

RAUF CƏFƏROV

KVANT MEXANİKASI

BAKİ – 2025

RƏYÇİLƏR

Akademik Ə.P. NƏHMƏDOV, Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu və Bakı Mühəndislik Universiteti

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor Z.A. CAHANGIRLI, Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyinin Fizika İnstitutu və Bakı Dövlət Universiteti

REDAKTOR

Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor Ş.M. NAĞIYEV, AMEA-nın Fizika İnstitutu

R.Q. Cəfərov. **Kvant mexanikası** adlı dərs vəsaiti Bakı Dövlət Universitetinin nəzəri fizika kafedrasının professoru Cəfərov Rauf Qədir oğlu tərəfindən kafedrada tədris olunan kursların fənn proqramlarına uyğun olaraq müasir elmi-pedaqoji tələblər nəzərə alınmaqla yazılmışdır. Tədris olunan dərs vəsaiti Fizika-050503 ixtisası üzrə bakalavr hazırlığının “Tədris planı”nda “İxtisas hazırlığı fənləri” qrupuna (İFP-B20) daxildir. Oxuculara təqdim olunan bu dərs vəsaitindən fizika və riyaziyyat fakültələrinin bakalavr və magistratura pilləsi tələbələri, həm də doktorantlar istifadə edə bilərlər.

Dərs vəsaitinin çap olunması Bakı Dövlət Universitetinin Elmi Şurasının qərarı ilə tövsiyyə edilmişdir, Protokol №1, 14.02.2020-ci il. Kitaba BDU-nun rektorunun R-02 №-li 07.01.2020-ci il tarixli əmri ilə qrif verilmişdir.

Bakı: «İSAAC GROUP» PRESS, 2022, 178 s., şəkillər ilə.

“Kvant mexanikası”nın yaranmasının fiziki şəraiti və nəzəriyyənin postulatları şərh edilir. Kvant mexanikasının fundamental məsələləri tədqiq olunur.

UDK 530.145(075.8)

© «İSAAC GROUP» PRESS, 2022

ELMI REDAKTORDAN

Bizi əhatə edən materiyanın dərinliklərinə daha çox nüfuz etdikcə, insanın əqli baxışının önündə daha da yeni sirrlər və fiziki hadisələr açılır. Bəzi sirrlər açılıb, amma bir çoxları hələ də bəşəriyyət üçün müəmma olaraq qalırlar.

Materiyanın fundamental xassələri haqqında, XX yüzilliyin sonuna toplanmış yekun nəticələr, bizim bütün dünyagörüşümüzü dəyişmək üzrədir. Mikroaləmin xassələrinin analizi üçün platforma və qüdrətli hesablama aləti olan kvant sahə nəzəriyyəsi, kvant mexanikasının məntiqi davamı kimi, Böyük Partlayışdan (təxminən 13.8 milyard il əvvəl) bu günümüzədək, və bundan sonra da baş verəcək fiziki prosesləri çox yüksək dəqiqliklə izah etməyə imkan yaradır. Hər bir fiziki nəzəriyyə kimi, kvant mexanikası da, keçən əsrin ilk onilliklərində, atom miqyasında aparılan yeni eksperimentlərdə müşahidə olunmuş fiziki hadisələrin öyrənilməsilə yaradılmışdır.

Atomun quruluşu, elektronun və atom nüvəsinin xüsusiyyətləri, atomun dayanıqlılığı, atomun və molekulların şüalanması – bütün bu hadisələr klassik fizikanın ideya və məfhumlarından kökündən fərqli olan, yeni ideyalar və yeni fiziki anlayışların yaradılması zərurətini gündəmə gətirirdi.

Bir çox universitetlərdə, tarixən elə formalaşıbdır ki, kvant mexanikası və digər nəzəri kursların, fizika fakültəsinin tələbələrinə tədrisi müxtəlif xüsusi kafedralar tərəfindən təşkil olunur. Nəzəri fizika kafedrası, 3-cü kurs tələbələrinin payız sessiyasında öyrəndikləri “Klassik elektrodinamika” kursu ilə başlayır. Bu fənn və Atom fizikası kursundan dərhal sonra “Kvant mexanikası” kursunun tədrisi başlanır. Burada kvant mexanikasının əsasları və onun riyazi təsviri qeyri-relyativistik fizika səviyyəsində təqdim olunur. Qeyri-relyativistik Şrödinger tənliyinin bəzi həll metodları təklif olunaraq, bir sıra fiziki nöqteyi-nəzərdən maraqlı tətbiqlər “Relyativistik kvant mexanikası” və “Bütöv mühitlərin elektrodinamikası” kimi xüsusi kursların öhdəsinə buraxılır.

Azərbaycan Respublikası universitetlərində fiziklərin hazırlanması, əsasən iki ixtisaslaşma – fizik və fizika müəllimi – üzrə aparılır. Hər iki ixtisaslaşma üzrə nəzəri fizikanın tədrisi iki mərhələdə aparılır. Bu ixtisaslaşmalar üçün birinci mərhələ, “minimum” adlanan, vahid proqrama malik olan dörd kursdan ibarətdir: “Nəzəri mexanika (Klassik sahə nəzəriyyəsi)”, “Klassik elektrodinamika”, “Kvant mexanikası” və “Statistik fizika”. İkinci mərhələdə, 4-cü kurs bakalavriat tələbələri, yuxarıdakı qeyd olunan minimuma daxil olmayan, nəzəri fizikanın bu, və ya digər bölməsini seçirlər. Nəticədə, tələbəni çox da yükləmədən, nəzəri fizikanın tam kursu, bu iki mərhələ sayəsində, ona (tələbəyə) təqdim edilmiş olur.

Hal-hazırkı vəsait, yuxarıda söylədiklərimizi nəzərə alaraq, “fizik” ixtisaslaşması üçün nəzərdə tutulmuş (həmçinin, “fizika müəllimi”, “mühəndis-fizik” və “energetik” ixtisaslaşması üçün də yararlıdır), kvant mexanikasının əhəmiyyətli təqdim olunmasını özündə əks etdirir.

MÜƏLLİFDƏN

Ümumi «Klassik mexanika» və «Elektrodinamika» kurslarından sonra, 6-cı semestrdə tədris olunan «Kvant mexanikası», nəzəri fizikanın (o cümlədən, elementar zərrəciklər və nüvə fizikasının) sonrakı bölmələrinin nəzəri əsaslarını özündə əks etdirir. Bu kursda, kvant nəzəriyyəsinin əsas anlayış və metodları, nəzəri ifadələrin üsulları və bir və ya çox-zərrəcikli sistemlər, həmçinin qeyri-müəyyən və dəyişən-saylı zərrəciklər sistemindəki kvant proseslərinin kəmiyyət və keyfiyyətə analizinə baza hazırlanır.

Kursun riyazi və metodik bazasını, 6-cı semestrin əvvəlinə kimi tələbələrə tədris olunan riyaziyyat və nəzəri fizikanın bütün bölmələri, həmçinin «Atom fizikası» kursu təşkil edir.

Xüsusilə, nanotexnologiyaların sürətli inkişafının müasir mərhələsində, fikrimizcə, «Kvant mexanikası»nın tədrisini elə qurmaq lazımdır ki, tələbə mikroaləmin qanunauyğunluqlarını dərinlən dərk etsin. Tələbə «Kvant mexanikası» kursunu öyrənərkən, paralel olaraq, «Kvant mexanikası»nın riyazi aparatını mənimsəməli və onu konkret fiziki məsələlərin həllində istifadə etməyi bacarmalıdır. Hal-hazırda, fizika fakültələrində ali riyaziyyatın tədrisində auditoriya saatlarının məhdud olduğu dövrdə və «Kvant mexanikası» fənninin mühazirə saatlarının azaldılaraq 60 saatdan 45 saata endirilməsi ilə əlaqədar kvant-mexaniki məsələlərin şərhinin ətraflı və eyni vaxtda daha yığcam həyata keçirilməsi tələbatı yaranıb.

Təqdim olunan dərs vəsaiti kvant fizikasında ilk addımlarını atan oxucu mikroaləm fizikasının riyazi aparatı olan «Kvant mexanikası» ilə yaxından tanış olması məqsədi daşıyır. Biz «Kvant mexanikası» ilə ötrə tanış olmaq məqsədi güdməyən oxucuya ümid bəsləyirik. Güman edirik ki, onda (oxucuda), xüsusi ədəbiyyata müraciət edərək, şərh olunan materialı daha da ətraflı öyrənmək istəyi yaranacaq. Buna baxmayaraq, biz, nəinki sadə olmayan formullardan qaçmış, bununla yanaşı, onların müfəssəl çıxarılışlarını da həyata keçirmişik. Həmçinin,

məlumdur ki, hər bir fənnin özünəməxsus “dili” mövcuddur. Hər bir yeni bilik sahəsinə yollanarkən, oranın məxsusi dili ilə qismən də olsa tanış olmaq zərurəti yaranır. Bizim halda, bu dil, kvant mexanikasının şərhinin “operator dilidir”. Əlbəttə, mətndə verilən hər bir xüsusi termin dərhal aydınlaşdırılır və kursiv ilə müşayiət edilir. Bütün kitab üzrə fiziki kəmiyyətlər “sm, qram, saniyə” ilə ifadə olunurlar. Ümid edirik ki, təqdim olunan dərs vəsaiti tələbələr arasında öz oxucusunu tapacaq.

Həm Bakı Dövlət Universitetinin Fizika Problemləri İnstitutundan, həm də Bakı və Sumqayıt Dövlət Universitetlərinin fizika fakültələrindən olan həmkarlarıma mütəmadi təmas və müzakirələrə görə dərin təşəkkürümü bildirirəm.

I HİSSƏ. KVANT MEXANİKASININ ƏSASLARI VƏ RİYAZİ APARATI

1. Mikroaləmdə gedən proseslərin izahında klassik nəzəriyyənin böhranı. Plank sabiti

Keçən əsrin əvvəllərində mikroaləm hadisələrinin tədqiqi nəticəsində toplanmış bəzi eksperimental faktlar, fiziki qanunauyğunluqların böyük ölçülər oblastından (makroaləm – gözlə görünən oblast) kiçik oblasta (mikroaləm $R \leq 10^{-8} sm$ - atomun ölçüsü) mexaniki şamil olunmasından bir dəfəlik imtina edilməsinə gətirdi. Bu istiqamətdə, ilk ciddi xəbərdarlıq Plank sabitinin ($h = 1,05 \cdot 10^{-27} \text{ erq} \cdot \text{san}$) kəşfi oldu. Fizikada Plank sabitinin meydana çıxması mikroaləmdə baş verən proseslərə bütün baxışları kökündən dəyişdi. Bu sabitin zəfər yürüşü, bizi, keçən yüzilliyin əvvəllərinə müraciət edərək, o zamanlar öz həllini tapmamış məsələlərə nəzər yetirməyə məcbur edir:

maddə ilə istilik tarazılığında olan elektromaqnit şüalanmasının spektrinin xarakteri problemi (mütləq qara cisim problemi);

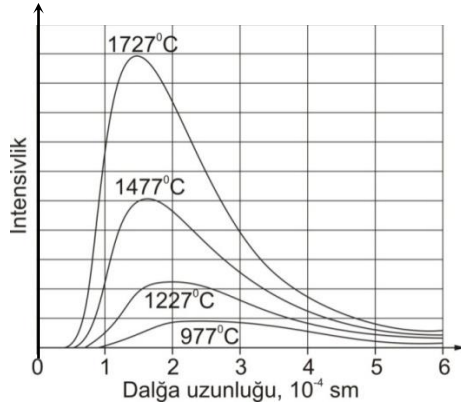
fotoelektrik effektində qırmızı sərhədin izahı problemi;

atomların ölçüləri və onların dayanıqlılığı problemi.

Əvvəlcə mütləq qara cismin şüalanmasının xarakterini müzakirə edək. Məlumdur ki, yüksək temperaturlu səthə malik ixtiyari cisim, tezlik və ya dalğa uzunluğuna görə çox geniş intervala malik elektromaqnit dalğaları şüalandırır. Bu məsələnin tədqiqində, yüksək temperatur şəraitində olan verilmiş cismin məhdud səthindəki sferik boşluğun şüalanmasının öyrənilməsi yetərli sayıla bilər. Sferik boşluqdan şüalanmanın intensivliyinin dəyişməsi kəsilməz spektrə malikdir (bax şəkl.1). Şəkildən görünür ki, əyri müəyyən $\lambda_{\max}$ dalğa uzunluğunda maksimuma malik olaraq, dalğa uzunluğunun kiçik və böyük qiymətlərində sıfıra yaxınlaşır. Bu asılılıq Vin yerdəyişmə qanunu adlanır və

sferik boşluğun divarlarının temperaturu ilə aşağıdakı şəkildə ifadə olunur:

$$\lambda_{\max} T = C_0 = 0.2898 \text{ sm} \cdot K \quad (1.1)$$



Şəkil1. Qara cismin şüalanma intensivliyinin dalğa uzunluğundan asılılığı

Şüalanma intensivliyinin spektral paylanması (Şəkil 1-dəki ayrının forması), nə sferik boşluğun formasından, nə də ki, divarlarının materialından asılıdır. Beləliklə, Vin qanunundakı C_0 vuruğu universal sabitdir. Səthdəki sferik boşluq, xarici müşahidəçi üçün, demək olar ki, qara səth kimi görünür. Belə ki, hətta divarlar təməmilə hamar olsa belə, kənardan sferik boşluğa düşən istənilən şüa, çoxqat əks olunmalar nəticəsində tam udulur. Bu sferik boşluğun şüalanma mənbəyi olması faktı aydın şəkildə başa düşüləndir. Biz bilirik ki, maddədə yüklü zərrəciklər vardır və sferik boşluğun divarlarını təşkil edən molekulaların istilik hərəkəti nəticəsində, təbii olaraq, sferik boşluğa enerji şüalandırılır. Belə şüalanma, öz növbəsində, sferik boşluğun divarları tərəfindən yenidən udula bilər. Əgər, divarların temperaturu dəyişmirsə, nəhayət konkret vaxtdan sonra, boşluğun enerjisi ilə divarları arasında müəyyən tarazlıq yaranar, yəni, sferik boşluğun divarları tərəfindən boşluğa buraxılan enerji ilə, divarların boşluqdan udduğu enerji bərabər olar. Beləliklə,

qarşıda, əsas məsələ kimi, boşluqdakı enerji sıxlığı üçün dalğa uzunluğu və temperaturun funksiyası olan ifadənin alınması durur.

