинетикалық энергия үшін оператор деп түсінеміз. Бул оператордың классикалық аналогы былайынша жазылады:

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

Бул аңлатпада  $v$  арқалы электронның тезлиги, ал  $p$  арқалы қозғалыс муғдары (импульси) белгиленген. Бундай түсіндириу еки себепке байланысты тастыйықланады: бириншиден  $T$  шамасынан уақыт бойынша алынған тууындының классикалық хәм квантлық аңлатпалары арасындағы аналогиядан, екіншиден  $T$  операторының меншикли мәнисинің абсолют шамасы бойынша  $mc^2$  шамасынан үлкенлигинде. Егер бизлер классикалық шамалар менен оператордың өзлерін салыстырмай, ал бул оператор үшін дүзилген Гейзенберг матрицасының орташаланған мәнисін қойсақ, онда аналогия жүдә жақын болады.

Ең дәслеп  $T$  операторынан уақыт бойынша тууынды аламыз. Биз улыұмалық формула бойынша мынаған ийе боламыз:

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

хәм соның менен бирге

$$H = T - e\Phi. \quad (5.11.5)$$

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

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

ямаса

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

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



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

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

$$\frac{dT}{dt} = -e(\dot{x}\mathcal{E}_x + \dot{y}\mathcal{E}_y + \dot{z}\mathcal{E}_z). \quad (5.11.8)$$

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

$T$  операторының меншикли мәнісіннің абсолют шамасы бойынша  $mc^2$  шамасынан үлкен екенлігіне исениу үшін оның квадратын дүземиз. (5.11.2)-формуланы хәм  $\rho$  матрицаларының қәсийетлерин пайдаланып

$$T^2 = m^2c^4 + c^2P^2 \quad (5.11.9)$$

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

$$P = \sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z \quad (5.11.10)$$

операторының квадраты болып табылады. Егер биз оның меншикли мәніслерин  $P'$  арқалы белгилесек, онда  $T^2$  операторының меншикли мәніслери

$$T'^2 = c^2(m^2c^2 + P'^2) \quad (5.11.11)$$

шамасына тең болады. Сонлықтан

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

хәм усыған сәйкес

$$|T'| \geq mc^2. \quad (5.11.13)$$

(5.11.12)-формулада квадрат түбирге ийе аңлатпаның алдына қос белги қойдық. Хәқыйқатында да кинетикалық энергия үшін теорияның еки белгиге де ийе мәніслерди береді.  $T$  операторының меншикли функциялары үшін теңлеме жазамыз

$$T\psi = c\rho_a(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z)\psi + mc^2\rho_c\psi = T'\psi. \quad (5.11.14)$$

Егер  $\psi$  функциясы бул теңлемениң  $T'$  меншикли мәніси үшін шешими болатуғын болса, онда

$$\psi^* = \rho_b\psi \quad (5.11.15)$$

функциясы  $-T'$  үшін шешим болып табылады. Хәқыйқатында да  $\rho_b$  матрицасы  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  матрицалары менен коммутацияланатуғын хәм  $\rho_a$  хәм  $\rho_c$  матрицалары менен антикоммутацияланатуғын болғанлықтан биз мынаны жаза аламыз:

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

яғнай

$$T\psi^* = -T'\psi^* \quad (5.11.16)$$

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

## VI бөлім

### Релятивисттик квантлық механика

#### 6-1. Скаляр релятивисттик Клейн-Гордон теңлемесі

а) Классикалық релятивисттик механика хәм Клейн-Гордон теңлемесі. Биз жоқарыда үйренген Шредингер теңлемесі  $\psi$  тезлиги жақтылықтың тезлиги  $c$  дан әдеуір киши болған бөлекшелердің қозғалысын тәрийиплеу ушын қолланылады. Релятивисттик емес Шредингер теңлемесі Лоренц түрлендириулерине қарата инвариант емес. Себеби уақыт хәм кеңістік координаталары Шредингер теңлемесіне бирдей хуқық пенен кирмейди: теңлеме уақыт бойынша алынған биринши тәртіпті тууындыны хәм координаталар бойынша алынған екінши тәртіпті тууындыны өз ишине алады. Ал арнаулы салыстырмалық теориясы болса теңлемеге уақытлық хәм кеңістік координаталардың бирдей тийкарда кириуін талап етеди.

Релятивисттик толқын теңлемесін алыу ушын масса менен энергия арасындағы классикалық релятивисттик қатнастан пайдаланамыз. Бул қатнас еркин бөлекше ушын былайынша жазылады:

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

Буннан кейін релятивисттик емес Шредингер теңлемесін алғандағы усулдан, яғни энергия менен импульстің орнына

$$E \rightarrow E = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (6.1.2)$$

операторларын киргизгенде болар еди. Бирақ квадрат түбір белгиси астындағы операторлардың толқын функциясына қалай тәсир ететугынлығы бизге мәлім емес. Сонлықтан классикалық толқын функциясынан релятивисттик толқын функциясына өтерде биринши гезекте биз квадрат түбірден қутылыуымыз керек. Буны еки жол менен әмелге асыруға болады: теңліктің еки тәрәпин де квадратқа көтерип Клейн-Гордонның скаляр теңлемесі алыу ямаса матрицалардың жәрдеминде квадрат түбірден шығару хәм Дирактың спинорлық теңлемесін алыу. Дирактың бул спинорлық теңлемесі релятивисттик эффектлерди де есапқа алады (Клейн-Гордон теңлемесі сыяқлы), спинлік эффектлерди де есапқа алады.

Бул параграфта биз биринши усулды қарап шығамыз (бул усул Клейн, Гордон хәм Фок тәрәпинен рауажландырылған). (1)-теңлемениң еки тәрәпин де квадратқа көтерип биз

$$E^2 - c^2 p^2 - m_0^2 c^4 = 0 \quad (6.1.3)$$

теңлемесіне ийе боламыз.

Бул теңлемеге (2)-аңлатпадан операторлардың мәніслерін қоятуғын болсақ биз еркин бөлекше ушын Клейн-Гордон теңлемесін аламыз<sup>3</sup>:

<sup>3</sup> (4)-теңлемеді  $\psi$  толқын функц иясы тек  $r$  радиус-векторынан ғана ғәрезли емес, ал уақыт  $t$  дан да ғәрезли. Бирақ оқыушы толқын функциясының  $t$  дан ғәрезли екенлигин өзі түсиниуі керек (мысалы

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

Электромагнит майданы қатнасуатын жағдайда (6.1.2)-аңлатпаның орнына төмендегідей улыұмаласқан операторларды қойыу керек болады<sup>4</sup>:

$$\begin{aligned} E \rightarrow F &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \\ \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{P} &= \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (6.1.5)$$

Бундай жағдайда майдан бар болған жағдай үшін релятивисттик теңлемени аламыз

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

(6)-релятивисттик толқын теңлемеси Лоренц түрлендіріулеріне қарата инвариант. Себеби бул теңлемеге уақыт та, кеңістік координаталар да теңдей тийкарда киреди хәм бул (6)-теңлемени релятивисттик жақтан инвариант формада жазыу мүмкин.

$$(P_t^2 - \mathbf{P}^2 - m_0^2 c^2) \psi = 0.$$

Бул аңлатпада

$$P_t = \frac{F}{c}.$$

б) Зарядтың хәм тоқтың тығызлығы. Зарядтың хәм тоқтың тығызлығы үшін аңлатпаны электромагнит майданлары болмаған жағдай үшін табамыз ( $\Phi = \mathbf{A} = 0$ ).

Шредингер теориясындағыдай жуұмақларымыздың тийкарына үзлексізлик теңлемесін қоямыз

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

Бул теңлеме релятивисттик инвариант формаға ийе болады. (6.1.4)-теңлемениң шеп тәрәпин  $\psi^*$  функциясына, ал комплексли-түйінлес теңлемени (бул жағдайда сол теңлемедегі  $\psi$  функциясы  $\psi^*$  функциясы менен алмастырылады)  $\psi$  ге көбейтип, буннан кейін биринен бирин алып төмендегідей аңлатпаға ийе боламыз:

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

Соңғы теңликти

теңлемеді уақыт бойынша туұынды тур). Сонлықтан буннан былай  $\psi$  менен  $t$  арасындағы байланысты тек бул байланыс анық көринип турмаған жағдайда көрсетип өтеміз.

<sup>4</sup> Классикалық жағдайда майдан бар болған жағдайда (1)-аңлатпаның орнына табамыз:

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

Бул жағдай (5)-оператордың киргизіліуіне эквивалент.

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

түрине түрлендириу мүмкін.

Енди заряд пенен тоқтың тығызлықтарын сәйкес

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

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

аңлатпаларының жәрдемінде анықлап олардың (6.1.7)- үзликсизлік теңлемесін қанаатландыратуғынлығын хәм усының менен бирге төрт өлшемлі

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{2m_0i} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} - \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial x_\mu} \right) \psi \right] \quad (6.1.12)$$

векторын пайда ететуғынлығын аңғарамыз. Бул аңлатпада

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

Тоқтың тығызлығы үшін (6.1.11)-формула релятивистлик емес

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

формула менен бирдей болады екен. Зарядтың тығызлығы үшін жазылған аңлатпа  $v \ll c$  болғанда релятивистлик емес  $\rho = e\psi^*\psi$  аңлатпасына өтеді. Хәқыйқатында да  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E$  алмастырыуын пайдаланып [(6.1.4)-формулаға қараңыз] (6.1.10)-аңлатпаның жәрдемінде зарядтың тығызлығы үшін төмендегідей аңлатпаны аламыз

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

Бул формула болса  $E \approx m_0c^2$  релятивистлик жақынласуында әдеттегі  $\rho = e\psi^*\psi$  формуласына өтеді. Бирақ релятивистлик теорияда  $E$  ниң терис мәніслеріне ийе екінші шешімнің болуы мүмкін ( $E < 0$ ). Бундай жағдайда  $\rho$  тығызлығы үшін е ниң белгисіне қарама-қарсы белгини қоямыз.

Солай етип релятивистлик теңleme принципінде тек терис белгиге ийе зарядқа ийе емес, ал оң белгиге ийе зарядланған бөлекшелерди де тәрийиплей алады екен (мысалы зарядланған пи-мезонлар үшін бул теңлемени қолланыуға болады).

Бөлекшелердің тығызлығы түсиниги болса (зарядтың тығызлығынан басқа)

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

улыуа жағдайда өзиниң мәнісін жоғалтады. Себеби бул аңлатпа оң анық шама болмайды хәм бул жағдай оның релятивистлик емес теориядағы аңлатпа болған

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

аңлатпасынан тийкарғы айырмасы болып табылады.

в) Водород тәризлі атомның релятивистлик теориясы (спинди есапқа алмаған

жағдай). Бул мәселени (6.1.6)-толқын теңлемесинің жәрдеминде шешиўимиз керек. Бул теңлемеді

$$\mathbf{A} = 0, \quad e\Phi = V = -\frac{Ze_0^2}{r} \quad (6.1.17)$$

Бундай жағдайда төмендегидей теңлемеге ийе боламыз:

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

Соңғы теңлемеді потенциал энергия ўақыттан ғарезсиз болғанлықтан стационар жағдайға өтиўге болады. Оның ушын улыўма энергиядан (улыўма  $E + m_0 c^2 > 0$  энергияны биз оң шама деп есаплаймыз) бөлекшениң меншикли энергиясы болған  $m_0 c^2$  энергиясын айырып аламыз:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E + m_0 c^2) t \right]. \quad (6.1.19)$$

Буннан кейин энергия операторы болған

$$E\psi(\mathbf{r}, t) = (E + m_0 c^2) \psi(\mathbf{r}) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E + m_0 c^2) t \right] \quad (6.1.20)$$

операторының тәсирин есапқа алып (6.1.18)-теңлемени

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

түрине алып келемиз.

Шредингер теориясындағыдай соңғы теңлемениң шешимин

$$\psi = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (6.1.22)$$

формасында излеймиз. Бундай жағдайда радиаллық бөлим ушын

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

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

$$A = \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \left[ 1 - \left( 1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right)^2 \right], \quad (6.1.24)$$

$$B = \frac{m_0 Z e_0^2}{\hbar^2} \left[ 1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right].$$

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

Релятивистлик эффектлерди есапқа алыў менен А ҳәм В турақлыларының мәнислириниң дәллигин арттырыў релятивистлик толқын теңлемесиниң шешиминиң характерине қандай да бир тәсир жасай алмайды (Шредингер

теңлемесінің шешіміне салыстырғанда). (6.1.23)-теңлемеді қосымша  $\frac{Z^2\alpha^2}{r^2}$  қосымша ағзасының пайда болуын тартысуға сәйкес келетінін қосымша релятивистік потенциал энергиясын киргизіліуі сыпатында қарауға болады. Қашықтыққа кері пропорционал бұл потенциал энергия айырым жағдайларда шешімнің характерін өзгерте алады. Бұл жағдайда кейінірек гәп етеміз.

Ең дәлеліп  $r \rightarrow 0$  шегіндегі асимптотикалық  $R_0$  шешімін изертлейміз.

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

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

Бұл теңлемесінің шешімін

$$R_0 = Cr^s$$

түрінде излейміз. Бундай жағдайда  $s$  ти анықлау үшін шешімі

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

түріндегі

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

теңлемесін шешеміз. Бұл жағдайда

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

Егер

$$Z\alpha < 1/2$$

теңсізлігі орынланатуғын болса екі  $s_1$  хәм  $s_2$  түбірі де  $l=0, 1, 2, \dots$  шамасының қалеген мәнісінде жақыйқы түбірге ийе болады. Бұл жағдайда биз  $rR_0$  шамасы нолге тарқалмауы  $R_0$  шешімі менен шекленсек болады (яғный бұл жағдайда  $C_2=0$  шәрті орынланады). Усының менен бирге  $E < 0$  ( $A > 0$  теңсізлігі орынланғанда)  $r \rightarrow \infty$  шегінде толқын функциясы үшін аңлатпада экспоненциаллық түрде кемейетуғын шешім менен шеклениуге болады.

Екі тәрәптен де кемейетуғын шешімлер менен шеклениу энергияның спектри үшін Шредингер теориясында алынғандай аңлатпаны береді (бұл жағдайда  $\frac{B}{\sqrt{A}} = n_r + l + 1 = n$  теңлемесіндегі  $l$  ди  $s_1$  шамасына алмастыру керек). Бундай жағдайда меншикли мәніслерди анықлау үшін

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

теңлемесіне ийе боламыз. Бұл теңлемеге  $A$  хәм  $B$  турақдыларының (6.1.24)-аңлатпа бойынша алынған мәніслерін қойып ( $n = n_r + l + 1$ )

$$E_{nl} = m_0 c^2 \left[ 1 + \frac{Z^2\alpha^2}{(n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - Z^2\alpha^2})^2} \right]^{-1/2} - m_0 c^2 \quad (6.1.30)$$

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

$$E_{nl} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left( \frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (6.1.31)$$

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

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

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

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

Экспериментте алынған мағлыўматлар менен салыстырыў Бальмер сериясы ушын сызықларға бөлиниўдиң ҳақыйқый кеңлигиниң (6.1.32)-формула бойынша алынған шамадан үш еседей киши екенлигин көрсетеди. Бундай қарама-қарсылықтың себеби мынадан ибарат: водород атомының қәддилериниң жуқа структурасы тек ғана энергия менен тезлик арасындағы байланыс пенен байланысly емес. Төменде көрсетилетуғындай бул жағдайда электронның спинин де, яғный меншикли механикалық моментин де есапқа алыў керек болады. Дәслеп Клейн-Гордон теңлемеси релятивистлик электронды тәрийиплеў ушын жарамлы деп есапланды. Бирақ бул спини нолге тең болған бөлекшениң қозғалыс теңлемеси болып табылады. Ал электронның спини болса  $1/2$  ге тең. Клейн-Гордон теңлемесин спинлери нолге тең пи-мезонлар ушын қолланыўға болатуғын болса керек. Мысалы, бул теңлеме дара жағдайда терис пи-мезонлардың ядроның дөгеррегінде айланыўын тәрийиплей алады. Тап усындай пи-мезоатомлар экспериментте алынды.

Ескериў. Ең ақырында (6.1.27)-теңлемеді

$$Z\alpha > 1/2 \quad (6.1.33)$$

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

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

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

Бул аңлатпада  $\gamma = \sqrt{Z^2\alpha^2 - 1/4}$ . Биз мәселемизди  $C_2 = 0$  хәм  $C_1 = 0$  шәрти менен шеклей алмаймыз. Себеби еки шешим де  $r \rightarrow 0$  шегинде бирдей сингулярлыққа ийе болады.

Сонлықтан  $l = 0$  болғанда үзликсиз спектр алынады. Бул дара жағдай бөлекшениң орайға “қулап түсиўине” мүмкиншилик береді.



## 6-2. Дирак теңлемеси

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

Квадрат түбирден қутылыу үшін теңликтің еки тәрәпин де квадратқа көтеріу керек. Усындай усыл менен спинге ийе емес бөлекшелердің қозғалысын тәрийиплейтуғын Клейн-Гордон теңлемеси алынған еди. Сонлықтан оны спини  $\frac{1}{2}$  ге тең ( $\hbar$  бирлигинде) электронлар үшін қолланыуға болмайды.

Басқа жол 1928-жылы Дирак тәрәпинен усынылды. Бул усыл (6.1.1)-қатнастың «линеаризациясына» алып келинеди. Бул спини  $\frac{1}{2}$  ге тең болған электрон үшін релятивисттик толқын теңлемесинің ашылыуын тәмийинледи. Классикалық Максвелл-Лоренц электродинамикасынан соңғы электрон ҳаққындағы тәлиматтың раўажланыуының аҳмийетли басқышы Дирактың теңлемеси менен байланыслы екенлигин атап өтемиз. Шредингердің релятивисттик емес квантлық механика менен Паули теңлемеси Дирак теңлемесинің базы бир жақынласыулары болып табылады.

а) Энергия операторының «линеаризациясы». Энергия менен импульс арасындағы релятивисттик қатнасты «линеаризация» қылыу үшін, яғный төрт ағзалыдан квадрат түбир алыу үшін (6.1.1)-теңлемени былайынша жазамыз:

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

Бул аңлатпада

$$p_0 = m_0 c, \quad p_1 = p_x, \quad p_2 = p_y, \quad p_3 = p_z. \quad (D.2)$$

Бундай жағдайда биз мынаған ийе боламыз:

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

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

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

Егер

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

теңлиги орынланатуғын болса, онда (D.4) аңлатпасы (D.3)-аңлатпаға сәйкес келеди, яғный төрт  $\alpha_{\mu}$  шамасы бир бири менен антикоммутацияланатуғын

$$\alpha_{\mu}\alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'}\alpha_{\mu} = 0, \quad \mu \neq \mu' \quad (\text{D.6})$$

болса олардың хәр биринің квадраты 1 ге тең болады

$$\alpha_{\mu}^2 = 1. \quad (\text{D.7})$$

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

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

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

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

Бул қыйыншылықтан өтиў ушын Дирак төрт қатарлы  $\sigma_n$  хәм  $\rho_n$  матрицаларының жыйнағын алыўды усынды. Бул матрицалар еки қатарлы матрицалар менен

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

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

қатнастарының жәрдеминде байланысқан.  $\sigma'_n$  арқалы Паули матрицалары белгиленген.

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

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

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

$$\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3 \quad \text{х.т.б.} \quad (\text{D.13})$$

$$\rho_1\rho_2 = -\rho_2\rho_1 = i\rho_3 \quad \text{х.т.б.} \quad (\text{D.14})$$

Соңғы қатнасты биз былайынша жаза аламыз:

$$\sigma_n\sigma_{n'} + \sigma_{n'}\sigma_n = \rho_n\rho_{n'} + \rho_{n'}\rho_n = 2\delta_{nn'}. \quad (\text{D.15})$$

Бул теңликлерге биз  $\sigma_n$  хәм  $\rho_{n'}$  шамаларының коммутативлигин қосыўымыз керек:

$$\sigma_n\rho_{n'} = \rho_{n'}\sigma_n. \quad (\text{D.16})$$

Бул коммутативликтің ҳақыйқатында да орын алатуғынлығын (D.9)- хәм (D.10)-

аңлатпалар бойынша тиккелей есаптар жүргізіу жолы менен исениуе болады.

(D.1) аңлатпасындағы  $\alpha_\mu$  матрицасы сыпатында Дирак

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

$$\alpha_0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}$$
(D.17)

матрицаларын алыуды усинды. Бул матрицалар (D.15)- хэм (D.16)-аңлатпаларға сәйкес (D.15)-шәртти қанаатландырады. Хақыйқатында да

$$\alpha_1^2 = \rho_1^2 \sigma_1^2 = I, \quad \alpha_0^2 = \rho_3^2 = 1,$$

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

$$\alpha_0 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_0 = \sigma_1 (\rho_3 \rho_1 + \rho_1 \rho_3) = 0$$
(D.18)

хэм тағы басқалар.

Бул матрицаларды жазыу арқалы биз төмендегилерди табамыз:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
(D.19)

б) Дирак теңлемеси. Тоқ пенен зарядтың тығызлығы.  $\alpha_\mu$  матрицаларының жәрдеминде линеаризация қылынған энрегия менен импульс арасындағы (D.1) қатнасына өтиу арқалы биз еркин бөлекше ушын Дирак теңлемесин аламыз

$$(E - H) \psi = 0. \quad (D.20)$$

Бул аңлатпада  $E$  хэм  $\mathbf{P}$  операторлары әдеттегидей төмендеги аңлатпалар түрінде жазылады

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

ал гамильтониан  $H$

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

аңлатпасының жәрдеминде анықланады.

Электрон векторлық хэм скаляр потенциаллары  $(\mathbf{A}, \Phi)$  болған электромагнит майданында қозғалатуғын болса да биз (D.20)- хэм (D.21)-теңлемелерден пайдалана береміз. Бирақ бул жерде толқын механикасының улыуға қағыйдаларына сәйкес энрегия менен импульс операторлары сыпатында олардың улыу маластырылған мәнислери алыныуы керек [Еске түсиреміз, олардың улыу маластырылған мәнислери

$$E \rightarrow F = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi,$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}.$$

схемасы бойынша табылатуғын еди (6.1.5)-аңлатпаға қараңыз]:

$$F = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi, \quad \mathbf{P} = -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}. \quad (\text{D.22})$$

Сонлықтан Дирак толқын теңлемесін электромагнит майданы бар болған жағдай ушын мына түрде жазамыз:

$$(F - c(\alpha \mathbf{P}) - \rho_3 m_0 c^2) \psi = 0. \quad (\text{D.23})$$

$\alpha$  хәм  $\rho_3$  матрицаларының қатар хәм бағаналар санына сәйкес  $\psi$  толқын функциясы төрт құраушыға ийе болуы керек. Толқын функциясының бул төрт құраушыларды бир бағанадан туратуғын бир матрицаға бириктиреміз:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.24})$$

Бул матрицаға түйинлес функция сыпатында бир қатардан туратуғын эрмитлик-түйинлес матрицаны түсінеміз:

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*). \quad (\text{D.25})$$

Солай етип (D.23)-Дирактың матрицалық теңлемеси төмендегидей төрт теңлемеден туратуғын системаға эквивалент екен:

$$\begin{aligned} (F - m_0 c^2) \psi_1 - c(P_x - iP_y) \psi_4 - cP_z \psi_3 &= 0, \\ (F - m_0 c^2) \psi_2 - c(P_x + iP_y) \psi_3 + cP_z \psi_4 &= 0, \\ (F + m_0 c^2) \psi_3 - c(P_x - iP_y) \psi_2 - cP_z \psi_1 &= 0, \\ (F + m_0 c^2) \psi_4 - c(P_x + iP_y) \psi_1 + cP_z \psi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (\text{D.26})$$

Комплексли түйинлес теңлеме де төмендегидей матрицалық теңлеме түрінде көрсетилиуі мүмкін:

$$\psi^+ (F - c(\alpha \mathbf{P}) - \rho_3 m_0 c^2) = 0. \quad (\text{D.27})$$

Бул теңлемеді  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  хәм  $-i\hbar \nabla$  операторларының өзіннің шеп тәрәпинде турған толқын функциясына тәсирін әдеттегидей емес түсиниу керек:

$$-\psi^+ i\hbar \nabla \rightarrow i\hbar \nabla \psi^+, \quad \psi^+ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^+. \quad (\text{D.28})$$

Солай етип (D.28)- хәм (D.27)-теңлемелерди былайынша жазыуға болады екен:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \psi - c \left( \alpha \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) \psi - \rho_3 m_0 c^2 \psi = 0, \quad (\text{D.29})$$

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi\right) \psi^+ - c \left( (i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \psi^+ \alpha \right) - m_0 c^2 \psi^+ \rho_3 = 0. \quad (\text{D.30})$$

(D.29)-теңлемени шеп тәрептен  $\psi^+$  ке, ал (D.30)-теңлемени оң тәрептен  $\psi$  ге көбейтсек хәм екинши теңлемени бириншиден алсақ төмендегидей қатнасты аламыз:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi^+ \psi + \text{div} \psi^+ \alpha \psi = 0 \quad (\text{D.31})$$

хәм бул теңлемени итималлықтың тығызлығы  $\rho$  ушын хәм тоқтың тығызлығы  $j$  ушын үзликсизлик теңлемеси сыпатында қарауымызға болады:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \text{div} j = 0. \quad (\text{D.32})$$

Бул жерде

$$\rho = e \psi^+ \psi, \quad j = ec \psi^+ \alpha \psi.$$

Соңғы формуладан  $c\alpha$  матрицасын тезлик операторы деп түсіндірсе болатуғынлығы көринип тур.

Егер (D.32) теңлигин ашсақ төмендегини табамыз:

$$\rho_0 = \frac{\rho}{e} = \psi^+ \psi = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_3^* \psi_3 + \psi_4^* \psi_4, \quad (\text{D.33})$$

яғный  $\rho_0$  бир элементтен туратуғын матрица болып табылады хәм сонлықтан ол әдеттеги функцияға сәйкес келеди.

Тап сол сыяқлы, төмендегидей аңлатпаның орын алатуғынлығын аңсат көрсетиуге болады

$$\begin{aligned} \frac{j_x}{ec} = \psi^+ \alpha_1 \psi &= (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \begin{pmatrix} \psi_4 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix} = \\ &= \psi_1^* \psi_4 + \psi_2^* \psi_3 + \psi_3^* \psi_2 + \psi_4^* \psi_1. \end{aligned} \quad (\text{D.34})$$

Бул жерде Клейн-Гордон теңлемесинен айырмаға ийе жағдай сыпатында  $\rho_0$  тығызлығының оң мәнисте анықланатуғын шама екенлигин көреміз. Бирақ бул жағдайдың өзи Дирак теориясында  $\rho_0$  шамасын бөлекшелердің тығызлығы деп қарауға болмайтуғынлығын көрсетеди. Клейн-Гордон теориясындағыдай Дирак теориясында да электронлар менен бирге оң зарядқа ийе бөлекшелер болған позитронлардың бар болуы мүмкін. Бул қаққында кейинирек гәп етиледі (Дирак теңлемесинің толық шешімлерин изертлегенде).

в) Лоренц түрлендіріулеріндегі хәм кеңісліктегі айландырыулардағы толқын функциясының трансформациялық қасиеттері. Арнаулы салыстырмалық теориясы бойынша физикалық нызамлар координаталар системасын Лоренц бойынша сайлып алыудан фәрезли емес болуы керек. Сонлықтан Максвелл теңлемелері сыяқлы Клейн-Гордон теңлемесі де, Дирак теңлемесі де Лоренц түрлендіріулеріне қарата инвариант болуы керек.

Дирак толқын функциясының трансформациялық қасиеттерін изертлейміз.

Бұның үшін ең дәлсіз Лоренц түрлендіріулерін жазамыз

$$ct' = ct \operatorname{ch} \gamma - x \operatorname{sh} \gamma, \quad x' = x \operatorname{ch} \gamma - ct \operatorname{sh} \gamma, \quad y' = y, \quad z' = z. \quad (\text{D.35})$$

Бұл аңлатпада

$$\operatorname{ch} \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \operatorname{sh} \gamma = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Бұл түрлендіріуді қалеген төрт өлшемлі вектор, соның ишінде зарядтың тығызлығы да, тоқтың тығызлығы да қанаатландырады:

$$cp' = cp \operatorname{ch} \gamma - j_x \operatorname{sh} \gamma, \quad j'_x = j_x \operatorname{ch} \gamma - cp \operatorname{sh} \gamma, \quad j'_{y,z} = j_{y,z}.$$

Бұл шамалардың анықламасынан келип шыққан халда Дирак теориясы бойынша төмендегилерге ийе боламыз:

$$\begin{aligned} \psi'^+ \psi' &= \psi^+ (\operatorname{ch} \gamma - \alpha_1 \operatorname{sh} \gamma) \psi = \psi^+ e^{-\gamma \alpha_1} \psi, \\ \psi'^+ \alpha_1 \psi' &= \psi^+ (\alpha_1 \operatorname{ch} \gamma - \operatorname{sh} \gamma) \psi = \psi^+ \alpha_1 e^{-\gamma \alpha_1} \psi, \\ \psi'^+ \alpha_{2,3} \psi' &= \psi^+ \alpha_{2,3} \psi. \end{aligned} \quad (\text{D.36})$$

Биз бұл жерде  $\alpha_1^{2n} = 1$ ,  $\alpha_1^{2n+1} = \alpha_1$ , ал  $n$  пүтин сан болғанлықтан

$$e^{-\gamma \alpha_1} = \operatorname{ch} \gamma \alpha_1 - \operatorname{sh} \gamma \alpha_1 = \operatorname{ch} \gamma - \alpha_1 \operatorname{sh} \gamma$$

теңдиклериниң орын алатуғынлығын инабатқа алдық.

Соңғы қатнастарды қанаатландырыу үшін биз

$$\begin{aligned} \psi' &= \left( \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \alpha_1 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \right) \psi = e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \psi, \\ \psi'^+ &= \psi^+ \left( \operatorname{ch} \frac{\gamma}{2} - \alpha_1 \operatorname{sh} \frac{\gamma}{2} \right) = \psi^+ e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \end{aligned} \quad (\text{D.37})$$

деп есаплауымыз керек. Бундай жағдайда

$$\alpha_1 e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} = e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \alpha_1, \quad \alpha_2 e^{-\frac{\gamma}{2} \alpha_1} = e^{\frac{\gamma}{2} \alpha_1} \alpha_2 \quad (\text{D.38})$$

екенлигин есапқа алып (D.36)-қатнастың дурыслығын аңсат көрсетиуге болады. (D.37)-аңлатпадан толқын функцияларының вектор сыпатында емес (пүтин ү мүйешлері), тензор сыпатында да емес (еки еселенген ү мүйешлері), түрлениуі  $\gamma/2$  мүйеши менен характерленетуғын ярым векторы сыпатында түрленетуғынлығы көринип тур. (D.37)-нызам бойынша түрленетуғын шамалар *спинорлар* ямаса *ярым рангалы тензорлар* атамасын алды.

Жоқарыда келтирилгендей усыллар менен әдеттеги кеңисликтік түрлендіріулерде (мысалы  $z$  көшериниң дөгерегінде мүйешине бурғанда) спинордың

$$\psi' = e^{i\sigma_3 \frac{\varphi}{2}} \psi, \quad \psi'^+ = \psi^+ e^{-i\sigma_3 \frac{\varphi}{2}} \quad (\text{D.39})$$

нызамы бойынша түрленетуғынлығын көрсетіуіге болады. Соңғы аңлатпалар тоқ векторы үшін исленген түрлендириулерден келип шығады:

$$\begin{aligned}j'_x &= j_x \cos \varphi + j_y \sin \varphi, \\j'_y &= j_y \cos \varphi - j_x \sin \varphi, \\j'_z &= j_z,\end{aligned}\tag{D.40}$$

ал бул шамалардың Дирак теориясында былайынша көрсетилиуі мүмкин:

$$\begin{aligned}\psi'^+ \alpha_1 \psi' &= \psi^+ (\alpha_1 \cos \varphi + \alpha_2 \sin \varphi) \psi, \\ \psi'^+ \alpha_3 \psi' &= \psi^+ \alpha_3 \psi\end{aligned}\tag{D.41}$$

хәм тағы басқалар. Бул аңлатпаға (D.39) дан  $\psi'$  тың мәнисин қойып хәм

$$\begin{aligned}\alpha_1 e^{i\sigma_3 \frac{\varphi}{2}} &= \alpha_1 \left( \cos \frac{\varphi}{2} + i\sigma_3 \sin \frac{\varphi}{2} \right) = \left( \cos \frac{\varphi}{2} - i\sigma_3 \sin \frac{\varphi}{2} \right) \alpha_1 = \\ &= e^{-i\sigma_3 \frac{\varphi}{2}} \alpha_1, \quad \alpha_3 e^{i\sigma_3 \frac{\varphi}{2}} = e^{i\sigma_3 \frac{\varphi}{2}} \alpha_3\end{aligned}$$

екенлигин есапқа алып (D.40) қатнасына келемиз.