Vin qanununun mənasını başa düşmək üçün, onu ((1.1) düsturunu) aşağıdakı şəkildə, yeni formada yazaq:

$$\frac{\lambda_{\max}}{c} \times kT = X = \frac{C_0 k}{c}. \quad (1.2)$$

Burada, $c = 3 \cdot 10^{10} \text{ sm} \cdot \text{san}^{-1}$ - işıq sürəti, $k = 1,38 \cdot 10^{-16} \text{ erq} \cdot \text{K}^{-1}$ - Bolsman sabiti, X hər-hansı bir sabitdir. (1.2) düsturunun sol tərəfi təsir ölçüsünə (zaman $\times$ enerji) malikdir. Deməli X -in də ölçüsü, buna bərabər olmalıdır.

1900-cü il dekabrın 14-də, Berlndə, alman fizika cəmiyyətinin qurultayında Maks Plank qara cismin şüalanmasının yeni qanunu haqqında məruzə etdi. **Onun əsas ideyası**, şüalanmada enerji paylanmasının kəsilməzliyini irəli sürən klassik təsvirdən, enerjinin yalnız diskret qiymətlər ala bilməsi fərziyyəsinə əsaslanan kvant təsvirinə keçiddən ibarət idi. ν tezliyi ilə sərbəst rəqs edən ossilyator (yük), enerjini yalnız, qiyməti $E = h\nu$ -yə bərabər olan porsiyalar ilə ala və verə bilər. Bu bərabərlikdə, h sabiti, təbiətin yeni, fundamental sabitini ifadə edir. Bu fərziyyə ilə, Plank çoxsaylı eksperimental nəticələrin ümumiləşdirilməsi ilə X sabiti üçün aşağıdakı ifadəni almış oldu:

$$\frac{\lambda_{\max}}{c} kT = \frac{C_0 k}{c} = X = 0.2014 \cdot h. \quad (1.3)$$

Buradan Plank sabiti üçün aşağıdakı qiymət alındı:

$$\begin{aligned} h &= \frac{C_0 k}{c \cdot 0.2014} = \\ &= \frac{0.2898 \text{ sm} \cdot \text{K} \cdot 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erq} \cdot \text{K}^{-1}}{3 \cdot 10^{10} \text{ sm} \cdot \text{san}^{-1} \cdot 0.2014} = 6.6 \cdot 10^{-27} \text{ erq} \cdot \text{san} \end{aligned}$$

Plankın özü, klassik təsəvvürlərdən bu yolla imtina edilməsi ilə çox çətinliklə razılaşıb, öz dahiyənə kəşfindən sonra, həyatının hələ bir neçə ilini klassik təsəvvürlər çərçivəsində qara

cismin şüalanmasının öyrənilməsinə sərf edib. Bütün bu müvəffəqiyyətsiz cəhdlər haqqında, o sonralar deyərdi ki, *hər bir uğursuzluq, qara cismin şüalanmasını klassik fizika çərçivəsində başa düşməyin mümkünsüzlüyü yekun nəticəsinə gətirirdi.*

Planka görə, şüalanma qanunu tam şəkildə aşağıdakı kimi göstərilə bilər,

$$E(\lambda, T) = \left(\frac{8\pi hc}{\lambda^5} \right) \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right)}. \quad (1.4)$$

Burada, $E(\lambda, T)$ – λ -nin və temperaturun T verilmiş qiymətlərində, vahid dalğa uzunluğu intervalında, sferik boşluqdakı enerji sıxlığıdır.

T -nin verilmiş qiymətində $E(\lambda, T)$ funksiyasının maksimumlarının yerlərini (Şəkil 1), (1.4) düsturunda E -dən λ üzrə törəmə almaqla müəyyənləşdirmək olur. Doğrudan da,

$$\frac{dE}{d\lambda} = 8\pi hc \frac{1}{\lambda^6} \left(-5 + \frac{hc}{\lambda kT} \right) e^{-\frac{hc}{\lambda kT}} = 0,$$

və

$$-5 + \frac{hc}{\lambda_{\max} kT} = 0.$$

Bu tənlikdən Vin qanunu alınır:

$$\begin{aligned} \lambda_{\max} T &= \frac{hc}{5k} = \\ &= \frac{6.6 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{san} \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ sm} \cdot \text{san}^{-1}}{5 \cdot 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ erg} \cdot K^{-1} \cdot 0.2014} = C_0 = 0.2898 \text{ sm} \cdot K. \end{aligned}$$

İndi isə fotoeffekt hadisəsinə müraciət edək.

19-cu əsrin sonunda, eksperimental olaraq müşahidə olunmuşdu ki, metalın səthinə işıq düşərkən, metaldan elektronlar buraxılır. Öz-özlüyündə, bu faktda heç bir qəribəlik yoxdur. Gözlənilməz o idi ki, metalın səthindən emissiya etmiş elektronların kinetik enerjisi işığın intensivliyindən deyil, işığın tezliyindən asılı olur və işığın tezliyi artdıqca elektronların

kinetik enerjisi xətti artır. Yəni, şüalanma intensivliyi nə qədər də böyük olsa, işığın elə bir minimum tezliyi vardır ki, ondan aşağı qiymətlərdə, elektronların emissiyası baş vermir. İşığın intensivliyinin artması metalın səthindən qopan elektronların enerjisinə təsir etməyib, yalnız vahid zamanda buraxılan elektronların sayının artmasına səbəb olur. Bu hadisə klassik fizika nöqteyi-nəzərindən heç cür izah olunmurdu. Klassik fizikaya görə, intensivliyin artması elektromaqnit dalğalarının amplitudunun artmasına və öz növbəsində, elektronların da sürətinin artmasına səbəb olmalı idi.

1905-ci ildə, Eynşteyn fotoeffektin izahı üçün hipotez irəli sürdü. Bu hipotezə görə metalın səthinə düşən şüa enerjisi $E = h\nu$ -yə bərabər olan foton selindən ibarət idi. Buraxılan elektronlara isə, fotonların metaldakı sərbəst elektronlarla toqquşmasından sonra sabit W işi görməklə metalın səthini tərk etmələri kimi baxılırdı. Bu halda, buraxılan elektronun kinetik enerjisini aşağıdakı kimi yazmaq olur:

$$E_k = h\nu - W . \quad (1.5)$$

Eynşteyn müşahidə etmişdi ki, əgər sferik boşluqdakı elektromaqnit şüası korpuskul xarakteri daşıyarsa, yəni $h\nu$ enerjili kvantlardan ibarət olması fərz olunarsa, onda qara cismin şüalanmasının Plank ideyası çox asanlıqla izah olunar. Eynşteynin fotoeffekt üçün tənliyi, Plank sabitinin yeni üsulla hesablanması imkan yaradaraq, Plank ideyasına yeni izahat vermiş oldu.

Nəhayət, atomların ölçüsü və dayanıqlılığı məsələsini müzakirə edək.

Atomun ölçüsünü, prinsip etibarı ilə, bərk cisim və ya mayenin iki qonşu molekulu arasındakı məsafə kimi qiymətləndirmək olar. Məlumdur ki, bu tərtib 10^{-8} m -ə bərabərdir. Rezerforda görə, atom, Z sayda elektrondan (hər bir elektronun yükü, $-e$ -dir) və Ze yüklü nüvədən ibarət, kütlə mərkəzi sükunətdə olan bir sistemdir. Hər bir elektron $\vec{r}_k(t)$ ($k = 1, 2, \dots, Z$) funksiyası ilə təsvir olunan orbit üzrə

hərəkət edir. Bu funksiya, t zaman anında zərrəciyin hal (vəziyyət) vektorunu müəyyən edərək, sistemin hərəkət tənliyinin yalnız yeganə bir həllinə uyğun olur. Sadəcə, miqyası dəyişməklə, bu yeganə həlldən bütöv bir həllər seriyası yaratmaq olar. Miqyası dəyişməklə, konkret həlldən yeni bir həllin əldə olunması faktı isə Keplerin üçüncü qanununun ümumiləşməsidir.

Xüsusi hal kimi, tək bir elektronun sükunətdə olan nüvə ətrafında hərəkətində, eyni bir eksentrisitetə malik iki ixtiyari elliptik orbit üçün yarımoxların kublarının periodların kvadratlarına nisbətlərinin bir-birinə mütənasibliyinə əsaslanaraq sonsuz sayda həllər qurmaq olar. Şübhəsizdir ki, bu həllərin hər hansı birinə üstünlük verməyə heç bir əsas yoxdur. Deməli atomun ölçüsünü, bu həllərin sırasından, seçib ayırmaq üçün heç bir prinsipə malik deyilik. Yəni, klassik fizikada atomun ölçüsünü müəyyən etmək üçün, konkret heç bir prinsip mövcud deyil.

Təbiətdə isə, hərəkət tənliyinin yalnız elə həlləri mövcuddur ki, bu həllər üçün atomun tam hərəkət miqdarı momenti Plank sabitinin (h) tam misillərinə bərabər qiymətlər alır. Bu o deməkdir ki, yalnız seçilmiş həllər mövcuddur. Beləliklə, atomun ölçüsünü müəyyən etmək üçün biz təbii yolla prinsip əldə etmiş oluruq.

Həmçinin, atomun əsas halının dayanıqlılığı məsələsi də klassik nəzəriyyədə, açıq qalırdı. Klassik elektrodinamikaya əsasən, atomun planetar modelinə görə, nöqtəvi nüvə sahəsində nöqtəvi elektronların elliptik orbit üzrə təcilli hərəkəti nəticəsində, sonuncular enerjilərini itirməli idilər ki, nəticədə atomun dayanıqlılığı faktı sual altında qalmalı idi.

İki postulat üzərində qurulan Nils Borun modeli (1913), müasir kvant mexanikasının yaradılması yolunda çox vacib bir addım oldu. Borun birinci postulatı, atom və atomlar sisteminə, enerjinin udulması və buraxılmasının qadağan olunduğu stasionar halların mövcudluğu faktını ortaya qoyur.

Bu hallardakı atom sisteminin enerjisi diskret spektrə $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ (enerji səviyyələri) malik olur.

İkinci postulata görə, E_m enerji səviyyəsindən E_n səviyyəsinə keçid, $\nu = \frac{E_m - E_n}{h}$ tezlikli foton şüalanması və ya udulması ilə müşayiət olunur. Burada h Plank sabitidir. Bu iki postulat, özlərini təcrübədə tam təsdiq etsələr də, klassik mexanika və elektrodinamikanın tələblərinə təməmilə ziddirlər.

Bu modelə əsasən, hidrogen atomunda elektronun, $J = mvq_0 = \frac{h}{2\pi}$ kvant şərtinə görə proton ətrafında, a_0 radiuslu orbit üzrə hərəkət tənliyi aşağıdakı kimidir: $m \left(\frac{v^2}{a_0} \right) = \frac{e^2}{a_0^2}$.

Burada v - elektronun sürəti, J isə hərəkət miqdarı momentidir. Yəni, hərəkət miqdarı momenti $\frac{h}{2\pi}$ -yə bərabərdir.

Verilmiş tənliklərdən alırıq ki,

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{h^2}{(2\pi)^2 m e^2} = \frac{(6.6 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{san})^2}{(2 \cdot 3.14)^2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-28} \text{ qr} \cdot (4.8 \cdot 10^{-10})^2} = \\ &= \frac{43.58 \cdot 10^{-54} \left(\text{qr} \cdot \frac{\text{sm}^2}{\text{san}^2} \right)^2 \cdot \text{san}^2}{(6.28)^2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-28} \text{ qr} \cdot 23.04 \cdot 10^{-20} \cdot \text{qr} \frac{\text{sm}^3}{\text{san}^2}} \approx 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ sm} . \end{aligned}$$

Atomun Bor nəzəriyyəsinin, hidrogen atomunun spektrinin kəmiyyətə izahını verməsi faktı, yeni yaranan ideyaların böyük müvəffəqiyyəti idi. Bu planetar model, Bor və digər nəzəriyyəçilər üçün, atomun kvant nəzəriyyəsinə qurmaq işinə güclü bir təkan vermiş oldu. Daha dəqiq nəzəriyyənin qurulması üçün, bu nəzəriyyə, Borun fikrincə aralıq mərhələ idi. Hal-hazırda isə, artıq belə nəzəriyyə - kvant mexanikası, təbiətdə, mikrondan kiçik bütün ölçülərdə baş verən bütün fiziki hadisələri, son dərəcə böyük dəqiqliklə həm kəmiyyətə, həm də keyfiyyətə izah edir.

Müzakirə olunan bu üç problem, Plank sabitinin kəşf olunmasının əsas səbəbləri olmaqla yanaşı, bu kəşfdən olduqca daha qiymətli – fizikanın yeni qanunlarının aşkar olunmasına yol açmış oldu.

Atom sistemləri hallarının diskret xarakter daşması, Frank və Hersin təcrübələrində (1913) öz birbaşa təsdiqini tapdı: yəni, atom diskret enerji spektrinə malikdir.

Daha sonra Ştern və Gerlax təcrübələrində aşkar olundu ki, hərəkət miqdarı momenti də diskret qiymətlər alır.

Sonralar mikroaləm üçün yeni bir ideya olaraq, ilk dəfə işıq kvantları ilə bağlı təcrübələrdə müşahidə olunmuş korpuskul-dalğa dualizmi prinsipi də irəli sürüldü.

2a. Dalğa funksiyası və ehtimal sıxlığı

Mikrozərrəciklərin difraksiyaya uğraması təcrübələri əsasında onların təbiətinin dalğa xarakterli olması faktının aşkarlanması, onların(mikrozərrəciklərin) dinamikasını öyrənmək üçün, mikrozərrəciklərə, zaman və məkanın funksiyası olan $\psi(x, y, z, t)$ dalğa funksiyası qarşı qoyulmasını zəruri edir. Ümumiyyətlə dalğa funksiyasının fiziki mənası haqqında heç bir mülahizə söyləmək olmur, Maks Borna (1926) görə, yalnız onun statistik interpretasiyası məna kəsb edir:

$$dW \sim |\psi(x, y, z, t)|^2 dV \quad (2.1)$$

kəmiyyəti, elektronun¹ t zaman anında fəzanın x, y, z nöqtəsini əhatə edən dV həcm elementində yerləşməsi ehtimalıdır

ψ dalğa funksiyasının özünün deyil, modulunun kvadratının $|\psi|^2$ fiziki məna daşması, bu dalğanı, klassik fizikadakı dalğa sahələrindən kəskin şəkildə fərqləndirərək, onun kompleks kəmiyyət də ola bilməsinə dəlalət etməklə yanaşı, hər hansı C ixtiyari sabitinə hasilinin $(C\psi)$ də mikrozərrəciyin eyni bir fiziki halını ifadə etməsini göstərir.

¹ Mətdə rast gəlinən elektron və zərrəcik anlayışları mikrozərrəcik kimi başa düşülməlidir.

Zərrəciyin t zaman anında fəzanın ixtiyari nöqtəsində aşkar olunması ehtimalının vahidə bərabər olması faktını ifadə edən *normallaşmış dalğa funksiyaları* anlayışını daxil edək. Verilmiş $|e^{i\alpha}|^2 = e^{i\alpha}(e^{i\alpha})^* = e^{i\alpha} \cdot e^{-i\alpha} = e^0 = 1$ ifadəsinə əsasən, vahidə normallaşmış ixtiyari dalğa funksiyası, $e^{i\alpha}$ (α - ixtiyari həqiqi ədəddir) dəqiqliyi ilə müəyyən olunduğundan, normallaşma şərti aşağıdakı kimi yazılır:

$$\int \psi(x, y, z, t) \psi^*(x, y, z, t) dV = 1. \quad (2.2)$$

(2.2) şərtini ödəyən dalğa funksiyaları üçün (2.1) münasibəti aşağıdakı şəkli alır:

$$dW = |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = \rho(x, y, z, t) dV. \quad (2.3)$$

$\rho(x, y, z, t)$ - funksiyasının ehtimal sıxlığı olduğunu nəzərə alaraq, (2.1)-(2.3) münasibətləri əsasında, zərrəciyin t zaman anında ixtiyari sonlu kiçik həcm elementində aşkar olunması ehtimalı üçün düsturu aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$W = \int |\psi(x, y, z, t)|^2 dV. \quad (2.4)$$

(2.2) şərtinin ödənməsi üçün isə, $\int |\psi|^2 dV$ inteqralının sonlu olması tələb olunur. Xüsusi halda, bu şərt, $|\psi|^2$ -nin sonsuzluqda sıfıra yaxınlaşmasını tələb edir, yəni dalğa funksiyası kvadratik inteqrallanan olmalıdır.

Bir mikrozərrəcik və ya zərrəciklər selinin yaratdığı difraksiya mənzərələrinin identikliyi, ayrılıqda bir mikrozərrəciyi ifadə edən $\psi(x, y, z, t)$ dalğa funksiyası və zərrəciklər sistemini ifadə edən

$$\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_i, y_i, z_i, t)$$

dalğa funksiyası tam identik olmalarını (i - zərrəciyin nömrəsidir) tələb edir. Yəni bir zərrəcik və ya zərrəciklər sistemi haqqında söylənilən mühakimələr arasında heç bir prinsipial fərq olmamalıdır. Xüsusi halda, bir zərrəcik halında (bax (2.1) düsturuna, $\psi(x, y, z, t)$ fiziki məna daşımayıb, yalnız $dW \sim |\psi(x, y, z)|^2 dV$ fiziki məna kəsb etdiyindən), qarşılıqlı

təsirdə olmayan, yaxud öz aralarında ixtiyari qanunla qarşılıqlı təsirdə olan N zərrəcikli dalğa funksiyası $\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_i, y_i, z_i, \dots, x_N, y_N, z_N, t)$ da heç bir fiziki məna kəsb etməyib, yalnız

$$dW \sim |\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_i, y_i, z_i, \dots, x_N, y_N, z_N, t)|^2 dV \quad (2.5)$$

ifadəsi fiziki mühakimə yürütməyə imkan yaradır. Yəni, t zaman anında bir nömrəli zərrəciyin x_1, y_1, z_1 nöqtəsini əhatə edən dV_1 həcm elementində olmasını, ikinci zərrəciyin x_2, y_2, z_2 nöqtəsini əhatə edən dV_2 həcm elementində yerləşməsini və i.a. ifadə edir. Xüsusi halda, digər zərrəciklərin ixtiyari yerləşməsi şəraitində, bir nömrəli zərrəciyin dV_1 həcm elementində yerləşmə ehtimalı, aşağıdakı kəmiyyətə mütənəsbidir:

$$dW \sim dV_1 \int |\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N, t)|^2 dV_2 \dots dV_N. \quad (2.6)$$

Analoji ifadələri, həmçinin, sistemin digər zərrəcikləri üçün də, yazmaq olar. Qeyd edək ki, (2.6) düsturu ilə verilən dW_1 ehtimalı, və digər zərrəciklər üçün yazıla bilən $dW_2, \dots, dW_N$ ehtimalları üçün yazılmış düsturlar (uyğun inteqralların sonlu olması şərti daxilində), N zərrəcikli sistemin dalğa funksiyasının normallaşma şərtinin

$$\int |\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N, t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N = 1 \quad (2.7)$$

ödəndiyi halda (2.3) düsturu ilə tam identik olurlar.

Dediklərimizlə yanaşı, qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sisteminə, ayrı-ayrı zərrəciklərin müxtəlif həcm elementlərində müxtəlif ehtimalla yerləşməsi səbəbindən, onlar bir-birindən asılı olmayan hadisələr sayılmalıdırlar:

$$dW = dW_1 dW_2 \dots dW_N = |\psi_1|^2 dV_1 |\psi_2|^2 dV_2 \dots |\psi_N|^2 dV_N.$$

Deməli, qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sisteminin dalğa funksiyası aşağıdakı kimi yazılmalıdır:

$$\psi = \psi_1 \psi_2 \dots \psi_N. \quad (2.8)$$

Bu düsturdan görünür ki, N zərrəcikli sistemin dalğa funksiyası, real üçölçülü fəzada deyil, $3N$ ölçülü fəzada normallaşmışdır, yəni, $|\psi|^2$ kəmiyyəti, üçölçülü fəzada deyil, $3N$ ölçülü fəzada müəyyən olunan ehtimal kimi başa düşülməlidir.

Beləliklə, dalğa prosesini ifadə edən, zərrəciklər sistemi üçün daxil edilən dalğa funksiyası məhfumu, real fəzada yayılan elektromaqnit, yaxud akustik dalğalar kimi eyni təbiətə malik olmamasını göstərir.

2b. De Broyl dalğası. Faza və qrup sürətləri

Mikrozərrəciklərin dalğa-korpuskul dualizminə görə, bəzi təcrübələrdə onlar (zərrəciklər) özlərini dalğa təbiətinə malik obyektlər kimi, digərlərində isə adi korpuskullar kimi bürüzə verirlər.

Zərrəciyin vəziyyəti, dalğa uzunluğu və i.a. kimi klassik anlayışlar, mikrozərrəciyə yalnız qismən şamil oluna bilər. Müəyyən enerjiyə malik elektron dəstəsinin fəzada sərbəst yayılaraq difraksiyaya mənzərəsi yaratması ilə birlikdə, enerji (E) və impulsu (p) əlaqələndirən düstur

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{mv \cdot mv}{2m} = \frac{p^2}{2m},$$

elektronun həmçinin impulsa da malik olması haqqında mühakimə yürütməyə əsas verir. Digər tərəfdən, dalğa-korpuskul dualizminə əsasən elektrona şamil oluna biləcək dalğa uzunluğu (λ) da daxil etmək olar. 1924-cü ildə De Broyl nəzəri mülahizələr əsasında, λ və p kəmiyyətləri arasında aşağıdakı münasibəti

$$p = \frac{2\pi \hbar}{\lambda} = \hbar k \quad (2.9)$$

təklif etdi.

(2.9) düsturu, işıq kvantları üçün aşağıdakı düstur ilə üst-üstə düşür:

$$p = \frac{E}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \quad (2.10)$$

(c – işıq sürətidir) və təbii olaraq fərz etmək olar ki, de Broyl dalğaları da aşağıdakı məlum, enerji və tezlik arasındakı

$$E = \hbar\omega = 2\pi\hbar\nu = 2\pi\hbar\frac{c}{\lambda} \quad (2.11)$$

düsturu ilə ifadə olunur.

Həmçinin qeyd edək ki, de Broyl dalğalarına xas olan tezlikləri, birbaşa eksperimental üsul ilə müəyyən etmək olmur.

(2.9) və (2.10) münasibətlərinə əsaslanaraq, sərbəst zərrəciyin dalğa funksiyasını, müstəvi monoxromatik dalğa şəklində ifadə etmək olar,

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = Ae^{i\left(\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar}t\right)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}. \quad (2.12)$$

A sabiti normallaşma şərtindən tapılır. Yuxarıda $\vec{k}$ dalğa vektorudur:

$$\vec{k} = \frac{1}{\hbar} \vec{p}. \quad (2.13)$$

(2.9), (2.10) və (2.11) düsturlarının köməkliyi ilə de Broyl dalğalarının dispersiya qanununu almaq olar:

$$\omega = \frac{1}{\hbar}E = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (2.14)$$

$p_x x - Et \equiv kx - \omega_k t$ kəmiyyəti dalğanın fazasını ifadə edir və sabit fazalı nöqtələr ($kx - \omega_k t = \text{const}$)

$$v_F = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} - \quad (2.15)$$

faza sürəti ilə hərəkət edir.

2a bölməsində qeyd olunan nəticələrə görə (bax (2.1)-(2.4) düsturlarına), (2.12) monoxromatik dalğası, sabit amplituda malikdir. Buna görə də, belə halda, zərrəcik eyni ehtimal ilə ixtiyari nöqtədə müşahidə oluna bilər. (2.12) dalğa funksiyası, ümumiyyətlə, ehtimal interpretasiyası imkanı yaratmır. Bu “vəziyyətdən” çıxmaq üçün, monoxromatik dalğa deyil, dalğa paketi anlayışı daxil edilir:

$$\psi(x, t) = \int \psi_k(x, t) dk = \int c(k) e^{i(kx - \omega_k t)} dk . \quad (2.16)$$

Zərrəciyin ixtiyari bir nöqtədə müşahidə olunması ehtimalını ifadə edən integralın, (2.2) şərtini ödəməsi üçün, $c_k = c(k)$ funksiyası seçilir və paketin *qrup sürəti* anlayışı daxil edilir,

$$v_{qr} = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{1}{m} p_0 . \quad (2.17)$$

(2.17) düsturu göstərir ki, de Broyl dalğasının qrup sürəti, makrozərrəciyin mexaniki hərəkətinin sürəti ilə üst-üstə düşür.

De Broyl tərəfindən, əvvəlcə fotonlar üçün irəli sürülən zərrəcik-dalğa dualizmi hipotezi, həmçinin, elektronlara, protonlara və digər mikroaləm zərrəciklərinə də xasdır. Bu zərrəciklərin dalğa və zərrəcik xüsusiyyətləri arasındakı kəmiyyət asılılıqları foronlar üçün yazılmış münasibətlər ilə üst-üstə düşür.

Sonrakı nəzəri tədqiqatlar nəticəsində, kvant fizikasının, iki, eyni hüquqlu(bərabər) riyazi nəzəriyyəsi meydana gəldi: Verner Heyzenbergin *matris mexanikası* (1925) və Ervin Şrödingerin *dalğa mexanikası* (1926). Hər iki nəzəriyyə, bir-birinə tamamilə ekvivalent olaraq, mikrofizikanın ümumi qəbul edilmiş fundamental nəzəriyyəsi olan, hal-hazırda bizim *kvant mexanikası* adlandırdığımız nəzəriyyənin iki müxtəlif riyazi təsviri olmalarını göstərdi.

3a. Superpozisiya prinsipi.

Kristallarda elektron dəstələri ilə aparılan eksperimentlərin nəticələrinin izahı, ehtimalların xətti qanunla

toplanmasını tələb edir. Məsələn, ψ_1 və ψ_2 dalğa funksiyaları ilə təsvir olunan hal mövcuddursa, onda bu dalğa funksiyalarının üst-üstə xətti toplanması da mümkündür:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 ,$$

yəni, zərrəciyin halını ψ_1 və ψ_2 dalğa funksiyaları ifadə edirlərsə, onda $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ yeni dalğa funksiyası da zərrəciyin halını təsvir edə bilər. Və yaxud, hər hansı bir kəmiyyətin ölçülməsi, A ilə işarə olunan halda a nəticəsi, B halında isə b nəticəsi verərsə, onda A və B hallarının superpozisiyası elə hal verər ki, bu hal üçün, həmin kəmiyyətin ölçülməsi müəyyən ehtimalla ya a nəticəsinə, yaxud da b nəticəsinə gətirər.

$$\text{Müəyyən impulsu malik hala} \quad (2.12)$$

$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$ müstəvi dalğa funksiyası uyğun gəlirsə, onda, difraksiya qəfəsinə düşən elektronun ilkin (başlanğıc) halını ifadə edən dalğa funksiyası, ümumi halda, (2.16) müstəvi dalğalarının superpozisiyası şəklində ifadə oluna bilər, yəni,

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\vec{p}, t) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) d\vec{p} . \quad (3.1)$$

Burada, $c(\vec{p}, t)$ - $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ impulsuna malik, de Broyl dalğasının amplitududur. Bu amplitud, ixtiyari halda olan elektronun dalğa funksiyasının, impulsları məlum olan halların dalğa funksiyalarının cəmlənməsinin nəticəsidir.