### 6-3. Дирак электронының орайлық күшлер майданындағы қозғалысы

а) Қозғалыс муғдарының орбиталық, спинлик хәм толық моментлери. Ең дәслеп орайлық күшлер майданындағы қозғалыс муғдары моментиниң сақланыу нызамын изертлеймиз:

$$V = e\Phi(r).\tag{6.3.1}$$

Шредингердің релятивистлик емес теориясында бундай жағдайда қозғалыс муғдарының орбиталық моментиниң сақланатуғынлығы белгили

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}].$$

Бирақ электронның спини де есапқа алынатуғын Дирак теориясында қозғалыс муғдарының орбиталық моменти операторы гамильтониан менен коммутацияланбайды, яғный қозғалыс интегралы болып табылмайды. Хақыйқатында да гамильтонианды

$$H = c\alpha_1 p_x + c\alpha_2 p_y + c\alpha_3 p_z + \rho_3 m_0 c^2 + V(r)\tag{6.3.2}$$

түринде көрсетип  $L_z = (x p_y - y p_x)$  қураушысының биринши еки ағзасы менен коммутацияланбайтуғынлығын көремиз:

$$H L_z - L_z H = c\alpha_1 p_y (p_x x - x p_x) - c\alpha_2 p_x (p_y y - y p_y).\tag{6.3.3}$$

Буннан кейин

$$(p_x x - x p_x) = (p_y y - y p_y) = \frac{\hbar}{i}$$

екенлигин есапқа алып

$$H L_z - L_z H = \frac{c\hbar}{i} (\alpha_1 p_y - \alpha_2 p_x) \neq 0 \quad (6.3.3a)$$

аңлатпасын аламыз.

Спинге ийе бөлекшелердің моментинің сақланыу нызамын табыу үшін

$$\begin{aligned} H \sigma_3 - \sigma_3 H &= c p_x \rho_1 (\sigma_1 \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_1) + c p_y \rho_1 (\sigma_2 \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_2) = \\ &= \frac{2c}{i} (\alpha_2 p_x - \alpha_1 p_y) \end{aligned} \quad (6.3.4)$$

аңлатпасын да пайдаланамыз.

Орбиталық  $\mathbf{L}$  хәм спинлик

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \quad (6.3.4a)$$

моментлердің қосындысынан туратуғын қозғалыс муғдарының толық моменти үшін оператор

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (6.3.4)$$

түсинигин киргизип (6.3.3a) хәм (6.3.3b) теңліклеринен қозғалыс муғдарының тек қураушысының ғана (бул жағдайда  $J_z$  қураушысының) гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын, яғный сақланыу нызамын қанаатландыратуғынлығын көрийге болады.

б) Момент операторлары үшін орын алмастыруу қатнастары. Орбиталық моменттің қураушыларының бир бири менен коммутацияланбайтуғынлығы және

$$L_x L_y - L_y L_x = i\hbar L_z \quad (6.3.5)$$

хәм тағы басқа да  $(x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x \dots)$  орын алмастыруу қатнастарына бағынатуғынлығы мәлим.

Меншикли момент операторы (спин) Дирак матрицаларына пропорционал

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma}. \quad (6.3.6)$$

Сонлықтан оның қураушылары өз-ара коммутацияланбауы керек. Паулидің еки қатарлы матрицалары  $\boldsymbol{\sigma}'$  хәм Дирактың төрт қатарлы матрицалары бирдей коммутацияланыу қажеттіліктеріне бағынатуғын болғанлықтан биз Дирак спини үшін Паули спини үшін табылғандай орын алмастыруу қатнастарын табамыз, яғный

$$S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z \quad (6.3.6a)$$

хәм тағы басқалар.

Орбиталық хәм спин моментлеринің қураушылары операторлар болып табылатуғын хәм бирдей болған орын алмастыруу қатнастарына бағынатуғын



болса да олар бири бири менен коммутацияланады. Себеби бул кураушыларды пайда ететуғын операторлар пүткиллей хәр қыйлы хәм ғәрезсиз характерлерге ийе (тууындылары хәм матрицалар).

Толық момент операторының кураушылары ушын бул ескертиўлерди есапқа алып (19.5)- хәм (19.6а)-орын алмастырыўлары қатнастарына сәйкес орын алмастырыў қатнастарын аламыз

$$\begin{aligned} J_x J_y - J_y J_x &= (L_x + S_x)(L_y + S_y) - (L_y + S_y)(L_x + S_x) = \\ &= i\hbar (L_z + S_z). \end{aligned}$$

Буннан төменги аңлатпаларды табамыз:

$$\begin{aligned} J_x J_y - J_y J_x &= i\hbar J_z, \\ J_y J_z - J_z J_y &= i\hbar J_x, \\ J_z J_x - J_x J_z &= i\hbar J_y. \end{aligned} \quad (6.3.7)$$

Кейинги еки орын алмастырыў қатнастары бириншиден  $x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x, \dots$  цикллық орын алмастырыў жолы менен алынды.

Толық моменттиң квадраты операторы

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2(\mathbf{LS}) \quad (6.3.8)$$

үш ағзаға ийе. Биринши ағза

$$L^2 = -\hbar^2 \nabla_{\Phi, \varphi}^2 \quad (6.3.9)$$

$Y_l^m$  шар функциясына тәсир еткенде оның меншикли мәнислері төмендегилерге тең болады:

$$L^2 \rightarrow \hbar^2 l(l+1), \quad (6.3.9a)$$

яғный орбиталық момент  $l$  ге тең болған ( $\hbar$  бирликлериндеги) жағдайлардағы халларды тәрийиплейди.

Екинши ағза

$$S^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 = s(s+1) \hbar^2 \quad (6.3.10)$$

сан болып табылады хәм  $\hbar$  бирликлериндеги спинди тәрийиплейди. Оның мәнисі  $s = 1/2$ .

Ең ақырында үшінши ағза

$$2(\mathbf{LS}) = 2(L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z) \quad (6.3.10a)$$

спин-орбиталық байланыс деп аталатуғын байланысты характерлейди.  $L_z$  хәм  $S_z$  моментлериниң кураушылары айырым түрде (6.3.9)- оператор менен де, (6.3.10)- оператор менен де коммутацияланбайтуғынлығын атап өтемиз.

Хақыйқатында да (6.3.5)- хәм (6.3.6а)-теңликлерди есапқа алған халда

$$\begin{aligned} L_z(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})L_z &= i\hbar(L_yS_x - L_xS_y), \\ S_z(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})S_z &= i\hbar(L_xS_y - L_yS_x) \end{aligned} \quad (6.3.11)$$

теңлигинің орын алатуғынлығын аңсат көрсетіуіге болады.

Буннан усы ағза менен тек толық моменттің коммутацияланыуының кереклиги

$$(L_z + S_z)(\mathbf{LS}) - (\mathbf{LS})(L_z + S_z) = 0, \quad (6.3.12)$$

ал соның менен бирге толық моменттің квадраты

$$J_z J^2 - J^2 J_z = 0 \quad (6.3.)$$

коммутацияланатуғынлығы көринип тур.

Жоқарыда айтылғанларға байланысly қозғалыс муғдарының толық моменти сақланатуғын мәселелерде (мысалы орайлық күшлер майданындағы спинлик бөлекше) толық моменттің квадраты хәм оның қураушыларының қәлегени (мысалы  $\mathbf{z}$  көшерине түсірилгени) улыұмалық меншикли функцияға ийе бола алады. Толық моменттің еки қураушысының бир ұақытта улыұмалық толқын функциясына ийе бола алмайтуғынлығын аңғарамыз. Себеби олар бир бири менен коммутацияланбайды [(6.3.7)-аңлатпаға қараңыз].

в) Моментлерди қосыу. Толық момент ушын сақланыу нызамын қанаатландыратуғын толқын функциясының мүйешлик бөлимін қараймыз. Толық момент орбиталық хәм спинлик моментлердің қосындысына тең болғанлықтан бундай мәселе момнетлерди қосыуға байланысly мәселе деп аталады

Эпиұайылық ушын Паули жақынласыуы менен шекленеміз. Бул жағдайда спин  $\sigma'$  еки қатарлы матрицалар жәрдемінде тәрийипленеди. Бул жағдайда шешимди еки қураушыға ийе матрица түрінде излеймиз

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (6.3.14)$$

ал бул матрицаның элементлери арасында қозғалыс муғдарының толық момнетинің сақланыу нызамын есапқа алатуғын байланыстың орнатылыуы керек:

$$\begin{aligned} J^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &= \left( \mathbf{L} + \frac{1}{2} \hbar \sigma' \right)^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \\ J_z \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} &= \left( L_z + \frac{1}{2} \hbar \sigma'_3 \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar m_j \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.3.15)$$

Бул аңлатпада  $\mathbf{L} = [r\mathbf{p}]$  арқалы орбиталық момент операторы, ал  $\sigma'$  арқалы Паулидің еки қураушыға ийе матрицалары белгиленген. (6.3.15)-теңдемелердің шешимлерін

$$\Psi_1 = C_1 Y_l^{m'}, \quad \Psi_2 = C_2 Y_l^m \quad (6.3.16)$$

түрінде излеймиз<sup>5</sup>. Бул аңлатпада  $Y_l^m$  арқалы шар функциялары белгиленген. Бундай жағдайда

<sup>5</sup>  $m$  менен  $m'$  тың хәр қыйлы мәнислерінде тек орбиталық моменттің квадраты ғана сақланады, бірақ оның  $z$  көшерине түсірилген проекциясы сақланбайды.

$$L^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l(l+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (6.3.17)$$

екенлигин есапқа алып (6.3.15), (19.12) хәм (19.13) аңлатпаларына сәйкес

$$\frac{1}{\hbar} (\sigma' L) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (19.18)$$

аңлатпасына ямаса

$$\frac{1}{\hbar} [(L_x - iL_y) \Psi_2 + L_z \Psi_1] = q \Psi_1, \quad (6.3.18)$$

$$\frac{1}{\hbar} [(L_x + iL_y) \Psi_1 - L_z \Psi_2] = q \Psi_2$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада

$$q = j(j+1) - l(l+1) - 3/4. \quad (6.3.18a)$$

Буннан кейин

$$L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m$$

хәм

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar \sqrt{(l+1 \pm m)(l \mp m)} Y_l^{m \pm 1}$$

аңлатпалардан пайдаланамыз. Нәтийжеде төмендигилерге ийе боламыз:

$$L_z Y_l^m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m = m\hbar Y_l^m, \quad (6.3.19)$$

$$(L_x \pm iL_y) Y_l^m = -\hbar \sqrt{(l+1 \pm m)(l \mp m)} Y_l^{m \pm 1}. \quad (6.3.20)$$

Буннан, егер биз  $m' = m - 1$  деп есапласақ (6.3.18)-аңлатпаданың оң хәм шеп тәреплериндеги шар функцияларын қысқарта алатуғынымыз көринип тур. Бундай жағдайда коэффициентлер арасындағы мынадай қатнастарды аламыз

$$\begin{aligned} (q - m + 1) C_1 + \sqrt{(l+1-m)(l+m)} C_2 &= 0, \\ \sqrt{(l+1-m)(l+m)} C_1 + (q + m) C_2 &= 0. \end{aligned} \quad (6.3.21)$$

Детерминанттың нолге тең болыу шәртинен шешимлердің мүмкин болған еки типине сәйкес келетуғын  $q$  шамасының еки мәнисин табамыз<sup>6</sup>:

$$q = l, \quad j = l + \frac{1}{2}, \quad C_2 = -\sqrt{\frac{l-m+1}{l+m}} C_1, \quad (6.3.22)$$

$$q = -(l+1), \quad j = l - \frac{1}{2}, \quad C_2 = \sqrt{\frac{l+m}{l-m+1}} C_1. \quad (6.3.23)$$

<sup>6</sup> Усының менен бир қатарда  $j$  шамасының терис мәниске ийе болған жағдайдағы да шешим бар. Бул шешимди биз есапқа алмаймыз.

Моменттерди қосқанда шар функциялары арасындағы қатнасты анықлайтуғын  $C_1$  хәм  $C_2$  коэффициентлерин Клебш — Гордан коэффициентлери деп атайды.

$C_1^2 + C_2^2 = 1$  нормировка шәртин пайдаланып,  $j = l + 1/2$ ,  $l = 0, 1, \dots$  болған жағдайда биринши типтеги шешимди былайынша жазамыз<sup>7</sup>:

$$\Psi^{(j=l+1/2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_l^{m-1} \\ -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}} Y_l^m \end{pmatrix} = Y_{l,m}^{(j=l+1/2)}. \quad (6.3.24)$$

$j = l - 1/2$ ,  $l = 1, 2, \dots$  болған жағдайда болса (шешимнің екінши типі) толқын функциясы мынаған тең:

$$\Psi^{(j=l-1/2)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} Y_l^{m-1} \\ \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_l^m \end{pmatrix} = Y_{l,m}^{(j=l-1/2)}. \quad (6.3.25)$$

Бул аңлатпада  $Y_{lm}^{(j)}$  арқалы шар спинорлары белгиленген. Олар ушын ортонормировка шәрти

$$\oint d\Omega Y_{lm}^{(j)+} Y_{lm}^{(j)} = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6.3.26)$$

түрінде жазылады. Бул аңлатпада  $j = l + 1/2$  болған жағдай спинлик хәм орбиталық моментлер өз-ара параллель, ал  $j = l - 1/2$  болған жағдай спинлик хәр орбиталық моментлер өз-ара антипараллель болған жағдайға сәйкес келеди. Егер  $Y_{lm}^{(j)+}$  шар спиноры бир қатарға ийе матрица болса хәм шар функцияларының ортонормировкаланғанлығын дыққатқа алсақ (6.3.26)-шәрт аңсат алынады. (6.3.24) хәм (6.3.25) шар спинорлары әдеттеги шар функцияларының спинорлық улыўмаластырылыўы болып табылады орайлық күшлер майданындағы ярым шешимнің мүйешлик бөлеги болып табылады.

$\Psi$  функциясы ушын бул шешимлерди (6.3.4)-аңлатпаға қойсақ қозғалыс муғдарының толық моментиниң  $J_z$  проекциясының  $J_z = \hbar m_j$  мәнислерин қабыл ететуғынлығын табамыз. Усының менен бирге  $m_j$  квантлық сан  $m_j = m - 1/2$  мәнислерине тең. (6.3.24)-аңлатпадан көринип турғанындай биринши тип шешимлери ушын ( $j = l + 1/2$ )  $m$  саны  $-l$  ( $m_j = -l - 1/2 = -j$ ) ден  $l + 1$  ( $m_j = l + 1/2 = j$ ) шамасына шекем өзгереді. Тап сол сыяқлы (6.3.25)-аңлатпаға сәйкес екінши тип шешим ушын ( $j = l - 1/2$ )  $m$  саны  $-l + 1$  ( $m_j = -j$ ) шамасынан  $l$  шамасына ( $m_j = j$ ) шекем өзгереді<sup>8</sup>. Солай етип бизиң нәтийжелеримиз мыналарға алып келинеди: қозғалыс муғдарының толық моментиниң квадраты

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j = \begin{cases} l \pm 1/2, & l \neq 0, \\ 1/2, & l = 0 \end{cases} \quad (6.3.26a)$$

меншикли мәнислерине ийе, яғный орбиталық момент сыяқлы квантланады, бирақ бул жағдайда *ишки квантлық сан* деп аталатуғын  $j$  саны ярым пүтин мәнислерди

<sup>7</sup> Биз шар функциялары арасындағы байланыстың тек спин-орбиталық тәсирлесиў бар болған жағдайда ғана орын алатуғынлығын аңғарамыз.

<sup>8</sup> Бул шеклердин орын алыўындағы себеп мынадан ибарат:  $|m| > l$  шеклеринде  $Y_l^m$  шар функциясы нолге айланады.

қабыллайды<sup>9</sup>. Моменттің  $z$  көшеріне түсірілген проекциясының меншикли мәніслери де ярым пүтин квантлық санлар менен характерленеди:

$$J_z = \hbar m_l, \quad m_l = -j, \dots, +j. \quad (6.3.27)$$

(6.3.8)-(6.3.10) қатнастардан хәм (6.3.26а) квантланыў қағыйдасынан келип шыққан халда спектроскопияда әхмийетли болған скаляр көбеймелердің квантланыў формулаларын алыўға болады

$$(\mathbf{LS}) = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) = \frac{\hbar^2}{2}\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\} \quad (6.3.28)$$

хәм

$$(\mathbf{JS}) = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 + S^2) = \frac{\hbar^2}{2}\{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)\}. \quad (6.3.29)$$

г) Спини бар бөлекшелердің орайлық күшлер майданындағы қозғалысы Ротатор. Егер бизлер спинлик эффектлерди есапқа алып бөлекшениң орайлық күшлер майданындағы қозғалысын релятивистлик емес жақынласыўда изертлегимиз келсе, онда қозғалыс муғдарының орбиталық моменти сақланатуғын қатнастарды характерлейтуғын  $Y_l^m$  шар функцияларының орнына биз қозғалыс муғдарының толық моменти (орбиталық плюс спинлик) сақланатуғын ҳалларды характерлейтуғын  $Y_{lm}^{(j)}$  шар спинорларын қолланыўымыз керек болады.

Релятивистлик емес жақынласыўларда шар спинорлары  $l$  квантлық санларның бирдей мәнісине ийе шар функцияларынан қуралатуғын болғанлықтан бундай жағдайда радиаллық бөлими ушын спинге ийе емес, релятивистлик емес бөлекшеге тийисли болған теңлемени аламыз, яғный

$$\nabla_r^2 R + \left( \frac{2m_0 E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0. \quad (6.3.30)$$

Солай етип орайлық күшлер майданындағы электронлар ушын толқын функциялары

$$\Psi = R Y_{lm}^{(j)} \quad (6.3.31)$$

түріне ийе болады. Бул аңлатпадағы  $Y_{lm}^{(j)}$  спиноры (6.3.24)- ямаса (6.3.25)- аңлатпаның жәрдемінде анықланады.

Дара жағдайда ротатор ушын биз  $r = a = \text{const}$  деп, ал толқын функциясының радиаллық бөлимин бирге тең ( $R=1$ ) деп алыўымызға болады. Бундай жағдайда спинлик эффектлер ротатордың энергиясы ушын ҳеш қандай қосымша ағзаларды бермейди. Ал ротатордың энергиясы спинсиз бөлекше ушын келтирилип шығарылған аңлатпа менен анықланады, яғный

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 a^2}. \quad (6.3.32)$$

Ал толқын функциясына келетуғын болсақ, онда ол  $Y_{lm}^{(j)}$  шар спиноры менен характерленеди. Сонлықтан бизлер ең дәслеп  $l$ ,  $m_l$  хәм  $j$  квантлық санлар ушын

<sup>9</sup> Бул атама мәселениң тарийхы менен байланыслы:  $j$  саны спектроскопистлер тәрәпинен спин ашылмастан бурын эмперикалық түрде киргизилген еди. Ал “ишки” деген термин сол ўақытлары анық емес болған бөлекшелердің қандай да бир ишки қәсийетин сәўлелендирди.

таңлап алыу қағыйдасын (правило отбора) табыуымыз керек. Бул таңлап алыу қағыйдалары тек ғана ротатор қаққындағы мәселеде орын алып қоймай, орайлық күшлер майданында қозғалатуғын бөлекшеге тийисли қалеген мәселеде, соның ишинде водород атомына арналған мәселеде де орын алыуы керек.

Спинге ийе емес бөлекшелер ушын табылған таңлап алыу қағыйдаларының орнына енди төмендегидей қағыйдаларды жазамыз:

$$\langle l'm'j' | q | lmj \rangle = \oint (Y_{l'm'}^{(j')})^+ q Y_{lm}^{(j)} d\Omega, \quad (6.3.33)$$

ал кейинги формуладағы  $q$  шамасы үш мәниске ийе болады:

$$q = z = \cos \vartheta, \quad q = x \pm iy = \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}. \quad (6.3.34)$$

Бул формулада әпиуайылық ушын ротатордың радиусын бирге тең деп аламыз:  $a=1$ .

Егер шар спинорларының орнына (6.3.24) ямаса (6.3.25) мәнислерин қойсақ, онда бул матрицалық элемент ушын төмендегини аламыз

$$\begin{aligned} \langle l'm'j' | q | lmj \rangle = \\ = D^{(j')} \oint (Y_{l'm'}^{m'-1})^* q Y_{lm}^{m-1} d\Omega + C^{(j')} \oint (Y_{l'm'}^m)^* q Y_{lm}^m d\Omega. \end{aligned} \quad (6.3.35)$$

Бул жерде (6.3.35)-аңлатпадағы еки интегралдың да

$$\begin{aligned} \langle l'm' | z | lm \rangle &= \oint (Y_{l'm'}^m)^* \cos \vartheta Y_{lm}^m d\Omega, \\ \langle l'm' | x + iy | lm \rangle &= \oint (Y_{l'm'}^m)^* \sin \vartheta e^{i\varphi} Y_{lm}^m d\Omega, \\ \langle l'm' | x - iy | lm \rangle &= \oint (Y_{l'm'}^m)^* \sin \vartheta e^{-i\varphi} Y_{lm}^m d\Omega \end{aligned}$$

интегралларына дәл сәйкес келетуғынлығы көремиз (бул формулалар релятивистлик емес ротатор ушын тығызлықтың тарқалыуына тийисли). Сонлықтан  $l$  хәм  $m$  квантлық санлар ушын спини жоқ ротатор ушын табылған таңлау қағыйдаларын табамыз, яғный

$$\Delta m_l = 0, \pm 1. \quad (6.3.37)$$

Егер  $j$  ушын таңлап алыу қағыйдасын анықлағанда бирдей типтеги шешимлер менен характерленетуғын халлар арасында өтиулер болатуғын болса ( $j' = l' + 1/2 \rightarrow j = l - 1/2$  ямаса  $j' = l' - 1/2 \rightarrow j = l + 1/2$ ) (6.3.24) хәм (6.3.25) аңлатпаларынан  $D^{(j')}$  хәм  $C^{(j')}$  коэффицентлериниң оң мәниске ийе болатуғынлығы хәм бундай өтиулердиң руқсат етилгенлиги көринеди. Бул жағдайда  $j$  квантлық санының мүмкин болған өзгериси орбиталық квантлық сан  $l$  диң де өзгериси менен бирге жүзеге келиуі керек, яғный  $\Delta j = \Delta l = \pm 1$ .

Егер өтиулер шешимлердиң хәр қыйлы типлери менен характерленетуғын халлар арасында жүзеге келетуғын болса ( $j' = l' + 1/2 \rightarrow j = l - 1/2$  ямаса  $j' = l' - 1/2 \rightarrow j = l + 1/2$ ), онда  $\Delta l = \pm 1$  хәм  $\Delta j = 0, +2, -2$  ушын үш мүмкин болған мәнислерди аламыз. Бирақ бул жерде  $D^{(j')}$  менен  $C^{(j')}$  коэффицентлериниң хәр қыйлы белгилерге ийе болатуғынлығын есапқа алыу керек. Соның менен бирге  $\Delta j = \pm 2$  болған жағдайда ағзалардың екеуі де бир бирин компенсация қылады хәм сонлықтан бундай өтиу қадаған етиледі.  $\Delta j = 0$  болған жағдайда бул айырма нолге айланбайды, бирақ еки ағза хәр қыйлы белгилер менен киретуғын болғанлықтан

бирдей типтегі шешімдерге сәйкес келетүгін қаллар арасындағы өтиўлердегі ( $\Delta j = \pm 1$  болған жағдай) нурланыў интенсивлигине қарағанда нурланыў интенсивлиги жүдә қалсиз болады.

Солай етип спин есапқа алынған жағдайда орайлық күшлер майданындағы квантлық санлар ушын таңлап алыў қағыйдалары төмнедегидей болады:

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \pm 1, \\ \Delta j = \begin{cases} \pm 1 & (\text{әдеттегидей интенсивлик}), \\ 0 & (\text{қалсиреген интенсивлик}). \end{cases} \quad (6.3.38)$$

#### 6-4. Дирак теңлемесиниң толық шешими

Бул параграфта бизлер тек оң энергияға ийе қалларды емес, ал терис энергияға ийе қалларды есапқа алып Дирак теңлемесиниң толық шешимин толығырақ изертлеймиз. Усыған байланысly терис мәнисли энергияға ийе қалдың талланыўы позитронның бар екенин болжаўға, яғный элементар бөлекшелердиң жаңа фундаменталлық қасийетиниң ашылыўына, атап айтқанда антибөлекшелердиң бар екенлигиниң қам бир элементар бөлекшелердиң басқа элементар бөлекшелерге айланыўының ашылыўына алып келди.

а) Оң қам терис энергияларды есапқа алып еркин бөлекше ушын Дирак теңлемесиниң шешими. Биринши гезекте еркин бөлекше ушын жазылған Дирак теңлемесин изертлеймиз. Ол былайынша жазылады:

$$\left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi = 0, \quad (6.4.1)$$

ал бул аңлатпадағы гамильтониан

$$H = \frac{\hbar c}{i} (\alpha \nabla) + \rho_3 m_0 c^2 \quad (22.2)$$

формуласының жәрдемінде бериледи.

Еркин қозғалысты орайлық күшлердиң тәсириндегі қозғалыстың дара жағдайы сыпатында қараўға болады қам сонлықтан толық моменттиң сақланыў нызамы орынланады [(6.3.4)-аңлатпаға қараңыз]

$$\mathbf{J} = [\mathbf{r}\mathbf{p}] + \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} = \text{const}. \quad (6.4.3)$$

Квантлық механиканың тилинде бул жағдай қозғалыс муғдарының толық моментиниң гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын аңғартады

Егер биз толық моменттиң импульстиң бағытындағы проекциясын алатуғын болсақ  $[\mathbf{r}\mathbf{p}]$  орбиталық моменттен қутыла аламыз. Себеби орбиталық моменттиң импульстиң бағытындағы проекциясы нолге тең:

$$(\mathbf{p} [\mathbf{r}\mathbf{p}]) = p_x (y p_z - z p_y) + p_y (z p_x - x p_z) + p_z (x p_y - y p_x) = 0.$$

Буннан былай орынланатуғын есаплаўлар ушын импульс бағытындағы қозғалыс муғдарының моментиниң проекциясының операторын киргизген қолайлы ( $\frac{1}{2}\hbar$  бирликлеринде)

$$S = 2 \frac{(\mathbf{Jp})}{\hbar p} = \frac{(\sigma \nabla)}{\sqrt{\nabla^2}} = \frac{(\sigma \nabla)}{ik}. \quad (6.4.4)$$

Бул аңлатпада импульс  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ , ал  $\nabla^2$  операторының меншикли мәнісі  $-k^2$  шамасына тең.

Бул оператордың (6.4.2)-гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығы анық. Буньң ушын тиккелей  $HS - SH = 0$  теңлигин пайдаланып тексерип көриўге болады.

Дирек теңлемесиниң дара шешимин

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{L^{3/2}} b e^{-ic\varepsilon K t + i\mathbf{k} \mathbf{r}} \quad (6.4.5)$$

түринде излеймиз. Бул аңлатпада

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} \quad (6.4.6)$$

төрт қатарлы матрица болып табылады.  $L^3$  арқалы тийкарғы параллелопипедтиң көлеми белгиленген, ал  $\mathbf{k}(k_1, k_2, k_3)$  толқын векторының құраўшылары  $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  пүтин санлары менен  $k_1 = \frac{2\pi}{L} n_1$  хәм тағы усы сыяқлы аңлатпалар арқалы байланысқан

$E$  энергиясы

$$K = \sqrt{k^2 + k_0^2}$$

шамасы менен

$$E = c\hbar\varepsilon K \quad (6.4.7)$$

аңлатпасы арқалы байланысқан. Бул аңлатпаларда  $k = \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}$  хәм  $k_0 = \frac{m_0 c}{\hbar}$ .  $\varepsilon$  параметри ҳәзирше белгисиз болып қалады.

$S$  операторының (6.4.2)-гамильтониан менен коммутацияланатуғынлығын есапқа алып биз толқын фунциясынан қосымша шәртти бағындыра аламыз:

$$\frac{(\sigma \nabla)}{ik} \psi(\mathbf{k}) = s \psi(\mathbf{k}). \quad (6.4.8)$$

Бул аңлатпада  $s$  шамасы (6.4.4)-оператордың меншикли мәнісі болып табылады.

(6.4.5)-толқын функциясын (6.4.8)- хәм (6.4.1)-теңлемелреге қойып биз  $b$  матрицасын анықлаў ушын еки теңлеме табамыз:

$$(ks - (\sigma \mathbf{k})) b = 0, \quad (6.4.9)$$

$$(\varepsilon K - s\rho_1 k - \rho_3 k_0) b = 0. \quad (6.4.10)$$

(D.9)- хәм (D.10)-аңлатпалардағы  $\sigma_n$  хәм  $\rho_n$  матрицаларының мәнислерин және (6.4.6)-теңликти есапқа алып соңғы еки матрицалық теңлемени теңлемелер системасы түринде жазамыз:



$$\begin{aligned}
(sk - k_3) b_{1,3} &= k_{12}^* b_{2,4}, \\
(sk + k_3) b_{2,4} &= k_{12} b_{1,3}, \\
(\varepsilon K - k_0) b_{1,2} &= sk b_{3,4}, \\
(\varepsilon K + k_0) b_{3,4} &= sk b_{1,2}.
\end{aligned}
\tag{6.4.11}$$

Бул аңлатпада

$$k_{12} = k_1 + ik_2, \quad k_{12}^* = k_1 - ik_2.$$

Егер

$$b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} A_1 B_1 \\ A_1 B_2 \\ A_2 B_1 \\ A_2 B_2 \end{pmatrix} \tag{6.4.12}$$

деп болжасақ соңғы теңлемелерди биз қанаатландыра аламыз. Бундай жағдайда  $A_{1,2}$  хәм  $B_{1,2}$  шамаларын анықлау үшін төмендегилерге ийе боламыз:

$$\begin{aligned}
(sk - k_3) B_1 &= k_{12}^* B_2, \\
(sk + k_3) B_2 &= k_{12} B_1,
\end{aligned}
\tag{6.4.13}$$

$$\begin{aligned}
(\varepsilon K - k_0) A_1 &= sk A_2, \\
(\varepsilon K + k_0) A_2 &= sk A_1.
\end{aligned}
\tag{6.4.13a}$$

(6.4.13)-теңдиктен  $s$  үшін меншикли мәнислерди аңсат табыуға болады:

$$s = \pm 1, \tag{6.4.14}$$

ал (6.4.13a) теңлигинен  $\varepsilon$  ниң мәнисин аңсат табамыз:

$$\varepsilon = \pm 1. \tag{6.4.14a}$$

Демек  $\varepsilon$  параметри энергияның белгисин анықлайды екен. Буннан кейин

$$\begin{aligned}
b^+ b &= b_1^* b_1 + b_2^* b_2 + b_3^* b_3 + b_4^* b_4 = \\
&= 1/4 (A_1^* A_1 + A_2^* A_2) (B_1^* B_1 + B_2^* B_2) = 1
\end{aligned}
\tag{6.4.15}$$

нормировка шәртин есапқа алып

$$\begin{aligned}
A_1 &= \sqrt{1 + \varepsilon \frac{k_0}{K}}, \quad A_2 = \varepsilon s \sqrt{1 - \varepsilon \frac{k_0}{K}}, \\
B_1 &= s e^{-1/2 i \varphi} \sqrt{1 + s \cos \vartheta}, \\
B_2 &= e^{1/2 i \varphi} \sqrt{1 - s \cos \vartheta}
\end{aligned}
\tag{6.4.16}$$

екенлигин табамыз. Бул аңлатпаларда  $\vartheta$  менен  $\varphi$  шамалары  $k$  толқын векторының сфералық мүйешлері болып табылады ( $k_{12} = k \sin \vartheta e^{i\varphi}$ ,  $k_3 = k \cos \vartheta$ ).

Алынған нәтижелердің анализи үшін улыўмалықты бузбай биз импульсти  $z$  көшери бағытында жайластырамыз ( $\vartheta = 0$ ,  $\varphi = 0$ ,  $k_x = k_y = 0$ ,  $k_z = k$ ). төрт

шешим сәйкес келеди. Бул шешимлер энергияның ( $\varepsilon = \pm 1$ ) ямаса спиннің ( $s = \pm 1$ ) белгиси менен айрылады. Олар  $b$  матрицасы ушын төмендегидей мәнислерди береді:

$$b(k, s = 1, \varepsilon = \pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 \pm \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \pm \sqrt{1 \mp \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (6.4.17)$$

$$b(k, s = -1, \varepsilon = \pm 1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 \pm \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \mp \sqrt{1 \mp \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix}.$$

$s = 1$  шешими спин импульске бағытланған жағдайды, ал  $s = -1$  болған жағдай спин импульске қарама-қарсы бағытланған жағдайды тәрийиплейди.  $\varepsilon$  шамасының белгиси энергияның белгисин анықлайды. Бул матрицалардың

$$b^+(k, s', \varepsilon') b(k, s, \varepsilon) = \delta_{ss'} \delta_{\varepsilon\varepsilon'}$$

ортонормировка шәртин қанаатландыратуғынлығын көрсетиу қыйын емес.