(2.12), (2.16), (3.1) düsturlarından istifadə edib,

$\varphi(p_x, p_y, p_z, t) = c(p_x, p_y, p_z, t) e^{\frac{-i}{\hbar}Et}$ - əvəzləməsini apararaq, aşağıdakı sabiti

$$A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} ,$$

(geniş əsaslanması, 17-ci paragrafda veriləcək normallaşma şərtindən tapılır) daxil edib, dalğaların superpozisiyasını aşağıdakı şəkildə yazmaq olur:

$$\psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p_x, p_y, p_z, t) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} dp_x dp_y dp_z. \quad (3.2)$$

Buradan, integralın çevrilməsi üçün məlum Furje teoreminə görə, hər bir ψ funksiyası üçün φ amplitudunu tapırıq:

$$\varphi(p_x, p_y, p_z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, z, t) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} dx dy dz, \quad (3.3)$$

yəni, *ixtiyari hala, zərrəciyin verilmiş $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ impulsu halına uyğun de Broyl dalğalarının superpozisiyası kimi baxmaq olar.*

(2.3) ifadəsini və zərrəciyin impulsunun $p_x, p_x + dp_x; p_y, p_y + dp_y; p_z, p_z + dp_z$ intervalında yerləşməsi ehtimalının $dp_x dp_y dp_z$ -ə mütənasib olmasını nəzərə alaraq, müəyyən edirik ki,

$$W = \int dW(p_x, p_y, p_z, t) = \int |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = \int |c(p_x, p_y, p_z, t)|^2 dp_x dp_y dp_z.$$

$\varphi(p_x, p_y, p_z, t)$ -nin, (3.1) düsturuna əsasən, $\psi(x, y, z, t)$ dalğa funksiyasının Furje sırasına ayrılışının komponenti olmasını nəzərə alsaq, aşağıdakı ifadəyə gəlirik:

$$\int |\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz = \int |c(p_x, p_y, p_z, t)|^2 dp_x dp_y dp_z. \quad (3.4)$$

Burada, sağ tərəf, zərrəciyin impulsunun ixtiyari qiymətinin tapılması ehtimalını göstərir, sol tərəf isə - zərrəciyin fəzanın ixtiyari nöqtəsində aşkar edilməsi ehtimalıdır. Burada, ehtimal

edilir ki, zərrəciyin $\bar{p}(p_x, p_y, p_z)$ impulsu $\psi(x, y, z, t)$ halında aşkar edilməsinin ehtimalı sıxlığı $\rho(p_x, p_y, p_z)$ ilə əlaqəlidir:

$$\rho(p_x, p_y, p_z) = |c(p_x, p_y, p_z)|^2.$$

ψ dalğa funksiyası (2.2) şərt ilə normallaşdıqından, (3.4) düsturundan aşağıdakı bərabərlik alınır:

$$\int |c(p_x, p_y, p_z)|^2 dp_x dp_y dp_z = 1.$$

Yəni, mikrozərrəciklər sistemi, $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ dalğa funksiyaları ilə ifadə olunursa, onda, aşağıdakı

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \quad (3.5)$$

xətti kombinasiya (superpozisiya) da, sistemin mümkün hallarından birini ifadə edən dalğa funksiyasıdır.

3b. Qeyri-müəyyənlik münasibətləri.

Heyzenbergə görə, dalğa paketi $\Delta p_x \Delta x \sim \hbar$ fəza ölçüsünə malik olduğundan, o (dalğa paketi), fəzada nə qədər dəqiq lokallaşarsa, uyğun impuls bir o qədər qeyri-müəyyən olur:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar, \quad (3.6)$$

$$\Delta p_y \Delta y \geq \hbar, \quad (3.7)$$

$$\Delta p_z \Delta z \geq \hbar. \quad (3.8)$$

Bu münasibətlərin riyazi əsaslandırılması ilə Əlavə A-da tanış olmaq olar.

Heyzenberq münasibətlərinə, zərrəciyin enerjisi və zaman intervalı arasındakı Heyzenberq-Bor münasibətini də əlavə etmək lazımdır:

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar,$$

yəni, zərrəciyi müşahidə etmə müddəti nə qədər kiçikdirsə, bu müddət ərzində onun enerjisini qiymətləndirmək (ölçmək) bir o qədər qeyri-müəyyəndir.

Mikrozərrəciyin klassik obyektlərdən kəskin fərqlənməsi, və difraksiya təcrübələrindən məlum olan, zərrəciyin hərəkət trayektoriyası anlayışı yoxluğu, onun(mikrozərrəciyin) hərəkətinin təsvirində, klassik fizikada olduğu kimi, hər bir zaman anında, onun koordinat və impulsunun dəqiq qiymətini müəyyən etməyi mümkünsüz etsə belə, Heyzenberq münasibətləri, bu ölçmələri, müəyyən qədər dəqiqliklə yerinə yetirməyə imkan verir. Zərrəciyin dəqiq lokallaşma nöqtəsi ətrafında onun impulsu təməmilə qeyri-müəyyəndir. Əksinə, zərrəciyin impulsu tam mənada konkret qiymətə malikdirsə, onda (3.6)-(3.8) münasibətlərinə əsasən, onun fəzada yerləşdiyi koordinat təməmilə qeyri-müəyyəndir. Bu mühakimələr, kvant mexanikasının vacib ümumi prinsiplərindən biri olan, *səbəbiyyət prinsipini* izah edir: $\hbar \rightarrow 0$ hüduduna keçərkən, kvant mexanikasının qanun və münasibətləri, klassik mexanikanın uyğun qanun və münasibətlərinə keçirlər. Xüsusi halda, çox böyük kütləyə malik zərrəcik üçün, $\hbar/m$ nisbəti o qədər kiçikdir ki, onun (zərrəciyin) koordinatı və impulsu praktik olaraq konkret qiymətlərə malik olur, yəni, kvant mexanikası, klassik mexanikanı, $\hbar \rightarrow 0$ limitində öz “tərkibində” saxlayır. Bu isə, öz növbəsində, bəzi kvant-mexaniki kəmiyyətlər və məfhumlar ilə klassik mexanikadakı analoqlar arasında əlaqə qurmağı mümkün edir.

4a. Şrödinger tənliyi

Zərrəciyin hərəkət dinamikasını təsvir etmək üçün, verilmiş konkret xarici qüvvə sahəsində, onun(zərrəciyin) hərəkətini ifadə edən dalğa funksiyasını tapmaq lazımdır. Xüsusi halda, superpozisiya prinsipindən çıxır ki, ψ funksiyasını müəyyən etmək üçün mümkün diferensial tənliklər xətti olmalıdırlar. Bu tənliklərin həllindən dalğa funksiyasının özü tapıla bilər. Sərbəst zərrəciyin hərəkətini ifadə edən dalğa funksiyası, müstəvi monoxromatik de Broyl dalğa şəklinə malikdir:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \vec{r} - \omega t)} = A e^{i\left(\frac{\vec{p}}{\hbar} \vec{r} - \frac{E}{\hbar} t\right)} = A e^{-\frac{i}{\hbar} E t} e^{\frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y + p_z z)}. \quad (4.1)$$

Yuxarıda adı çəkilən tənliyin aşkar şəklini ümumi mülahizələr vasitəsilə tapmaq üçün (4.1) dalğa funksiyasında zamana görə törəməni alaq:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi. \quad (4.2)$$

Daha sonra (4.1) dalğa funksiyasının koordinatlara görə ikinci tərtib törəmələrini tapaq:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \psi. \quad (4.3)$$

Sərbəst zərrəciyin enerjisini

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \quad (4.4)$$

ifadəsini (4.2) tənliyində nəzərə alıb

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \psi,$$

bu tənlikdə (4.3) tənliyini istifadə etsək, alırıq:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} (-\hbar^2) \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right).$$

$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \Delta \psi$ ifadəsini nəzərə alıb, yuxarıdakı tənliyin

hər tərəfini $i\hbar$ -a vuraraq, zərrəciyin nə impuls, nə də ki, enerjisi kimi xarakteristikalarını özündə daşımayan, yalnız zərrəciyin kütləsi və $\hbar$ universal sabiti daxil olan *Şrödingər tənliyi* adlanan zamana görə birinci tərtib, koordinatlara görə isə ikinci tərtib diferensial tənliyə gəlirik:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi. \quad (4.5)$$

Bu tənliyə daxil olan i vuruğu, dalğa funksiyasının, həmçinin, kompleks də ola biləcəyini göstərir.

4b. Stasionar və qeyri-stasionar hallar üçün Şrödinger tənliyi

(4.5) tənliyinin həllərindən biri - zamandan harmonik asılı olan

$$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (4.6)$$

funksiyasını (4.5) tənliyinin sol tərəfində yerinə yazsaq

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \quad (4.7)$$

zamana görə diferensiallanmadan

$$i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} E \psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi.$$

sonra sərbəst zərrəciyin $\psi(x)$ dalğa funksiyasını müəyyən edən aşağıdakı tənliyi alırıq:

$$\Delta \psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0. \quad (4.8)$$

Nəhayət, zərrəciyin sərbəst hərəkəti zamanı, kinetik enerjinin tam enerji ilə üst-üstə düşməsi ilə əlaqədar, zərrəciyin potensial enerjisini ($U(x)$) də daxil edərək, yalnız koordinatdan asılı dalğa funksiyası üçün tənlik alırıq:

$$\Delta \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi(x) = 0. \quad (4.9)$$

Bu tənlik, ixtiyari, zamandan asılı olmayan potensial sahədə hərəkət halı üçün, Şrödinger dalğa tənliyinin ümumiləşməsidir. (4.9) tənliyi *stasionar hallar üçün Şrödinger tənliyi*. Doğrudan da, (4.6) halında olan zərrəciyin koordinatlarının ölçülməsi ehtimalının sıxlığı zamandan asılı olmur:

$$|\psi(x,t)|^2 = \left| \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \right|^2 = |\psi(x)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E t + \frac{i}{\hbar} E t} = |\psi(x)|^2 e^0 = |\psi(x,0)|^2 \quad (4.10)$$

(4.2) tənliyini (4.9) tənliyində istifadə etsək, zərrəciyin, həm koordinatdan, həm də zamandan asılı olan dalğa funksiyasını tapmağa imkan verən, kvant mexanikasının əsas tənliyi - *ümumi Şrödinger dalğa tənliyini* alırıq:

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi \quad (4.11)$$

Klassik fizikanın tənlikləri kimi, kvant mexanikasında Şrödinger tənliyi də, məlum təcrübi nəticələrin ümumiləşdirilməsindən irəli gəlib, böyük elmi uzaqgörənliyin nəticəsi sayılır. Tənliyin doğruluğu, və ona daxil olan dalğa funksiyasının mənasının izahı, müasir atom və molekul, nüvə və elementar zərrəciklər fizikasının çoxsaylı eksperimentlərində öz təsdiqini tapır. Şrödinger tənliyini həll etmək üçün başlanğıc və sərhəd şərtləri də verilməlidir. Şrödinger tənliyi, elektrodinamikanın Dalamber tənliyindən fərqli olaraq, zamana görə birinci tərtib tənlik olduğundan, dalğa funksiyasının, $\psi(x, 0)$ başlanğıc şərtinin verilməsi tələbi tamamilə təbiidir. Sərhəd şərtlərinin verilməsi tələbi, dalğa funksiyası və onun birinci tərtib törəməsinin *kəsilməzliyinin, birqiymətliliyinin və normallaşma şərtlərinin* ödənilməsinə gətirərək, prinsipcə, Şrödinger tənliyinin *yeganə həllini* - $\psi(x, t)$ dalğa funksiyasını tapmağa imkan verir. Yəni, dalğa funksiyasının başlanğıc qiyməti verilərsə, sonrakı ixtiyari zaman anında, Şrödinger tənliyinin həlli vasitəsilə, zərrəciyin halının müəyyən edilməsi problemi həll olunur.

5a. Xətti operatorlar

Beləliklə, kvant mexanikasında hər bir fiziki kəmiyyətə, müəyyən xətti operator qarşı qoyulur. Və istifadə olunan riyazi aparat öz-özlüyündə, sistemin müəyyən hallarının digər hallardan

seçilməsi ilə əlaqədar olan riyazi fizikanın məsələlərinə identikdir. Yəni, riyazi dildə deyilsə, kvant mexanikası, xətti operatorlar və onların məxsusi qiymətləri məsələsidir.

Xətti operatorlar nəzəriyyəsi, riyaziyyatçılar tərəfindən, kvant mexanikasının yaranmasından xeyli əvvəl işlənilib hazırlanmışdı. İndi bu nəzəriyyə, digər riyazi metodlarla birlikdə, *operator kvant mexanikasının* riyazi aparatını təşkil edir.

Operator, verilmiş $\varphi(x)$ funksiyasının əsasında, digər

$$\psi(x) = \hat{F}[\varphi(x)] \quad (5.1)$$

funksiyanı hesablamağa imkan yaradan riyazi əməliyyatdır. Bu, məsələn, hər-hansı bir X ədədini, digər $\psi(x)$ ədədinə çevrilməsi əməliyyatıdır. Operatorlar adətən $\wedge$ ilə işarələnirlər. Məsələn, $\hat{F}$.

Aşağıdakı

$$\hat{F}(\varphi_1 + \varphi_2) = \hat{F}\varphi_1 + \hat{F}\varphi_2, \quad (5.2)$$

$$\hat{F}(a\varphi) = a\hat{F}\varphi, \quad (5.3)$$

(burada a ixtiyari sabitdir) şərtlərinin ödənildiyi ixtiyari $\hat{F}$ operatoru *xətti operator* adlanır. (5.2) və (5.3) şərtlərindən aşağıdakı münasibət alınır,

$$\hat{F}(a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2) = a_1\hat{F}\varphi_1 + a_2\hat{F}\varphi_2. \quad (5.4)$$

Verilmiş $\hat{F}$ və $\hat{R}$ operatorlarının kombinasiyalarından, operatorların cəmi $\hat{G} = \hat{F} + \hat{R}$,

$$\hat{G}\varphi = \hat{F}\varphi + \hat{R}\varphi, \quad (5.5)$$

və hasil $\hat{L} = \hat{F}\hat{R}$,

$$\hat{L}\varphi = \hat{F}(\hat{R}\varphi), \quad (5.6)$$

operatorları qurulur.

Operatorların tətbiq obyekti kimi, bir və yaxud bir neçə dəyişənli, həm kəsilməz (məsələn, koordinat), həm də diskret qiymətlər alan (məsələn, enerji səviyyələri) funksiyalar ola bilər.