б) Еркін электронның спинлик қәсийетлерин изертлеу. Тек оң мәнисли энергиялар менен шекленип бөлекшелердің спинлик қәсийетлерин изертлеймиз ( $\varepsilon = 1$ ). Импульс  $z$  көшери менен бағытлас болған жағдайдағы толқын функциясы төмендегидей түрге ийе болады:

$$\begin{aligned} \psi(k, \varepsilon = 1) = \\ = \frac{1}{L^{3/2}\sqrt{2}} \left[ C_1 \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{pmatrix} + C_{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 + \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ -\sqrt{1 - \frac{k_0}{K}} \end{pmatrix} \right] e^{-icKt + ikz}. \end{aligned} \quad (6.4.18)$$

Спиннің қураушысы импульс пенен бағытлас болған жағдайда ғана емес, ал спиннің қәлеген қураушысы (орбиталық моментсиз) қозғалыс интегралы болып қалатуғын жағдайда да спин түсинигин киргизиу мүмкин болып шығады. Еркін қозғалыу орын алған жағдайда бул сақланатуғын спин мынаған тең ( $\frac{1}{2}\hbar$  бирлигинде):

$$\sigma^0 = \frac{\hbar(\sigma k)}{k^2} + \rho_3 \frac{\sigma k^2 - \hbar(\sigma k)}{k^2}. \quad (6.4.19)$$

(6.4.19)-аңлатпа бойынша анықланған спиннің сақланыуы оның қәлеген қураушысының гамильтониан менен коммутацияланыуына байланыслы келип шығады

Егер импульс  $z$  көшери бағытында бағытланған болса, онда  $\sigma^0$  операторының  $\sigma_z^0$  импульси бағытындағы хәм импульске перпендикуляр бағытланған  $\sigma_x^0$  хәм  $\sigma_y^0$  қураушылары сәйкес төмендегилерге тең:

$$\sigma_z^0 = \frac{(\sigma k)}{k} = \sigma_3, \quad \sigma_x^0 = \rho_3 \sigma_1, \quad \sigma_y^0 = \rho_3 \sigma_2.$$

Бұл оператордың меншикли мәнісін  $s^0$  арқылы белгілеп төмендегілерді табамыз:

бойлық қураушысы үшін

$$s_3^0 = \int \psi^\dagger \sigma_3 \psi d^3x = C_1^* C_1 - C_{-1}^* C_{-1};$$

көлденең қураушылар үшін

$$s_1^0 = \int \psi^\dagger \rho_3 \sigma_1 \psi d^3x = C_{-1}^* C_1 + C_1^* C_{-1},$$

$$s_2^0 = i (C_{-1}^* C_1 - C_1^* C_{-1}).$$

Егер биз толқын функциясын хәр қыйлы энергияларға ийе (соның ишінде хәм терис энергияға да ийе) халлардың қосындысы сыпатында сайлап алатуғын болсақ, онда орташа мәнісін есаплағанда ўақытлық ағзалар жоғалады, себеби улыўмаласқан спин операторы гамильтониан менен коммутацияланады. Усының менен бирге қозғалыс интеграллары да (яғный гамильтониан менен коммутацияланатуғын) болып табылатуғын хәр қыйлы операторлардың коммутативлик емеслиги системаның айныған система екенлигин билдиреди (берілген импульс пенен энергияға спиннің хәр қыйлы бағытлары сәйкес келеди). Усыған байланысly  $s^0$  векторының орташа мәнісін  $C_1$  хәм  $C_{-1}$  амплитудаларының хәр қыйлы комбинацияларынан ғәрезли болады.  $s^0$  векторының үш өлшемлі бирлік вектор екенлигин көрсетиўге болады. Себеби  $(s_1^0)^2 + (s_2^0)^2 + (s_3^0)^2 = (C_1^* C_1 + C_{-1}^* C_{-1})^2 = 1$ , ал оның қураушылары Лоренц бурыўларында

$$\begin{aligned} s_3'^0 &= s_3^0 \cos \gamma + s_1^0 \sin \gamma, \\ s_1'^0 &= s_1^0 \cos \gamma - s_3^0 \sin \gamma, \quad s_2'^0 = s_2^0 \end{aligned} \quad (6.4.20)$$

нызамы бойынша түрленеди. Бұл аңлатпада

$$\begin{aligned} \cos \gamma &= \frac{\beta_1 - \beta \cos \vartheta}{B}, \quad \sin \gamma = \frac{\beta \sqrt{1 - \beta_1^2} \sin \vartheta}{B}, \\ B &= \sqrt{(\beta_1 - \beta \cos \vartheta)^2 + \beta^2 (1 - \beta_1^2) \sin^2 \vartheta}. \end{aligned} \quad (6.4.21)$$

Бұл аңлатпада бөлекшениң дәслепки координаталар системасындағы тезлиги болған  $c\beta_1 = c \frac{k}{K}$  шамасы  $z$  көшери бағытында бағытланған.  $z$  көшери менен арасындағы мүйеш  $\vartheta$  болған штрихланған координаталар системасының тезлиги  $c\beta$  шамасына тең. Штрихланған координаталар системасының тезлиги  $zx$  тегислигинде жатыўы керек.  $s_3'^0$  шамасы болса импульстің жаңа бағытына салыстырғандағы спиннің бойлық қураушысы. Буннан үш өлшемлі бирлік вектордың Лоренц түрлендириўлеринен кейин де үш өлшемлі бирлік вектор болып қалатуғынлығы келип шығады.

Енди спираллықты анықлаймыз. Спираллық деп  $s_3^0 = 1$  ( $C_1 = 1$ ,  $C_{-1} = 0$ ) шәрти орынланғанда импульске салыстырғандағы поляризация векторының айланыўын айтамыз. Бұл жағдайда (6.4.18)-аңлатпадан көринип турғанындай

$$\sigma_x^0 \psi = -i \sigma_y^0 \psi. \quad (6.4.21a)$$

Усының менен бирге толқын функциясының уақыттан ғәрезлигин есапқа алып (яғный  $\psi \sim e^{-icKt}$  ғәрезлигин) айланыудың ху тегислигинде (х көшеринен у көшерине қарай) жүзеге келетуғынлығын табамыз (бул тегислик импульске, яғный z көшерине перпендикуляр). Демек оң координаталар системасында  $s_3^0 = 1$  болған жағдай оң бурғы бойынша спираллықты, ал шеп координаталар системасында шеп бурғы болйынша спираллықты тәрийиплейди. Бул нәтийже тәбийий нәтийже болып табылады. Себеби  $s_3^0 = (s^0 k^0)$  скаляр көбеймесінде  $k^0$  импульстиң бирлик поляр векторы, ал  $s^0$  болса спиннің бирлик аксиаллық векторы болып табылады. Оң координаталар системасынан терис координаталар системасына өткенде  $k^0$  векторының бағыты қарама-қарсы бағытқа өзгереді, ал  $s^0$  аксиаллық бирлик векторы бағытын өзгертпейди (яғный бул жағдайда тек спираллықтың математикалық формасы ғана өзгереді).

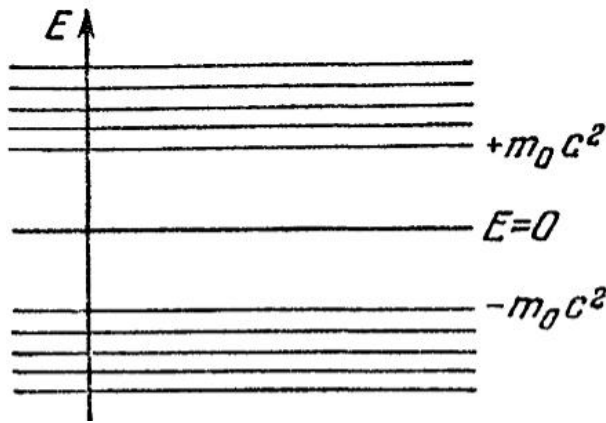
в) Терис энергияға ийе қаллар. «Тесикшелердің» Дирак теориясы. Позитронның ашылыуы. Оң мәниске ийе энергияға ийе қаллар менен ( $\varepsilon = 1$ ) [(6.4.18) шешимін қараңыз] Дирак теориясы терис мәнисли энергияларға сәйкес келетуғын ( $\varepsilon = -1$ ) шешимлерге ийе:

$$E = -c\hbar K. \quad (6.4.216)$$

Бизлер терис энергияға ийе шешимлердің тек Дирак теориясына тән емес екенлигин, бундай шешимлердің қәлеген релятивистлик теорияда, хәтте классикалық теорияда да пайда болатуғынлығын аңғарамыз. Ғақыйқатында да еркін бөлекшениң энергиясы оның массасы хәм импульси менен былайынша байланысқан

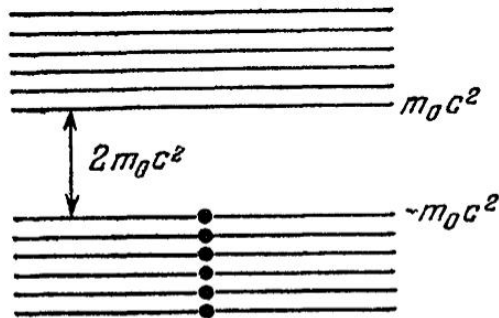
$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}$$

Демек еркін бөлекшениң энергиясы ушын теңдей хуқыққа ийе еки шешим орын алады деген сөз. Соның менен бирге энергияның мәнислеринің еки областы (оң хәм терис мәниске ийе энергиялар)  $2m_0 c^2$  шамасына тең интервалға айрылған (сүўретте келтирилген). Биринши рет қарағанда терис энергияға ийе қаллар ғақыйқатлыққа сәйкес келмейтуғындай болып көринеди. Себеби терис энергиялар областы шексизликке шекем даўам етеди ( $E = -\infty$ ) хәм сонлықтан ең төменги энергетикалық қал болмайды. Ондай болса әдеттеги қаллардың хеш қайсысы да орнықты бола алмайды, себеби барлық уақытта да төменирек энергетикалық қалға спонтан өтиўдің жүзеге келиўи мүмкин. Соның менен бирге терис массаға (яғный терис мәнисли энергияға) ийе бөлекшениң қәсийетлери әдеттегидей болмайды: мысалы оң массаға ийе бөлекше менен тартысыўда ол сол оң массаға ийе бөлекшеден ийтерилиўи керек. Дара жағдайда қыялымызда массаларының белгилери хәр қыйлы болған электронлар бир бири менен тәсир етискенде оң массаға ийе электронның терис массаға ийе электроннаң қашыўы, ал терис массаға ийе электронның оң массаға ийе электронды қуўыўи керек болады. Себеби олардың салмақ орайының бир ноқатта қозғалмай қалыўи керек.

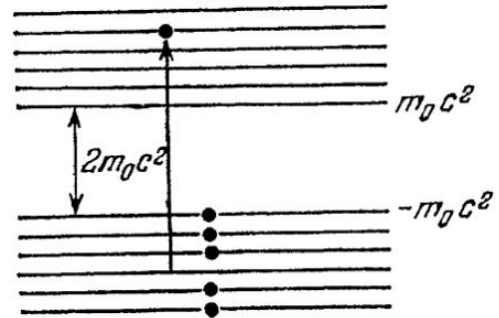


Еркин Дирак бөлекшесинің энергиясының мүмкін болған қаддилери

Классикалық физикада терис мәниске ийе болған халлар мәниске ийе емес хәм сонлықтан бундай халларды қарамайды. Себеби бөлекше қозғалғанда оның энергиясы үзликсиз өзгереді хәм оң энергияға ийе халдан терис мәнисли энергияға ийе халға энергияның секирмели түрде  $\Delta E \geq 2m_0c^2$  шамасына өзгериуі мүмкін емес. Сонлықтан ўақыттың баслағыш моментиндеги терис энергияға ийе халларды жоқ етип, буннан кейин оларды пүткиллей итибарға алмаўымыз мүмкін.



Электрон-позитрон вакуумның ноллик халының схемасы.



Электрон-позитрон жубының пайда болыў схемасы.

Квантлық теориядағы жағдай пүткиллей басқаша. Бул теория бойынша тек үзликсиз спектрге емес, ал дискрет спектрге ийе халлар арасында да өтиўлердиң жүзеге келиуі мүмкін. Енди терис энергияға ийе халларды механикалық түрде дыққаттан алып таслаўға болмайды. Себеби  $+m_0c^2$  энергиясына ийе халдан  $-m_0c^2$  энергияға ийе халға өтиўдиң итималлығы нолге тең болмай шығады.

Электронлардың терис энергияға ийе халларға өтиўинен қутылыў ушын Дирак 1931-жылы терис энергияға ийе қаддилердиң барлығы толған деген идеяны усинды (сүүретте келтирилген). Усының нәтийжесинде әдеттеги жағдайларда оң энергияға ийе электронлар терис энергияға ийе қаддилерге өте алмайды.

Енди  $E > 2m_0c^2$  энергияға ийе гамма-квант вакуумниң терис энергияға ийе электронына тәсир етип оны оң энергияға ийе халға өткереді деп ойлайық. Бундай жағдайда мысалы ядро тәрепинен жутылған гамма-кванттың орнына оң энергияға ийе электрон хәм оның менен бирге электронлар тәрепинен толтырылған терис энергетикалық қаддилер фонында «тесикше» пайда болады (Электрон-позитрон жубының пайда болыў схемасы сүүретте көрсетилген).

Дирак гипотезасының ең аҳмийетли табысы соннан ибарат, ол бул «тесикшени» массасы оң хәм электронның массасына тең, бирақ заряды қарама-қарсы белгиге ийе бөлекше (позитрон) деп түсиндирди. Хақыйқатында да дәслепки моментте бөлекшелер болмаған болсын. Бундай жағдайда фонның ноллик энергиясы  $E_{\text{вак}}$  терис энергиялық халлардағы электронлардың  $n$ -энергияларының қосындысына

тең:

$$E_{\text{вак}} = \sum_{n'_-} E_{n'_-}, \quad (6.4.22)$$

ал ноллик заряд болса

$$e_{\text{вак}} = - \sum_{n'_-} e_0 \quad (6.4.23)$$

шамасына тең.

Солай етип ҳақыйкый бөлекше болмаған жағдайда «тесикшелер» теориясы көз-қараслары бойынша оң энергияға ийе барлық ҳаллардың бос екенлигин, ал терис энергияға ийе барлық ҳаллардың ийеленген екенлигин аңғартады. Бул ҳалды биз ноллик ҳал деп қабыл етемиз (Электрон-позитрон вакуумның ноллик ҳалының схемасы сүўретте көрсетилген).

Электрон  $n_-$  терис энергияға ийе ҳалдан  $n_+$  оң энергияға ийе базы бир ҳалға өткен жағдайда системаның энергиясының улыўмалық өзгериси

$$\Delta E = E_{n_+} + \sum'_{n'_-} E_{n'_-} - \sum_{n'_-} E_{n'_-} \quad (6.4.24)$$

ямаса

$$\Delta E = E_{n_+} - E_{n_-} = E_{n_+} + |E_{n_-}| \quad (6.4.25)$$

шамалары пайда болған бөлекшелердің оң энергияларының қосындысына тең болады<sup>10</sup>.

Зарядқа қатнасы бар тап сондай таллаў «тесикшеге» сәйкес келетуғын бөлекшениң зарядының электронның зарядына қарама-қарсы болатуғынлығын көрсетеди:

$$e = -e_{n_+} - \sum'_{n'_-} e_0 + \sum_{n'_-} e_0 = -e_{n_+} + e_{n_-} = -e_0 + e_0. \quad (6.4.)$$

Солай етип электронның энергиясы терис болған ҳалдан энергиясы оң болған ҳалға өтиўи (бундай өтиўдің энергиясы  $2m_0c^2$  шамасынан үлкен болмаған гамма-квант жутылғанда жүзеге келетуғынлығы түсиникли) еки бөлекшениң туўылыўына алып келеди. Бул жағдайда электронның терис энергияға ийе ҳалын («тесикше») оң  $+e_0$  зарядқа ийе ҳәм оң энергияға ийе бөлекше тәрәпинен ийеленген ҳал деп қараўға болады<sup>11</sup>. Дирак тәрәпинен болжап айтылған усындай бөлекше Андерсон тәрәпинен 1932-жылы космослық нурлардың құрамында ашылды.

Енди Дирак теориясы электрон менен бир қатарда толқын функциясы Дирак теңлемесин энергияның оң мәниси менен ҳәм зарядтың да оң мәниси менен қанаатландыратуғын позитронды да қосып алады.

<sup>10</sup> Сумма белгисиниң үстиндеги штрих ( $\Sigma'$ ) сумма алыўдың  $n'_- = n_-$  ҳалдан басқа барлық  $n'_-$  ҳаллары бойынша алынатуғынлығын аңғартады.

<sup>11</sup> Майданның квантлық теориясының усылларын пайдаланып зарядтың белгисине қарата симметриялы болған электрон-позитрон вакуумның теориясын дәретиўге болатуғынлығын аңғарамыз. Бирақ хәтте биз қарап атырған электронлар менен позитронларға қарата симметриялы болмаған теория (электрон – бөлекше, ал позитрон «тесикше») тийкарында да бөлекшелердің бир бирине айланыўыны менен байланыслы болған көп кубылысларды көргизбелі түрде түсиндириўге болады.

Дирак теориясы биз қарап атырған процеске қарама-қарсы процессти де бийкарламайды: «тесикше» бар болса оң мәнисли энергияға ийе электрон терис энергияға ийе қалға өте алады. Бул жағдайда электрон хәм позитрон гамма-квантларына айланады. Бундай айланыста орын алатуғын энергия менен импульстиң сақланыў нызамлары пайда болған гамма-квантларының санының екиден кем болмаўын талап етеди.

г) Электрон-позитронлық вакуум ҳаққында түсиник. Электромагнит вакуум менен бир қатарда электрон-позитронлық вакуум хәм басқа да бөлекшелердиң вакуумлери бар. Барлық майданлар ушын мәлим дәрежеде улыўмалық болған екинши гезектеги квантланыў усылы электрон-позитрон вакуумның тәсирин есапқа алыўға мүмкиншилик бередиди.

Хәзирги ўақытлардағы майданның квантлық теорияда ҳәр қыйлы бөлекшелердиң вакуумлериниң қәсийетлери оғада әҳмийетли орынды ийелейди. Вакуум биринши гезекте бөлекшелер арасындағы тәсирлесийўлерди тәмийинлейди. Мысалы электромагнит тәсирлесийўди (Кулон нызамын) еки зарядтың электромагнит вакуум арқалы тәсирлесийўиниң нәтийжеси деп қараўға болады. Бундай жағдайда бир электрон «псевдофотон» (оны көбинесе виртуаллық фотон деп атайды) шығарады, ал екиншиси оны жутады. Солай етип электр майданы электромагнит вакуумның қозған ҳалы болып табылады.

Екинши тәрәптен вакуум өзине тән резервуар болып табылады. Вакуумнан ҳақыйқый бөлекшелерди (олар туўылғанда) алады (бөлип алады) хәм аннигиляцияның нәтийжесинде сол бөлекшелер вакуумге «өтеди» (ямаса «вакуумге айланады»). Электрон-позитронлық вакуум мәниси бойынша биз ушын таныс болған электронлардың терис энергиялы ҳаллардағы фоны болып табылады. тилекке қарсы бундай вакуум классикалық аналогқа ийе емес хәм сонлықтан электромагнитлик вакуум жағдайындағыдай ярым классикалық түсиндирийге мүмкиншилик бермейди. Ядроның Кулон майданы (электр майданы) бул вакуумды поляризациялай алады (яғный электрон диэлектрикте жайласқан жағдайдағыдай аўхалда болады). Усының нәтийжесинде

$$V_{э.-п} = -\frac{4}{15} e_0^2 \alpha \left( \frac{\hbar}{m_0 c} \right)^2 \delta(r) \quad (6.4.27)$$

аңлатпасы менен анықланатуғын қосымша тәсирлесийў энергиясы пайда болады.

Электрон-позитрон вакуум әсиресе электронның магнитлик қәсийетине күшли тәсир етеди. Усының салдарынан электронның магнит моменти Бор магнетонынан үлкен болатуғынлығын Швингер көрсетти:

$$\mu = -\mu_0 \left( 1 + \frac{\alpha}{2\pi} \right). \quad (6.4.28)$$

Электронның магнит моментине қосылатуғын қосымта

$$\Delta\mu_{э.-п} = -\left( \frac{\alpha}{2\pi} - 0,328 \frac{\alpha^2}{\pi^2} + 0,13 \frac{\alpha^3}{\pi^3} \right) \mu_0 = -0,0011596\mu_0 \quad (6.4.29)$$

аңлатпасының жәрдемінде анықланады хәм алынған шама радиоспектроскопиялық усыллардың жәрдемінде алынған эксперименталлық нәтийжелерге жақсы сәйкес келеди [(20.35)-аңлатпаға қараңыз].

д) Позитрон ушын толқын теңлемеси. Энергия ушын терис мәниске ийе шешимлердиң электромагнит майданы бар болған жағдайлардағы шешимлердиң физикалық мәнисин анықлаў ушын Дирактың

$$\left\{ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi - c \left[ \alpha_1 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \psi = 0 \quad (6.4.30)$$

тийкарғы теңлемесі менен бир қатарда комплексли-түйінлес теңлемени де жазамыз:

$$\left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + c \left[ \alpha_1 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right) - \alpha_2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \psi^* = 0. \quad (6.4.31)$$

Егер  $\alpha_1^* = \alpha_1, \alpha_2^* = -\alpha_2, \alpha_3^* = \alpha_3, \rho_3^* = \rho_3$  екенлигин, ал

$$\psi^* = \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \psi_3^* \\ \psi_4^* \end{pmatrix} \quad (6.4.32)$$

комплексли-түйінлес толқын функциясының эрмитлик-түйінлес

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \quad (6.4.33)$$

толқын функциясынан айырмаға ийе екенлигин есепқа алғанда (6.4.31)-аңлатпаны аңсат алыўға болады.

Комплексли-түйінлес теңлемениң эрмитлик-түйінлес теңлемеге пүткиллей эквивалент екенлигин аңғарамыз:

$$\psi^+ \left\{ \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) - c \left[ \alpha_1 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} = 0. \quad (6.4.34)$$

Бул аңлатпаның дурыслығына (6.4.31)-теңлемени де, (6.4.34)-теңлемени де төрт теңлемелер системасы түрінде жазсақ хәм толқын функциясынан соң турған оператордың

$$\psi^+ \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -\frac{\partial \psi^+}{\partial t}, \quad \psi^+ \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow -\frac{\partial \psi^+}{\partial x} \quad (6.4.35)$$

тәсир етиў қағыйдаларын есепқа алсақ (6.4.34)-аңлатпаның дурыслығына аңсат исениўге болады

Дирактың комплексли-түйінлес теңлемесінде

$$\psi^* = i\alpha_2 \rho_3 \psi \quad (6.4.36)$$

алмастырыўын әмелге асырамыз. Бундай жағдайда Дирак матрицаларының коммутация қағыйдаларын есепқа алып толқын функциясы ушын



$$\left\{ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi - c \left[ \alpha_1 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{c} A_x \right) + \alpha_2 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} A_y \right) + \alpha_3 \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c} A_z \right) \right] - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \tilde{\Psi} = 0, \quad (6.4.37)$$

теңлемесін табамыз. Бул теңлеме позитронның қозғалысын тәрийиплейди. Себеби бул теңлеме тийкарғы (6.4.30)-теңлемеден  $e$  зарядының  $-e$  менен алмасқанлығы менен айрылады. Усының менен бирге  $\psi(r, t) = e^{-i \frac{|E|}{\hbar} t} \psi(r)$  қалы оң энергиялы қал, ал  $\psi^*(r, t) = e^{-i \frac{|E|}{\hbar} t} \psi^*(r)$  қалы терис энергияға ийе қал деп түсиндирилетуғын болғанлықтан биз  $\tilde{\Psi}$  функциясындағы энергияны  $\psi^*$  функциясындағы энергиядан басқа деп түсиниұимиз керек. Басқа сөзлер менен айтқанда (6.4.37)-теңлемедегі оң энергияға ийе қалларды позитронларға, ал терис энергияға ийе қалларды электронларға тийисли деп қараў керек.

## Мәселелер хәм олардың шешимлери

### 1-мәселе. Итималлықтың сақланыуы нызамы

$\psi^* \psi d^3x$  аңлатпасы  $d^3x$  көлеміндеги бөлекшени табыудың итималлығына тең етип алынатуғын

$$\int \psi^* \psi d^3x = 1 \quad (1.1)$$

нормировка шәртинің итималлық бойынша интерпретациясы сақланыуы нызамына сөзсиз алып келеди. Бул нызамды хәм классикалық көз-қарасларда турып алынған нәтийжелердің мүмкин болған интерпретациясын табыңыз.

Шешими. Биз излеп атырған сақланыуы нызамы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{s} = 0 \quad (1.2)$$

үзликсизлик теңлемеси түрине ийе болыуы керек. Бул аңлатпада

$$\rho = \psi^* \psi \quad (1.3)$$

арқалы итималлық тығызлығы, ал  $\mathbf{s}$  арқалы итималлық тоғының тығызлығы белгиленген.  $\rho$  шамасы  $\psi$  хәм  $\psi^*$  шамаларына қарата бисызықлы форма (билинейная форма) болғанлықтан (1.2)-теңлемени еки жағдайда да бир

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

гамильтонианға ийе еки Шредингер теңлемесинің комбинациясының нәтийжесінде алыу мүмкин:

$$H\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad H\psi^* = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t}. \quad (1.5)$$

Солай етип

$$\psi^* H\psi - \psi H\psi^* = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

теңлемесин аламыз. (1.2)-аңлатпаға сәйкес бул қатнастың шеп тәрепи дивергенция түрінде жазылыуы керек. Ұақықатында да

$$\psi^* H\psi - \psi H\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{div} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

Сонлықтан  $\mathbf{s}$  векторы ушын

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (1.6)$$

аңлатпасын жаза аламыз.

Алынған нәтижеге классикалық интерпретация беріу үшін төмендегідей таллауларды өткереміз.

Егер  $\rho$  шамасын да,  $s$  шамасын да  $m$  массаға көбейтсек, онда нәтижеде биз массаның тығызлығы  $\rho_m$  ди хәм импульс тығызлығы  $\mathbf{g}$  ны аламыз:

$$\rho_m = m\rho, \quad \mathbf{g} = m\mathbf{s}. \quad (1.7)$$

Бундай жағдайда үзликсизлік теңлемесин массаның сақланыу нызамы сыпатында интерпретациялау (түсіндіріу) мүмкін. Тап усындай жоллар менен бөлекшениң заряды  $e$  ге көбейтип зарядтың тығызлығы  $\rho_e$  ге хәм электр тоғының тығызлығы  $j$  ге келемиз:

$$\rho_e = e\rho, \quad \mathbf{j} = e\mathbf{s}. \quad (1.8)$$

Ал (1.2)-теңлеме зарядтың сақланыу нызамына айланады.

Массаның сақланыу нызамының хәм зарядтың сақланыу нызамына уқсас екенлиги дыққатқа ылайық. Себеби олардың екеуі де бир бөлекшениң конвекциялық тоғы менен байланысly.

(1.6)-хәм (1.7)-аңлатпалардан алынған Шредингер майданының толық импульси ушын жазылған

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{g} d^3x = \frac{\hbar}{2i} \int (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) d^3x$$

аңлатпасын екінши қосылыушыны бөлеклеп интеграллаудың жәрдеминде

$$\mathbf{p} = \int \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi d^3x \quad (1.9)$$

түрине алып келиуіге болады. Бул  $\psi$  квантлық халдағы  $(\hbar/i) \nabla$  импульс операторының орташа мәнісине берілген анықлама менен сәйкес келеди (3-мәселеге қараңыз).

## 2-мәселе. Шредингердің вариациялық принципі

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi = E\psi \quad (2.1)$$

Шредингер теңлемесин энергия ушын вариациялық принцип пенен алмастырыңыз.

Шешими. (2.1)-дифференциаллық теңлемениң қәлеген  $\psi$  шешими байланыс теңлемесин қанаатландырады (бул дискрет спектр халлары ушын дурыс):

$$\int \psi^* \psi d^3x = 1. \quad (2.2)$$

Сонлықтан энергия ушын аңлатпа (2.1)-теңлемени  $\psi^*$  функциясына көбейтиу хәм буннан кейин барлық кеңіслік бойынша интеграллау жолы менен алынады:

$$E = \int \psi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi \right] d^3x. \quad (2.3)$$

Грин формуласын есапқа алып биринши ағзаны бөлеклерге бөліп интеграллау

$$\int \psi^* \nabla^2 \psi d^3x = \oint \psi^* \nabla \psi df - \int (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) d^3x \quad (2.4)$$

аңлатпасын береді. Егер  $\psi$  шешими үлкен  $r$  қашықтықтарында

$$\psi \sim r^{-3/2-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0$$

аңлатпасына салыстырғанда әстерек киширейетуғын болса ғана (2.2)-нормировкалаушы интеграл бар болады. Бірақ бұл шәрт орынланғанда шексіз қашықталатын сфераның бети бойынша алынған (2.4) теги интеграл жоғалады. Сонлықтан (2.3)-аңлатпаны былайынша жаза аламыз

$$E = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) + \psi^* V(r) \psi \right] d^3x. \quad (2.5)$$

Бұл теңлік  $\psi$  хәм  $\psi^*$  функцияларына қарата да, (2.2)-нормировка шәртіне қарата да симметриялы. Сонлықтан биз оны тап сондай табыс пенен (2.1)-теңлемеге комплексли түйінлес болған

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V(r) \psi^* = E \psi^* \quad (2.1a)$$

теңлемесинен де алған болар едик.

(2.1)- хәм (2.1a) теңлемелердің (2.2) байланысы бар болған жағдайлар ушын (2.5)-интегралдың экстремумы хаққындағы вариациялық мәселе ушын Эйлер теңлемеси екенлигин көрсетиу қыйын емес. Бірақ биз вариациялық есаплау аппаратынан пайдаланбаймыз, ал туұрыдан-туұры дәлиллейді қолланамыз.

Мейли  $\psi_\lambda$  арқалы  $E_\lambda$  меншикли мәнисине тийисли (2.1)-дифференциаллық теңлемениң шешими болсын. Бұл теңлеме (2.5)-интегралға  $E_\lambda$  ниң мәнисин береді. Енди  $\psi_\lambda$  функциясын оған жақын болған  $\psi_\lambda + \delta\psi$  функциясы менен алмастырамыз. Бұл жерде  $\delta\psi$  арқалы киши, бірақ ықтыярлы вариация белгиленген. Егер (2.2)-шәртти  $\psi_\lambda + \delta\psi$  функциясы да  $\psi_\lambda$  функциясы қанаатландыратуғындай дәрежеде қанаатландырады деп есапламасақ, онда

$$\int (\psi_\lambda^* + \delta\psi^*) (\psi_\lambda + \delta\psi) d^3x = 1$$

хәм усыған сәйкес

$$\int (\psi_\lambda \delta\psi^* + \psi_\lambda^* \delta\psi) d^3x + \int (\delta\psi^* \delta\psi) d^3x = 0. \quad (2.6)$$

$\psi_\lambda + \delta\psi$  функциясын (2.5)-интегралға қойғаннан кейин энергия ушын  $E_\lambda + \delta E_\lambda$  аңлатпасын аламыз. Бұл жерде

$$\begin{aligned} \delta E_\lambda = \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla \psi_\lambda^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + (\nabla \psi_\lambda) \cdot (\nabla \delta\psi^*)] + V (\psi_\lambda \delta\psi^* + \psi_\lambda^* \delta\psi) \right\} d^3x + \\ + \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \delta\psi^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + V \delta\psi^* \delta\psi \right] d^3x. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Бұл аңлатпада биринши қатарда кишилиги бойынша биринши, ал екінши қатарда екінши тәртіпті ағзалар жыйналған. Бурын бөлекке бөліп интеграллауларды орынлаған едик. Енди де бөлеклерге бөліп, бірақ қарама-қарсы

бағытта интегралласақ биз биринши қатарда  $\delta\psi \nabla^2 \psi_\lambda^*$  хәм  $\delta\psi^* \nabla^2 \psi_\lambda$  аңлатпаларына, ал буннан кейин туўындылардан қутылыў ушын (2.1)- хәм (2.1a)-теңлемелерден пайдаланыўымыз мүмкин. Усының нәтийжесинде

$$\int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi_\lambda^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + V \psi_\lambda^* \delta\psi \right] d^3x = E_\lambda \int \delta\psi \psi_\lambda^* d^3x$$

аңлатпасына ийе боламыз. Сонлықтан, егер (2.7)-теңликти есапқа алатуғын болсақ, онда (2.7)-қатнастың биринши қатары кишилиги бойынша екінши тәртипли үлес береді:

$$\delta E_\lambda = \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \delta\psi|^2 + (V - E_\lambda) |\delta\psi|^2 \right] d^3x. \quad (2.8)$$

Бизде  $\delta\psi$  ямаса  $\delta\psi^*$  бойынша сызықлы ағзалар қалмағанлықтан  $E_\lambda$  энергиясы Шредингер теңлемесиниң щешимлери болған  $\psi_\lambda$  лер ушын  $\delta\psi = 0$  болған жағдайда минимумға ямаса максимумға ийе болады. Экстремумның неден ибарат екенлиги – максимум бе ямаса минимум ба екенлиги (2.8)-аңлатпаның белгисинен ғәрезли болады.

Бул мәселени тереңирек түсиниў ушын (2.1)-теңлемениң шешимлериниң жыйнағы болған  $\{\psi_\lambda\}$  функцияларынан пайдаланамыз хәм олардан функциялардың ортогоналлық системасын дүземиз:

$$\int \psi_\mu^* \psi_\nu d^3x = \delta_{\mu\nu}. \quad (2.9)$$

Енди функциялардың бул системасы бойынша  $\delta\psi$  диң вариациясын жаямыз:

$$\delta\psi = \sum_\nu c_\nu \psi_\nu. \quad (2.10)$$

Бундай жағдайда (2.8)-теңлик

$$\begin{aligned} \delta E_\lambda &= \sum_\mu \sum_\nu c_\mu^* c_\nu \int \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi_\mu^*) \cdot (\nabla \psi_\nu) + (V - E_\lambda) \psi_\mu^* \psi_\nu \right] d^3x = \\ &= \sum_\mu \sum_\nu c_\mu^* c_\nu \int \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_\nu + (V - E_\lambda) \psi_\nu \right] \psi_\mu^* d^3x \end{aligned}$$

түрине ямаса (2.9) бенен (2.1) ди есапқа алсақ

$$\delta E_\lambda = \sum_\mu |c_\mu|^2 (E_\mu - E_\lambda) \quad (2.11)$$

түрине ийе болады. Егер  $E_\lambda$  энергиясы тийкарғы халға тийисли болса, онда барлық  $\psi_\mu$  халлары ушын  $E_\mu \geq E_\lambda$  хәм вариациялық принцип  $E_\lambda$  ушын минимумды береді. Себеби (2.11)-сумма оң мәниске ийе. Қозған халлар ушын бундай улыўмалық қағыйданы келтирип шығарыўға болмайды. Себеби бундай жағдайда (2.11)-суммада оң мәнисли де, терис мәнисли де қосылыўшылар бар болады.

### 3-мәселе. Кеңисликлик орташалар ушын классикалық механика

Кеңисликлик орташалар (математикалық күтиўлер) ушын классикалық ньютонлық механиканың тийкарғы теңлемеси болған

$$\frac{dp}{dt} = F \quad (3.1)$$

теңлемесиниң квантлық механикада да орын алатуғынлығын көрсетиңиз. Бул формулаларда  $\mathbf{p}$  импульсти, ал  $\mathbf{F}$  күшти аңғартады.

**Шешими:** Мейли  $\mathbf{F}$  күши потенциал  $\mathbf{F} = -\nabla V$  потенциал арқалы аңлатылатуғын, ал  $\mathbf{p}$  импульс  $(\hbar/i) \nabla$  операторы менен алмастырылған болсын. Бизди қызықтыратуғын орташалар

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \nabla \psi d^3x, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{F} = - \int \psi^* (\nabla V) \psi d^3x \quad (3.3)$$

теңликлериниң жәрдемінде анықланады. Бизиң алдымызда турған мәселе егер  $\psi$  хәм  $\psi^*$  функциялары

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi, \\ +\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^* \end{aligned} \quad (3.4)$$

Шредингер теңлемесин қанаатландыратуғын болса (3.2)- хәм (3.3)-интеграллардың (3.1)-теңлемени қанаатландыратуғынлығын анықлаудан ибарат.

Дәлиллейди биз (3.2)-аңлатпаны ўақыт бойынша дифференциаллаудан баслаймыз:

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \int (\dot{\psi}^* \nabla \psi + \psi^* \nabla \dot{\psi}) d^3x = \frac{\hbar}{i} \int (\dot{\psi}^* \nabla \psi - \dot{\psi} \nabla \psi^*) d^3x. \quad (3.5)$$

Биз жоқарыда екінши қосылыўшыны бөлеклерге бөлип интеграллағанда пайда болатуғын бетлик интегралдың үлесиниң нолге тең екенлигин хәм сонлықтан оны қалдырып кетиўге болатуғынлығын есапқа алдық. Бул жерде (3.4)-теңлемелердиң жәрдемінде  $\psi$  хәм  $\psi^*$  функцияларынан қутылып

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int [(\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi) (\nabla \psi^*)] d^3x + \int (\psi^* \nabla V \psi + V \psi \nabla \psi^*) d^3x \quad (3.6)$$

аңлатпасын аламыз. Бөлеклерге бөлип интеграллаў

$$\int (\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) d^3x = - \int (\nabla \psi^*) (\nabla^2 \psi) d^3x$$

(3.5)-интегралдағы еки қосылыўшының бир бири менен жыйысатуғынлығын көрсетеди. (3.5)-аңлатпадан ең кейінде қалған қосындыны бөлеклерге бөлип интеграллаўды қоллансақ

$$\mathbf{p} = \int \psi^* [V \nabla \psi - \nabla (V \psi)] d^3x$$

аңлатпасын аламыз. Ең ақырында

$$\nabla (V \psi) = V \nabla \psi + \psi \nabla V$$

формуласынан пайдаланып

$$\dot{\mathbf{p}} = - \int \psi^* (\nabla V) \psi d^3x = \mathbf{F}$$

теңлемесине келемиз. Биз бунның дурыслығын дәлиллейимиз керек еди.

#### 4-мәселе. Қозғалыс муғдарының моменти ушын классикалық нызамлар

Кеңісликлик орташа мәніслер ушын қозғалыс муғдарының моменти  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  менен күш моменти  $\mathbf{T} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$  арасындағы классикалық

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{T} \quad (4.1)$$

байланысының квантлық механикада да орын алатуғынлығын көрсетіңіз. Бул формулаларда  $\mathbf{p}$  импульсти, ал  $\mathbf{F}$  күшти аңғартады.

Шешими: Жоқарыдағы мәселедегидей кеңісликлик орташаларды анықлаудан баслаймыз:

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla) \psi d^3x, \quad (4.2)$$

$$\mathbf{T} = - \int \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla V) \psi d^3x. \quad (4.3)$$

Бул жағдайда да егер  $\psi$  хәм  $\psi^*$  функциялары (3.4)-Шредингер теңлемесин қанаатландырады деп есаплаймыз.

Биз дәлиллейди (4.2)-аңлатпаны уақыт бойынша дифференциаллаудан баслаймыз:

$$\dot{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \int [\dot{\psi}^* (\mathbf{r} \times \nabla \psi) + \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla \dot{\psi})] d^3x.$$

Екинши қосылыўшыны

$$\psi^* \nabla \dot{\psi} = \nabla (\psi^* \dot{\psi}) - \dot{\psi} \nabla \psi^*$$

теңлигиниң жәрдеминде түрлендиремиз хәм бул теңликтиң оң тәрәпиндеги биринши ағзаға буннан былай векторлық анализдиң төмендегидей улыўмалық формуласын пайдаланыўға болатуғынлығын есапқа аламыз:

$$\int \mathbf{r} \times \nabla f d^3x = 0. \quad (4.4)$$

Бул аңлатпада  $f = \psi^* \dot{\psi}$ . Бул

$$\dot{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \int \mathbf{r} \times (\dot{\psi}^* \nabla \psi - \dot{\psi} \nabla \psi^*) d^3x$$

аңлатпасын береді. Енді (3.4)-теңдемелердің жәрдеминде  $\psi$  хәм  $\psi^*$  функцияларынан қутылсақ мынаған ийе боламыз:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{L}} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \int \mathbf{r} \times [(\nabla^2 \psi^*)(\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi)(\nabla \psi^*)] d^3x + \\ & + \int V \mathbf{r} \times (\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*) d^3x. \end{aligned} \quad (4.5)$$

$(\nabla^2 \psi^*)(\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi)(\nabla \psi^*) = \nabla [(\nabla \psi^*)(\nabla \psi)]$  теңлиги орынлы болғанлықтан биринши интегралдың белгиси астындағы қаўсырманың ишиндеги аңлатпа  $\dot{f} = (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi)$  скаляр функцияның градиенти болып табылады. Сонлықтан (4.4) ке сәйкес бул интеграл жоғалады. Екинши интеграл белгиси астындағы қаўсырма ишиндеги аңлатпа  $\nabla (\psi^* \psi)$  ға тең Буннан кейин

$$V \nabla (\psi^* \psi) = \nabla (V \psi^* \psi) - \psi^* \psi \nabla V$$

теңлигин пайдаланып хәм (4.4)-формуланың жәрдеминен және пайдаланып екинши интегралды

$$\int \mathbf{r} \times [V \nabla (\psi^* \psi)] d^3x = - \int \mathbf{r} \times (\psi^* \psi \nabla V) d^3x$$

түрине алып келемиз Бул аңлатпа күш моментиниң орташа мәниси ушын жазылған (4.3)-аңлатпаға сәйкес келеді.

## 5-мәселе. Энергияның сақланыуы нызамы

Мейли Шредингер толқын майданының энергиясы 2-мәселедеги (2.5)-интегралының жәрдеминде тәрийипленетуғын болсын. Бундай жағдайда энергияның сақланыуы нызамы

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \text{div } \mathbf{S} = 0 \quad (5.1)$$

түрине ийе болыуы керек. Бул аңлатпада  $W$  арқалы энергияның тығызлығы, ал  $\mathbf{S}$  арқалы энергия ағысының тығызлығы белгиленген. Қолайлы болған  $\mathbf{S}$  Умов-Пойнтинг векторын конструкциялап энергияның сақланыуы нызамын келтирип шығарыңыз.

Шешими: (2.5)-теңлемеге сәйкес

$$E = \int W d^3x. \quad (5.2)$$

Бул жерде

$$W = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*)(\nabla \psi) + \psi^* V \psi. \quad (5.3)$$

Бул аңлатпадағы биринши ағза кинетикалық энергияның, ал екинши ағза потенциал энергияның тығызлығы. (5.1)-теңлемеге сәйкес бизге



$$\dot{W} = \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla \dot{\psi}^*)(\nabla \psi) + (\nabla \psi^*)(\nabla \dot{\psi})] + V(\dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}) \quad (5.4)$$

тууындысы керек.

$$(\nabla \dot{\psi}^*)(\nabla \psi) = \nabla(\dot{\psi}^* \nabla \psi) - \dot{\psi}^* \nabla^2 \psi$$

хәм

$$(\nabla \psi^*)(\nabla \dot{\psi}) = \nabla(\dot{\psi} \nabla \psi^*) - \dot{\psi} \nabla^2 \psi^*$$

болғанлықтан (5.4)-аңлатпаның кинетикалық энергия менен байланыслы болған бөлимин түрлендириүимиз хәм төмендегидей түрде жазыуымыз мүмкин

$$\dot{W} = \nabla \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\psi}^* \nabla \psi + \dot{\psi} \nabla \psi^*) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \dot{\psi}^* \nabla^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \dot{\psi} \nabla^2 \psi^* + \dot{\psi}^* V \psi + \dot{\psi} V \psi^*. \quad (5.5)$$

(3.4)-Шредингер теңлемеси бизге соңғы қосылыўшыдағы кеңисликлик тууындыларды хәм потенциалды ўақыт бойынша тууындылар менен алмастырыўға мүмкиншилик береді. Нәтийжеде алынған ағзалар бир бири менен жыйысады:

$$\dot{\psi}^* \left( -\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} \right) + \dot{\psi} \left( \frac{\hbar}{i} \dot{\psi}^* \right) = 0.$$

Сонлықтан (5.5)-теңлеме өзиниң формасы бойынша (5.1)-теңлеме менен бирдей, ал биз излеп атырған Умов-Пойнтинг векторы

$$\mathbf{S} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\psi}^* \nabla \psi + \dot{\psi} \nabla \psi^*) \quad (5.6)$$

аңлатпасының жәрдеминде аңлатылады.

## 6-мәселе. Эрмитлик түйинлеслик

$\Omega$  операторы менен эрмитлик түйинлес  $\Omega^\dagger$  операторы

$$\int (\Omega \psi)^* \varphi \, d\tau = \int \psi^* \Omega^\dagger \varphi \, d\tau \quad (6.1)$$

теңлигиниң жәрдеминде анықланады. Бул теңликти функционаллық анализдің белгилеўлери (символикасы) жәрдеминде былайынша жазыў мүмкин:

$$\langle \Omega \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \Omega^\dagger \varphi \rangle. \quad (6.16)$$

Бул аңлатпада  $\psi$  менен  $\varphi$  лер

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad \langle \varphi | \varphi \rangle = 1 \quad (6.2)$$

нормировка шәртлерине бағынатуғын ықтыярлы функциялар.

Бул анықламаны матрицалық көрсетиў тилинде келтирип шығарыңыз.  $\Omega = \Omega^\dagger$  теңлиги менен анықланатуғын эрмитлик оператордың меншикли мәнислери

хақында не айта аласыз?

**Шешими.** Оператордың матрицалық көриниси  $\{u_v\}$  ортонормировкаланған функциялардың толық жыйнағын сайлап алыу менен анықланады:

$$\langle u_v | u_\mu \rangle = \delta_{\mu v}. \quad (6.3)$$

Ықтыярлы нормировкаланған  $\psi$  хәм  $\varphi$  функциялары ушын

$$\psi = \sum_v a_v u_v, \quad \varphi = \sum_\mu b_\mu u_\mu \quad (6.4)$$

түріндегі жайыулар (қатарларға жайыулар) орын алады. (6.4)-аңлатпаны (6.1)-анықламаға қойсақ

$$\sum_\mu \sum_v a_v^* b_\mu \langle \Omega u_v | u_\mu \rangle = \sum_\mu \sum_v a_v^* b_\mu \langle u_v | \Omega^\dagger | u_\mu \rangle$$

аңлатпасын аламыз. Теңлік  $\psi$  хәм  $\varphi$  функцияларының қалеген жубы ушын орынлы деп болжаймыз. Соның ушын хәр бир қосылыушы ушын өз алдына

$$\langle \Omega u_v | u_\mu \rangle = \langle u_v | \Omega^\dagger | u_\mu \rangle \quad (6.5)$$

теңлигиниң орынланыуы керек. Енди  $\{u_v\}$  толық жыйнағын  $\Omega^\dagger$  операторының матрицасын анықлау ушын пайдаланамыз. буның ушын (6.5)-теңликтиң оң тәрәпин былайынша түрлендиремиз:

$$\langle u_v | \Omega^\dagger | u_\mu \rangle = (\Omega^\dagger)_{v\mu}.$$

Шеп тәрәпин болса, оны былайынша түрлендириу мүмкин:

$$\langle \Omega u_v | u_\mu \rangle = \int (\Omega u_v)^* u_\mu d\tau = \left[ \int u_\mu^* (\Omega u_v) d\tau \right]^* = \langle u_\mu | \Omega | u_v \rangle^* = \Omega_{\mu v}^*.$$

Демек  $\Omega$  хәм  $\Omega^\dagger$  матрицаларының матрицалық элементлери (6.5)-аңлатпаға сәйкес

$$(\Omega^\dagger)_{\mu v} = \Omega_{v\mu}^* \quad (6.6)$$

қатнасы арқалы байланысқан болыуы керек. Басқаша айтқанда эрмитлик түйинлес  $\Omega^\dagger$  матрицасының элементлери  $\Omega$  матрицасының элементлеринен транспонирлеу ( $\mu \leftrightarrow v$ ) хәм комплексли түйинлеслеу операцияларының жәрдемінде алынады екен.

(6.6)-қатнастың жәрдемінде биз  $\Omega^{\dagger\dagger} = \Omega$  теңлигин бирден алатуғынымызды атап өтемиз.

$\Omega$  эрмитлик (өзине өзи түйинлес) матрицасы ушын (анықлама бойынша  $\Omega = \Omega^\dagger$ ) биз (6.6)-аңлатпаға сәйкес

$$\Omega_{\mu v} = \Omega_{v\mu}^* \quad (6.7)$$

екенлигине ийе боламыз. Диагоналлық  $\mu = v$  матрицалық элементлери хақыйқый. Бундай тастыйықлау функциялардың қалеген ортонормировкаланған жыйнағы ушын дурыс (яғный гильберт кеңислигиндегі координаталар системасының қалеген түрде сайлап алыныуы ушын орынлы). Мысалы  $\{u_v\}$  жыйнағының

жәрдемінде  $\Omega_{\mu\nu}$  матрицасы диагоналық түрге алып келинеді:

$$\Omega_{\mu\nu} = \omega_{\mu} \delta_{\mu\nu}. \quad (6.8)$$

$\omega_{\mu}$  шамаларының мәнісі  $\Omega$  матрицаларының меншикли мәніслери еди, сонлықтан эрмитлик матрицаның меншикли мәніслери ҳақыйқый болып табылады.

**Ескертиў:** Ең кейинги нәтийжеге байланыслы барлық физикалық шамалардың операторлары (бақланатуғын шамалар) эрмитлик болып табылады.

### 7-мәселе. Эрмитлик операторды қурыў

Классикалық  $x p_x$  көбеймесине сәйкес келетуғын квантлық механикалық операторды қурыңыз (дүзиңиз).

Шешими.

а)  $x$  ҳәм  $p_x$  операторлары коммутацияланбайды ҳәм

$$p_x x - x p_x = \frac{\hbar}{i} \quad (7.1)$$

орын алмастырыў қатнасын қанаатландырады. Бул теңликтиң дурыслығын координаталық көринисте жеңил тексерип көриў мүмкин. Бул аңлатпада

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (7.2)$$

Сонлықтан  $x p_x$  классикалық көбеймесине

$$\Omega = (1 - \alpha) x p_x + \alpha p_x x \quad (7.3)$$

түриндеги ҳәр бир оператор сәйкес келеди. Дәслеп  $\alpha$  турақлысын ҳақыйқый деп есаплаймыз. Бул турақлыны қәлеген  $\psi$  квантлық ҳал ушын  $\Omega$  шамасының орташа мәніси

$$\langle \Omega \rangle = \int \psi^* \Omega \psi d^3x = \text{ҳақыйқый шама} \quad (7.4)$$

болатуғындай етип сайлап аламыз.  $p_x$  операторы ушын жазылған (7.2)-аңлатпаны пайдаланып (7.4)-теңликти жайылған түрде былайынша жазамыз:

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \left[ (1 - \alpha) x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) \right] d^3x = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha \psi \right) d^3x.$$

Енди  $\psi$  диң

$$\psi = f + i g$$

ҳақыйқый бөлимин жормал бөлегинен айырсақ төмендеги аңлатпаны аламыз:

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \left[ x \left( f \frac{\partial f}{\partial x} + g \frac{\partial g}{\partial x} \right) + \alpha (f^2 + g^2) \right] d^3x + \\ + \hbar \int x \left( f \frac{\partial g}{\partial x} - g \frac{\partial f}{\partial x} \right) d^3x.$$

Бұл аңлатпаның оң тәрәпиндегі екінші интеграл хақықый. Ал бірінші интеграл болса жормал хәм (7.4)-аңлатпаға сәйкес жоғалыуы керек. Соның менен бирге

$$\int (f^2 + g^2) d^3x = 1$$

хәм бул теңликти

$$\frac{1}{2} \int x \frac{\partial}{\partial x} (f^2 + g^2) d^3x = -\alpha$$

теңлиги түрінде жазыу мүмкин. Бул теңлик болса бөлеклерге бөліп интеграллағаннан кейін

$$\alpha = \frac{1}{2} \quad (7.5)$$

мәнісин береді.

Солай етип  $\Omega$  операторының эрмитлигин тәміинлеуші

$$\Omega = \frac{1}{2} (xp_x + p_x x) \quad (7.6)$$

симметриялық комбинациясы дурыс болады.

Егер комплексли  $\alpha$  ға өтсек  $\alpha$  шамасының

$$\alpha = \frac{1}{2} + i\beta \quad (7.7)$$

түріндегі қәлеген түрі пайдаға асады. Бул аңлатпада  $\beta$  арқалы ықтыярлы хақықый сан белгиленген. Хақықатында бул жағдайда

$$\Omega = \frac{1}{2} (xp_x + p_x x) + i\beta (p_x x - xp_x) \quad (7.8)$$

хәм биз бірінші қосылыушының орташа мәнісинің хақықый екенлигин, екіншісин орташалағанда болса (7.1)-орын алмастырыу қатнасының орын алыуына байланысly квантлық халдың сайлап алыныуынан ғәрезсиз турақлы  $\beta\hbar$  үлесин беретуғынлығын көреміз. Демек бул қосылыушы физикалық мәніске ийе емес. Сонлықтан оны есапқа алмау керек.

б) Оператордың эрмитлигин тап сондай табыс пенен

$$\langle u | \Omega v \rangle = \langle \Omega u | v \rangle \quad (7.9a)$$

ямаса толығырақ

$$\int u^* \Omega v d^3x = \int (\Omega u)^* v d^3x \quad (7.9b)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықлау мүмкін. Бул жерде  $u$  менен  $v$  арқалы комплексли ықтыярлы функциялар белгиленген. Бундай функцияларды сайлап алыу тек интеграллардың бар болуы шәрті менен шекленеди. (7.3)-оператор ушын хақыйқый  $\alpha$  де бул

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{i} \int u^* \left[ (1-\alpha) x \frac{\partial v}{\partial x} + \alpha \frac{\partial (xv)}{\partial x} \right] d^3x = \\ & = -\frac{\hbar}{i} \int \left[ (1-\alpha) x \frac{\partial u^*}{\partial x} + \alpha \frac{\partial (xu^*)}{\partial x} \right] v d^3x \end{aligned}$$

ямаса

$$\int u^* \left( x \frac{\partial v}{\partial x} + \alpha v \right) d^3x = - \int \left( x \frac{\partial u^*}{\partial x} + \alpha u^* \right) v d^3x$$

аңлатпасын береді. Бул жерде қосылыушылардың тәртібин өзгертип мынаны аламыз:

$$\int x \frac{\partial}{\partial x} (u^* v) d^3x = -2\alpha \int u^* v d^3x.$$

Шеп тәрәпинде турған ағзадан бөлеклерге бөліп интеграл алсақ

$$- \int u^* v d^3x = -2\alpha \int u^* v d^3x$$

аңлатпасын табамыз. Бул бизиң ески (7.5) нәтижемізди, яғный  $\alpha = 1/2$  ди береді.

### 8-мәселе. Операторды дифференциаллау

Мейли  $f(p, x)$  функциясы  $p_k, x_k$  операторларының пүтин функциясы болсын. Коммутациялық қағыйдалардан

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = -[f, p_k], \quad (8.1)$$

$$\frac{\partial f}{\partial p_k} = [f, x_k] \quad (8.2)$$

қатнастарының келип шығатуғынлығын көрсетиңіз. Бул аңлатпаларда қысқартуы мақсетінде

$$[f, g] = \frac{i}{\hbar} (fg - gf)$$

белгилеуи қолланылған.

**Шешими:** Каноникалық коммутациялық қағыйдалар

$$[p_k, p_l] = 0, \quad [x_k, x_l] = 0, \quad [p_k, x_l] = \delta_{kl} \quad (8.3)$$

формулалары менен бериледи. (8.1)- хәм (8.12)-аңлатпалардың дурыслығы төрт

избе-из баскышқа бөлинеди.

1. Мейли  $f = p_l$ . Бул жағдайда  $\partial f / \partial x_k = 0$  хәм  $\partial f / \partial p_k = \delta_{kl}$ . Демек (8.1)- хәм (8.2)- қатнастар

$$[p_k, p_l] = 0, \quad [p_l, x_k] = \delta_{lk}$$

түрине енеди хәм сонлықтан (8.3)-формулаларға сәйкес келеди. Тап усындай жоллар менен олардың дурыслығы  $f = x_l$ ,  $\partial f / \partial x_k = \delta_{kl}$ ,  $\partial f / \partial p_k = 0$  болған жағдайлар ушын да көрсетиледи.

2. Мейли (8.1)- хәм (8.2)-қатнастар  $f$  хәм  $g$  функциялары ушын да орынлы болсын. Бирақ сызықлылық қасиетке ийе болғанлықтан олар  $c_1$  хәм  $c_2$  ықтыярлы комплексли коэффициентлерге ийе қалеген  $c_1 f + c_2 g$  сызықлы комбинациясы ушын да дурыс болады.

3.  $f$  хәм  $g$  функциялары ушын орынлы болған (дурыс болған) бул қатнастар  $fg$  көбеймеси ушын да дурыс болады. (8.1) жағдайында буны тиккелей өткерилген

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k} (fg) &= f \frac{\partial g}{\partial x_k} + \frac{\partial f}{\partial x_k} g = -\{f, p_k\} g + [f, p_k] g = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \{fg p_k - f p_k g + f p_k g - p_k f g\} = -[fg, p_k] \end{aligned}$$

есаплауларының жәрдеминде тексерип көриу мүмкин. Тап сол сыяқлы есаплауларды (8.2)-қатнас жағдайы ушын да орынлауға болады.

4. Жоқарыдағы 3-пунктте көрсетилген жағдайлардан биз қарап атырған қатнастардың қалеген сандағы  $p_k$  хәм  $x_k$  көбейтиушилерине ийе ықтыярлы көбеймелердің сызықлы комбинациясы ушын да дурыс. Бул жағдай олардың  $p_k$  хәм  $x_k$  өзгериушилеринің қалеген пүтин функциясы ушын да дурыс екенлигин көрсетеди. Бул жағдайды бизің дәлиллейүимиз керек еди.

## 9-мәселе. Орташа мәнислердің уақыттың өтиуі менен өзгериуі

Мейли  $\langle A \rangle$  арқалы  $\psi$  халындағы  $A$  операторының уақыттан ғәрезсиз болған орташа мәниси болсын.  $\psi$  халы уақыттың өтиуі менен өзгеретуғын болсын.  $\langle A \rangle$  шамасының уақыттың өтиуі менен қалайынша өзгеретуғынлығын анықлаңыз. Сиз  $\langle x_k \rangle$  хәм  $\langle p_k \rangle$  орташа мәнислеринің өзгерислері хаққында не айта аласыз?

**Шешими.**

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^*(t) A \psi(t) dt \quad (9.1)$$

орташа мәнисинің өзгериуі тезлиги

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \int (\dot{\psi}^* A \psi + \psi^* A \dot{\psi}) dt \quad (9.2)$$

шамасына тең.  $\psi$  хәм  $\psi^*$  толқын функцияларының тууындылары Шредингер теңлемесине бағынады:

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} = H \psi, \quad \frac{\hbar}{i} \dot{\psi}^* = H^\dagger \psi^*. \quad (9.3)$$

Бул жерде  $H$  гамильтонианы эрмитлик оператор болып табылады. Сонлықтан  $H = H^\dagger$ .

(9.3)-аңлатпаны (9.2)-аңлатпаға қойып

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \int [(H^\dagger \psi^*) A \psi - \psi^* A H \psi] d\tau$$

екенлигине ямаса функционаллық анализ белгилеулерінде

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} [\langle H \psi | A \psi \rangle - \langle \psi | A H \psi \rangle] \quad (9.4)$$

аңлатпасын аламыз. (9.4)-аңлатпаның биринши қосылыушысын

$$\langle \Omega \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \Omega^\dagger \varphi \rangle$$

аңлатпасының жәрдемінде түрлендирип

$$\langle H \psi | A \psi \rangle = \langle \psi | H^\dagger A \psi \rangle = \langle \psi | H A \psi \rangle$$

аңлатпасына ийе боламыз. Сонлықтан (9.4)-теңлік

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | H A - A H | \psi \rangle \quad (9.5)$$

түрине енеди ямаса қысқа түрде жазылған

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [H, A] \rangle \quad (9.6)$$

аңлатпасын аламыз. (9.6)-қатнасты  $A = x_k$  хәм  $A = p_k$  болған дара жағдай ушын қолланамыз. (8.1)- хәм (8.2)-қатнастарды есапқа алғанда бул қолланыў

$$\frac{d}{dt} \langle x_k \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_k} \right\rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle p_k \rangle = - \left\langle \frac{\partial H}{\partial x_k} \right\rangle \quad (9.7)$$

аңлатпаларын береді. Солай етип орташа мәнислер классикалық механиканың каноникалық ызамлары бойынша өзгереді екен.

**Ескертиў:** Гүман пайда болмаўы ушын улыўма жағдайда

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \langle [H, A] \rangle$$

теңлигиниң орынлы екенлигин атап өтемиз.

## II. Спин есапқа алынбайтуғын бир бөлекшели мәселелер

### A. Бир өлшемли мәселелер

Бир өлшемли мәселелер әдеуир идеалластырыў болып табылады. Бирақ бундай мәселелерди квантлық механиканың тийкарғы өзгешеликлерин айқынластырыў ушын пайдаланыў мүмкин. Бундай мәселелер

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x, t) \psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{A.1})$$

түріндегі толқынлық теңлемени шешкенде пайда болады. Бундай мәселеде потенциал тек бір  $x$  декарт координатасынан ғәрезли болады.

$$\psi = e^{i(k_1 y + k_3 z)} \varphi(x, t) \quad (\text{A.2})$$

факторластырылуының жәрдеминде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} (k_2^2 + k_3^2) \varphi + V(x, t) \varphi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (\text{A.3})$$

теңлемесін аламыз. Егер

$$\varphi(x, t) = e^{-i\omega_0 t} u(x, t), \quad \hbar\omega_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_2^2 + k_3^2) \quad (\text{A.4})$$

белгилеулерін қабыл етсек бұл теңлемени және де әпиұайыластырыуға болады. Усының нәтижесінде биз бир өлшемлі толқын теңлемесіне келеміз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V(x, t) u = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (\text{A.5})$$

(A.2)- хәм (A.3)-формулардағы экспоненциаллық көбейтиушілер  $x$  көшеріне перпендикуляр бағытта тарқалатуғын тегіс толқынларды тәрийиплейди. Бұл толқынлар  $x$  бағытындағы толқын функциясының қасиетлеріне тәсир етпейди.

### 16-мәселе. Еркін қозғалыс жағдайындағы фундаменталлық шешімлер

$V = 0$  болған жағдай үшін бир өлшемлі толқын теңлемесін шешіңіз. Алынған шешімлердің физикалық мәнісін таллаңыз.

**Шешими.**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (16.1)$$

толқын теңлемесі өзгериушілерди айырыуға мүмкиншилик береді<sup>1</sup>:

$$\psi(x, t) = u(x) g(t). \quad (16.2)$$

Себеби (16.2)-аңлатпаны (16.1) теңлемеге қойсақ

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u''}{u} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\dot{g}}{g} = \hbar\omega \quad (16.3)$$

теңлемесін аламыз. Бұл аңлатпада  $\hbar\omega$  арқалы айырыу тұрақтысы белгиленген.

<sup>1</sup> Бұл жерде хәм буннан кейін (A.4)-теңлемени қанаатландыратуғын бир өлшемлі толқын функциясын  $\psi$  арқалы, ал оның кеңіслик бөлімін  $u$  арқалы белгилейміз.



(16.3)-теңлемени еки теңлемеге айырыў арқалы

$$\dot{g} = -i\omega g \quad \text{яғнаы} \quad g(t) = e^{-i\omega t} \quad (16.4)$$

хәм

$$u'' + \frac{2m\omega}{\hbar} u = 0. \quad (16.5)$$

Егер  $\omega$  ҳақыйқый шама болып табылатуғын болса, онда толқын функциясы дәўирли болады хәм  $|\psi|^2$  шамасы ўақыттан ғәрезли болмайды (стационар ҳал). Егер  $\omega$  оң шама болса, онда

$$\frac{2m\omega}{\hbar} = k^2 \quad (16.6)$$

шамасы да оң шама болады. Сонлықтан жоқарыда айтылғанлардан басқа (16.5)-теңлемениң шешими  $x$  кеңисликлик өзгериўшисиниң дәўирли функциясы болады.

**Ескертиў:** Толқын функциясының ўақыттан ғәрезли екенлигин көрсететуғын (16.4) комплексли формасы квантлық механиканың өзине тән әҳмийетли өзгешелигин қурайды:  $\sin\omega t$  менен  $\cos\omega t$  функциялары (16.4)-дифференциал теңлемениң шешимлери болып табылмайды. Классикалық физика менен квантлық механика арасындағы бундай айырма Шредингер теңлемесиниң ўақыт бойынша биринши тәртипли теңлеме екенлиги менен байланысly.

$\omega$  параметриниң физикалық мәнисин (16.1)-теңлемениң шеп тәрәпиндеги операторды Гамильтон операторы деп қарап анықлаймыз (бул жағдайда Гамильтон операторы тек кинетикалық энергияның операторы болған бир оператордан турады). Буннан  $E = \hbar\omega$  шамасының бөлекшениң кинетикалық энергиясы екенлиги келип шығады. Сонлықтан оның мәниси барлық ўақытта да оң болыўы керек хәм бизиң шешимимиз гамильтонианның меншикли функциясы болып табылады.

$k^2$  шамасының мәниси оң болғанлықтан (16.5)теңлемениң ямаса

$$u'' + k^2 u = 0 \quad (16.7)$$

теңлемесиниң улыўмалық шешими

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (16.8a)$$

түрине ийе болады. Сонлықтан бир өлшемли

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)} \quad (16.8b)$$

толқын функциясы қарама-қарсы бағытта тарқалатуғын еки толқыннан турады. Еки толқынның да фазалық тезлиги  $v_\phi = \omega/k$  шамасына тең.

Егер тығызлық ушын аңлатпаны анық түрде

$$\rho = \psi^* \psi, \quad (16.9)$$

ал ағыс ушын аңлатпаны

$$s = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \quad (16.10)$$

түрінде жазсақ, онда толқын функциясының кеңістік бөлімінің физикалық мәнісі айқынласады. (16.86)-аңлатпаға муәпәк биз

$$\rho = |A|^2 + |B|^2 + (AB^* e^{2ikx} + A^* B e^{-2ikx}),$$

$$s = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2)$$

аңлатпаларына ийе боламыз.  $A$  хәм  $B$  амплитудаларына ийе еки толқынның қарама-қарсы бағытланған еки ағысқа сәйкес келетуғынлығы көринип тур. Олардың интенсивлиги толқынлардың салыстырмалы нормировка турақлысы арқалы анықланады хәм  $k$  ға пропорционал. Тығызлық ушын аңлатпа толқынлардың (когерент толқынлардың) интерференциясының орын алатуғынлығын көрсетеди. Бул интерференция кеңістік дәуірликтиң пайда болуының себепшиси болады.