Fiziki kəmiyyətlər həqiqi qiymətlər alırlar. Operatorların təsir etdiyi funksiyalar isə, ümumiyyətlə desək, kompleksdirlər.

Kəsilməz qiymətlər alan x dəyişənin hər-hansı bir funksiyasına təsir edən, tipik operator kimi, X -ə vurmanı göstərmək olar $\psi = x\varphi$.

5b. Diferensial və integral operatorlar və onların kommutasiyaları

Kəsilməz qiymətlər alan x dəyişənin hər-hansı bir funksiyasına təsir edən tipik operatorlardan digəri kimi x -ə görə diferensiallamayı göstərmək olar. $\hat{F} = \frac{d}{dx_i}$ - hər hansı bir dəyişən

üzrə diferensiallama operatoru

$$\psi(x_i) = \frac{d}{dx_i} \varphi(x_i),$$

mənası verir və diferensiallama operatoru, tez-tez istifadə olunduğundan, xüsusi, *diferensial operatorlar* anlayışı daxil edilir.

Məsələn, Laplas $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ və qradient

$$\vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \text{ operatorları.}$$

İxtiyari $\hat{F}$ operatoruna, aşağıdakı münasibətlərin

$$\hat{F}^{-1}\hat{F}\psi = \psi, \quad \hat{F}\hat{F}^{-1}\psi = \psi, \quad \hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{F}\hat{F}^{-1} = 1$$

ödənilədiyi tərs operator $\hat{F}^{-1}$ qarşı qoyulur.

Əgər $\hat{F}$ diferensial operator dursa, onda ona tərs operator $\hat{F}^{-1}$, integral operator olar. Doğrudan da, əgər aşağıdakı münasibətdə,

$$\hat{F}\psi(x) = \varphi(x), \quad (5.7)$$

bərabərliyin sağ və sol tərəflərinə $\hat{F}^{-1}$ operatoru ilə təsir etsək, alırıq:

$$\psi(x) = \hat{F}^{-1}\varphi(x), \quad (5.8)$$

yaxud,

$$\psi(x) = \int G(x, x')\varphi(x')dx'. \quad (5.9)$$

$G(x, x') \hat{F}^{-1}$ integral operatorunun nüvəsi olaraq, Qrin funksiyası adlanır, və aşağıdakı münasibəti ödəyir:

$$\hat{F} G(x, x') = \delta(x - x'), \quad (5.10)$$

Burada, $\delta(x - x')$ - Dirakin δ -funksiyasıdır (bu funksiyanın özəllikləri sonrakı mühazirələrdə müzakirəyə çıxarılacaq).

Çox vacib bir məqama toxunaq. Əgər, funksiya əvvəlcə $\hat{F}$ operatoru, sonra isə $\hat{R}$ operatoru təsir edirsə, onda onların hasili $\hat{L}' = \hat{R}\hat{F}$ operatoru olaraq, ψ dalğa funksiyasına təsir etibarı ilə

$$\hat{L}'\psi = \hat{R}(\hat{F}\psi). \quad (5.11)$$

(5.6) düsturu ilə üst-üstə düşürlər. Yəni, operatorların hasili, onların yerləşməsi ardıcılığından əsaslı surətdə asılıdır. Deməli belə operatorların cəbri, kommutasiya etməyən kəmiyyətlərin cəbridir. Əgər iki operatorun hasili, ψ dalğa funksiyasına təsirinin nəticəsi etibarı ilə operatorların hansı ardıcılıqla yerləşməsindən asılı deyilsə, onda deyirlər ki, bu operatorlar kommutasiya edəndirlər, əks halda isə (yəni iki operatorun yerləşmə ardıcılığını dəyişdikdə, onların hasili olan operatorların hər hansı eyni bir funksiya təsirinin nəticələri fərqlənirlərsə) bu operatorlar kommutasiya etməyən operatorlar adlanırlar. Məsələn,

x -ə görə diferensiallama operatorunun $(\hat{R} = \frac{d}{dx})$, x -ə vurma

operatoruna $(\hat{F} = x)$ hasilini tapaq, yəni, (5.6) və (5.11) düsturlarına əsasən $\hat{L}$ və $\hat{L}' = \hat{R}\hat{F}$ operatorlarının ψ dalğa funksiyasına təsirləri aşağıdakı kimidirlər:

$$\begin{aligned} \hat{L}\psi &= x \frac{\partial}{\partial x} \psi, \\ \hat{L}'\psi &= \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \psi + x \frac{\partial}{\partial x} \psi = (1 + x \frac{\partial}{\partial x})\psi. \end{aligned}$$

Deməli, $\hat{L}$ və $\hat{L}'$ operatorlarının aşkar şəkilləri $\hat{L} = x \frac{\partial}{\partial x}$,

$\hat{L}' = 1 + x \frac{\partial}{\partial x}$ bərabər deyillər, yəni $\hat{L}$ və $\hat{L}'$ operatorları

kommutasiya etmirlər. $\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F}$ ifadəsi, $\hat{F}$ və $\hat{R}$ operatorlarının kommutatoru adlanaraq, aşağıdakı mötərizələr vasitəsilə ümumiləşdirilir:

$$[\hat{F}, \hat{R}] = \hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F}. \quad (5.9)$$

Əgər, $\hat{F}\hat{R} = -\hat{R}\hat{F}$ münasibəti ödənirsə, onda deyirlər ki, $\hat{F}$ və $\hat{R}$ operatorları antikommutasiya edirlər.

6. Xətti operatorların məxsusi qiymət və məxsusi funksiyaları

Yuxarıda qeyd etdik ki, zərrəciyin hərəkət qanununu almaq üçün, Şrödinger tənliyi ilə birlikdə, həmçinin, dalğa funksiyasının başlanğıc halda ifadəsini $\psi(x, 0)$ də bilmək lazımdır. Ümumi halda, sərhəd şərtləri sistemi, dalğa funksiyasının, *standart şərtlər adlanan, birqiymətliyi və kəsilməzliyi* tələblərinə, o cümlədən *dalğa funksiyasının birinci tərtib törəməsinin*, və *normallaşma şərtlərinin* məlum olması tələblərinə gətirir. Axırıncı şərt, adətən, dalğa funksiyasının modulunun məhdudiyyətini tələb edir. Başlanğıc şərt, standart şərtlərlə birlikdə, prinsipcə, Şrödinger tənliyinin *yeganə həllini* - $\psi(x, t)$ dalğa funksiyasını tapmağa imkan verir.

Daha ümumi şəkildə desək, aşağıdakı

$$\hat{F} \psi = F \psi \quad (6.1)$$

operator münasibətindəki $\hat{F}$ operatoru xətti diferensial operator dursa, onda (6.1) tənliyi bircins, xətti diferensial tənlik olmalıdır. $\hat{F}$ operatoru ilə ψ -funksiyaya təsir etdikdə, dalğa funksiyası üçün olan, eksponensial (2.12) ifadəsinə əsasən, son

nəticə kimi, hər hansı bir F sabitinə vurulmuş elə həmin ψ dalğa funksiyası alınır.

Ümumiyyətlə desək, (6.1) tənliyinin, trivial həlldən fərqli olan və standart şərtləri ödəyən həlləri, F -in bütün qiymətlərində deyil, yalnız müəyyən seçilmiş qiymətlərində mövcuddurlar. F -in bu qiymətləri, $\hat{F}$ operatorunun *məxsusi qiymətləri*, (6.1) tənliyinin uyğun həlləri isə, $\hat{F}$ operatorunun *məxsusi funksiyaları* adlanırlar.

Verilmiş operatorun məxsusi qiymətlərinin məcmusu, məxsusi qiymətlər spektri adlanır. Məxsusi qiymətlərin spektri həm *diskret*, həm də *kəsilməz* ola bilər.

Standart şərtlərdən məlum olur ki, dalğa funksiyası sonlu olmalıdır, yəni, $|\psi|^2$ ifadəsinin inteqralı sonlu qiymətə malik olmalıdır. Əks halda, inteqrallama zamanı bu ifadə sonsuzluğa çevrilirsə. *requlyarlaşma* adlanan, xüsusi əməliyyat keçirməklə, prinsipcə, sonlu ifadəyə nail olmaq olar. Amma bu metodların şərh, bizim mühazirələr kursunun həddudlarından çox kənara çıxır.

Əgər operatorun hər bir məxsusi qiymətinə bir ψ məxsusi funksiyası uyğun gəlsə, onda verilmiş operatorun məxsusi qiymətlərinin məcmusu *cırılmamış spektrə* malik olur. Operatorun hər bir məxsusi qiymətinə r sayda məxsusi funksiya uyğun gəlsə, onda deyirlər ki, verilmiş məxsusi qiymət, r *tərtib cırılmağa* malikdir.

7. Ermit operatorlar və onların xüsusiyyətləri

Şrödinger tənliyini öyrənəndə qeyd etdik ki, dalğa funksiyası kompleks də ola bilər. Digər tərəfdən, fiziki kəmiyyətlərin həqiqiliyi (ancaq real qiymətlər ala bilməsi faktı) tələb edir ki, ixtiyari operatorun məxsusi qiymət və məxsusi funksiyasını tapmaq üçün (6.1) tənliyi yalnız həqiqi məxsusi qiymətlərə gətirməlidir. Yəni, kvant mexanikasında, yalnız həqiqi məxsusi qiymətlərə malik, özü-özünə qoşma(xüsusi halda, ermit)

olan operatorlar maraqlı kəsb edirlər. Prinsipcə, hər bir xətti $\hat{F}$ operatoruna, bu operatorun “özünə qoşma”(yaxud *ermit qoşma* $\hat{F}^+$ olan operator) qarşı qoymaq olar. Xüsusi halda, operator öz qoşması ilə üst-üstə düşərsə $\hat{F}^* = \hat{F}$ (* - kompleks qoşma işarəsidir), ermitlik şərti aşağıdakı kimi olur:

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 dV = \int \psi_2 \hat{F}^* \psi_1^* dV \quad (7.1)$$

($\hat{F}^*$ operatoru $\hat{F}^* \psi^* = (\hat{F} \psi)^*$ tənliyindən müəyyən edilir).

Aşağıdakı misala baxaq. $\hat{F} = \frac{d}{dx}$ diferensiallama operatoru üçün, (7.1) tənliyində hissə-hissə inteqrallama əməliyyatını yerinə yetirsək, alırıq:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_2 dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \frac{d\psi_1^*}{dx} dx .$$

(ψ_1 və ψ_2 funksiyaları üçün $|\psi|^2$ ifadəsinin sonsuzluqda sıfıra bərabərliyi şərti qəbul edilib). Yəni, aşağıdakı nəticəyə gəlirik:

$$\hat{F}^+ = -\frac{d}{dx} .$$

Yəni, diferensiallama operatoru ermit operator deyildir.

Digər bir, $i \frac{d}{dx}$ operatoruna baxaq. Bu halda, ψ_1 və ψ_2 funksiyaları üçün $|\psi|^2$ ifadəsinin sonsuzluqda sıfıra bərabərliyi fərziyyəsində (7.1)-də hissə-hissə inteqrallama aparsaq, alırıq:

$$i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_2 dx = -i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \frac{d\psi_1^*}{dx} dx .$$

$\left(i \frac{d}{dx}\right)^* = -i \frac{d}{dx}$ olduğundan, (7.1) şərti ödənilir, yəni $\hat{F} = i \frac{d}{dx}$ operatoru ermit operatorudur.

İlkin $\hat{F}$ operatoruna görə transponirə olunuş $\tilde{\hat{F}}$ operatoru aşağıdakı şərti,

$$\int \psi_1^* \hat{F} \psi_2 dV = \int \psi_2 \tilde{\hat{F}} \psi_1^* dV$$

ödəyərsə, onda (7.1)-ə əsasən alırıq:

$$\hat{F}^+ = \tilde{\hat{F}}^* .$$

Aşağıdakı neoremi isbat edək. Əgər $\hat{F}$ və $\hat{R}$ operatorları kommutasiya edirlərsə və ermit qoşmadırlarsa ($\hat{F}^+ = \hat{F}$, $\hat{R}^+ = \hat{R}$), onda onların hasili də ermit qoşmadır.

Əksini fərz edək. Tutaq ki, $\hat{L}^+$ operatoruna qoşma olan $\hat{L}$ operatoru, iki $\hat{F}$ və $\hat{R}$ operatorlarının hasilidir: $\hat{L} = \hat{F}\hat{R}$. (7.1)-ə əsasən, alırıq ki,

$$\int \psi_1^* \hat{F} (\hat{R} \psi_2) dV = \int (\hat{R} \psi_2) (\hat{F}^+ \psi_1)^* dV .$$

İnteqralaltı ifadədə, $(\hat{R} \psi_2)$ və $(\hat{F}^+ \psi_1)$ funksiylərinin yerini dəyişərək,

$$\int \psi_1^* \hat{F} \hat{R} \psi_2 dV = \int (\hat{F}^+ \psi_1)^* \hat{R} \psi_2 dV ,$$

(7.1) münasibətini bir daha tətbiq etsək, son nəticəyə gələrik:

$$\int \psi_1^* \hat{F} \hat{R} \psi_2 dV = \int \psi_2 (\hat{R}^+ \hat{F}^+ \psi_1)^* dV .$$

Alınmış yeni operator $\hat{L}^+ = (\hat{F}\hat{R})^+$, göstərir ki,

$$(\hat{F}\hat{R})^+ = \hat{R}^+ \hat{F}^+ .$$

Doğrudan da, bu şərtlər daxilində alırıq ki,

$$(\hat{F}\hat{R})^+ = \hat{R}\hat{F} = \hat{F}\hat{R} .$$

Deməli, $\hat{F}$ operatoru ermitdirsə, hər bir operator özü özü ilə kommutasiya etdiyindən $\hat{F}^2 = \hat{F}\hat{F}$ də ermit operator olar. Bu fərziyyə, prinsipcə, eyni operatorun sonsuz sayda hasili üçün də doğrudur: $\hat{F}^n = \underbrace{\hat{F} \cdot \hat{F} \dots \hat{F}}_n$ (n - müsbət tam ədəddir)/

8. Ermit operatorların məxsusi qiymət və məxsusi funksiyaları

$\hat{F}$ operatorunun diskret spektrə malik olması və onun məxsusi funksiyasının vahidə normallaşması fərziyyələrində, ermit operatorların məxsusi qiymətlərinin həqiqiliyini göstərək. Sadəlik üçün diskret spektr halını seçək. Bu hal üçün (6.1) tənliyini aşağıdakı kimi yazılır:

$$\hat{F} \psi_n = F_n \psi_n. \quad (8.1)$$

Bu tənliyə kompleks qoşma olan tənliyi də yazaq:

$$\hat{F}^* \psi_n^* = F_n^* \psi_n^*. \quad (8.2)$$

Sol tərəfdən (8.1) tənliyini ψ_n^* -a, (8.2) tənliyini isə, ψ_n -ə vuraraq bütün fəza boyunca integrallayaq:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \hat{F} \psi_n dV &= F_n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n dV, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n (\hat{F}^* \psi_n^*) dV &= F_n^* \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n dV. \end{aligned}$$

Bu ifadələri tərəf-tərəfə çıxaraq,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \hat{F} \psi_n dV - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n (\hat{F}^* \psi_n^*) dV = (F_n - F_n^*) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n dV = 0$$

Diskret spektr halı üçün, (2.2) normallaşma şərtinə

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_n dV = 1 \quad (8.3)$$

əsaən: $F_n - F_n^* = 0$. Yəni $\hat{F}$ ermit operatoru yalnız həqiqi məxsusi qiymətlərə malikdir: $F_n = F_n^*$.