Когерентликтиң пайда болуы ушын айрықша себеп болмаған жағдайда (мысалы шегаралық шәртлер болмағанда) хәр бир толқынды өз алдына қарау ақылға муәпәк келеди. Бундай жағдайда  $B = 0$  деп болжаймыз хәм бул болжау  $s > 0$  теңсізлигин береді. Соның менен бирге  $A = 0$  деп болжасақ та болады. Бундай жағдайда  $s < 0$  теңсізлигин аламыз. Нәтийжеде бир бирине қарама-қарсы болған анау ямаса мына бағыттағы бөлекшениң тууры сызықты қозғалысы алынады.  $k$  шамасы еки белгиге де ийе болады деп есаплап бизиң нәтийжелеримизди былайынша жууақлау мүмкин:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= C e^{i(kx - \omega t)}, \\ E &= \hbar \omega, \quad k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar}, \\ \rho &= |C|^2, \quad s = \frac{\hbar k}{m} |C|^2. \end{aligned} \quad (16.11)$$

$\omega$  ны жоқ етип

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (16.12)$$

екенлигине ийе боламыз. Сонлықтан бөлекшениң импульси хәм оның классикалық тезлиги сәйкес

$$p = \hbar k \quad (16.13)$$

хәм

$$v = \frac{\hbar k}{m} \quad (16.14)$$

шамаларына тең болады. Тезлик ушын алынған соңғы аңлатпа

$$v_{\Phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2} v$$

фазалық тезлік аңлатпасына пүткіллей сәйкес келмейді. Бірақ бұл аңлатпа толқынның группалық тезлигине сәйкес келеді:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v.$$

Ескертіу: (16.1)-тийкарғы дифференциал теңлемени  $D$  жормал диффузия коэффициентине ийе диффузия теңлемеси деп қарауға болады:

$$D \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad D = i \frac{\hbar}{2m}.$$

Квантлық теорияда өзгеріушілерді айырыу әхмийетли орынды ийелейтуғынлығын, ал диффузия теориясында әхмийетли орынды ийелемейтуғынлығын есапқа алсақ диффузия мәселелеріндегі көп ушырасатуғын  $D$  коэффициенті хакыйқый мәніске ийе болғандағы

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp \left[ \frac{im}{2\hbar} \cdot \frac{(x-\xi)^2}{t} \right] d\xi$$

шешими квантлық механикада пайдаланылуы ушын орын таппайды.

(16.1)-теңлемедегі уақыттың белгисін өзгертіу  $\psi$  толқын функциясын  $\psi^*$  пенен алмастыруға алып келеді.

## 17-мәселе. Еркін қозғалыстағы толқын пакети

Толқын пакетін дүзиңіз хәм оның уақытлық эволюциясын изертлеңіз.

**Шешими.** Биз толқын теңлемесін дара жағдай ушын шешеміз хәм оны бурын тапқан (16.11)-шешім түрінде жазамыз:

$$\psi(k; x, t) = C(k) e^{i(kx - \omega t)}, \quad (17.1)$$

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2. \quad (17.2)$$

Бұл аңлатпада  $C(k)$  арқалы ықтыярлы турақлы амплитуда белгиленген. Ал  $k$  шамасы болса елеге шекем еркін параметр. Сонлықтан толқын теңлемесінің улыұмалық шешими

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(k; x, t) dk \quad (17.3)$$

аңлатпасындағы  $k$  бойынша қәлеген жыйнақлы интеграл түрінде жазылады.

(17.3)-теңлік ең улыұма түрдегі бир өлшемлі толқын пакетін тәрийиплейді. Интегралдың жыйнақлы болуы ушын  $|k| \rightarrow \infty$  шегінде  $C(k)$  коэффициенті ең

кеминде  $1/k$  түрінде нолге умтылыуы керек. Тап сол сыяқлы сайлап алынған  $C(k)$  амплитудасы белгили бир түрдеги шешимге алып келеди.

Енди  $p_0 = \hbar k_0$  импульсине ийе биз тәрийиплеп атырған бөлекшени  $t = 0$  басланғыш уақыт моментинде  $x = 0$  ноқатының этирапында табыудың итималлығы нолден сезилерликтей айырмасы бар жағдай ушын толқын пакетин құрамыз. Егер толқын пакетин

$$\psi(x, 0) = A \exp \left[ -\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x \right] \quad (17.4)$$

түрінде алатуғын болсақ бул мақсетке жетиуге болады. Хәқыйқатында да бул жағдайда

$$\rho(x, 0) = |\psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \exp \left( -\frac{x^2}{a^2} \right)$$

тығызлығы  $|x| \leq a$  областында локализицияланған бөлекшеге жууап береді. Ал (16.10) ағысы

$$s(x, 0) = \frac{\hbar}{2mi} 2ik_0 |A|^2 \exp \left( -\frac{x^2}{a^2} \right) = \rho \frac{\hbar}{m} k_0$$

шамасына тең. Сонлықтан  $v_0 = \hbar k_0 / m$  шамасы бөлекшениң тезлигине, ал  $p_0 = mv_0 = \hbar k_0$  шамасы пакеттиң импульсине тең. Толқын функциясы тек бир бөлекшени тәрийиплейтуғын болғанлықтан

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho dx = 1$$

нормировка шәрти орынлы болады. Яғный

$$|A|^2 = \frac{1}{a \sqrt{\pi}}. \quad (17.5)$$

(17.3)- хәм (17.1)-аңлатпаларды пайдаланып (17.4)-аңлатпаны тегис толқынлар бойынша жайыу мүмкин:

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} dk. \quad (17.6)$$

Бул интеграл Фурье интегралы болып табылады. Бул аңлатпадан  $C(k)$  коэффициентлери былайынша табылады:

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x \right] dx.$$

Бул интегралды жақсы белгили болған

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi} \quad (17.7)$$

формуласының жәрдеминде есаплап ең ақырында

$$C(k) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (k - k_0)^2 \right] \quad (17.8)$$

екенлигине ийе боламыз. Бул нәтийжени Гейзенбергтің анықсызлық қатнастарын пайдаланған халда аңсат түсиниўге болады. Басланғыш халда (17.4)-аңлатпаға сәйкес бөлекшениң координатасының анықсызлығы  $\Delta x \approx a$  шамасына тең болады. Екинши тәрәптен (17.8)-аңлатпаның көрсеткениндей толқын функциясына тийкарғы үлести  $k = k_0$  ноқатының этирапындағы кеңлиги  $\Delta k \approx 1/a$  шамасына тең  $k$  толқын санының спектри (ямаса кеңлиги  $\Delta p \approx \hbar/a$  шамасына тең  $p = \hbar k$  импульси спектри) береді. Демек  $a$  шамасының қалайынша сайлап алынғанлығынан фәрезсиз

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar \quad (17.9)$$

қатнасы орын алады. Бул Гейзенбергтің анықсызлық қатнасы болып табылады.

$t = 0$  ўақыт моментиндеги  $C(k)$  амплитудасын анықлап (17.3)-антегралды қәлеген ўақыт моменти ушын есаплаўға өте аламыз:

$$\psi(x, t) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{1}{2} a^2 (k - k_0)^2 + ikx - i \frac{\hbar t}{2m} k^2 \right] dk.$$

Бул аңлатпадағы экспонентада  $k$  ның квадратлық формасы тур. Сонлықтан бул интегралды қайтадан (17.7) қәтелер интегралына алып келиўге болады. Нәтийже

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\left(1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}\right)^{1/2}} \exp \left[ -\frac{x^2 - 2ia^2 k_0 x + i \frac{\hbar t}{2m} k_0^2 a^2}{2a^2 \left(1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}\right)} \right] \quad (17.10)$$

түрине ийе болады.

Енди тығызлық  $\rho$  менен  $s$  ағысын қәлеген ўақыт моментинде қарап бул әдеўир қурамалы аңлатпаны түсиниў қыйын болмайды. Бул жағдайда тығызлық мынаған тең:

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]^{1/2}} \exp \left[ -\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]} \right]. \quad (17.11)$$

Координата  $x$  тың функциясы сыпатында ол қоңыраў тәризли иймеклик формасына ийе болады. Бирақ бул жағдайда оның максимумы  $x = 0$  ноқаттан  $x = (\hbar k_0 / m) t$  ноқатына аўысқан болады. Демек (17.10)-аңлатпа менен тәрийипленетуғын «толқынның дөңес» орны  $v_0 = \hbar k_0 / m$  тезлиги менен қозғалады (группалық тезлик бөлекшениң тезлигине тең). Соның менен бир қатарда (17.11)-экспонентадағы бөлшектің бөлими толқын пакетиниң кеңлигиниң  $t = 0$  моменттен баслап  $a$  шамасынан  $t = t$  ўақыт моментинде

$$a' = a \left[ 1 + \left( \frac{\hbar t}{ma^2} \right)^2 \right]^{1/2} \approx \frac{\hbar}{ma} t$$

шамасына шекем үлкейетуғынлығын көрсетеді. Бул эффектти (17.8)-спектрлик функцияның түринен аңсат түсиндириўге болады. Толқын санларының спектри  $\Delta k \approx 1/a$  шамасындағы кеңликке ийе болатуғын болғанлықтан ҳәр қыйлы толқынлардың тезликлери кеңлиги  $\Delta v = (\hbar/m) \Delta k = \hbar/ma$ Т шамасына тең областта жайылған. Сонлықтан пакет  $t$  ўақытқа пропорционал  $\Delta x = t \Delta v = (\hbar/ma) t$  шамасына кеңейеди. Бул нәтийжени жоқарыда тапқан едик.

Ағыс ушын аңлатпа (17.10)-аңлатпадан

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik_0 \frac{1 + i \frac{x}{a^2 k_0}}{1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}} \psi$$

аңлатпасының жәрдемінде алынады. (17.11)-формула менен салыстырғаннан кейинги тиккелей есаплаўлар

$$s(x, t) = \rho(x, t) v_0 \frac{1 + \frac{\hbar t x}{ma^4 k_0}}{1 + \left( \frac{\hbar t}{ma^2} \right)^2} \quad (17.12)$$

формуласын береді. Буннан биз ықтыярлы ўақыт ушын  $s = \rho v_0$  теңлигине пүткиллей ийе болмайтұғынымызды көремиз (биз  $t=0$  моментінде усындай жағдайға ийе болған едик). Бул жағдай да тезликлер спектриниң шекли кеңлигиниң бар екенлигиниң нәтийжеси болып табылады.  $x_0 = v_0 t$  пакетиниң максимумы ушын (17.12)-теңлик те  $s = \rho v_0$  элементар қатнасына алып келеді. Екинши тәрәптен  $x \leq x_0$  ушын  $s \leq \rho v_0$  теңсизлигине ийе боламыз. Бул да ақылға толық жуўап береді. Себеби  $t$  моментине шекем  $x < x_0$  ( $x > x_0$ ) ноқатына тезлиги  $v_0$  шамасынан киши (үлкен) болған толқын пакетиниң бөлимлери ғана жетеді.

Ең ақырында  $\int \rho dx = 1$  нормировка шәртиниң ўақыттың барлық моментлери ушын (барлық ўақыт ушын) орынланатуғынлығын еске түсирип өтемиз. Бул заттың сақланыў нызамының көриниўи болып табылады.

## 18-мәселе. Турғын толқынлар

Бөлекше  $x = -a$  ҳәм  $x = +a$  ноқатларында жайласқан өткермейтуғын дийўаллардың арасына қойылған (дийўаллар усы шегараларға бөлекшелер келгенде күшли ийтерилиске ушыраўы ушын ойлап табылған идеализация болып табылады). Меншикли ҳалларды табыў ҳәм олардың қәсийетлерин таллаў керек.

**Шешими.** Стационар ҳаллар ушын биз

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \quad (18.1)$$

функциясына ийе боламыз. Толқын функциясының кеңисликлик бөлеги  $u(x)$

$$u'' + k^2 u = 0 \quad (18.2)$$

Шредингер теңлемесін қанаатландырады. Бул аңлатпада

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (18.3)$$

хәм ең улыўмалық жағдайда

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (18.4)$$

түрине ийе болады.

Өткизбейтуғын дийўаллардың болыўы

$$u(a) = 0, \quad u(-a) = 0 \quad (18.5)$$

шегаралық шәртлерин пайда етеди. Бул шәртлер

$$\int_{-a}^a |u(x)|^2 dx = 1 \quad (18.6)$$

нормировка шәрти менен квантлық механикада сайлап алыныўы ҳеш қашан регламентленбеген фазалық көбейтиўшини есапқа алмағанда меншикли функцияларды толық анықлаўға мүмкиншилик береді.

(18.4)-аңлатпаны (18.5)-аңлатпаға қойсақ  $A$  хәм  $B$  ларды анықлаў ушын бир текли теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{aligned} Ae^{ika} + Be^{-ika} &= 0, \\ Ae^{-ika} + Be^{ika} &= 0. \end{aligned}$$

Бул система тек анықлаўшы нолге тең болғанда ғана әпиўайы шешимге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} e^{ika}e^{-ika} \\ e^{-ika}e^{ika} \end{vmatrix} = 0 \text{ ямаса } \sin 2ka = 0. \quad (18.7)$$

(18.7) шәртти тек

$$k_n = \frac{\pi}{2a} n, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (18.8)$$

формуласы менен анықланатуғын  $k_n$  коэффициентлериниң меншикли мәнислери ғана қанаатландырады. (18.7)-шәртти қанаатландыратуғын  $k=0$  мәниси (18.6)-нормировка шәртине қайшы келгенликтен итибарға алынбаўы керек. (18.3)- хәм (18.8)-аңлатпалардан энергияның меншикли мәнислери ушын

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \quad (18.9)$$

формуласын аламыз.

(18.8)-аңлатпа тийкарында

$$e^{ik_n a} = e^{i \frac{\pi}{2} n} = i^n$$

теңдіклеріне ийе боламыз. Сонлықтан

$$B = (-1)^{n+1} A.$$

Егер  $n$  тақ сан болса  $B = A$  хәм нормировкаланған функциялар төмендегилерге тең:

$$u_n^+(x) = a^{-\frac{1}{2}} \cos k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots \quad (18.10a)$$

Егер  $n$  жуп сан болса  $B = -A$  хәм

$$u_n^-(x) = a^{-\frac{1}{2}} \sin k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots \quad (18.10b)$$

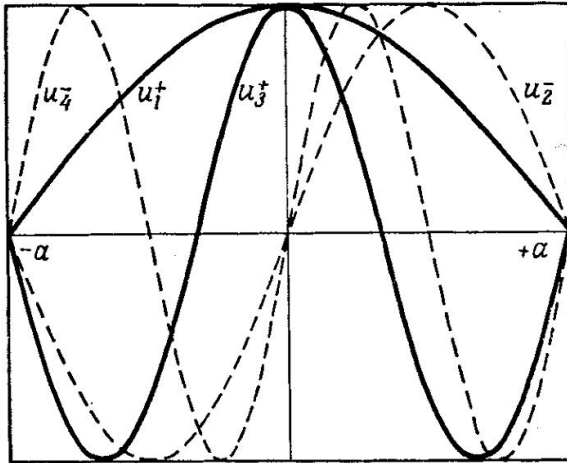
$u_n$  функциялары [егер (18.10b) формуласындағы белгиниң сезилерликтей өзгерисин есапқа алмағанда]  $n$  ниң белгисинен ғәрезсиз болғанлықтан оның ( $n$  ниң) терис мәнислерин итибарға алмаўға болады. Сонлықтан (мысал ретинде) ең төменги төрт ҳалдың толқын функциялары төмендегидей болады:

$$\begin{aligned} n=1, \quad E_1 &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad u_1^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi x}{2a}, \\ n=2, \quad E_2 &= 4E_1, \quad u_2^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi x}{a}, \\ n=3, \quad E_3 &= 9E_1, \quad u_3^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{3\pi x}{2a}, \\ n=4, \quad E_4 &= 16E_1, \quad u_4^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{2\pi x}{a}. \end{aligned} \quad (18.11)$$

Координата басындағы орайдағы инверсияға қатнасы бойынша меншикли функциялардың жуп ( $n$  тақ болғанда) ямаса тақ ( $n$  жуп болғанда) болатуғынлығын атап өтиў керек. Толқын функцияларының усындай қәсийети ҳаққында гәп еткенде ҳалдың жуплығы ҳаққында гәп етеди: симметриялық толқын функциясы болған жағдайда жуплықты оң, ал қарама-қарсы жағдайда терис деп есаплаймыз. Қабыл етилген ( $u_n^+, u_n^-$ ) белгилеўлеринде жуплық жоқарғы «+» хәм «-» индексleri менен белгиленеди.

Биринши төрт меншикли функциялар 1-сүўретте көрсетилген.





1-сүрөт.

Шексиз бийик дийуаларға ийе бир өлшемли потенциал қутыдағы биринши төрт меншикли функциялар.

Меншикли функциялардың кеңисликлик бөлимлери ҳақыйқый болғанлықтан итималлықтың қосынды тоғы (результуирующий ток вероятности) ҳеш бир халда бар бола алмайды. Бул (18.4)-формулада  $|A| = |B|$  теңлигиниң орынланыуы менен байланысly (16-мәселеде келтирилген таллауларды еске түсириңиз). (18.4)-аңлатпадағы  $A$  ҳәм  $B$  амплитудаларына ийе толқынлар тоқлар менен импульслерге қарама-қарсы болған үлеслерди қосады. Сонлықтан энергияның дискрет меншикли мәнислерине тийисли гамильтонианның меншикли функциялары

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

импульс операторының меншикли функциялары бола алмайды. Ҳақыйқатында да (18.10а) ҳәм (18.10б) аңлатпаларын дифференциаллау синусоидалық шешимлердиң қайта тиклениуине алып келмейди, ал синусоидалық шешимлерди косинусоидалық шешимлер менен алмастырады. Импульстиң орташа мәнисин болса

$$\langle n | p | n \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-a}^a u_n(x) \frac{\partial}{\partial x} u_n(x) dx$$

формуласының жәрдемінде есаплауға болады. Барлық ҳаллар ушын бул интеграл жоғалады. Себеби интеграл белгиси астында турған аңлатпа  $x$  тың тақ функциясы болып табылады. Солай етип итималлық тоғының тығызлығының нолге айланыуына сәйкес  $\langle n | p | n \rangle = 0$  аңлатпасына ийе боламыз.

**Ескертиу:** Математикалық көз-қарастан бул мәселе тардың (струнаның) тербелиси ҳаққындағы классикалық мәселе болып табылады. Бирден бир айырма мынадан ибарат: квантлық механикада энергияның меншикли мәнислери квадратлық нызам бойынша өзгереді. Ал классикалық физикада болса меншикли жийиликлер усындай нызам бойынша өзгереді. Бирақ тербелислердиң классикалық энергиясы квантлық механикада ҳеш қандай аналогқа ийе емес. Себеби тербелислердиң классикалық энергиясы тербелислердиң амплитудасынан ғәрезли ҳәм амплитуда ықтыярлы мәниске ийе бола алмайды. Квантлық механикада болса толқын функциясының амплитудасы (18.6)-нормировка шәрти менен бөлекшелердиң саны бирге тең екенлиги жағдайы бойынша белгиленип алынған.

### 19-мәселе. Ярым өткеріуші дийұал (полупроницаемая перегородка)

18-мәселенің шәртлерине қосымша  $x=0$  ноқатына жуқа хәм шексиз бийик ярым өткеріуші дийұал орнатылған. Усы дийұалдың стационар халларға тәсирин анықлаңыз.

**Шешими.** Барлық областты теңдей еки областқа бөлип туратуғын ярым өткеріуші дийұалды  $2\varepsilon$  шекли кеңлигине хәм шекли  $V_0$  бийикликке ийе барьердин дара жағдайы сыпатында қараўға болады ( $x = -\varepsilon$  хәм  $x = +\varepsilon$  ноқатлары арасындағы). Қысқалық ушын

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) = \kappa^2 \quad (6.3.1)$$

белгилеулерин киргиземиз. Еки  $u(\pm a) = 0$  шегаралық шәртинен басқа барьердин бар болғанлығы себепли биз және де төрт шегаралық шәртке ийе боламыз. Себеби  $u(x)$  хәм  $u'(x)$  функциялары  $x = \pm\varepsilon$  ноқатларында үзликсиз болыуы керек. Биринши еки шәртти қанаатландырып хәм шешимди ҳақыйқый формада алып

$$u = \begin{cases} A_1 \sin k(x+a), & -a \leq x \leq -\varepsilon, \\ Be^{-\kappa x} + Ce^{\kappa x}, & -\varepsilon \leq x \leq \varepsilon, \\ A_2 \sin k(x-a), & \varepsilon \leq x \leq a. \end{cases} \quad (6.3.2)$$

аңлатпаларына ийе боламыз.  $x = \pm\varepsilon$  ноқатларындағы үзликсизлик шәрти енди

$$u(-\varepsilon) = A_1 \sin k(a-\varepsilon) = Be^{\kappa\varepsilon} + Ce^{-\kappa\varepsilon}, \quad (19.3a)$$

$$u'(-\varepsilon) = kA_1 \cos k(a-\varepsilon) = \kappa(-Be^{\kappa\varepsilon} + Ce^{-\kappa\varepsilon}), \quad (19.3б)$$

$$u(+\varepsilon) = A_2 \sin k(\varepsilon-a) = Be^{-\kappa\varepsilon} + Ce^{\kappa\varepsilon}, \quad (19.3в)$$

$$u'(+\varepsilon) = kA_2 \cos k(\varepsilon-a) = \kappa(-Be^{-\kappa\varepsilon} + Ce^{\kappa\varepsilon}) \quad (19.3г)$$

теңлемелерин береді. (19.3a), (19.3б) хәм (19.3в), (19.3г) теңликлеринен  $A_1$  менен  $A_2$  ни жоғалтсақ сәйкес еки аңлатпа қалады

$$\begin{aligned} k \operatorname{ctg} k(a-\varepsilon) &= \kappa \frac{-Be^{2\kappa\varepsilon} + C}{Be^{2\kappa\varepsilon} + C}, \\ k \operatorname{ctg} k(a-\varepsilon) &= \kappa \frac{B - Ce^{2\kappa\varepsilon}}{B + Ce^{2\kappa\varepsilon}}. \end{aligned} \quad (19.4)$$

Теңлемелердин шеп тәреплери бир бирине тең болғанлықтан оң тәреплери де бир бирине тең болады. Ал теңлемелердин оң тәреплери бир бири менен тек  $B = \pm C$  болған жағдайда ғана тең болады.  $B = +C$  болған жағдайда (19.3a) хәм-(19.3в) теңликлеринен  $A_1 = -A_2$  екенлигине ийе боламыз хәм оң жуплыққа ийе шешим аламыз. Егер  $B = -C$  теңлиги орынланатуғын болса  $A_1 = A_2$  хәм бизлер терис жуплыққа ийе шешим аламыз. Демек буннан бурынғы мәселедегидей стационар халлар хәр қыйлы жуплық пенен характерленетуғын еки классқа бөлинеді екен.

Енди  $\kappa\varepsilon \rightarrow 0$  хәм

$$\kappa^2 \varepsilon = \Omega \quad (19.5)$$

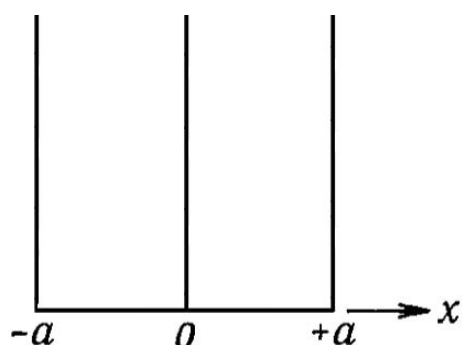
шамасы шекли болып қалатуғын  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $\kappa \rightarrow \infty$  шегине өтемиз.  $\Omega$  шамасын дийўалдың өткізбеўшилиқ коэффициенті деп атаймыз. Себеби  $\Omega$  шамасының өсиўи менен дийўалдың өткеріўшилигі кемейеди. Оң жуплықта ( $B = C$ ) (19.4)-қатнас оң тәрепин қатарға жайғанда

$$k \operatorname{ctg} ka = -\Omega \quad (19.6a)$$

аңлатпасын береді. Теріс жуплықта ( $B = -C$ ) жоқарыда келтирилгендей жоллар менен

$$k \operatorname{ctg} ka \rightarrow -\infty \quad (19.6b)$$

аңлатпасы алынады.



2-сүүрет.

Ярым өткеріўши дийўалға ийе потенциал қуты.

Екинши жағдай әдеўир әпиўайы. Меншикли функциялар дийўалда нолге айланады. Сонлықтан шешім мынадай түрге ийе болады:

$$u_n^-(x) = \begin{cases} A \sin k_n^-(x+a), & -a \leq x < 0, \\ A \sin k_n^-(x-a), & 0 < x \leq a, \end{cases} \quad (19.7a)$$

$$k_n^- a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

$$u_n^-(-x) = -u_n^-(x), \quad |A|^2 = \frac{1}{a}.$$

(19.6a) теңлемеси болса, ол  $k_n^+$  меншикли мәнислерин тек санлы анықлаўға мүмкіншилиқ береді. Тек еки шеклик жағдай буған кирмейди:

1) толық (пүткиллей) өткермейтуғын дийўал ( $\Omega \rightarrow \infty$ ), бундай жағдайда меншикли мәнислер ушын (19.6b) теңлемесиндегидей нәтийже, яғный  $k_n^+ = n\pi$  нәтийжеси алынады;

2) толық өткеретуғын дийўал ( $\Omega = 0$ ), бундай жағдайда  $k_n^+ = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi$  нәтийжесине ийе боламыз.

Солай етип өткізбеўшилиқ коэффициенті шекли мәниске ийе болғанда  $k_n^+$  меншикли мәнислери  $k_n^-$  пенен  $k_{n-1}^-$ Т шамаларының арасында жатады, яғный оң хәм теріс жуплыққа ийе қәддилер гезеклеседи екен. Меншикли функцияларды

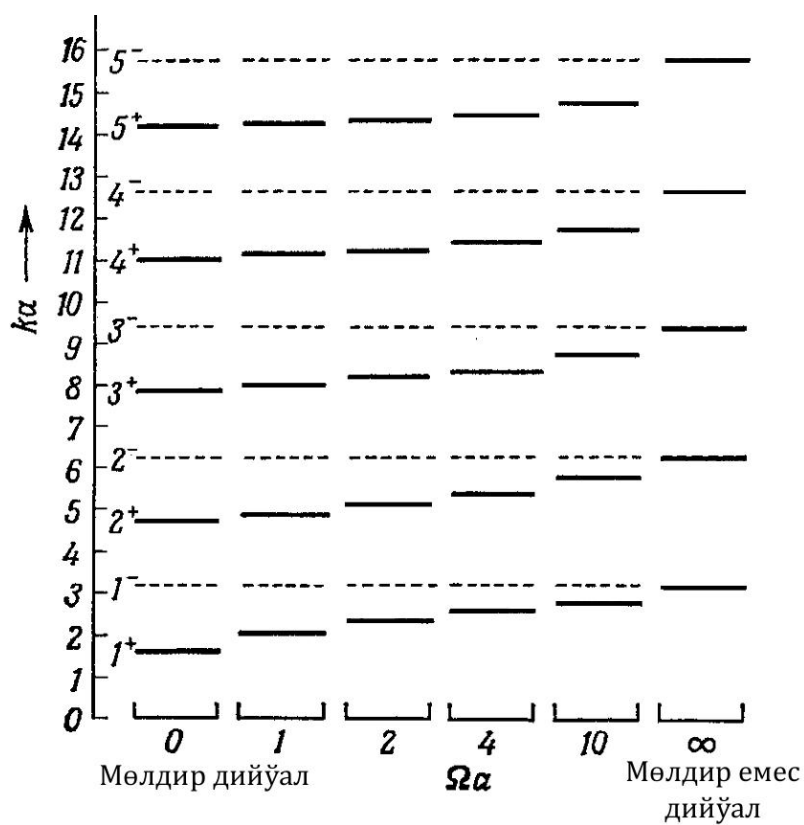
$$\begin{aligned}
 u_n^+(x) &= \begin{cases} -A \sin k_n^+(x+a), & -a \leq x < 0, \\ +A \sin k_n^+(x-a), & 0 < x \leq +a, \end{cases} \\
 \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi < k_n^+a < n\pi, & \quad n = 1, 2, 3, \dots, \\
 u_n^+(-x) = u_n^+(x), & \quad |A|^2 = \frac{2k_n^+}{2k_n^+a - \sin 2k_n^+a}.
 \end{aligned}
 \tag{19.76}$$

түрінде жазыу мүмкін. Олардың мәнісі  $x = 0$  нокатында шеклі хәм графиклерде сынықлар пайда болады.

Төменде келтирилген кестеде өлшем бирлигине ийе емес  $\Omega a$  параметриниң базы бир мәніслериндеги төменги халлар ушын (19.6а) теңлемесиниң жәрдеминде алынған  $k_n^+a$  көбеймесиниң санлы мәніслери келтирилген:

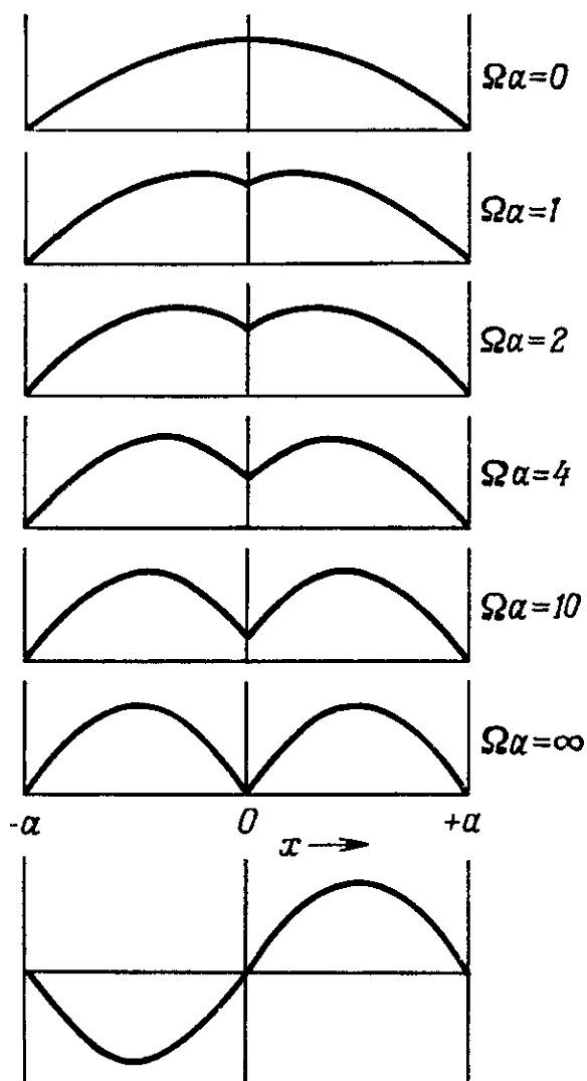
| $\Omega a$    | $n = 1$ | $n = 2$ | $n = 3$ | $n = 4$ | $n = 5$ |
|---------------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 0             | 1,571   | 4,712   | 7,854   | 10,996  | 14,187  |
| $\frac{1}{4}$ | 1,715   | 4,765   | 7,886   | 11,018  | 14,155  |
| $\frac{1}{2}$ | 1,835   | 4,816   | 7,917   | 11,040  | 14,171  |
| 1             | 2,023   | 4,925   | 7,979   | 11,085  | 14,208  |
| 2             | 2,282   | 5,091   | 8,097   | 11,173  | 14,276  |
| 4             | 2,568   | 5,361   | 8,305   | 11,335  | 14,408  |
| 10            | 2,866   | 5,763   | 8,711   | 11,704  | 14,734  |
| $\infty$      | 3,142   | 6,283   | 9,425   | 12,566  | 15,708  |

Усындай жоллар менен алынған қәддилер 3-сүүретте көрсетилген. Бул сүүретте тутас сызықлар оң жуплыққа ийе халларға, ал пунктир сызықлар терис мәнісли жуплыққа ийе халларға тийисли. Бул сүүреттиң шеп тәрәпиндеги ең шетки қәддилер дийўал пүткиллей мөлдир болған ( $\Omega = 0$ ) жағдай ушын алынған. Бул жағдай 18-мәселеде соғылған сүүретке сәйкес келеди. Дийўал қанша мөлдир болған сайын, яғный сүүреттиң оң шетине жақынлаған сайын оң жуплыққа ийе қәддилер жоқары көтеріледі, ал терис мәнісли жуплыққа жуўап беретуғын қәддилер өзлериниң дәслепки ийелеген орынларында қалады. Бул жағдай жуп толқын функцияларының қәсийетлеринде де сәўлеленген. Мысал ретинде  $n = 1$  ушын бир усундай функция 4-сүүретте келтирилген (толқын функциялары нормировкаланбаған). Өткермейтуғын дийўал жағдайында ( $\Omega \rightarrow \infty$ ) ол  $x = 0$  нокатында нолге айланады хәм қутының еки тәрәпи бир биринен ғәрезсиз болады. Егер белгисине итибар бермесек қутының шеп тәрәпинде бул функция биринши тақ меншикли функцияға сәйкес келеди (4-сүүреттиң төменги бөлимінде көрсетилген). Солай етип  $\Omega \rightarrow \infty$  шегинде энергия қәддилери айныйды (3-сүүреттеги шетки оң жолақ).



3-сұйрет.  
Дийұалдың өткізбеушилик  
коэффициентиниң хәр  
қыйлы мәнислериндеги  
қәддилердиң  
жайласыұлары.

Тутас сызықлар оң  
жуплыққа ийе халлар, ал  
пунктирлик сызықлар терис  
мәнисли жуплыққа ийе  
қәддилер ушын.



4-сүрет.

Дийұалдың өткізбеушилик коэффициентінің хәр қыйлы мәніслеріндегі биринши еки стационар халлардың толқын функциялары.

Жоқарысында  $1^+$  халы, төменде  $1^-$  халы.

## 20-мәселе. $\delta$ -тәрізлі потенциал барьердің ярым өткізгіш дийұалы

19-мәселедегі потенциал дийұалды Дирактың  $\delta$ -функциясының жәрдемінде де тәрийиплеу мүмкін. Бул жағдайда потенциалды

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x) \quad (20.1)$$

түрине ийе деп болжаймыз. Буның дурыс екенлигин дәлилдеңіз хәм усындай дийұалға байланысly келип шығатуғын шегаралық шәртлерди таллаңыз.

**Шешими.** Бизге

$$u'' + [k^2 - 2\Omega \delta(x)] u = 0 \quad (20.2)$$

Шредингер теңлемесин шешиу керек. Ең дәслеп (20.2)-дифференциал теңлеме де,  $u(\pm a) = 0$  шегаралық шәрти де  $x \rightarrow -x$  инверсиясына қарата инвариант екенлигин көремиз. Демек дифференциал теңлеме хәм шегаралық шәртлер менен анықланатуғын бул мәселениң шешимлери жуплық операторының меншикли

функциялары ғана бола алады (жуплық операторы  $x$  шамасын  $-x$  шамасына айландырады). Бунның дурыслығына былайынша исениўге болады. Қәлеген  $u(x)$  функциясын еки бөлекке бөлиўге болады: жуп  $f(x) = f(-x)$  ҳәм тақ  $g(x) = -g(-x)$ . Сонлықтан

$$\begin{aligned} u(x) &= Af(x) + Bg(x), \\ u(-x) &= Af(x) - Bg(x). \end{aligned}$$

Егер  $u(x)$  функциясы бизиң мәселемиздиң шешими болатуғын болса,  $u(-x)$  шешими де бизиң мәселемиздиң шешими болады. Ал айныў (вырождение) болмайтуғын болғанлықтан шешим мультипликативлик турақлы дәллигине шекем (мысалы  $\alpha$  ге шекем) бир мәнисли болады. Демек

$$u(-x) = \alpha u(x)$$

ямаса

$$Af(x) - Bg(x) = \alpha [Af(x) + Bg(x)].$$

$f$  пенен  $g$  бир бирине сызықлы ғәрезсиз. Бул жағдайдың орын алыўы ушын  $A = \alpha A$  ҳәм  $B = -\alpha B$  теңликлериниң орынланыўы шәрт. Демек  $\alpha = 1$ ,  $B = 0$ , сонлықтан  $u(x)$  функциясы жуп функция болып табылады. Егер  $\alpha = -1$  болса  $A = 0$  ҳәм  $u(x)$  тақ функция болады.

Енди потенциал дийўал қасындағы жағдайларды үйренемиз. (20.2)-теңлемени дийўалдың тиккелей қасы областында интеграллағанда  $[u(x)]$  функциясын үзликсиз деп есаплаймыз]

$$u'(+0) - u'(-0) = 2\Omega u(0) \quad (20.3)$$

теңлемесине ийе боламыз. Басқа сөз бенен айтқанда

$$L(x) = \frac{u'(x)}{u(x)} \quad (20.4)$$

логарифмлик туўындысы дийўалда  $2\Omega$  шамасына тең секириўге ушырайды:

$$L(+0) - L(-0) = 2\Omega. \quad (20.5)$$

Солай етип 19-мәселеде пайдаланылған жеткиликли дәрежедеги қыйын процедураны потенциал дийўалдағы белгили дәрежедеги жасалма, бирақ жүдә апиўайы шегаралық шәрт пенен алмастырыўға болады екен. Бул шегаралық шәртти алыўымыздың себеби биз дифференциал теңлемениң потенциал дийўалдың тиккелей қасындағы қәсийетлерин ғана есапқа алыў болып табылады. Сонлықтан егер қосымша  $V(x)$  сингулярлық емес потенциал болған жағдайда да, басқа қәлеген орында қойылған шегаралық шәртлерде де бул теңлемени қанаатландыратуғынлығын атап өтемиз.

Енди меншикли функциялар ҳаққындағы мәселеге дыққат аўдарамыз. Егер  $u_n^-(x)$  тақ шешимлерине итибар беретугын болсақ, онда ол потенциал дийўалда нолге айланады, яғный  $u_n^-(0) = 0$ . Бирақ бул жағдайда (20.3)-теңликке байланысly түүында ҳеш қандай секирмели өзгериске ушырамайды, ал ол үзликсиз болады. Солай етип дийўалдың болыўы өткизбеўшилик коэффициентиниң қандай болыўына байланыссыз тақ шешимлерге тәсир етпейди екен. Бул жағдай 19-

мәселедеги алынған нәтижелерге толық сәйкес келеді [(19.7a) — теңлікке қараңыз].

Екінші тәрептен зәрүрлік бойынша жуп шешімлер төмендегідей түрге ийе болуы керек:

$$u_n^+(x) = \begin{cases} -A \sin k_n^+(x+a), & -a \leq x < 0, \\ +A \sin k_n^+(x-a), & 0 < x \leq a. \end{cases} \quad (20.6)$$

Буннан

$$L(+0) = -k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a, \quad L(-0) = k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a$$

хәм сонлықтан (20.5)-шәрттиң күшине хәм (19.6a)-теңлемеге сәйкес

$$k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a = -\Omega.$$

Солай етип буннан кейинги таллаулар 19-мәселениң таллауын толық қайталайды.

## 21-мәселе. $\delta$ тәризли потенциал барьердеги шашырау

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x) \quad (21.1)$$

потенциал барьерине шеп тәрептен энергиясы  $E$  шамасына тең болған бөлекшелер ағысы келип түссин. Барьердің бар болуының бул барьердің еки тәрепинен де «шағылысып» еки тәрепке қарай тарқалатуғын толқынлардың пайда болуына алып келетуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими.**  $x=0$  болған ноқаттың тиккелей қасынан басқа барлық орынларда Шердингер теңлемесиниң улыұмалық шешимин былайынша жазамыз

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k > 0. \quad (21.2)$$

Бул теңлемеді  $A$  хәм  $B$  лар арқалы  $x < 0$  хәм  $x > 0$  областларында хәр қыйлы мәнислерге ийе константалар белгиленген. Бул константалардың мәнислерин сайлап алыу жолы менен (21.2)-шешиминиң шегаралық шәртти қанаатландыратуғын жағдайға алып келиу мүмкин. Егер барьерге келип түсиуши толқынның амплитудасын 1 ге тең деп есаплап нормировканы сайлап алсақ, онда бизиң шешимимизди басқаша жазыу мүмкин

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \\ (1+F)e^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (21.3)$$

Бул аңлатпаларда  $B$  хәм  $F$  сәйкес арқалы алдыға қарай хәм кейинге қарай шашыраған толқынлардың амплитудалары белгиленген.

(20.3)-теңлік бойынша  $x=0$  ноқатында  $u(x)$  функциясының қәсийетлери

$$u(+0) = u(-0) \quad \text{и} \quad u'(+0) - u'(-0) = 2\Omega u(0) \quad (21.4)$$

аңлатпасының жәрдемінде анықланады. Бул қатнастар  $B = F$  хәм



$$ik(1+F) - ik(1-B) = 2\Omega(1+B)$$

қатнасын береді. Сонлықтан ең ақырында

$$B = F = \frac{\Omega}{ik - \Omega} \quad (21.5)$$

формуласын аламыз.

(21.3)-шешімде үш толқынды бір-бірінен айырыу мүмкін: интенсивлиги 1 ге тең келип түсіуші толқын, интенсивлиги  $|B|^2$  қа тең шашыраған толқын және интенсивлиги  $|1+F|^2$  қа тең барьерден өткен толқын. (21.5)-қатнастан

$$|B|^2 = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + k^2}, \quad |1+F|^2 = \frac{k^2}{\Omega^2 + k^2} \quad (21.6)$$

екенлигі келип шығады. Бул

$$1 = |B|^2 + |1+F|^2 \quad (21.7)$$

сақланыу нызамына (үзліксіздік теңлемесіне) алып келеді. Бул нызам бойынша өткен және шашыраған толқындардың интенсивліктерінің қосындысы келип түсіуші толқынның интенсивлігіне тең.

Егер потенциал барьер дерлік өткермейтуғын болса ( $\Omega \rightarrow \infty$ ), онда (21.5) ке байланысы  $B \approx -1$  және  $1+F \approx 0$ . Сонлықтан биз толық шағылысуға ийе боламыз. Егер потенциал барьер дерлік мөлдир болса ( $\Omega = \infty$ )

$$B = F \approx \frac{\Omega}{ik}$$

және шашыраған толқынның интенсивлігі бөлекшениң энергиясына кері пропорционал болып шығады. Әлбетте, бул жағдай бөлекшениң энергиясы жүде үлкен болған шеклерде орын алады және бөлекшениң энергиясы киші болғанда ( $k \ll \Omega$ ) бундай жағдай орын алмайды. Бизлер бул жерде Борнның биринші жақынласуының дара жағдайын көреміз. Бул жақынласу тек жоқары энергияларда ғана дурыс. Бирақ анықлық ушын мына жағдайды атап өтиуимиз керек: кинетикалық энергияның  $V(x)$  потенциал энергияға салыстырғанда үлкен болуы пүткіллей талап етилмейді (гейде усындай талап қойылады). Жақыйқатында да, биз келтирген мысалда  $x=0$  ноқатында хәтте шексіз үлкен мәніске ийе болады.

Алға қарай және артқа (кейінге) қарай бағытланған толқындар ушын шашырау амплитудаларының теңлігі (21.1)-потенциалдың өзине тән белгиси болып табылады

## 22-мәселе. Симметриялы потенциал барьердегі шашырау

Энергиясы  $E$  болған бөлекшелер ағысы  $-a \leq x \leq a$  областында шекленген потенциалный барьерге келип түседі. Потенциал  $x$  тың төмендегідей жуп функциясы болсын:

$$V(x) = V(-x) \quad (22.1)$$

$x = \pm a$  ноқатларында алға және кейінге шашыраған толқындардың

амплитудасын толқын функциясының логарифмлик туыңдысы арқалы көрсетіу талап етиледі.

**Шешими.** (22.1)-симметрия шәртинен әҳмийетли нәтийже келип шығады: энергия  $E$  ниң қәлеген мәнисинде Шредингер теңлемеси жуп

$$u_+(x) = u_+(-x), \quad u'_+(x) = -u'_+(-x) \quad (22.2a)$$

шешимине де, тақ

$$u_-(x) = -u_-(-x), \quad u'_-(x) = u'_-(-x) \quad (22.2б)$$

шешимине де ийе болады. Бул шешимлер сызықлы ғәрезсиз емес, сонлықтан улыұмалық шешимди ықтыярлы сызықлы комбинация сыпатында жазыу мүмкин.  $-a \leq x \leq a$  интервалында  $u_+$  пенен  $u_-$  дара шешимлерин  $x=0$  ноқатта

$$u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0$$

хәм

$$u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1$$

деп есаплап санлы усыллардың жәрдемінде де анықлау мүмкин. Әлбетте, бундай жағдайларда базислик шешимлердиң нормировкасы жеткиликли дәрежеде ықтыярлы түрде әмелге асырылады. Солай етип биз  $x=a$  ноқаттағы олардың логарифмлик туыңдыларын есаплауымыз мүмкин. Бул туыңдыларды өлшем бирликке хәм салыстырмалы нормировкаға ғәрезли емес түрде былайынша жаза аламыз

$$au'_+(a)/u_+(a) = L_+, \quad au'_-(a)/u_-(a) = L_- \quad (22.3)$$

$x=-a$  ноқатында логарифмлик туыңдылар  $au'_\pm(-a)/u_\pm(-a)$  (22.2)-аңлатпаға сәйкес  $-L_+$  хәм  $-L_-$  ге тең болады.

Шеп тәрәптен келип түсетуғын, амплитудасы 1 ге тең толқын ушын шешим мына түрге ийе болады:

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & -\infty < x \leq -a, \\ C_1 u_+(x) + C_2 u_-(x), & -a \leq x \leq a, \\ (1+F)e^{ikx}, & a \leq x < \infty. \end{cases} \quad (22.4)$$

$x=\pm a$  ноқатларындағы  $u(x)$  хәм  $u'(x)$  функцияларының үзликсизлиги төмендегидей төрт шәртти береді:

$$e^{-ika} + Be^{ika} = C_1 u_+(a) - C_2 u_-(a), \quad (22.5a)$$

$$ik(e^{-ika} - Be^{ika}) = -C_1 u'_+(a) + C_2 u'_-(a), \quad (22.5б)$$

$$(1+F)e^{ika} = C_1 u_+(a) + C_2 u_-(a), \quad (22.5в)$$

$$ik(1+F)e^{ika} = C_1 u'_+(a) + C_2 u'_-(a). \quad (22.5г)$$

(22.5a)- хәм (22.5в)-теңликлерин қосып хәм (22.5б)-теңликтен (22.5г)-теңликти алсақ оң тәрәпте сәйкес  ${}^2C_1 u_+(a)$  хәм  ${}^2C_1 u'_+(a)$  функцияларын аламыз. Енди олардың қатнастарын алсақ

$$L_+ = ika \frac{-e^{-ika} + (1 + F + B) e^{ika}}{e^{-ika} + (1 + F + B) e^{ika}} \quad (22.6a)$$

аңлатпасын аламыз. Тап сол сыяқлы, бірақ белгилерин өзгертип исленген процедура

$$L_- = ika \frac{e^{-ika} + (1 + F - B) e^{ika}}{-e^{-ika} + (1 + F - B) e^{ika}} \quad (22.6б)$$

аңлатпасын береді. (22.6a)- хәм (22.6б)-теңлемелерин  $1 + F \pm B$  шамасына қарата шешсек хәм әпиұайылық ушын

$$ka = q \quad (22.7)$$

амплитудалар ушын төмендегидей аңлатпаларды аламыз:

$$B = -\frac{1}{2} e^{-2iq} \left[ \frac{L_+ + iq}{L_+ - iq} + \frac{L_- + iq}{L_- - iq} \right], \quad (22.8a)$$

$$1 + F = -\frac{1}{2} e^{-2iq} \left[ \frac{L_+ + iq}{L_+ - iq} - \frac{L_- + iq}{L_- - iq} \right]. \quad (22.8б)$$

Үзликсизлик теңлемеси тийкарында өткен хәм шағылысқан толқынлардың интенсивликтери келип түсіуші толқынның интенсивлигине тең болуы керек екенлигин күтіу шәрт. Хәқыйқатында да (22.8a)- хәм (22.8б)-қатнастардан

$$|B|^2 = \frac{(L_+ L_- + q^2)^2}{(L_+ L_- + q^2)^2 + q^2 (L_+ - L_-)^2}, \quad (22.9a)$$

$$|1 + F|^2 = \frac{q^2 (L_+ - L_-)^2}{(L_+ L_- + q^2)^2 + q^2 (L_+ - L_-)^2} \quad (22.9б)$$

формулалары келип шығады. Солай етип биз күтип атырған

$$|B|^2 + |1 + F|^2 = 1 \quad (22.10)$$

қатнасы сөзсиз орынланады.

Солай етип алға хәр артқа қарай шашыраған толқынлардың амплитудасын табыу проблемасы  $x = a$  нокатындағы жуп хәм тақ толқын функцияларының (22.3)-логарифмлик туындыларын табыуға алып келинеді екен. Әлбетте бул соңғы мәселени (22.1)-потенциал анық түрде берилмеген жағдайда шешиуге болмайды

21-мәселениң нәтийжесиндегидей бул жағдайда  $B = F$  теңлиги ушын орын жоқ. Егер

$$q |L_+ - L_-| > |L_+ L_- + q^2|$$

теңсизлиги орынланатуғын болса алға қарай шашыраған толқын, ал қарама-қарсы жағдайда кейин қайтқан толқынның интенсивлиги жоқары болады.

### 23-мәселе. Туўры мүйешли барьерден шағылысыў

22-мәселеде алынған улыўма формуланы

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(x) = k_0^2, \quad |x| \leq a \quad (23.)$$

түриндеги потенциаллық барьерге ҳәм бул интервалдың сыртындағы  $V=0$  потенциалына қолланыңыз. Өтиў коэффициентин есаплаңыз.

**Шешими.** Барьердің ишинде Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$u'' + (k^2 - k_0^2) u = 0. \quad (23.2)$$

Бул теңлема еки типтеги шешимге ийе болады: табалдырықтан киши болған потенциал энергия ушын ( $k < k_0$ ) ҳәм табалдырықтан жоқары болған кинетикалық энергия ушын ( $k > k_0$ ). Биз биринши жағдайдан баслаймыз.

$$k_0^2 - k^2 = \kappa^2. \quad (23.3)$$

Бундай жағдайда

$$u'' - \kappa^2 u = 0.$$

Сонлықтан жуп ҳәм тақ шешимлер ушын сәйкес

$$u_+(x) = \operatorname{ch} \kappa x, \quad u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0 \quad (23.4a)$$

ҳәм

$$u_-(x) = \frac{1}{\kappa} \operatorname{sh} \kappa x, \quad u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1 \quad (23.4b)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Демек

$$L_+ = au'_+(a)/u_+(a) = \kappa a \operatorname{th} \kappa a, \quad (23.5a)$$

$$L_- = au'_-(a)/u_-(a) = \kappa a \operatorname{cth} \kappa a. \quad (23.5b)$$

(22.96) формуласының жәрдемінде элементар түрлендириўлерден кейин өтиў коэффициенти ушын

$$T \equiv |1 + F|^2 = \frac{1}{1 + \left( \frac{k_0^2}{2k\kappa} \right)^2 \operatorname{sh}^2 2\kappa a} \quad (23.6)$$

формуласын аламыз.

Шағылысыў коэффициенти болса (22.10)-формуланың жәрдемінде алынады:

$$R \equiv |B|^2 = 1 - T. \quad (23.7)$$

Классикалық механикада келип түсіуші ағыс барьерде толық шағылысқан болар еді хәм биз  $|B|^2 = 1$  хәм  $|1 + F|^2 = 0$  теңліклерине ийе болған болар едик. (23.6)-формулаға сәйкес бул  $\kappa a \rightarrow \infty$  шәрти орынланғанда ғана, яғный бөлекшениң энергия қадди үстінде бийик "потенциал таў" пайда болғанда ғана жүзеге келген болар еді. Бул жағдайда өтиў коэффициенті жүдә киши шамаға, бирақ шекли мәниске ийе болған болар еді („туннель эффекти“). Оны жуўық түрде былайынша жазыў мүмкин

$$T = \frac{16k^2\kappa^2}{k_0^4} e^{-4\kappa a}. \quad (23.8)$$

Өтиў коэффициентиниң шамасының тәртиби тийкарынан экспоненциаллық көбейтиўши тәрпипен анықланады.

Ескертиў ретінде: Буннан былай экспонентаның көрсеткиши ушын ықтыярлы  $V(x)$  потенциалында биз интеграл түриндеги улыўма аңлатпа аламыз (16-мәселени қараңыз):

$$4\kappa a = 2 \int_{-a}^{+a} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V - E)} dx.$$

Бөлекшениң кинетикалық энергиясының мәниси потенциал барьердиң бийиклигинен жоқары болса (23.3)-аңлатпаның жәрдемінде анықланған  $\kappa$  шамасы жормал шамаға айланады. Қолайлылық ушын

$$K^2 = k^2 - k_0^2 = -\kappa^2 \quad (23.9)$$

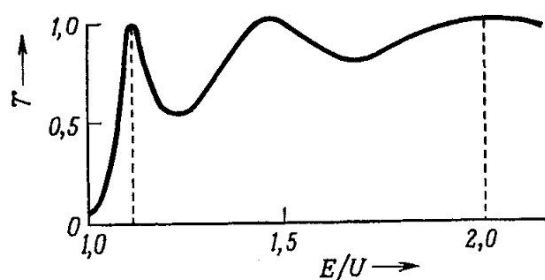
белгилеўин киргизип биз енди (23.6)-аңлатпаның орнына

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \sin^2 2Ka} \quad (23.10)$$

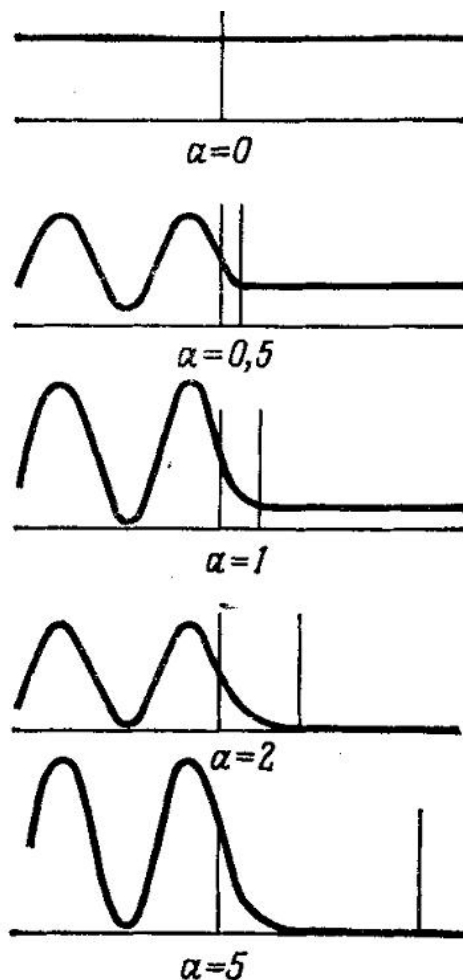
аңлатпасын жаза аламыз. Биз қарап атырған энергияларды классикалық механикада  $T = 1$  хәм  $R = 0$ , (23.10)-формула бойынша анықланған өтиў коэффициенті болса  $T = 1$  болған жағдайда тек  $2Ka = n\pi$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) болған жағдайда максимум мәнисине жеткен болар еді. Усындай максимумлар арасында  $2Ka = (n + 1/2)\pi$  ноқатларында минимумлар жайласады. (23.10)-формуладағы синустағы көбейтиўши қанша киши болса бул минимумлар  $T = 1$  мәнисине жақын жайласады (басқа сөз бенен айтқанда потенциал барьердиң бийиклигине салыстырғанда бөлекшениң энергиясы қаншама үлкен болса).

Өтиў коэффициенті  $T$  шамасының энергияның барьердиң бийиклигине қатнасынан ғәрезлиги (айтайық  $U$  шамасынан) 5-сүүретте келтирилген. Бул сүүретте  $2ka = 3\pi$  болған жағдай ушын  $T(E/U)$  функциясының графиги келтирилген. 6-сүүретте толқын функциясының қалайынша өзгеретуғынлығы көрсетилген: бул сүүретте итималлық тығызлығы  $|u|^2$  шамасының координата  $x$  тан ғәрезлиги сәўлелендирилген. Барьердиң оң тәрәпинде  $|u|^2 = |1 + F|^2$ , яғный итималлықтың тығызлығы турақлы шама, барьердиң шеп тәрәпинде болса келип түскен толқын менен шашыраған толқынлардың интерференциясы орын алады. 6-сүүретте хәр қыйлы кеңликке ийе барьерлер ушын  $k^2 = \kappa^2 = 1/2 k_0^2$  болған жағдай сүүретленген. Барьер қаншама кең болса өткен толқынның интенсивлиги соншама киши хәм

интерференция қубылысы анық көринеди.



5-сұурет. Өтиў коэффициенти  $T$  менен энергияның барьердің бийиклигине қатнасы арасындағы байланыс ( $E > U$  болған жағдай ушын)



6-сұурет.  $E < U$  болған жағдайда шеп тәрептен туўры мүйешли барьерге келип түсетуғын бөлекшелер ағысы ушын  $|u|^2$  шамасының  $x$  координатасынан ғәрезлиги. Вертикал жайласқан сызықлар жубы жәрдемінде барьердің кеңлиги  $a$  белгиленген. Барьердің шеп тәрепиндеги осцилляция келип түсиўши ҳәм шашыраған толқынлардың интерференциясынан пайда болған.

## 24-мәселе. Шағылысыў инверсиясы

Мейли  $0 < x < a$  областта  $V(x) > 0$  потенциал барьер түриндеги тосқынлыққа шеп тәрепинен толқын келип түсетуғын болсын. Потенциалдың формасынан ғәрезсиз толқын оң тәрептен келип түсетуғын болса да шашыратыў коэффициентиниң тап сондай мәниске ийе болатуғынлығын көрсетиңиз.

**Шешими.** Мейли  $u(x)$  пенен  $v(x)$  функциялары  $0 < x < a$  областы ушын вронскианы

$$uv' - vu' = 1 \quad (24.1)$$

болған Шредингер теңлемесінің бір биринен ғәрезсіз екі хақыйқый шешими болсын. Шеп тәрептен келип түсетуғын толқын ушын толқын функциясы

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0, \\ Au(x) + Bv(x), & 0 < x < a \\ Ce^{ik(x-a)}, & x > a, \end{cases} \quad (24.2)$$

түрине ийе болады хәм  $x=0$  менен  $x=a$  ноқатларындағы  $\psi$  хәм  $\psi'$  функцияларының үзликсизлиги

$$\begin{aligned} 1 + R &= Au(0) + Bv(0), \\ ik(1 - R) &= Au'(0) + Bv'(0), \\ Au(a) + Bv(a) &= C, \\ Au'(a) + Bv'(a) &= ikC \end{aligned} \quad (24.3)$$

аңлатпаларын береді. (24.1)-аңлатпаның жәрдемінде соңғы екі теңлемелер жубынан

$$\begin{aligned} A &= C[v'(a) - ikv(a)], \\ B &= -C[u'(a) - iku(a)] \end{aligned} \quad (24.4)$$

аңлатпаларын табамыз.  $A$  хәм  $B$  ушын табылған аңлатпаларды (24.3)-теңлемелер системасының биринши жубына қойсақ

$$1 + R = (p_{0a} - iq)C, \quad 1 - R = (p_{a0} - ir)C \quad (24.5)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Бул аңлатпаларда жазыұды қысқартыұ ушын мынадай белгилеұлер қабыл етилген:

$$\begin{aligned} p_{0a} &= u(0)v'(a) - v(0)u'(a), \\ p_{a0} &= u(a)v'(0) - v(a)u'(0), \\ q &= k[u(0)v(a) - v(0)u(a)], \\ r &= \frac{1}{k}[u'(0)v'(a) - v'(0)u'(a)]. \end{aligned} \quad (24.6)$$

(24.5)-қатнастың жәрдемінде ең ақырында мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

$$R = \frac{(p_{0a} - p_{a0}) - i(q - r)}{(p_{0a} + p_{a0}) - i(q + r)}. \quad (24.7)$$

Сонлықтан шағылыстырыұ коэффициенти ушын

$$|R|^2 = \frac{(p_{0a} - p_{a0})^2 + (q - r)^2}{(p_{0a} + p_{a0})^2 + (q + r)^2} \quad (24.8)$$

түріндеги аңлатпаны аламыз.

Енди келип түсиұши толқын барьерге оң тәрептен келип түсетуғын болсын. Буның ушын (24.2) толқын функциясын

$$\tilde{\psi} = \begin{cases} \tilde{C}e^{-ikx}, & x < 0, \\ \tilde{A}u(x) + \tilde{B}v(x), & 0 < x < a, \\ e^{-ik(x-a)} + \tilde{R}e^{ik(x-a)}, & x > a \end{cases} \quad (24.9)$$

аңлатпасы менен алмастырыў жеткиликли. Енди үзликсизлик шәрти мынаны береді:

$$\begin{aligned} 1 + \tilde{R} &= \tilde{A}u(a) + \tilde{B}v(a), \\ -ik(1 - \tilde{R}) &= \tilde{A}u'(a) + \tilde{B}v'(a), \\ \tilde{A}u(0) + \tilde{B}v(0) &= \tilde{C}, \\ \tilde{A}u'(0) + \tilde{B}v'(0) &= -ik\tilde{C}. \end{aligned} \quad (24.10)$$

Бул теңлемелердиң структурасы (24.3)-теңлемелердиң структурасы менен бирдей. (24.10)-теңлемелерди (24.3)-теңлемелерден  $k$  ны  $-k$  ға алмастырыў ҳәм  $a$  аргументи менен 0 ди орын алмастырыў жолы менен алыў мүмкин. Бундай түрлендириўлерди (24.6)-қатнастарға қоллансақ

$$p_{0a} \rightarrow p_{a0}, \quad p_{a0} \rightarrow p_{0a}, \quad q \rightarrow q, \quad r \rightarrow r \quad (24.11)$$

өзгерислерин береді. Солай етип ең ақырғы формулалар (24.7) менен (24.8) ден тек  $p_{0a}$  менен  $p_{a0}$  диң орынларының алмасқанлығы менен ғана айрылады екен. (24.8)-аңлатпа  $p_{0a}$  менен  $p_{a0}$  шамаларына қарата симметриялы болғанлықтан шағылыстырыў коэффициенті

$$|\tilde{R}|^2 = |R|^2 \quad (24.12)$$

шеп тәрәптен келип түсетуғын толқын ушын да, оң тәрәптен келип түсетуғын толқын ушын да бирдей мәниске ийе болады. Бирақ бул  $R$  амплитудасы ушын мәниске ийе болмайды. Хәқыйқатында да (24.7)-теңлик  $\alpha$  ҳәм  $\beta$  комплексли санларының  $R = \alpha/\beta$  қатнасы түринде жазылғанда (24.11)-қатнасқа сәйкес  $\tilde{R} = -\alpha^*\beta$  түрине түрленеди.

## 25-мәселе. Туўры мүйешли потенциал шуқыр

$$V(x) = \begin{cases} -U, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a \end{cases} \quad (25.1)$$

туўры мүйешли потенциал шуқыр бар болған жағдай ушын байланысқан ҳалларды ҳәм усындай ҳаллар менен байланыссы болған меншикли мәнислерди табыңыз.

**Шешими.** Буннан бурын қарап шығылған еки мәселениң нәтийжелери оң мәнисли энергияға ийе ҳаллардың қәсийетлерин қыйыншылықсыз үйрениўге мүмкиншилик береді. Сонлықтан бизге байланысқан ҳалларға сәйкес келиўши терис энергиялар жағдайын қарап шығыў жеткиликли.

Потенциал  $V(x) = V(-x)$  инверсиясына қарата инвариант. Сонлықтан шешимлердиң жуп ямаса тақ болыўы шәрт (20-мәселеге қараңыз).

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \quad U = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}, \quad k^2 = k_0^2 - \kappa^2 \quad (25.2)$$

деп есаплап бул шешимлерди былайынша жазыўға болады:



Жуп шешимлер:

$$\begin{aligned} u_+(x) &= \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \cos ka e^{\kappa(a-x)}, & x > a, \end{cases} \\ u_+(-x) &= u_+(x), \\ \frac{1}{A_+^2} &= \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \frac{1}{\kappa} \cos^2 ka; \end{aligned} \quad (25.3a)$$

Тақ шешимлер:

$$\begin{aligned} u_-(x) &= \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \sin ka e^{\kappa(a-x)}, & x > a, \end{cases} \\ u_-(-x) &= -u_-(x), \\ \frac{1}{A_-^2} &= \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \frac{1}{\kappa} \sin^2 ka. \end{aligned} \quad (25.3б)$$

Жоқарыда потенциал шуқырдың ишиндеги хәм сыртындағы амплитудалардың мәниси  $u(x)$  функциясы  $x=a$  ноқатында үзликсиз болатуғындай етип сайлап алынған. Нормировкалаушы турақлы

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u|^2 dx = 1$$

шәртинің жәрдемінде анықланған еди.  $u'$  дың  $x=a$  ноқатында үзликсиз болыуы талабы және бир шәртти береді:

Жуп

$$-k \sin ka = -\kappa \cos ka \quad (25.4a)$$

ямаса

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k}; \quad (25.4б)$$

Тақ

$$k \cos ka = -\kappa \sin ka \quad (25.5a)$$

ямаса

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{k}{\kappa}. \quad (25.5б)$$

(25.4)- хәм (25.2)-аңлатпалардың жәрдемінде нормировкаланған турақлылар ушын келтирип шығарылған аңлатпаларды еки жағдайда да бирдей теңлик алынатұғындай етип әпиұайыластырыу мүмкин:

$$\frac{1}{A_{\pm}^2} = a + \frac{1}{\kappa}. \quad (25.5)$$

(25.4)-теңлемелерден меншикли мәнислерди табыу ушын бул теңлемелердің оң тәрәпиндеги шаманы (25.2)-аңлатпа менен алмастырамыз хәм

$$C = k_0 a \quad (25.6)$$

белгилеуін киргиземиз. Нәтийжеде төмендегилерди аламыз:

Жуп:

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}{ka} \quad (25.7a)$$

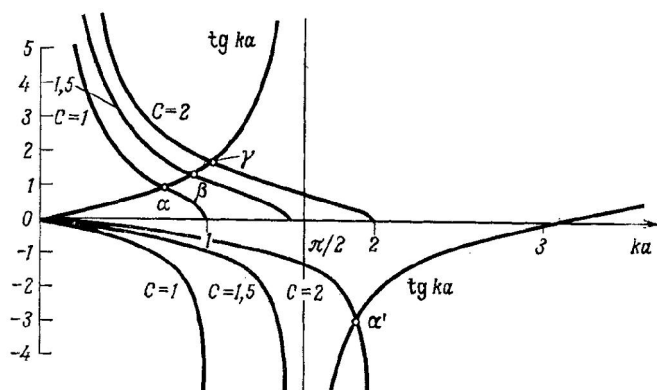
хәм тақ:

$$\operatorname{tg} ka = - \frac{ka}{\sqrt{C^2 - (ka)^2}} \quad (25.7б)$$

Потенциалдың берілген мәнісінде  $C$  шамасы турақлы, оның мәніси шуқырдың өлшемлеринен ( $C^2 \sim Ua^2$ ) ғана ғәрезли. Ал (25.7a)- хәм (25.7б) теңлемелери  $ka$  ның барлық мәніслерин, соның менен бирге энергияның берілген өлшемлердеги шуқырда жүзеге келетуғын барлық

$$E = -U \left[ 1 - \left( \frac{ka}{C} \right)^2 \right] \quad (25.)$$

мәніслерин анықлауға мүмкиншилик береді.