9. Ortoqonallıq və ermit operatorların məxsusi funksiyalarının normallaşması

Növbəti teoremi isbat edək. *Xətti ermit $\hat{F}$ operatorunun iki müxtəlif məxsusi F_n və F_m qiymətlərinə uyğun olan məxsusi funksiyaları, ψ_n və ψ_m^* üçün, aşağıdakı münasibət ödənilir:*

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = 0 \quad , \quad (m \neq n) . \quad (9.1)$$

yəni bu funksiyalar qarşılıqlı ortonormaldırlar.

ψ_n və ψ_m^* funksiyaları uyğun olaraq (8.1) və (8.2) tənliklərini ödəyirlər. $\hat{F}$ operatoru ermit olduğundan, (7.1) ermitlik şərtinə əsasən aşağıdakı tənliyi yaza bilərik:

$$\int \psi_m^* \hat{F} \psi_n dV = \int \psi_n \hat{F}^* \psi_m^* dV . \quad (9.2)$$

(9.2) bərabərliyindəki inteqralaltı ifadələrdə, (8.1) və (8.2) tənliklərini istifadə etsək alırıq:

$$F_n \int \psi_m^* \psi_n dV = F_m \int \psi_n \psi_m^* dV ,$$

yaxud

$$(F_m - F_n) \int \psi_m^* \psi_n dV = 0 .$$

$F_m - F_n \neq 0$ olduğundan ψ_n və ψ_m^* məxsusi funksiyaların qarşılıqlı ortonormal olduqlarını alırıq:

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = 0 . \quad (9.3)$$

Diskret spektr halında ($m=n$), ermit operatorun məxsusi funksiyalarının (8.3) normallaşma şərti və (9.3) ortonormalıq şərtləri aşağıdakı vahid formada yazılır:

$$\int \psi_m^* \psi_n dV = \delta_{nm} . \quad (9.4)$$

Burada δ_{nm} - Kroneker simvoludur: $\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases}$.

Kəsilməz spektr halında, $\psi_F(x)$ və $\psi_{F'}(x)$ dalğa funksiyaları üçün ortonormalıq şərti, (9.1)-(9.3)-ə analogi olaraq cəmləmə əməliyyatının inteqrallama ilə əvəzləyərək isbat olunur:

$$\int \psi_F^*(x) \psi_{F'}(x) dV = 0. \quad (9.5)$$

Kəsilməz spektr halında (9.4) şərti Dirak δ -funksiyası vasitəsilə də yazılır

$$\int \psi_F^*(x) \psi_{F'}(x) dV = \delta(F - F'). \quad (9.6)$$

10. Məxsusi funksiyalara ayrılış

Artıq qeyd etdik ki, ixtiyari xətti ermit operatorun məxsusi funksiyalar sistemi, ortoqonal funksiyalar sistemidir. Ali riyaziyyat kursundan məlumdur ki, müxtəlif şərtlər daxilində hər bir kəsilməz funksiyanı, *tam sistem* təşkil edəcək məxsusi funksiyalar sisteminə ayırmaq olar.

10a. Diskret spektr halı

Diskret spektrə malik $\hat{F}$ operatoru halında, məxsusi funksiyalar sisteminin *tam sistem* olması şərtlərini müəyyən edək.

(3.5) superpozisiya prinsipinə əsasən zərrəciklər sistemin halı $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ dalğa funksiyaları ilə ifadə olunursa, onda hər hansı ψ dalğa funksiyasının, vahidə normallaşmış ψ_n məxsusi funksiyalar üzrə aşağıdakı şəkildə sıraya ayrılışı,

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad (10.1)$$

da sistemin mümkün hallarından birini ifadə edən dalğa funksiyasıdır.

Axırıncı ifadəni sol tərəfdən $\psi_m^*(x)$ -a vurub, bütün fəza üzrə inteqrallayaraq:

$$\int \psi_m^*(x) \psi(x) dV = \int \psi_m^*(x) \sum_n c_n \psi_n(x) dV.$$

Cəmləmə və inteqrallamanın yerlərini dəyişsək alarıq:

$$\int \psi_m^*(x) \psi(x) dV = \sum_n c_n \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dV.$$

Diskret spektr halında, ermit operatorun məxsusi funksiyalarının (9.4) ortoqonallıq şərtindən istifadə edək:

$$\int \psi_m^*(x) \psi(x) dV = \sum_n c_n \delta_{mn},$$

yaxud

$$c_m = \int \psi_m^*(x) \psi(x) dV. \quad (10.2)$$

Bu ifadədə $m=n$ əvəzləməsi aparıb (10.1) ayrılışında istifadə edib,

$$\psi(x) = \sum_n \int \psi_n^*(x') \psi(x) \psi_n(x') dV',$$

integral və cəm işarələrinin yerlərini dəyişərək yenidən yazsaq,

$$\psi(x) = \int \psi(x') \left(\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) \right) dV'. \quad (10.3)$$

alınmış ifadənin qanunauyğunluğu yalnız, $\psi_n(x)$ məxsusi funksiyalar sisteminin *tamlıq* şərtini ifadə edən aşağıdakı

$$\sum_n \psi_n^*(x') \psi_n(x) = \delta(x - x') \quad (10.4)$$

bərabərliyinin ödənilməsi nəticəsində mümkün ola bilər.

10b. Kəsilməz spektr halı

İndi isə kəsilməz spektr halına baxaq. Kəsilməz spektr halında $\psi(x)$ funksiyasının, məxsusi funksiyalar üzrə ayrılışı (10.1) düsturu ilə deyil, aşağıdakı integral ilə verilir:

$$\psi(x) = \int c(F) \psi_F(x) dF. \quad (10.5)$$

(10.5) tənliyini hər iki, sol və sağ tərəflərdən, $\psi_{F'}^*(x)$ funksiyasına vuraraq bütün fəza üzrə integrallama apararaq,

$$\int \psi_{F'}^*(x) \psi(x) dV = \int c(F) dF \int \psi_{F'}^*(x) \psi_F(x) dV$$

integralaltı ifadədə (9.6) düsturundan istifadə edək:

$$\int \psi_{F'}^*(x) \psi(x) dV = \int c(F) dF \cdot \delta(F' - F).$$

δ -funksiya vasitəsilə, integrallamadan sonra alırıq ki,

$$c(F') = \int \psi_{F'}^*(x) \psi(x) dV .$$

F' indeksini F ilə əvəzləyərək,

$$c(F) = \int \psi_F^*(x) \psi(x) dV ,$$

bu ifadəni məxsusi funksiyalar üzrə ayrılış düsturu (10.5)-də istifadə etsək,

$$\psi(x) = \int \psi_F^*(x') \psi_F(x) dF \psi(x') dV ,$$

alınmış ifadənin doğruluğu, kəsilməz spektr halında məxsusi funksiyalar sisteminin *tamliq* şərtini ifadə edən, yalnız aşağıdakı

$$\int \psi_F^*(x') \psi_F(x) dF = \delta(x - x') . \quad (10.7)$$

bərabərliyinin ödənilməsi nəticəsində mümkün ola bilər.

11. Koordinat, impuls və kinetik enerji operatorları

Kvant mexanikasının əsas prinsiplərindən biri olan *uyğunluq prinsipi* əsasında, bəzi kvant mexaniki kəmiyyətlər ilə klassik anlayışlar arasında əlaqə qurmaq mümkündür.

Klassik mexanikada sistemin halı, mexaniki kəmiyyətlər adlanan, koordinat və impulsun (yaxud, onlar vasitəsilə ifadə olunan digər kəmiyyətlər) verilmiş qiymətləri ilə müəyyən olunduğundan, uyğunluq prinsipinə əsasən, kvant mexaniki sistemlərdə analoji rol *kvantmexaniki kəmiyyətlər*, yaxud *fiziki kəmiyyətlər (dinamik dəyişənlər)* oynayır.

Uyğunluq prinsipinə əsasən, hər bir mexaniki kəmiyyətə, uyğun kvantmexaniki xətti operator qarşı qoymaq olar. Yalnız bir operatorun ifadəsini müəyyənləşdirməklə, kvant mexanikasının digər operatorlarının tam sistemini qurmaq mümkündür.

Məsələn, başlanğıc operator kimi, koordinat operatorunu götürməklə, aşağıdakı şərti münasibətləri **yazmaq olar**:

$$\hat{x} \equiv x, \quad \hat{y} \equiv y, \quad \hat{z} \equiv z, \quad \hat{\vec{r}} \equiv \vec{r} . \quad (11.1)$$

Qeyd edək ki, başlanğıc operator kimi hansı operator seçilirsə, o təsvirdə həmin operator (həmçinin, ixtiyari kvant-mexaniki funksiya) sadəcə adi vurma əməliyyatını ifadə edir. Məsələn,

koordinat təsvirində (1.1) ifadələri ilə müəyyən edilən koordinat operatorları, həm öz aralarında, həm də digər operatorlar ilə münasibətdə yalnız vurma əməliyyatını ifadə edirlər. Həmçinin, hər təsvirdə, uyğun kəmiyyətin özü və ixtiyari funksiyası həm öz təsvirinin elementinə (uyğun dinamik dəyişənə və funksiyaya), həm də digər operatorlara qarşı adi riyazi vurma kimi başa düşülməlidir. Məsələn, porsensial enerji $U(x, y, z)$ koordinatın funksiyası olduğundan, koordinatlar və onların ixtiyari funksiyaları kimi, koordinat təsvirində yazılmış digər operatorlarla kvant-mexaniki operator münasibətində yalnız vurma əməliyyatı kimi başa düşülür.

(1.1) ifadələrindən istifadə etməklə prinsipə impuls, kinetik enerji və digər operatorların koordinat təsvirində aşkar ifadələrini qurmaq olar.

Uyğunluq prinsipinə əsasən zərrəciyin $\vec{p}$ impulsuna qarşı $\hat{\vec{p}}$ operatoru, kinetik enerjisində E isə $\hat{E}$ kinetik enerji operatoru qarşı qoyulur. Zərrəciyin kinetik enerjisinin klassik ifadəsində

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

impulsu ($\vec{p}$) $\hat{\vec{p}}$ operatoru ilə əvəz etsək, kinetik enerji operatoru üçün aşkar ifadə alırıq:

$$\hat{E} = \frac{1}{2m} \hat{\vec{p}}^2 = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2). \quad (11.2)$$

İmpuls operatorunun ($\hat{\vec{p}}$) koordinat təsvirində aşkar şəklini tapmaq üçün, alternativ üsul seçək.

Sərbəst zərrəciyin hərəkətini ifadə edən (4.8) Şrödinger tənliyində

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) = E \psi(x),$$

enerjinin klassik düsturuna $E = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 / 2m$ əsasən, uyğunluq prinsipi kontekstində kinetik enerji operatorunun aşkar şəklini ifadə edən (11.2) düsturundan istifadə etsək, alarıq,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \psi(x).$$

Alınmış tənliyin hər iki, sol və sağ tərəflərini $2m$ -ə vurub, sol tərəfdə xəyali vahidin kvadratından $i^2 = -1$, daha sonra, Laplas operatorun aşkar şəklindən $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ istifadə etsək,

aşağıdakı tənliyə gələrik:

$$\frac{\hbar^2}{i^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi = (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \psi(x).$$

Bu ifadədən, iki çoxhəddlinin bərabərlik şərtinə əsasən, yazı bilərik:

$$\frac{\hbar^2}{i^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = \hat{p}_x^2 \psi,$$

$$\frac{\hbar^2}{i^2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi = \hat{p}_y^2 \psi,$$

$$\frac{\hbar^2}{i^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi = \hat{p}_z^2 \psi.$$

Beləliklə, ermitliyi təmin edən i vuruğu və $\hbar$ Plank sabitinin də iştirak etdiyi, uyğun koordinat üzrə diferensiallanmaya əsaslanan, impulsun proyeksiyaları operatorlarının koordinat təsvirində aşkar ifadələrini alarıq:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (11.3)$$

12a. Tam enerji operatoru - hamiltonian

Uyğunluq prinsipinə əsasən, kinetik və potensial enerjilərin cəmi ilə müəyyən olunan tam enerji funksiyası $H = E + U$ (Hamilton funksiyası) tam enerji operatoru (Hamilton operatoru) $\hat{H}$ ilə əvəz olunur:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x, y, z). \quad (12.1)$$

Burada, kinetik enerji operatorunun (11.1) ifadəsindən istifadə olunmuşdur. Potensial enerji U isə yalnız koordinatlardan asılı olduğundan, ona qarşı qoyulan operator, sadəcə, $U(x, y, z)$ funksiyası ilə üst-üstə düşür. $f = -\nabla U$ $f = -\vec{\nabla} U(\vec{r}, t)$ qüvvəsinin təsir etdiyi xarici qeyri-stasionar sahədə olan zərrəciyin Hamilton operatoru aşağıdakı şəkildədir:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \quad (12.2)$$

(burada $\vec{r}(x, y, z)$, $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$).