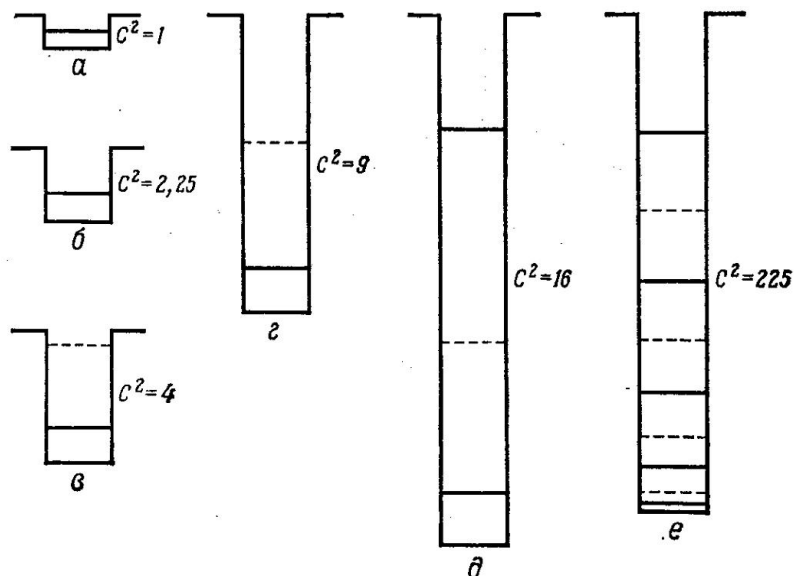
7-сүүрет.

(25.7a) хәм (25.7б) теңлемелериниң графикалық шешими.

Сүүретте теңлемелердин оң тәреплериниң  $C$  параметриниң хәр қандай мәніслериндеги иймекликлердин тангенсоида  $\operatorname{tg} ka$  менен кесилисиу ноқатлары көрсетилген. Оң ординаталарға ийе иймекликлер оң халларға, ал терис ординаталарға ийе иймекликлер тақ халларға тийисли.

7-сүүретте  $\operatorname{tg} ka$ , соның менен бирге (25.7a) хәм (25.7б) сүүреттин оң бөлимлери  $ka$  шамасының функциясы сыпатында көрсетилген. Меншикли мәніслер соңғы еки иймекликтин тангенсоида менен кесилисиу ноқатының абсциссасы сыпатында табылады. Бул иймекликлер шуқырдың өлшемлери тәрепинен анықланатуғын  $C$  параметринен ғәрезли. Мысалы  $C = 1$  мәнісинен баслап биз жуп жағдайда  $\alpha$  арқалы белгиленген бир кесилисиу ноқатын анықлаймыз. Тақ жағдайында болса биз бир де ноқатты ала алмаймыз. Демек бундай өлшемлерге ийе шуқырда оң жуплыққа ийе тек бир ғана байланысқан хал жүзеге келеди екен. Бул шуқыр сәйкес қәдди менен 8,а сүүретте келтирилген. Үлкен өлшемлерге ийе шуқыр ушын ( $C = 1,5$ ) 7-сүүреттеги иймекликлер  $\beta$  ноқатында кесилиседі. Тап бурынғыдай тек бир оң жуплыққа ийе хал болады (8,б сүүрет). Қала берсе  $-(ka)_\beta > (ka)_\alpha$  теңсізлиги орынлағанлықтан  $E_\beta < E_\alpha$ . Егер шуқырдың өлшемин және де үлкейтсек (мысалы  $C = 2$  шамасын алсақ), онда  $\gamma$  ноқатындағы кесилисиу оң жуплыққа ийе еле де төменирек халды береді ( $E_\gamma < E_\beta$ ). Бирақ усы айтылғанлардан басқа оған  $\alpha'$  ноқатындағы кесилисиуге сәйкес келетуғын тақ жуплыққа ийе хал қосылады (8-в сүүрет). Шуқырдың өлшемлериниң буннан былай өсиуі менен оның «сыйдырғышлығы» артады (8 г—е сүүретлер):  $C$

ның өсиуі менен оң хәм терис жуплыққа ийе гезеклесип жайласқан халлардың сериясын пайда етип байланысқан халлардың саны да сызықты түрде өседі. Меншикли функциялар болса, олар улыұмалық қағыйдаға бағынады: оларда ноллер қаншама көп болса, онда олардың энергиялар шкаласындағы ийелеген орны соншама жоқары болады. Төрт төменги халлардың толқын функциялары  $C = 5$  болған жағдай ушын 9-сұуретте көрсетілген.



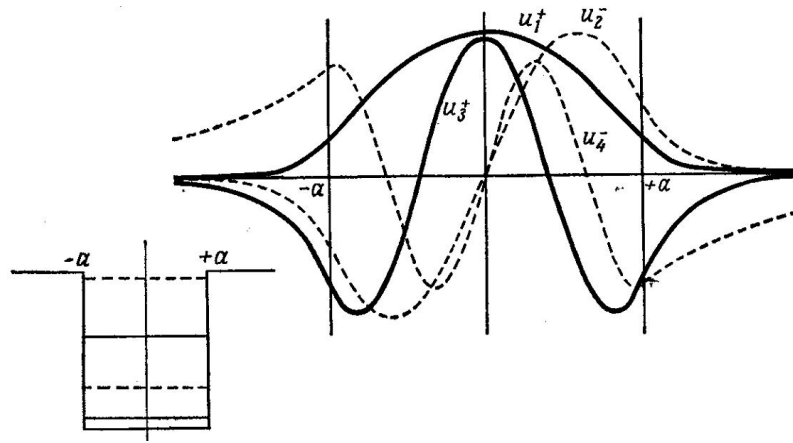
8-сұурет.  $C$  характеристикалық параметриниң хәр қыйлы мәнислеріндеги энергия қәддилери (a - e).

Тутас сызықлар – оң жуплыққа ийе халлар, пунктир сызықлар – терис жуплыққа ийе халлар.

Классикалық механикада бөлекше шуқырды шеклеп турған дийұаллар арасында ( $x = \pm a$  ноқатлары арасында) энергияның қәлеген мәнисінде тербеле алған болар еди. Шуқырдың сыртында оның кинетикалық энергиясы терис мәниске ийе болған болар еди. Сонлықтан шуқырдан сырттағы область классикалық жақтан жетиўге болмайтуғын область болып табылады. Квантлық механикада болса биз бундай қатаң түрде қойылған шеклеўге ийе болмаймыз. Шуқырдың сыртында бөлекшени табыўдың итималлығы  $P_i$  бирден (1 ден) киши болады:

$$P_i = \int_{-a}^{+a} |u|^2 dx = 1 - \frac{k^2}{k_0^2(1 + \kappa a)}. \quad (25.9)$$

Солай етип бөлекшениң шуқырдың сыртында жайласыуының итималлығы нолге тең емес екен. Шуқырдан сырттағы шекли интервал ушын итималлық бөлекше менен шуқырдың арасындағы қашықтықтың үлкейиуі менен экспоненциал түрде кемейеди.



9-сүүрет.  $C = 5$  болған жағдай ушын энергия қәддилери хәм меншикли функциялар. Тутас сызықлар — оң жуплыққа ийе ҳаллар, пунктир сызықлар – тақ жуплыққа ийе ҳаллар.

## 26-мәселе. Еки шексиз дийўаллар арасындағы туўры мүйешли потенциал шуқыр

10-сүүретте келтирилген потенциал ушын Шредингер теңлемесиниң шешимлерин табыңыз.  $l \rightarrow \infty$  шегиндеги оң мәнисли энергияға ийе ҳалларды айрықша түрде қараңыз.

**Шешими.**  $E < 0$  болған «байланысқан» ҳалларды тезлик пенен қараўдан баслаймыз. (25.2)-теңлик пенен анықланған бурынғы  $k^2$ ,  $k_0^2$  хәм  $\kappa^2$  ларды хәм

$$\int_{-l}^{+l} |u|^2 dx = 1$$

нормировка шәртин пайдаланып толқын функцияларын төмендегидей етип жаза аламыз:

Жуп:

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\cos ka \operatorname{sh} \kappa(l-x)}{\operatorname{sh} \kappa(l-a)}, & a \leq x \leq l, \end{cases} \quad (26.1a)$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \frac{\cos^2 ka}{\kappa} \left[ \operatorname{ctg} \kappa(l-a) - \frac{\kappa(l-a)}{\operatorname{sh}^2 \kappa(l-a)} \right];$$

Тақ:

$$u_- = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \frac{\sin ka \operatorname{sh} \kappa(l-x)}{\operatorname{sh} \kappa(l-a)}, & a \leq x \leq l, \end{cases} \quad (26.1b)$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \frac{\sin^2 ka}{\kappa} \left[ \operatorname{cth} \kappa(l-a) - \frac{\kappa(l-a)}{\operatorname{sh}^2 \kappa(l-a)} \right].$$

Бул жерде де 25-мәселедегидей  $u(x)$  функциясының  $x=a$  ноқатындағы үзликсизлигин есапқа алдық. Бирақ бул ноқаттағы  $u'(x)$  туўындысының үзликсизлиги талабы бизге қосымша шәрт қояды:

Жуп

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k} \operatorname{cth} \kappa (l-a), \quad (26.2a)$$

тақ

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\kappa} \operatorname{th} \kappa (l-a). \quad (26.26)$$

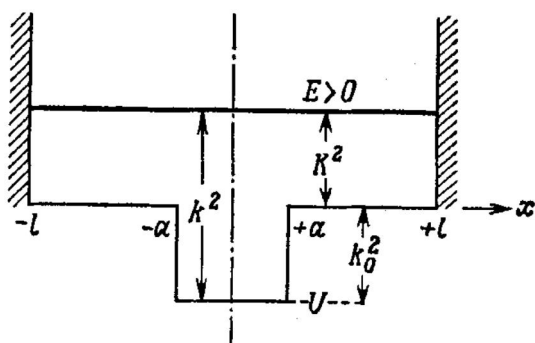
Бул аңлатпалар меншикли мәніслерди есаплауға мүмкіншилик береді. бірақ биз буннан былай майда-шүйделерине тереңлеспейміз хәм

$$\kappa (l-a) \gg 1$$

шәрти орынланғанда гиперболалық функцияның екеўиниң де 1 ге тезден умтылатуғынлығын аңғарамыз. Бундай жағдайда (26.2a) хәм (26.26) теңлемелери алдыңғы мәселениң меншикли мәніслер ушын жазылған (25.4a) хәм (25.46) аңлатпаларына, ал  $1/A_{\pm}^2$  ушын (26.1a) хәм (26.16) нормировка қатнастары сәйкес (25.3a) хәм (25.36) қатнастарына өтеді. Толқын функцияларының өзлери ушын жазылған (26.1a)- хәм (26.16)-аңлатпаларда  $|x| < l$ , бірақ  $\kappa(l-x) \gg 1$  шәрти орынланғанда, яғный тап солай етип (25.3a)- хәм (25.36)-толқын функцияларына және де қайтып келип

$$\frac{\operatorname{sh} \kappa (l-x)}{\operatorname{sh} \kappa (l-a)} \approx e^{\kappa (a-x)}$$

деп алыуға болады.



10-сүүрет.

Оң мәнісли энергияларға ийе ҳаллар ҳаққындағы мәселе әдеўир кызық мәселе болып табылады.  $l$  диң шекли мәніслеринде,  $l$  диң өсиўи менен пайда болатуғын қәддилердиң тығыз системасын пайда ететуғын дискрет меншикли мәніслер бар болады. Бул система  $l \rightarrow \infty$  шегинде континуумға өтеді.  $E > 0$  ниң орнына жаңа

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}, \quad K^2 = -\kappa^2 = k^2 - k_0^2 \quad (26.3)$$

өзгериўшисин киргизип биз толқын функцияларын мына түрде жазыўымыз мүмкин:

Жуп

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\cos ka}{\sin K(l-a)} \sin K(l-x), & a \leq x \leq l, \end{cases} \quad (26.4a)$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] - \frac{\cos^2 ka}{K} \left[ \operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)} \right];$$

Тақ

$$u_- = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \frac{\sin ka}{\sin K(l-a)} \sin K(l-x), & a \leq x \leq l, \end{cases} \quad (26.46)$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] - \frac{\sin^2 ka}{K} \left[ \operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)} \right].$$

Бул аңлатпалар бойынша  $u(x)$  функциясы енди үзлексіз, ал оның туыңдысы  $u'(x)$  болған функциясының үзлексізлігі және де шәрт береді:

жуп

$$\operatorname{tg} ka = \frac{K}{k} \operatorname{ctg} K(l-a), \quad (26.5a)$$

тақ

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{K} \operatorname{tg} K(l-a). \quad (26.5б)$$

Бул шәртлер меншикли мәніслерди есаплауға мүмкіншилиқ береді. Бул шәртти пайдаланып биз  $1/A_\pm^2$  шамалары ушын жазылған нормировкалаушы аңлатпалардағы екінші қаўсырмалардағы  $\operatorname{ctg} K(l-a)$  ны алмастыра аламыз. Нәтийжеде мына аңлатпаларды аламыз:

$$\begin{aligned} \frac{1}{A_+^2} = & \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \\ & + (l-a) \left( \cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \sin^2 ka \right) - \frac{k}{K^2} \sin ka \cos ka \end{aligned} \quad (26.6a)$$

хәм

$$\begin{aligned} \frac{1}{A_-^2} = & \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \\ & + (l-a) \left( \sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \cos^2 ka \right) + \frac{k}{K^2} \sin ka \cos ka. \end{aligned} \quad (26.6б)$$

Егер  $l \rightarrow \infty$  шәрти орынланатуғын болса, онда бул аңлатпалардағы екінші ағза шексіз үлкейеди. Сонлықтан

$$\begin{aligned} \frac{1}{A_+^2} & \approx l \left( \cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \sin^2 ka \right), \\ \frac{1}{A_-^2} & \approx l \left( \sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \cos^2 ka \right). \end{aligned} \quad (26.7)$$

Бирақ усы жағдайға қарамастан шуқырдың сыртындағы амплитуданы (26.4a) хәм (26.4б) аңлатпаларынан тиккелей алыуға болады:

$$\frac{\sin^2 K(l-a)}{A_+^2 \cos^2 ka} \rightarrow l, \quad \frac{\sin^2 K(l-a)}{A_-^2 \sin^2 ka} \rightarrow l. \quad (26.8)$$

Сонлықтан  $x > a$  шәрти орынланғанда толқын функциясы

$$u_\pm = \frac{1}{\sqrt{l}} \sin K(l-x) \quad (26.9)$$

түрине ийе болады. Бул жерде  $l$  шамасы елге шекем толқын функциясының фазасына киреди. Бирақ оны меншикли мәнислерди анықлайтуғын (26.5a)- хәм (26.5б)-теңлемелердин жәрдемінде жоғалтыў мүмкин:

жуп

$$Kl = \operatorname{arctg} \left( \frac{\frac{K}{k} + \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} Ka}{\operatorname{tg} ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg} Ka} \right), \quad (26.9a)$$

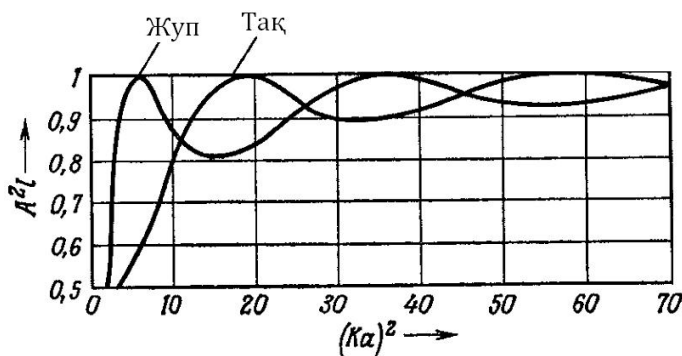
тақ

$$Kl = \operatorname{arctg} \left( \frac{\operatorname{tg} Ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg} ka}{1 + \frac{K}{k} \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} Ka} \right). \quad (26.9б)$$

Бул толқын функциялар системасының ең көзге тасланатуғын айырмашылығы олардың энергия қәддилеринен ибарат. Энергия қәддилерининң тығызлығын  $l$  диң жүдә үлкен, бирақ шекли мәнислери ушын (26.5a) хәм (26.5б) теңлемелерден табыў мүмкин.  $Kl$  өзгериўшиси кеңлиги  $\pi$  ге тең интервалда өзгергенде бул теңлемелердин оң тәрәпи ҳақыйқый көшер бойынша  $-\infty$  тен  $+\infty$  ке шекем өзгереді. Теңлемениң екеўининң де бул интервалда тек бир шешими болады. Сонлықтан биз бир биринен орташа  $\Delta K = \pi/(2l)$  шамасындағы қашықлықта жайласқан гезеклесип жайласқан жуп хәм тақ қәддилерге ийе боламыз ( $K$  өзгериўшиси шкаласында). (26.3)-аңлатпаға сәйкес энергия шкаласындағы қәддилер арасындағы орташа қашықлық

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{m} K \frac{\pi}{2l} = \frac{\pi}{l} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m} E} \quad (26.10)$$

шамасына тең. Солай етип избе-из жайласқан қәддилер арасындағы орташа қашықлық тек  $E^{1/2}$  шамасына пропорционал хәм нормировкалаўшы интервалдың узынлығына кери пропорционал өседі екен. Демек  $l \rightarrow \infty$  шегінде дискрет энергия спектри үзликсиз спектрге айланады екен.



11-сүүрет.  
Үзликсиз спектрдеги виртуаллық  
халлар.

$k_0 a \equiv C = 2$  болған жағдай ушын амплитуданың өзгериў өзгешелиги 11-сүүретте келтирилген. Өлшем бирлигине ийе емес  $A^2 l$  шамасы шуқырдың сыртындағы барлық областта бирдей мәниске ийе, ал  $l$  шамасы үлкен болғанда шуқырдың ишиндеги амплитуданың квадратының өлшемин береді. Бул шаманың  $(Ka)^2$  шамасынан фәрезлигининң графиги, яғный бирликсиз шамалардағы энергияның мәнисинен фәрезлиги (26.7)-формуланың жәрдемінде қурылған. Энергияның избе-

из мәніслерінің шексіз көп саны бар. Олар үшін  $A^2I$  шамасы 1 ге тең максималлық мәністи қабылдайды. Максимумлар арасында энергия үлкен болған сайын хәлсіз көрінетуін амплитуданың минимумлары жатады (11-сұйреттегі ордината көшерінің төменгі жартысының көрсетілмегенлігіне итибар бериңіз). Амплитуданың максимумына сәйкес келетуін энергияларда энергияның мәнісі оң болса да биз қарап атырған халлар байланысқан халлардың базы бир белгилерін еле де сақлайды. Себеби бул халларда шуқыр ийеленген областтағы мүмкін болған толқын функцияларының максималлық концентрациясы алынады. Усындай себепке байланысly виртуаллық халлар хәкқында гәп етиледі (терис энергияға ийе «хәкыйқый» байланысқан халларға қарама-қарсы мәністе).

## 28-мәселе. Дәуірлі потенциал

Дәуірлі потенциал бар болған жағдайдағы толқын функциялары менен энергия спектри арасындағы улыұмалық қатнасларды алыңыз.

**Шешими.** Егер  $V(x)$  арқалы дәуірі  $a$  шамасына тең дәуірлі функция берілген болса, онда Шредингер теңлемесі  $a$  еселенген барлық трансляцияларға қарата инвариант болады:

$$V(x+a) = V(x), \quad x \rightarrow x+na, \quad n=0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (28.1)$$

$u_1(x)$  хәм  $u_2(x)$  арқалы Шредингер теңлемесінің сызықлы ғәрезсіз шешімлері болсын. Бундай жағдайда  $u_1(x+a)$  хәм  $u_2(x+a)$  функциялары да сол теңлемесінің шешімлері болады. Қәлеген шешімді  $u_1(x)$  хәм  $u_2(x)$  функцияларының сызықлы комбинациясы түрінде қарауға болғанлықтан, бул жағдай  $u_1(x+a)$  хәм  $u_2(x+a)$  функциялары үшін да орынлы болады:

$$\begin{aligned} u_1(x+a) &= C_{11}u_1(x) + C_{12}u_2(x), \\ u_2(x+a) &= C_{21}u_1(x) + C_{22}u_2(x). \end{aligned} \quad (28.2)$$

Енди усы шешімлердің ишінде бир бири менен

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x) \quad (28.3)$$

аңлатпасының жәрдемінде байланысқан  $\psi_1$  хәм  $\psi_2$  шешімлері де бар болатуғынлығын (Флоке теоремасы) дәлиллеуіге болады. Бул аңлатпада  $\lambda$  арқалы турақлы көбейтiуші белгіленген. Бул жағдайда

$$\psi(x+na) = \lambda^n \psi(x), \quad n=0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (28.3a)$$

шәртинің орынланатуғынлығы айқын. Биз излеген дәлиллеуі мына түрге ийе болады:

$$\psi(x) = Au_1(x) + Bu_2(x) \quad (28.4)$$

хәм (28.2)-аңлатпаға сәйкес

$$\psi(x+a) = (AC_{11} + BC_{21})u_1(x) + (AC_{12} + BC_{22})u_2(x).$$

Егер



$$\begin{aligned} AC_{11} + BC_{21} &= \lambda A, \\ AC_{12} + BC_{22} &= \lambda B \end{aligned} \quad (28.5)$$

теңдіктері орынланатынын болса, онда соңғы аңлатпа  $\lambda\psi(x)$  шамасына тең болады.

$A$  хәм  $B$  шамаларына қарата (28.5)- еки бир текли сызықты алгебралық теңдемелер системасы тек ғана

$$\begin{vmatrix} C_{11} - \lambda & C_{21} \\ C_{12} & C_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (28.6)$$

детерминанты нолге тең болғанда ғана құрамалы емес шешімлерге ийе болады. Бул  $\lambda$  шамасына қарата квадрат теңleme болып, оның түбірлері  $\lambda_1$  менен  $\lambda_2$  ге еки  $\psi_1$  хәм  $\psi_2$  функциялары сәйкес келеди.

(28.3)-формуладан

$$D = \psi_1 \psi_2' - \psi_2 \psi_1'$$

Вронский детерминантының (Вронский детерминанты деп  $\psi_1 \psi_2' - \psi_2 \psi_1'$  түріндеги детерминантқа айтамыз)

$$D(x+a) = \lambda_1 \lambda_2 D(x)$$

қантасын қанаатландыратуғынлығын көріуге болады. Грин теоремасы бойынша Вронский детерминанты  $x$  тан ғәрезли емес, сонлықтан

$$\lambda_1 \lambda_2 = 1 \quad (28.7)$$

қатнасы келип шығады.

$\lambda_1$  менен  $\lambda_2$  параметрлері хақында толығырақ мағлыұматларды (28.3а) теңлігін қарап алыуға болады. Мейли  $|\lambda| > 1$  болсын. Бундай жағдайда толқын функциясы  $\psi$  диң амплитудасы  $x \rightarrow \infty$  та шексиз үлкейеди хәм  $x \rightarrow -\infty$  де шексиз кемейеди. Егер  $|\lambda| < 1$  теңсизлиги орынланса қарама-қарсы жағдай орын алады. Бундай шешімлер нормировкаланбайды. Сонлықтан физикалық мәніслерге ийе шешімлер тек  $|\lambda| = 1$  теңліги орынланған жағдайда ғана, яғный

$$\lambda_1 = e^{iKa} \quad \text{хәм} \quad \lambda_2 = e^{-iKa} \quad (28.8)$$

орын алады. Бул аңлатпаларда  $K$  арқалы хақыйқый шама белгиленген.  $e^{2\pi i n} = 1$  болғанлықтан  $K$  шамасының

$$-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a} \quad (28.9)$$

интервалында жатқан мәніслері менен шеклениуге болады. Бул жағдай бизге мүмкин болған барлық толқын функцияларын береді. Солай етип  $\psi(x)$  тың барлық шекленген шешімлері ушын

$$\psi(x+na) = e^{inKa} \psi(x) \quad (28.10)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул жағдай  $\psi(x)$  функциясы тек

$$\psi(x) = e^{iKx} u_K(x) \quad (28.11)$$

түрге ийе болғанда ғана жүзеге келеді. Бул аңлатпада  $u_K(x)$  арқалы дәуірлі функция, яғный

$$u_K(x) = u_K(x+a) \quad (28.12)$$

түріндегі функция белгиленген. Бул нәтиже Блох теоремасының мазмұнын құрайды.

Енді энергия спектри мәселесіне келеміз.  $0 \leq x \leq a$  интервалында (28.4) аңлатпасы үшін ісленгендей қандай да  $u_1$  хәм  $u_2$  шешімлерінен  $\psi$  үшін шешімді жазыуымыз керек. Дәуірліліктің қоңсы  $a \leq x \leq 2a$  интервалы үшін (28.10)-формулаға сәйкес

$$\psi(x) = e^{iKa} [Au_1(x-a) + Bu_2(x-a)] \quad (28.13)$$

формуласын аламыз. Бунда аргументтің  $x-a$  мәнісі алдыңғы интервалға түседі. Бул интерваллардың шегарасында, яғный  $x=a$  ноқатында (28.4) хәм (28.13) аңлатпалардың өзлери де, олардың туындылары да бір бирине сәйкес келиуі керек:

$$\begin{aligned} Au_1(a) + Bu_2(a) &= e^{iKa} [Au_1(0) + Bu_2(0)], \\ Au_1'(a) + Bu_2'(a) &= e^{iKa} [Au_1'(0) + Bu_2'(0)]. \end{aligned} \quad (28.14)$$

Бул  $A$  хәм  $B$  ға қарата бір текли теңдемелер системасы детерминанты нолге тең болған жағдайда ғана шешімге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} u_1(a) - e^{iKa}u_1(0) & u_2(a) - e^{iKa}u_2(0) \\ u_1'(a) - e^{iKa}u_1'(0) & u_2'(a) - e^{iKa}u_2'(0) \end{vmatrix} = 0.$$

Детерминантты ашып биз ең ақырында

$$\cos Ka = \frac{[u_1(0)u_2'(a) + u_1(a)u_2'(0)] - [u_2(0)u_1'(a) + u_2(a)u_1'(0)]}{2(u_1u_2' - u_2u_1')} \quad (28.15)$$

қатнасына келеміз. Бул аңлатпаның бөлімінде аргументтің қәлеген мәнісінен алынған вронскиан тур (вронскиан константа болғанлықтан оның айқын мәнісін көрсетіу шәрт емес).

(28.15)-теңлеме меншикли мәніслердің бар болыуы шәрти болып табылады. Егер теңлемениң оң тәрәпинің абсолют шамасы бирден артық болмаса бул теңлемениң жәрдемінде  $K$  шамасын есаплауға болады. Бул шәртти қанаатландыратуғын энергияның мәніслерінің көп санлы интерваллары бар. Соның менен бирге бул шәрт қанаатландырылмайтуғын да энергияның көп санлы интерваллары бар. Солай етип энергия спектри айырым қәддилерден турмайды, ал руқсат етилген хәм қадаған етилген энергия зоналардың гезеклескен избе-излігінен турады. (28.15)-аңлатпаға сәйкес энергия зоналарының шегарасы  $\cos Ka = \pm 1$  қатнасынан анықланады.

**Ескертиу:**  $u_1$  хәм  $u_2$  шешімлерін сызықлы ғәрезсиз болған қәлеген  $v_1$  хәм  $v_2$  сызықлы ғәрезсиз болған қәлеген шешімлері жубы менен алмастырыуға болатуғын болғанлықтан (28.15)-теңлемени тап сондай табыс пенен  $v$

функциясы арқалы да жазыуға болады. Бирақ ол да тап сол энергия зоналарына алып келиуі керек. Буның дурыслығына (28.15)-теңлемеге

$$u_1 = c_{11}v_1 + c_{12}v_2, \quad u_2 = c_{21}v_1 + c_{22}v_2$$

аңлатпаларын қойып исениуға болады. Қурамалы емес есаплаулар  $v$  функциясын пайдаланғанда егер  $\|c_{ik}\|$  детерминанты нолге айланбайтуғын болғанда  $u$  функциясын пайдаланғанда алынған нәтижелердің алынатуғынлығын көрсетеді.

## 29-мәселе. Дирак потенциал тарағы

Дирактың  $\delta$ -функциясының избе-излигинен туратуғын дәуірли потенциал берілген (қоңсылас айрықша ноқатлар арасындағы интервал турақлы хәм  $a$  шамасына тең):

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na). \quad (29.1)$$

Энергияның руқсат етилген мәнислеринен туратуғын зоналарды анықлаңыз.

**Шешими.**

$$u_1(x) = e^{ikx} \text{ хәм } u_2(x) = e^{-ikx} \quad (29.2)$$

түріндегі фундаменталлық шешимлерден баслаймыз.

Егер  $0 \leq x \leq a$  интервалында шешим

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (29.3)$$

түрине ийе болса, онда қоңсылас  $a \leq x \leq 2a$  интервалында шешим (28-мәселеге қараңыз)

$$u(x) = e^{iKa} [Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}] \quad (29.4)$$

түрінде болады.  $x = a$  ноқатында

$$\begin{aligned} u(a+0) &= u(a-0), \\ u'(a+0) &= u'(a-0) + 2\Omega u(a) \end{aligned} \quad (29.5)$$

шегаралық шәртлериниң орынланыуы керек. Сонлықтан

$$e^{iKa} (A + B) = Ae^{ika} + Be^{-ika} \quad (29.6a)$$

хәм

$$ike^{iKa} (A - B) = ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) + 2\Omega(Ae^{ika} + Be^{-ika}). \quad (29.6b)$$

(29.6a) хәм (29.6b) теңлемелер  $A$  хәм  $B$  шамаларына қарата бир текли сызықлы теңлемелер системасы болып табылады. Оның детерминанты нолге айланыуы керек. Әпиуайы түрлендириулер

$$\cos Ka = \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka \quad (29.7)$$

теңлигин береді. Демек энергияның руқсат етилген зоналары

$$\left| \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka \right| \leq 1 \quad (29.8)$$

ямаса

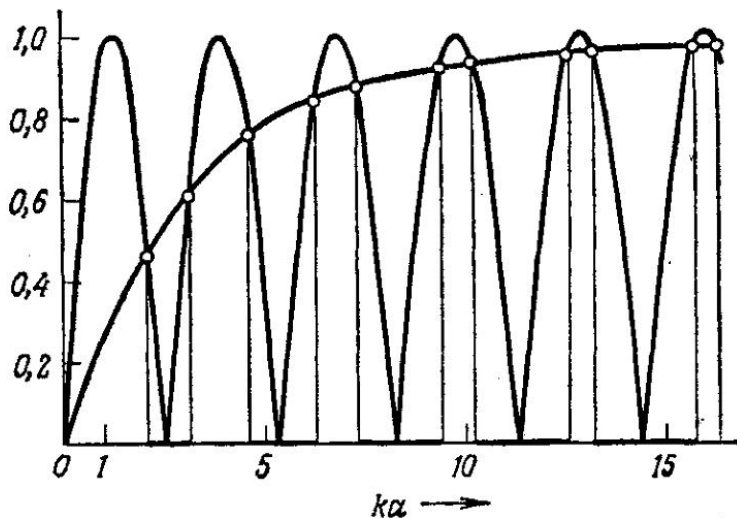
$$\left| \cos \left( ka - \arctg \frac{\Omega a}{ka} \right) \right| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + (\Omega a/ka)^2}} \quad (29.9)$$

теңсізлігінің жәрдеминде, ал энергияның меншикли мәніслері

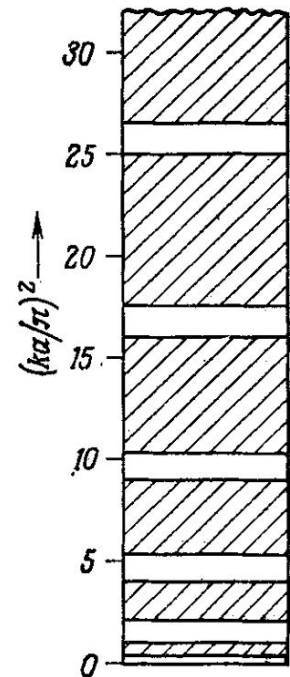
$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (ka)^2 \quad (29.10)$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

15—18 сұреттерде  $\Omega a = 4$  болған жағдай үшін орынланған есапалаулардың нәтижелері келтірілген. (29.9)-теңсізліктің оң және шеп тәрепінде тұрған  $ka$  шамасының функциялары 15-сұретте көрсетілген.