Zərrəciklər sisteminin Hamilton operatoru, Hamilton funksiyasının klassik ifadəsinə

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{\vec{p}_k^2}{2m_k} + \sum_{k=1}^N U_k(\vec{r}_k) + U_{qt}$$

uyğunluq prinsipinə əsasən yazılır:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \frac{\hat{p}_k^2}{2m_k} + \sum_{k=1}^N U_k(\vec{r}_k) + U_{qt} \quad (12.3)$$

Burada, $\vec{p}_k$, m_k , $U_k(\vec{r}_k)$, k -nömrəli zərrəciyin uyğun olaraq, impulsu, kütləsi və potensial sahədə enerjisi; U_{qt} - zərrəciklərin qarşılıqlı təsir enerjisidir və $\vec{p}_k$ impulsu uyğun impuls operatoru $\hat{p}_k$ (k - indeks k - nömrəli zərrəciyin koordinatı üzrə diferensiasilləməni - $\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}$ göstərir) ilə

əvəzlənmişdir. (4.5), (4.8) Şrödinger tənliklərindən və ixtiyari operatorun məxsusi qiymət və məxsusi funksiyası üçün $\hat{F}\psi = F\psi$ (6.1) tənliyinə analogi, tam enerjinin məxsusi qiymət və məxsusi funksiya tənliyinə $\hat{H}\psi = E\psi$ əsasən yazılmış *operator Şrödinger tənliyi* aşağıdakı kimi yazılaraq,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi, \quad (12.4)$$

(12.3) Hamilton operatoru ilə birlikdə kvant mexaniki zərrəciklər sisteminin halını tam təsvir edir.

Şrödinger tənliyinin operator formasında yazılışı, daha ümumi xarakter daşıyaraq, ixtiyari stasionar və yaxud qeyristasionar sahələrdə zərrəciyin hərəkətini təsvir etməyə tam yararlıdır. Xüsusi halda, bu tənlik zərrəciyin elektromaqnit sahəsində hərəkəti üçün də yararlıdır. Klassik Hamilton funksiyası kimi, hamiltonianı ixtiyari əyrixətli sistem üçün də yazmaq olar. Bunun üçün, yalnız Δ diferensial Laplas operatorunun ifadəsini yeni sistemdə yazmaq lazımdır. Şrödinger tənliyinin həlli əməliyyatını sadələşdirmək məqsədi ilə, potensial enerjinin ifadəsinin sadə görkəmə malik olması üçün, qüvvə sahəsinin simmetriyasından asılı olaraq, bu və ya digər əyrixətli koordinat sistemi seçilir.

İxtiyari operatorun məxsusi qiymət və məxsusi funksiyası üçün $\hat{F}\psi = F\psi$ (6.1) tənliyinə analogi yazılmış, $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}$ bərabərliyinə əsasən, diferensiallama operatorunun məxsusi funksiyası olduğunu və p_x məxsusi qiymətləri olan - impuls operatorunun aşkar şəklini alternativ yolla alaraq,

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x},$$

$p = \hbar k$ (2.9) düsturunu da yada salsaq, e^{ikx} funksiyasının de Broyl monoxromatik dalğasının məxsusi funksiyası rolunu

oynamasını görürük. De Broyl dalğası, həmçinin, $E = \hbar\omega_k$ məxsusi qiymətlərinə malik Hamilton operatorunun da məxsusi funksiyası olduğu aşkar olunur:

$$\hat{H}e^{ikx} = \hbar\omega_k e^{ikx}.$$

Sonuncu tənlik, diskret enerji səviyyələrinə malik olan birölçülü Şrödinger tənliyinə uyğun gəlir.

12b. Elektromaqnit sahəsindəki yüklü zərrəciyin hamiltonianı

Hamilton operatoru üçün yuxarıda yazılan ifadələrin, zərrəciyin elektromaqnit sahəsində hərəkəti üçün yarırsızlığı səbəbindən yüklü zərrəcik üçün Hamilton operatorunun aşkar şəklini müəyyən edək.. Qeyri relyativistik e yüklü zərrəciyin skalyar φ və vektorial $\vec{A}$ potensialları ilə verilmiş elektromaqnit sahəsində hərəkəti halında Hamilton operatorunu almaq üçün ümumiləşmiş impulsun $\vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ ifadəsinə əsasən, klassik mexanikanın Hamilton funksiyasını yazaq:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + e\varphi. \quad (12.5)$$

Burada, C - işıq sürətidir.

Uyğunluq prinsipinə görə, (12.5) düsturunda Hamilton funksiyasını Hamilton operatoru, ümumiləşmiş impulsu impuls operatoru ilə əvəz edək:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + e\varphi. \quad (12.6)$$

(yalnız koordinat və zamanın funksiyası olduqlarından, vektorial və skalyar potensiallar dəyişilməz qalırlar).

13. Kvant mexanikasında orta qiymət

Kvant mexanikasında sistemin halının təsvir olunması, F_n məxsusi qiymətinə uyğun olan F kəmiyyətinə qarşı qoyulan $\hat{F}$ operatorunun $\psi(x)$ məxsusi funksiyaya malik olması kimi başa düşülməlidir. Onda, F kəmiyyəti ölçülərkən $F = F_n$ qiymətinin alınması faktı, $\psi(x)$ məxsusi funksiyasının məlum olması faktı ilə bərabər hüquqlu sayılmalıdır. $\psi(x)$ funksiyasının hər hansı bir $\hat{F}$ operatorunun məxsusi funksiyası olmadığı halda, sistemin halının $\psi(x)$ funksiyası vasitəsilə təsvir olunmasının hansı yolla reallaşması məsələsi öz aktuallığını ortaya çıxarır. Bu o deməkdir ki, verilmiş halda F kəmiyyəti heç bir konkret qiymətə malik deyil. Sistem üzərində aparılan ölçmələr zamanı, məlum ehtimal ilə hər hansı bir F_n məxsusi qiymətinin alınması, verilmiş halda, F kəmiyyətinin orta qiymətinin müəyyən olunmasını təbii bir əməliyyat kimi meydana çıxarır.

Zərrəciklərin eyni bir $\psi(x)$ dalğa funksiyası ilə təsvir olunduğu fərziyyədə çox sayda zərrəciklər sistemində ixtiyari zərrəcik üçün hər hansı bir F kəmiyyətinin ölçmələri nəticəsində əldə edilən orta qiymət ehtimal nəzəriyyəsinə əsasən, aşağıdakı kimidir:

$$\bar{F} = \sum_n W_n F_n .$$

Burada W_n - ölçü aparılarkən F_n məxsusi qiymətinin alınması ehtimalıdır. Ehtimalın $dW = |c_n|^2$ ifadəsindən istifadə edərək, diskret spektr halı üçün alırıq:

$$\bar{F} = \sum_n |c_n|^2 F_n . \quad (13.1)$$

Kəsilməz spektrə halında cəmləmə inteqrallama ilə əvəz olunur:

$$\bar{F} = \int |c(F)|^2 F dF .$$

Amplitudun $c_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dV$ ifadəsini (13.1) istifadə esək, alarıq:

$$\bar{F} = \sum_n c_n^* c_n F_n = \sum_n c_n F_n \int \psi_n(x) \psi^*(x) dV = \sum_n c_n \int F_n \psi_n(x) \psi^*(x) dV,$$

yəni, orta qiymətin müəyyən olunmasında paylanmanın amplitudu əvəzinə, bilavasitə $\psi(x)$ dalğa funksiyasının özü iştirak edir. $\hat{F}$ operatorunun diskret spektr halında məxsusi qiymət və məxsusi funksiyasının müəyyən edildiyi $\hat{F} \psi_n(x) = F_n \psi_n(x)$ tənliyindən istifadə edərək, axıncı ifadəni

$$\bar{F} = \sum_n c_n \int \psi^* \hat{F} \psi_n dV = \int dV \psi^* \hat{F} \sum_n c_n \psi_n.$$

şəklində yazıb, $\psi = \sum_n c_n \psi_n$ paylanmasını nəzərə alsaq, vahidə normallaşmış ψ dalğa funksiyası halında orta qiymət üçün aşağıdakı düsturu alarıq:

$$\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi dV. \quad (13.2)$$

ψ dalğa funksiyası $\hat{F}$ operatorunun məxsusi funksiyası olduğu halda, $\hat{F} \psi = F_m \psi$ məxsusi qiymət tənliyinə əsasən F kəmiyyətinin orta qiyməti, F_m məxsusi qiyməti ilə üst-üstə düşür: $\bar{F} = F_m$.

14. Kommutativlik: məxsusi funksiya və qeyri-müəyyənlik prinsipi arasında əlaqə

Biz yuxarıda, kvant mexanikasında çox vacib sayılan, operatorların kommutativliyi haqqında fikir yürütmüşük. Operatorların kommutasiya etməsi əhəmiyyəti, onlara uyğun fiziki kəmiyyətlərin ölçülməsi, və deməli qeyri-müəyyənlik prinsipi ilə birbaşa bağlıdır.

Aşağıdakı teoremi isbat edək: Əgər, F və R kəmiyyətləri $\psi_n(x)$ dalğa funksiyası ilə ifadə olunan ixtiyari halda müəyyən bir qiymətə malikdirlərsə, onda onlara uyğun $\hat{F}$ və $\hat{R}$

operatorları kommutasiya edirlər və $\psi_n(x)$ hər iki operatorun məxsusi funksiyasıdır.

$\hat{F}$ və $\hat{R}$ operatorlarının məxsusi qiymət və məxsusi funksiya tənliliklərini,

$$\hat{F}\psi_n(x) = F\psi_n(x),$$

$$\hat{R}\psi_n(x) = R\psi_n(x),$$

uyğun olaraq $\hat{R}$ və $\hat{F}$ operatorlarına vurub,

$$\hat{R}\hat{F}\psi_n = \hat{R}F\psi_n = F\hat{R}\psi_n = FR\psi_n,$$

$$\hat{F}\hat{R}\psi_n = R\hat{F}\psi_n = R\hat{F}\psi_n = RF\psi_n$$

tənliliklərin sağ tərəflərinin bərabərliyindən, $\hat{R}\hat{F}\psi_n = \hat{F}\hat{R}\psi_n$ alırıq:

$$(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R})\psi_n = [\hat{R}, \hat{F}]\psi_n = 0.$$

Yəni, iki kvantmexaniki kəmiyyət eyni zamanda müəyyən qiymətlərə malikdirlərsə, onda onlara uyğun olan operatorlar kommutasiya etməlidirlər, deməli ölçmələrin aparıldığı hallara uyğun dalğa funksiyası hər iki operatorun məxsusi funksiyası olmalıdır.

Aşağıdakı misala baxaq. Koordinat operatoru $x = \hat{x}$ və ona uyğun impulsun proyeksiyası operatoru $\hat{p}_x$ ($\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$), kommutasiya etməyən operatorlara misal kimi göstərilə bilər:

$$\begin{aligned} (x\hat{p}_x - \hat{p}_xx)\psi &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{\partial}{\partial x} x \psi \right) = \\ &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} \psi - x \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \right) = i\hbar \psi. \end{aligned}$$

Yəni, $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$. Onlara uyğun olan kəmiyyətlər eyni zamanda konkret qiymətə malik olmurlar. Əksinə, koordinat operatorları və digər fərqli ox üzrə impulsun proyeksiyası operatoru, məsələn, $\hat{x}$ və $\hat{p}_y$, öz aralarında kommutasiya edirlər, yəni, uyğun x və p_y kəmiyyətləri eyni zamanda ölçülə bilən kəmiyyətdirlər.

Koordinat və impulsun fərqli oxlar üzrə proyeksiyaları eyni zamanda müəyyən qiymətə malik ola bilərlər. Deməli, onlar ümumi məxsusi funksiyalara malik ola bilərlər. Əgər sistemin halı verilərsə, onda deyirlər ki, sistemi ifadə edən dalğa funksiyası verilib. Yəni sistemin halı deyildikdə müəyyən kvant mexaniki kəmiyyətlərin məcmusu başa düşülməlidir. Bu kəmiyyətlərin məcmusu sistemin halını tam ifadə edir.

15. $\hat{x}$ operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası

$\hat{x}$ operatorunun məxsusi qiymətini müəyyən etmək üçün uyğun riyazi ifadə (6.1) tənliyinə əsasən aşağıdakı kimi yazılır:

$$\hat{x}\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x). \quad (15.1)$$

Burada x_0 - X koordinatının müəyyən qiymətidir.

Həmçinin, məlumdur ki, dekart koordinatlarının operatorları $\hat{r}$, bu dəyişənlərin özlərinə vurma əməliyyatına gətirilir (yəni, $\hat{x} = x$, $\hat{y} = y$, $\hat{z} = z$):

$$x\psi_{x_0}(x) = x \cdot \psi_{x_0}(x). \quad (15.2)$$

Əgər, (15.1) və (15.2) bərabərliklərini tərəf tərəfə çıxsaq, alırıq:

$$(x - x_0)\psi_{x_0}(x) = 0. \quad (15.3)$$

Dalğa funksiyası δ -funksiyaya normallaşdığından

$$\int \psi_{x_0}^*(x)\psi_{x_0}(x)dx = \delta(x_0 - x'_0) \quad (15.4)$$

münasibəti doğrudur.

(15.3)-dən alırıq:

$x = x_0$, əgər $\psi_{x_0}(x) \neq 0$ olarsa,

$x \neq x_0$, əgər $\psi_{x_0}(x) = 0$ olarsa.