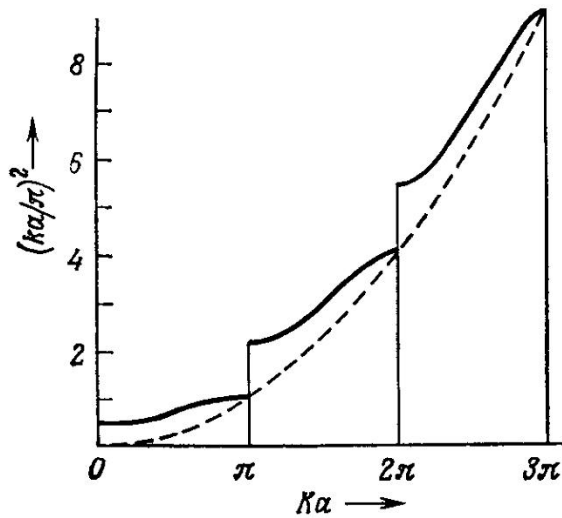


15-сұрет. Зоналық структураны графикалық анықтау

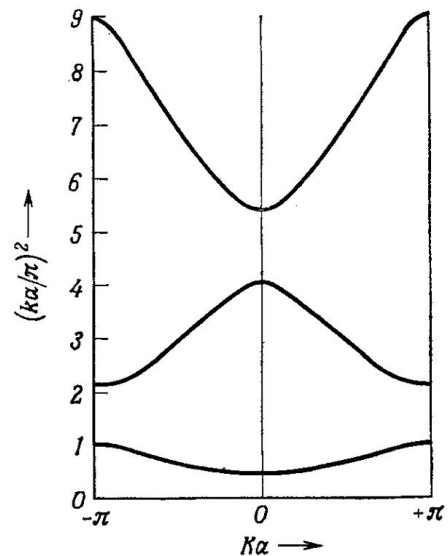


16-сұрет. Дирак потенциал тарағы орын алғандағы зоналық структура.

Сәйкес иймектіклердің кесілісіуі нәқатлары киші дөңгелеклер менен аңлатылған, ал (29.9)-теңсізлік орынланатуғын интерваллар  $ka$  көшерінде жуған сызықтар менен белгіленген.



17-сүрөт. Биринши үш зона ушын (Бриллюэннің бир өлшемли зоналары) энергияның  $Ka$  шамасынан ғарезлиги. Пунктир сызык пенен еркин бөлекшениң энергиясына жууап беретугын парабола белгиленген.



18-сүрөт. Энергияның  $Ka$  өзгериушисинен ғарезлиги.

Зоналардың жоқарғы шегарасында  $\pi$  еселенген нокатлар сәйкес келеди. (29.7)-теңлемеге сәйкес бул нокатларда  $\cos Ka = \cos ka$ . 15-фигураның жәрдеминде энергиялық шқалада табылған зоналардың ийелеген орынлары 16-сүрөтте келтирилен. Бул сүрөтте руқсат етилген энергия зоналары штрихланған. Энергияның артыуы менен руқсатетилген зоналар кеңейеди. Сонлықтан энергия спектри үзликсиз спектрге жақынласады. Бирақ сонда да руқсат етилген зоналар үзликсиз спектрге толығы менен айланбайды: хәтте ең жоқары энергияларда да барлық ўақытта жоқарыдан  $ka = n\pi$  нокатларына тийисетуғын қадаған етилген зоналар болады. 17- хәм 18-сүрөттерде биринши үш зона ушын энергияның (өлшеми жоқ бирликлердеги)  $Ka$  шамасынан ғарезлиги көрсетилген. 17-сүрөтте  $Ka$  өзгериушиси бир зонадан екінши зонаға өткенде монотонлы түрде өседи, ал 18-сүрөтте болса оның өзгериси  $-\pi \leq Ka \leq \pi$  интервалы менен шекленген. 17-сүрөттеги пунктир сызык руқсат етилген зоналардың жоқарғы шегараларына сәйкес келетуғын нокатынан өлетуғын  $K = k$  параболасын көрсетеди.

Келтирилген сүрөттердің барлығы да  $\Omega a = 4$  болған жағдайға тийисли. Сонлықтан сол сүрөттер бойынша дийўалдың өткизгишлигиниң энергия спектрине тәсири хәққында хеш нәрсе айтыўға болмайды.  $\Omega a$  ның киши мәнислери ушын (29.9) теңсизликтиң оң тәрәпи 1 ге тезирек жақынласады хәм 15-сүрөттеги сәйкес иймеклик косинусоиданы усы косинусоиданың максимумына жақын нокатларда кеседи. Бул қадаған етилген зоналардың қалыңлығының кемейетуғынлығын көрсетеди. Руқсат етилген зоналардың жоқарғы шегарасының ийелейтуғын орны ( $ka = n\pi$  нокатлары)  $\Omega a$  дан ғарезсиз болғанлықтан усы шаманың киширейиуи менен 16-сүрөтте бул зоналардың төменги шегараларының ғана төменге қарай жылжыйтуғынлығы көринип тур.  $\Omega a = 0$  теңлиги орынланғанда қадаған етилген зоналар пүткиллей жоғалады. Усының менен бирге бизиң потенциалымыз да жоғалады. Бул жағдайда биз еркин қозғалысқа хәм соған сәйкес үзликсиз спектрге келемиз. Екинши тәрәптен, егер  $\Omega a \rightarrow \infty$  шәрти орынланатуғын болса руқсат етилген зоналар  $ka = n\pi$  дискрет қәддилерге айланады. Бул жағдайда дийўаллар потенциал шуқырларды бир биринен толығы менен изоляциялайды хәм биз қарап атырған спектр 18-мәселениң спектрине айланады. Тек ғана биз хәзир

қарап атырған мәселеде дийўаллар арасындағы қашықтық  $a$  шамасына тең, ал 18-мәселеде дийўаллар арасындағы қашықтық  $2a$  ға тең еді.

### 30-мәселе. Гармоникалық осциллятор

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (30.1)$$

осцилляторлық потенциалы бар жағдайдағы меншикли мәнислерди хәм меншикли функцияларды табыңыз.

**Шешими.**

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{хәм} \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (30.2)$$

белгилеўлерин киргизиў арқалы Шредингер теңлемесин былайынша жазыўға болады

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + (k^2 - \lambda^2 x^2) u = 0. \quad (30.3)$$

Бул дифференциаллық теңлемениң шешимлери  $|x| \gg k/\lambda$  шәрти орынланғанда  $\exp(\pm 1/2 \lambda x^2)$  нызамы бойынша өзгереді. Егер

$$u(x) = e^{-1/2 \lambda x^2} v(x) \quad (30.4)$$

деп есаплап экспонентаны  $u(x)$  функциясынан айырып алатуғын болсақ, онда

$$v'' - 2\lambda x v' + (k^2 - \lambda) v = 0 \quad (30.5)$$

теңлемесин қанаатландыратуғын  $v(x)$  функциясы полином болады ямаса  $e^{\lambda x^2}$  функциясына пропорционал болады. (30.5)-теңлемени

$$v(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j \quad (30.6)$$

қатарға жайыўының жәрдемінде шешип

$$a_{j+2} = \frac{\lambda(2j+1) - k^2}{(j+2)(j+1)} a_j \quad (30.7)$$

рекуррентли қатнасын аламыз.

$j \rightarrow \infty$  шегінде  $e^{\lambda x^2}$  функциясын дәреже бойынша қатарға жайыўға сәйкес келетуғын  $a_{j+2} = (2\lambda/j) a_j$  асимптоталық қатнасы орын алады. Солай етип егер (30.6)-қатары ең ақырғы ағзада үзиліске түспейтуғын болса (30.4) шешимин нормировкалаўға болмайды екен. Ал (30.6)-қатардың ең ақырғы ағзада үзиліске түсиўи  $a_{n+2} = 0$  болғанда, яғный

$$k^2 = \lambda(2n+1)$$

теңлиги орынланғанда орын алады. Бул жағдайда (30.2)-аңлатпаға сәйкес

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (30.8)$$

аңлатпасына ийе боламыз.

$u_n(x)$  меншикли функцияларын (30.7)-қатнастың жәрдемінде алыўға ҳәм

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^2(x) dx = 1 \quad (30.9)$$

шәрти менен нормировкалаў мүмкин.

Дәслепки меншикли функциялардың бир қаншасы төменде келтирилген:

$$\begin{aligned} u_0 &= C_0 e^{-1/2 \lambda x^2}, \\ u_1 &= C_1 x e^{-1/2 \lambda x^2}, \\ u_2 &= C_2 (1 - 2\lambda x^2) e^{-1/2 \lambda x^2}, \\ u_3 &= C_3 \left( x - \frac{2}{3} \lambda x^3 \right) e^{-1/2 \lambda x^2}, \\ u_4 &= C_4 \left( 1 - 4\lambda x^2 + \frac{4}{3} \lambda^2 x^4 \right) e^{-1/2 \lambda x^2}, \\ u_5 &= C_5 \left( x - \frac{4}{3} \lambda x^3 + \frac{4}{15} \lambda^2 x^5 \right) e^{-1/2 \lambda x^2}, \end{aligned} \quad (30.10)$$

ал сәйкес нормировкалаў коэффициентлери төменде келтирилген:

$$\begin{aligned} C_n &= \left( \frac{\lambda}{\pi} \right)^{1/4} c_n, \quad c_0 = 1, \quad c_1 = \sqrt{2\lambda}, \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ c_3 &= \sqrt{3\lambda}, \quad c_4 = \sqrt{\frac{3}{8}}, \quad c_5 = \sqrt{\frac{15\lambda}{4}}. \end{aligned} \quad (30.11)$$

Ең дәслепки үш меншикли функциялар 19-сүўретте көрсетилген.

Меншикли функциялардың анық жуплыққа ийе болатуғынлығын аңсат көрийге болады. Потенциалдың симметрияға ийе болуының себебинен  $V(-x) = V(x)$  шәрти орныланады, ал  $u_n(-x)$  функциясы  $u_n(x)$  функциясы менен бир қатарда дифференциал теңлемениң тап сол (30.8)-меншикли мәниске сәйкес келетуғын шешими болып табылады. Айныў (вырождение) болмағанлықтан сол еки шешим бир биринен тек турақлы  $f$  көбейтиўши менен ғана айрылады. Усының менен бирге нормировка шәртинен  $|f|^2 = 1$  теңлигине ийемиз.  $x$  тың белгисин және бир рет өзгертсек биз дәслепки шешимге қайтып келемиз, сонлықтан  $f^2 = 1$  ямаса  $f = \pm 1$ . Демек қәлеген меншикли функция я жуп, я тақ болады деген сөз.

Егер (30.5)-теңлемеге  $x$  тың орнына

$$y = \lambda x^2 \quad (30.12)$$

жаңа өзгериўшисин киргизсек бул факттиң дурыслығын тиккелей тексерип көрийге болады. Бул жағдайда  $v(y)$  функциясы

$$y v'' + \left( \frac{1}{2} - y \right) v' + \left( \frac{k^2}{4\lambda} - \frac{1}{4} \right) v = 0$$

түріндегі айныған гипергеометриялық функция үшін дифференциал теңлемени қанаатландырады. Егер

$$a = \frac{1}{4} - \frac{k^2}{4\lambda} = \frac{1}{4} - \frac{B}{2\hbar\omega} \quad (30.13)$$

түріндегі белгилеуді қабыл етсек бұл теңлемениң улыұмалық шешими

$$v = A {}_1F_1\left(a, \frac{1}{2}; y\right) + By^{1/2} {}_1F_1\left(a + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; y\right) \quad (30.14)$$

түрінде болады. Айныған геометриялық қатар (вырожденный геометрический ряд)  ${}_1F_1$  пүтин функция болғанлықтан (30.14)-шешимдегі  $x$  өзгеріушісіне қатнасы бойынша биринши қосылыұшы жуп, ал екінши қосылыұшы тақ.  $y \rightarrow \infty$  шегінде еки қосылыұшыда  $e^y y^{a-1/2}$  сыяқлы тарқалады хәм егер қатарлар жоғалмаса хәм үзиліске түспесе шешимди нормировкалаұға болмайды. Биринши аргументи пүтин терис санға тең болса гипергеометриялық қатар үзиледи. Сонлықтан бизде еле де еки мүмкиншилик бар. Егер

$$a = -n \text{ ямаса } E_{2n} = \hbar\omega \left(2n + \frac{1}{2}\right) \quad (30.15a)$$

болса биринши қатар үзиледи хәм меншикли функциялар үшін

$$u_{2n}(x) = A {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \lambda x^2\right) e^{-1/2 \lambda x^2} \quad (30.16a)$$

функциясын аламыз.

Егер

$$a + \frac{1}{2} = -n \text{ ямаса } E_{2n+1} = \hbar\omega \left(2n + \frac{3}{2}\right) \quad (30.15б)$$

болса, онда екінши қатар үзиледи хәм меншикли функция мынаған тең болады:

$$u_{2n+1}(x) = Bx {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; \lambda x^2\right) e^{-1/2 \lambda x^2}. \quad (30.16б)$$

Бұл нәтийжелер меншикли мәнислер үшін алынған (30.8)- хәм меншикли функциялар үшін алынған (30.10)-формула менен толық сәйкесликке ийе.

(30.16a)- хәм (30.16б)-теңликлер менен алынған көп ағзалыларды Эрмит полиномлары деп атайды. Айныған гипергеометриялық функция менен олар

$$\begin{aligned} H_{2n}(\xi) &= (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \xi^2\right), \\ H_{2n+1}(\xi) &= (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2\xi {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; \xi^2\right) \end{aligned} \quad (30.17)$$

қатнастары менен байланысқан. Усының менен бир қатарда және

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \quad (30.18)$$



формуласы орын алады.

Солай етип улыўма жағдайда нормировкаланған меншикли функциялар [(30.9)-аңлатпаға қараңыз]

$$u_n(x) = \left( \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \right)^{1/2} H_n(\sqrt{\lambda} x) e^{-1/2 \lambda x^2} \quad (30.19)$$

түрине ийе болады.

(30.19)-формула бойынша нормировканы есаплай ушын төмендегидей қағыйдадан пайдаланамыз. Меншикли функцияны

$$u_n = C_n e^{-1/2 \xi^2} H_n(\xi); \quad \xi = \sqrt{\lambda} x$$

түрінде жазамыз. Бундай жағдайда (30.9)-шәртке байланысly

$$C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [H_n(\xi)]^2 d\xi = \sqrt{\lambda}$$

теңлигиниң орынланыўы керек. Енди  $H_n(\xi)$  полиномларының бирин оның (30.18)-аңлатпасы менен алмастырамыз. Буннан кейин алынған

$$(-1)^n C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасын бөлеклерге бөлип  $n$  рет интегралласақ ең ақырында

$$C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} d\xi = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасын аламыз.  $H_n(\xi)$  шамасы  $\xi$  ге қарата  $n$ -дәрежели көп ағзалы болғанлықтан  $n$  рет интеграллағаннан кейин  $\xi$  диң тек ең жоқарғы дәрежесиниң үлеси сақланып қалады:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n + \dots,$$

яғный

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!$$

хәм (30.19)-формула менен толық сәйкес келетуғын

$$C_n^2 \cdot 2^n n! \sqrt{\pi} = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

### 37-мәселе. Потенциал текше (потенциальная ступенька)

$$V(x) = \frac{1}{2} V_0 \left( 1 + \operatorname{th} \frac{x}{2a} \right) \quad (37.1)$$

потенциал текшесиниң майданындағы шағылыстырыу коэффициентин анықлаңыз.

**Шешими.** Биз қарап атырған потенциал  $x = -\infty$  ноқатында  $V=0$  ден  $x = +\infty$  ноқатында  $V=V_0$  ге шекем өседі. Усындай өсиудің барысында потенциалдың ең күшли өсиуі  $-2a < x < 2a$  интервалында жүзеге келеді:

$$V(-2a) = 0,119V_0 \text{ хәм } V(+2a) = 0,881V_0, \quad (37.2)$$

Шеп тәрәптен келип түсиуі толқынды тәрийиплейтуғын толқын функциясы

$$u = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \text{ шегинде} \\ Ce^{-Kx}, & \text{егер } x \rightarrow +\infty \text{ шегинде } E < V_0, \\ Ce^{ik'x}, & \text{егер } x \rightarrow +\infty \text{ шегинде } E > V_0 \end{cases} \quad (37.3)$$

асимптоталық түрге ийе болыуы керек.

$|R|^2$  шамасы биз излеп атырған шағылыстырыу коэффициентин болып табылады. Потенциал (37.1) болған

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left[ k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \right] u = 0 \quad (37.4)$$

Шредингер теңлемесин шешиу үшін  $x$  өзгериушисиниң орнына жаңа

$$y = (1 + e^{x/a})^{-1} \quad (37.5)$$

өзгериушисин пайдаланамыз. Буннан кейин

$$\kappa^2 = k^2 a^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E, \quad \lambda^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 \quad (37.6)$$

белгилеулерин пайдаланып хәм

$$\frac{d}{dx} = -\frac{1}{a} y(1-y) \frac{d}{dy}, \quad 1 + \operatorname{th} \frac{x}{2a} = 2(1-y)$$

екенлигин есапқа алып

$$y(1-y) \frac{d^2u}{dy^2} + (1-2y) \frac{du}{dy} + \left[ \frac{\kappa^2}{y(1-y)} - \frac{\lambda^2}{y} \right] u = 0 \quad (37.6)$$

теңлемесин аламыз.

**Ескертиу:** (37.6) түріндеги теңлемени хәзирги заман программаластыруу тиллеринде аналитикалық жоллар менен аңсат шешиу мүмкин. Мысалы Mathematica 7 for students тилин пайдаланғанда шегаралық шәртлерди бермей теңлемени шешиу үшін

$$\text{DSolve}[y * (1 - y) * u''[y] + (1 - 2y) * u'[y] + \left(\frac{k^2}{y * (1 - y)} - \frac{\lambda^2}{y}\right) * u[y] == 0, u[y], y]$$

түріндегі аңлатпа жазылады. Ал компьютер мынадай шешімді береді:

$$u[y] \rightarrow -1^{-2} \frac{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}}{e^{\frac{1}{2}(-\text{Log}[-1+y] - \text{Log}[y])}} \frac{-1+y}{y^{\frac{1}{2}(1-2ik)}} y^{1+\frac{1}{2}} \frac{-1-2}{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}} C[2] \\ \text{Hypergeometric2F1}\left[-ik - \frac{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}}{2}, 1 - ik - \frac{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}}{2}, 1 - 2 \frac{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}}{2}, y\right] + \\ e^{\frac{1}{2}(-\text{Log}[-1+y] - \text{Log}[y])} (-1+y)^{\frac{1}{2}(1-2ik)} y^{\frac{1}{2}(1+2 \frac{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}}{2})} C[1] \\ \text{Hypergeometric2F1}\left[-ik + \frac{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}}{2}, 1 - ik + \frac{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}}{2}, 1 + 2 \frac{\sqrt{-k^2 + \lambda^2}}{2}, y\right]$$

Жоқарыда (37.6) түріндегі теңлемнің шешімінде Hypergeometric функцияның пайда болатуғынлығы көриніп тур. Екіншіден қазіргі заман компьютерлерін қолланғанда квантлық механиканың мәселелерінің аңсат хәм тез шешилетуғынлығы айқын көринеді.

(37.6)-дифференциаллық теңлеме үш айрықша нокатқа ийе болады:  $y = 0, 1, \infty$  хәм сонлықтан оның шешими гипергеометриялық функция арқалы аңлатылады.

$$u(y) = y^v (1-y)^\mu f(y) \quad (37.7)$$

подстановкасының жәрдемінде, бул подстановкада

$$v^2 = \lambda^2 - \kappa^2, \quad \mu^2 = -\kappa^2, \quad (37.8)$$

(37.6)-теңлеме қурамалы емес түрлендириулерден кейін стандарт формадағы Гаустың гипергеометриялық теңлемесіне алып келинеді:

$$y(1-y)f'' + [(2v+1) - (2\mu+2v+2)y]f' - \\ - (\mu+v)(\mu+v+1)f = 0. \quad (37.9)$$

Биз қазір бул теңлемнің

$$f(y) = C {}_2F_1(\mu+v, \mu+v+1, 2v+1; y) \quad (37.10)$$

дара шешимінің  $C$  коэффициентін сәйкес түрде сайлап алғанда (37.2)-шегаралық шәртті қанаатландыратуғынлығын көрсетеміз.

$x \rightarrow +\infty$  шегінен баслаймыз. Бундай шекте  $y \approx e^{-x/a} \rightarrow 0$  хәм усыған сәйкес (37.10)-шешими  $f(0) = C$  теңлигине умтылады. Сонлықтан

$$u(y) \rightarrow Cy^v \approx Ce^{-vx/a}. \quad (37.11)$$

Енді екі мүмкіншиликти бир биринен айырыу керек.

а)  $\lambda > \kappa$ ,  $v$ —хақыйқый сан хәм нолден үлкен. Бул жағдайда (37.11)-аңлатпа экспоненциаллық нызам бойынша кемейеді ( $E < V_0$  теңсизлиги орынланғанда усындай болыуы керек). Солай етип

$$u \rightarrow Ce^{-Kx} \text{ хәм } K^2 = \frac{v^2}{a^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad (37.12a)$$

екенлигине ийе боламыз.

б)  $\lambda < \kappa$ ,  $\nu = -ik'a$  — таза жормал сан. Бундай жағдайда

$$u \rightarrow C e^{ik'x} \text{ хәм } k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0). \quad (37.126)$$

Екинши тәрәптен  $y \rightarrow 1$  шегинде  $x \rightarrow -\infty$  хәм  $1 - y \approx e^{x/a} \rightarrow 0$  екенлигин есапқа алғанда  $y$  аргументине ийе гипергеометриялық функцияны  $1 - y$  аргументине ийе гипергеометриялық функцияға түрлендириўдиң жақсы белгили болған қағыйдасын пайдаланыўға болады:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(\mu + \nu, \mu + \nu + 1, 2\nu + 1; y) = \\ = \frac{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu - \mu) \Gamma(\nu - \mu + 1)} {}_2F_1(\mu + \nu, \mu + \nu + 1, 2\mu + 1; 1 - y) + \\ + (1 - y)^{-2\mu} \frac{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu + \nu) \Gamma(\mu + \nu + 1)} {}_2F_1(\nu - \mu, \nu - \mu + 1, -2\mu + 1; 1 - y). \end{aligned}$$

$1 - y = e^{x/a}$  теңлигин есапқа алсақ бул

$$u \rightarrow C \left\{ \frac{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu - \mu) \Gamma(\nu - \mu + 1)} e^{\mu x/a} + \frac{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu + \nu) \Gamma(\mu + \nu + 1)} e^{-\mu x/a} \right\}$$

аңлатпасын береді.

$$\mu = i\kappa, \quad \frac{\mu}{a} = ik \quad (37.13)$$

орнына қойыўынан кейин

$$C = \frac{\Gamma(\nu - \mu) \Gamma(\nu - \mu + 1)}{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(-2\mu)} \quad (37.14)$$

хәм

$$R = \frac{\Gamma(+2\mu) \Gamma(\nu - \mu) \Gamma(\nu - \mu + 1)}{\Gamma(-2\mu) \Gamma(\nu + \mu) \Gamma(\nu + \mu + 1)} \quad (37.15)$$

деп қабыл етсек бизиң шешимимиздиң формасы бойынша (37.2)-аңлатпа менен сәйкес келетуғынлығын көриўге болады.

Енди және де еки мүмкиншиликти бир биринен айырыў керек болады:

$$E > V_0 \text{ хәм } E < V_0.$$

а)  $E < V_0$ ,  $\mu = i\kappa$  — таза жормал сан,  $\nu$  ҳақыйқый сан хәм нолден үлкен. (37.15) бөлшегиниң алымы да, бөлими де комплексли түйинлес шамалардан ибарат. Сонлықтан

$$|R|^2 = 1,$$

яғный толық шағылысыў орын алады.

б)  $E > V_0$ ,  $\mu = i\kappa$  хәм  $\nu = -i\sigma$  шамалары таза жормал шамалар. Енди  $\Gamma(\pm 2\mu)$  көбейтиўшилери ғана комплексли түйинлес шамалар болады, олар шағылысыў (шағылыстырыў) коэффициенти  $|R|^2$  шамасына үлес қоспайды. Буннан

кейін

$$\Gamma(z) = \frac{1}{z} \Gamma(z+1)$$

болғанлықтан

$$|R|^2 = \left| \frac{(\nu + \mu) \Gamma^2(\nu - \mu + 1)}{(\nu - \mu) \Gamma^2(\nu + \mu + 1)} \right|^2 = \left( \frac{\kappa - \sigma}{\kappa + \sigma} \right)^2 \left[ \left| \frac{\Gamma(1 - i(\kappa + \sigma))}{\Gamma(1 + i(\kappa - \sigma))} \right|^2 \right]^2.$$

Енді

$$|\Gamma(1 + i\eta)|^2 = \frac{\pi\eta}{\operatorname{sh} \pi\eta}$$

элементар формуласынан пайдаланыў мүмкін. Шағылыстырыў (шағылысыў) коэффициенті үшін ең ақырында мынадай формуланы аламыз:

$$|R|^2 = \left[ \frac{\operatorname{sh} \pi(\kappa - \sigma)}{\operatorname{sh} \pi(\kappa + \sigma)} \right]^2 \quad (37.16)$$

ямаса

$$|R|^2 = \left[ \frac{\operatorname{sh} \pi(k - k')a}{\operatorname{sh} \pi(k + k')a} \right]^2. \quad (37.17)$$

Бұл аңлатпаларда  $k$  хәм  $k'$  арқалы потенциал текшениң сәйкес шеп хәм оң тәреплеріндегі толқынлық санлар белгиленген.

### Қосымша мәселелер

Сызықты оператор деп төмендегідей қасиетлерге ийе операторларға айтамыз:

1.  $\hat{F}(\psi + \varphi) = \hat{F}\psi + \hat{F}\varphi,$
2.  $\hat{F}(\alpha\psi) = \alpha\hat{F}\psi.$

(1.1)

Мүмкін болған операторлардың айырымларын қараймыз. Квадратқа көтеріў операторы:

$$\hat{Q}\psi = \psi^2. \quad (1.2)$$

Дифференциаллаў операторы  $\hat{D} = \frac{d}{dx}$ :

$$\hat{D}\psi(x) = \frac{d}{dx}\psi(x) = \psi'(x). \quad (1.3)$$

Инверсия операторы  $\hat{I}$

$$\hat{I}\psi(x) = \psi(-x). \quad (1.4)$$

Бөлекшениң радиус-векторы операторы  $\hat{r}$

$$\hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

ал бөлекшениң улыўмаласқан импульси  $\mathbf{P}$  ға  $\hat{\mathbf{P}}$  операторы

$$\hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

бул аңлатпада  $i$  арқалы жормал бирлик,  $\hbar$  арқалы Планк турақлысы,  $\nabla$  арқалы Гамильтонның «набла» деп аталатуғын дифференциаллық операторы белгиленген:

$$\nabla\psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial y}\mathbf{e}_y + \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial z}\mathbf{e}_z.$$

Бул жерде  $x, y, z$  арқалы декарт координаталары, ал  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  арқалы сәйкес  $x, y, z$  көшерлериниң ортлары белгиленген.

**1.1-мәселе.** (1.1)-(1.6) операторларының сызықлы екенлигин тексерип көриңиз. Шешими: Оператордың сызықлы ямаса сызықлы емес екенлигин анықлау үшін

1.  $\hat{F}(\psi + \varphi) = \hat{F}\psi + \hat{F}\varphi,$
2.  $\hat{F}(\alpha\psi) = \alpha\hat{F}\psi.$

шәртлерин қанаатландыратуғынлығын ямаса қанаатландырмайтуғынлығын тексерип көриу зәрүр. Квадратқа көтеріу операторының сызықлы екенлигин тексерип көриу үшін  $\hat{Q}$  операторы менен  $\psi$  хәм  $\varphi$  функцияларына тәсир етемиз:

$$\hat{Q}(\psi + \varphi) = (\psi + \varphi)^2 = \psi^2 + \varphi^2 + 2\psi\varphi \neq \psi^2 + \varphi^2 = \hat{Q}\psi + \hat{Q}\varphi.$$

Соның ушын бул оператор сызықлы оператор болып табылады.

Басқа операторлардың барлығы да сызықлы. Ҳақыйқатында да

$$\begin{aligned} \hat{D}(\psi + \varphi) &= \frac{d}{dx}\psi + \frac{d}{dx}\varphi = \hat{D}\psi + \hat{D}\varphi, \quad \hat{D}\alpha\psi = \frac{d}{dx}(\alpha\psi) = \alpha\frac{d}{dx}\psi = \alpha\hat{D}\psi; \\ \hat{I}(\psi(x) + \varphi(x)) &= \psi(-x) + \varphi(-x) = \hat{I}\psi(x) + \hat{I}\varphi(x), \quad \hat{I}\alpha\psi(x) = \alpha\psi(-x) = \alpha\hat{I}\psi(x); \\ \hat{\mathbf{r}}(\psi + \varphi) &= \mathbf{r}(\psi + \varphi) = \mathbf{r}\psi + \mathbf{r}\varphi = \hat{\mathbf{r}}\psi + \hat{\mathbf{r}}\varphi, \quad \hat{\mathbf{r}}(\alpha\psi) = \alpha\mathbf{r}\psi = \alpha\hat{\mathbf{r}}\psi; \\ \hat{\mathbf{p}}(\psi + \varphi) &= -i\hbar\nabla(\psi + \varphi) = -i\hbar\nabla\psi - i\hbar\nabla\varphi = \hat{\mathbf{p}}\psi + \hat{\mathbf{p}}\varphi, \\ \hat{\mathbf{p}}(\alpha\psi) &= -i\hbar\nabla(\alpha\psi) = \alpha(-i\hbar\nabla\psi) = \alpha\hat{\mathbf{p}}\psi. \end{aligned}$$

**1.2-мәселе.**  $\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$  теңлигиниң дурыс екенлигин дәлилдеңиз.

Шешими:  $\hat{F}$  хәм  $\hat{G}$  операторларының  $\hat{F} + \hat{G}$  суммасы деп  $\psi$  функциясына

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi$$

қағыйдасы бойынша тәсир ететуғын операторға айтамыз. Сонлықтан

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi = \hat{G}\psi + \hat{F}\psi = (\hat{G} + \hat{F})\psi$$

теңликлерин аламыз. Буннан  $\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$  екенлигин аламыз.

**1.3-мәселе.** Координата операторларының бір бири менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңіз.

Шешими:  $[\hat{x}, \hat{y}]$  коомутаторының  $\psi$  функциясына тәсирин көреміз.

$$[\hat{x}, \hat{y}]\psi = \hat{x}\hat{y}\psi - \hat{y}\hat{x}\psi = xy\psi - yx\psi = 0$$

хәм буннан  $[\hat{x}, \hat{y}] = 0$  екенлиги табамыз.

**1.4-мәселе.** Импульс құраушылары операторларының бір бири менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңіз.

Шешими: Мысал ушын  $\hat{p}_x$  хәм  $\hat{p}_y$  операторларын алайық. Бундай жағдайда

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{p}_y]\psi &= (\hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_x)\psi = -\hbar^2 \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right) = \\ &= -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x} \right). \end{aligned}$$

Аралас  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y}$  хәм  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial x}$  туўындылары өз-ара тең болғанлықтан  $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$ .

**1.5-мәселе.** Координата операторы менен басқа координатаға түсирилген проекцияның импульси операторы менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңіз.

Шешими: Мысал ретинде мына жағдайды қараймыз:

$$[\hat{x}, \hat{p}_y]\psi = \hat{x}\hat{p}_y\psi - \hat{p}_y\hat{x}\psi = -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} (x\psi) \right) = -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial y} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = 0,$$

демек  $[\hat{x}, \hat{p}_y] = 0$  екен.

**1.6-мәселе.**  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  коммутаторын табыңыз.

Шешими:  $[\hat{x}, \hat{p}_x]$  операторы менен  $\psi$  функциясына тәсир етип мынаны табамыз:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi = \hat{x}\hat{p}_x\psi - \hat{p}_x\hat{x}\psi = -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \right) = -i\hbar \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \right) = i\hbar \psi$$

ямаса

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar.$$

**1.7-мәселе.**  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$  теңлигинің дұрыс екенлигин дәлилдеңіз.

Шешими:

$$= \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}.$$

$$\begin{aligned}
 [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} = \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) + (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} = \\
 &= \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}.
 \end{aligned}$$

## Пайдаланылган әдебиетлар дизими

### Тийкарғы әдебиет

Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Курс теоретический физики. III том. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е издание. Физматлит. Москва. 2004. 800 с.

А.А.Соколов, И.М.Тернов, В.Ч.Жуковский. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1979. 528 с.

А.С.Давыдов. Квантовая механика. 2-е издание. Издательство «Наука». Москва. 1973. 702 с.

Д.И.Блохинцев. Основы квантовой механики. Издательство «Наука». Москва. 1983. 664 с.

В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. Часть 1. Едиториал УРСС. Москва. 2001. 304 с.

В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. Часть 2. Едиториал УРСС. Москва. 2001. 304 с.

З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 1. Издательство «Мир». Москва. 1974. 342 с.

З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 2. Издательство «Мир». Москва. 1974. 316 с.

А.Қ.Ахметов. Квнаттық механикаға кириспе. Алматы. Ғылым баспасы. 2003.

### Қосымша әдебиет

Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Краткий курс теоретической физики. Книга 2. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1972.

В.А.Фок. Начала квантовой механики. Издательство «Наука» Москва. 1976. 376 с.

Л.А.Головань, Е.А.Константинова, П.А.Форш. Задачи по квантовой механике для химиков. Москва. Физический факультет МГУ. 154 с.

Л.К.Мартинсон, Е.В.Смирнов. Квантовая физика. Москва. Издательство МГТУ имени Н.Э.Баумана. 2004. 496 с.

Қ.Қ.Қайырбаев. Кванттық механика негиздери. Павлодар. 2005.