(15.4) şərtindən çıxır ki,

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0). \quad (15.5)$$

Onda, δ -funksiyanın xassəsinə əsasən müəyyən olunur ki,

$$\psi_{x_0}(x) = \begin{cases} \infty, & x = x_0, \\ 0, & x \neq x_0. \end{cases}$$

Qoşma funksiyanı müəyyən edərək $\psi_{x'_0}^*(x) = \delta^*(x - x_0)$ (15.4)-ə əsasən (həmçinin $\delta^*(x - x_0) = \delta(x_0 - x)$ olduğunu nəzərə alaraq) aşağıdakı yekun ifadəyə gəlirik:

$$\int \psi_{x'_0}^*(x) \psi_{x_0}(x) dx = \int \delta(x'_0 - x) \delta(x - x_0) dx = \delta(x_0 - x'_0).$$

Analoji olaraq $\hat{y}$ və $\hat{z}$ operatorlarının məxsusi funksiyalarını müəyyən etmək olar:

$$\psi_{y_0}(y) = \delta(y - y_0), \quad \psi_{z_0}(z) = \delta(z - z_0).$$

$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ operatorları kommutasiya etdiklərindən

$$[x_i, x_k] = 0 \quad i, k = 1, 2, 3(x, y, z),$$

eyni məxsusi funksiya malikdirlər:

$$\begin{aligned} \psi_{r_0}(\vec{r}) &= \psi_{x_0}(x) \psi_{y_0}(y) \psi_{z_0}(z) = \\ &= \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0). \end{aligned}$$

16. İmpuls operatorunun x -təsvirində məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası

x -təsvirində $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ operatorlarının məxsusi qiymətlərini və məxsusi funksiyalarını müəyyən etmək üçün uyğun tənlikləri yazaq:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi, \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial y} = p_y \psi, \quad \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial z} = p_z \psi. \quad (16.1)$$

Birinci tənliyin həllini aşağıdakı şəkildə axtaraq:

$$\psi(x, y, z) = a(y, z) \phi(x),$$

$a(y, z)$ - ixtiyari funksiyadır.

(16.1)-dəki birinci tənliyi həll etsək, alarıq,

$$\psi_{p_x} = a(y, z) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (16.2)$$

Analoji olaraq $\hat{p}_y$ və $\hat{p}_z$ operatorlarının da məxsusi funksiyalarını yazma bilərik:

$$\psi_{p_y} = a(x, z) e^{\frac{i}{\hbar} p_y y}, \quad (16.3)$$

$$\psi_{p_z} = a(x, y) e^{\frac{i}{\hbar} p_z z}. \quad (16.4)$$

p_x, p_y, p_z -lərin istənilən həqiqi qiymətlərində $\psi_{p_x}, \psi_{p_z}, \psi_{p_y}$ funksiyaları üçün sonluluq şərti ödənilir. $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ operatorları kommutasiya etdiklərindən

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0 \quad i, k = 1, 2, 3(x, y, z),$$

onlar eyni bir (ümumi) məxsusi funksiyaya və məxsusi qiymətlərin kəsilməz spektrinə malikdirlər. (16.2)-(16.4)-ə əsasən verilmiş $\vec{p}$ impulsuna uyğun məxsusi funksiya

$$\psi_p = a e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} e^{\frac{i}{\hbar} p_y y} e^{\frac{i}{\hbar} p_z z} = a e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}}, \quad (16.5)$$

şəklində yazılır və zərrəciyin sərbəst hərəkətini təsvir edir.

17. Kəsilməz spektr halında $\hat{p}$ operatorunun məxsusi funksiyası

p_x, p_y, p_z kəmiyyətlərinin verilməsi ilə (16.5) dalğa funksiyasını tam mənası ilə qurmaq mümkündür. İmpulsun məxsusi qiymətlər çoxluğu kəsilməz spektr təşkil edir. Kəsilməz spektr halında məxsusi funksiyalar üçün

$$\int \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad (17.1)$$

normallaşma şərtindən istifadə edərək, a sabitini müəyyən etmək mümkündür. (16.5) düsturunu (17.1)-də nəzərə alaraq yazaq:

$$\int a^* e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \vec{r}} a e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{r} = \delta(\vec{p} - \vec{p}'). \quad (17.2)$$

Daha sonra δ -funksiyanın integral təsvirindən

$$\delta(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha t} dt ,$$

istifadə edərək, aşağıdakı sadə hesablamaları aparmaqla a vuruğu tapılır:

$$\begin{aligned} \delta(\vec{p} - \vec{p}') &= |a|^2 \int e^{\frac{1}{\hbar} i(p_x - p'_x)x} dx \int e^{\frac{1}{\hbar} i(p_y - p'_y)y} dy \int e^{\frac{1}{\hbar} i(p_z - p'_z)z} dz = \\ &= |a|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(p_x - p'_x) \delta(p_y - p'_y) \delta(p_z - p'_z) = \\ &= |a|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}') = \delta(\vec{p} - \vec{p}'), \\ \sqrt{a^2} &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} . \end{aligned}$$

Beləliklə, $\hat{\vec{p}}$ operatorunun normallaşmış məxsusi funksiyası aşağıdakı kimidir:

$$\psi_{\vec{p}}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} . \quad (17.3)$$

18. İmpuls təsvirində koordinat və impuls operatorları

İndi isə koordinat və impuls operatorlarının impuls təsvirində analitik ifadələrini tapaq. $\psi(x, y, z)$ funksiyasını (17.3) məxsusi funksiyaların superpozisiyası

$$\psi(x, y, z) = \int c(\vec{p}) \psi_{\vec{p}}(x, y, z) d\vec{p} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int c(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} d\vec{p} \quad (18.1)$$

kimi ifadə edərək, impuls operatorunun öz təsvirində məxsusi funksiyasını tapmaq olar. Burada $c(\vec{p})$ - sistemin impuls təsvirində dalğa funksiyasıdır.

$$c^*(\vec{p}) c(\vec{p}) d\vec{p} = |c(\vec{p})|^2 d\vec{p} = w(\vec{p}) d\vec{p}$$

ifadəsi zərrəciyin impulsunun mümkün qiymətlərinin $\vec{p}$, $\vec{p} + d\vec{p}$ intervalında yerləşməsi ehtimalını göstərir. Həmçinin, məlumdur ki, zərrəciyin impulsunun hər hansı bir qiymətə malik olması ehtimalı vahidə bərabərdir:

$$\int c^*(\vec{p}) c(\vec{p}) d\vec{p} = \int \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} = 1. \quad (18.2)$$

(10.5) düsturuna əsasən, $\psi^*(\vec{r})$ funksiyasının öz məxsusi funksiyaları üzrə ayrılışını yazsaq,

$$\psi^*(\vec{r}) = \int c^*(\vec{p}) \psi_p^*(\vec{r}) d\vec{p} ,$$

(18.2) ifadəsindən alırıq ki,

$$\int c^*(\vec{p}) c(\vec{p}) d\vec{p} = \int c^*(\vec{p}) d\vec{p} \int \psi_p^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r}.$$

Bu tənliyin sağ və sol tərəflərinin müqayisəsindən aşağıdakı münasibət alınır:

$$c(\vec{p}) = \int \psi_p^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} . \quad (18.3)$$

Burada $c(\vec{p})$, impuls operatorunun öz təsvirində məxsusi funksiyası kimi başa düşülə bilər.

İmpuls operatorunun p -təsvirində orta qiyməti aşağıdakı kimidir:

$$\bar{p} = \int c^*(\vec{p}) \hat{p} c(\vec{p}) d\vec{p} = \int W(\vec{p}) \vec{p} d\vec{p}. \quad (18.4)$$

(18.4) bərabərliyinin doğru olması üçün

$$\hat{p} c(\vec{p}) = \vec{p} c(\vec{p}) .$$

operator münasibətinin ödənilməsi tələb olunur.

Bunu (18.4)-də nəzərə alaraq:

$$\bar{p} = \int c^*(\vec{p}) \hat{p} c(\vec{p}) d\vec{p} = \int c^*(\vec{p}) \vec{p} c(\vec{p}) d\vec{p} .$$

(18.2) düsturuna əsasən aydın olur ki, impuls təsvirində impuls operatoru özü özünə bərabərdir: $\hat{p} = \vec{p}$.

Nəhayət, (18.1) tənliyini sol və sağ tərəflərdən $\hat{r}$ operatoruna vursaq, impuls təsvirində koordinat operatorunun ifadəsini

alırıq: $\hat{r} = i \hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} .$

19. Hərəkət miqdarı momenti və hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorları

(11.1) koordinat və (11.3) impulsun proyeksiyaları operatorlarından istifadə edərək, hərəkət miqdarı momentinin

$$L_x = y p_z - z p_y,$$

$$L_y = z p_x - x p_z,$$

$$L_z = x p_y - y p_x,$$

klassik ifadələrinə əsasən, koordinat təsvirində hərəkət miqdarı momenti operatorunun aşkar ifadəsini qurmaq olar. Uyğunluq prinsipinə əsasən mexaniki kəmiyyətləri kvant mexaniki operatorlar ilə əvəz etsək, alırıq:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad (19.1)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (19.2)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (19.3)$$

İmpulsun proyeksiyaları operatorlarının məcmusu, hərəkət miqdarı momentinin bütün xassələrini özündə daşıyan, hərəkət miqdarı momenti operatorunu müəyyən edir:

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar [\vec{r} \vec{\nabla}] = [\vec{r} \hat{\vec{p}}]. \quad (19.4)$$

Qeyd edək ki, hərəkət miqdarı momentinin müxtəlif koordinat oxları üzrə proyeksiyaları operatorları öz aralarında kommutasiya etmirlər. Əyanilik üçün aşağıdakı kommutatoru hesablayaq:

$$\begin{aligned} & \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = \\ & = (y \hat{p}_z - z \hat{p}_y)(z \hat{p}_x - x \hat{p}_z) - (z \hat{p}_x - x \hat{p}_z)(y \hat{p}_z - z \hat{p}_y) = \\ & = y \hat{p}_z z \hat{p}_x - z \hat{p}_y z \hat{p}_x - y \hat{p}_z x \hat{p}_z + z \hat{p}_y x \hat{p}_z - \\ & - z \hat{p}_x y \hat{p}_z + x \hat{p}_z y \hat{p}_z + z \hat{p}_x z \hat{p}_y - x \hat{p}_z z \hat{p}_y = \end{aligned}$$

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

İndekslərin yerlərini dövrü dəyişməklə, daha iki münasibət alırıq:

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z \\
[\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_y, \\
[\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar \hat{L}_x,
\end{aligned} \tag{19.5}$$

(19.5) münasibətlərindən çıxır ki, zərrəciyin hərəkət miqdarı momentinin proyeksiyaları L_x , L_y , L_z eyni zamanda müəyyən qiymət ala bilməzlər, yəni, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ operatorları kommutasiya etmirlər. Deməli, onlar eyni bir məxsusi funksiya malik deyillər.

Qeyd edək ki, analogi kommutasiya qaydaları hərəkət miqdarı momentinin proyeksiyaları və koordinat operatorları

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x y - y \hat{L}_x &= i\hbar z, \\
\hat{L}_y z - z \hat{L}_y &= i\hbar x, \\
\hat{L}_z x - x \hat{L}_z &= i\hbar y,
\end{aligned} \tag{19.6}$$

həmçinin hərəkət miqdarı momentinin proyeksiyaları operatorları ilə impulsun proyeksiyaları operatorları üçün də doğrudur:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{L}_x &= i\hbar \hat{p}_z, \\
\hat{L}_y \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{L}_y &= i\hbar \hat{p}_x, \\
\hat{L}_z \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{L}_z &= i\hbar \hat{p}_y.
\end{aligned} \tag{19.7}$$

Bununla yanaşı, koordinat və impulsun proyeksiyası operatorları, hərəkət miqdarı momentinin eyni ox üzrə proyeksiyası operatoru ilə kommutasiya edirlər,

$$\hat{L}_x x - x \hat{L}_x = 0,$$

$$\hat{L}_x \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{L}_x = 0.$$

Həmçinin, hərəkət miqdarı momentinin proyeksiyaları operatorları $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatoru $\hat{L}^2$ ilə də kommutasiya edirlər:

$$\hat{L}_x \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_x = 0,$$

$$\hat{L}_y \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_y = 0, \quad (19.8)$$

$$\hat{L}_z \hat{L}^2 - \hat{L}^2 \hat{L}_z = 0.$$

Hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorunu müəyyən edək:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.$$

Puasson mötərizələrinin xassələrindən istifadə edərək, (19.8)-dəki birinci bərabərliyi isbat edək:

$$\begin{aligned} \left[\hat{L}_x, \hat{L}^2 \right] &= \left[\hat{L}_x, \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \right] = \left[\hat{L}_x, \hat{L}_x^2 \right] + \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y^2 \right] + \left[\hat{L}_x, \hat{L}_z^2 \right] = \\ &= \left[\hat{L}_x, \hat{L}_x \hat{L}_x \right] + \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y \hat{L}_y \right] + \left[\hat{L}_x, \hat{L}_z \hat{L}_z \right] = \hat{L}_x \left[\hat{L}_x, \hat{L}_x \right] + \left[\hat{L}_x, \hat{L}_x \right] \hat{L}_x + \\ &\quad + \hat{L}_y \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y \right] + \left[\hat{L}_x, \hat{L}_y \right] \hat{L}_y + \hat{L}_z \left[\hat{L}_x, \hat{L}_z \right] + \left[\hat{L}_x, \hat{L}_z \right] \hat{L}_z = \\ &= \hat{L}_y i \hbar \hat{L}_z + i \hbar \hat{L}_z \hat{L}_y + \hat{L}_z (-i \hbar) \hat{L}_y - i \hbar \hat{L}_y \hat{L}_z = \\ &= i \hbar (\hat{L}_y \hat{L}_z + \hat{L}_z \hat{L}_y - \hat{L}_z \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_z) = 0 \end{aligned}$$

Analoji olaraq digər bərabərliklər də isbat olunur. Buradan çıxır ki, hərəkət miqdarı momentinin ixtiyari ox üzrə proyeksiyası və hərəkət miqdarı momentinin kvadratı eyni zamanda müəyyən bir qiymətə malik ola bilərlər.

**20. Hərəkət miqdarı momentinin proyeksiyaları və
hərəkət miqdarı momentinin kvadratı
operatorlarının sferik koordinat sistemində
ifadələri²**

$\hat{L}_x$ və $\hat{L}^2$ operatorları kommutasiya etdiklərindən, onlar eyni bir məxsusi funksiya malik olmalıdırlar. Məxsusi funksiya və məxsusi qiymət üçün yazılmış uyğun tənliklərin

$$\begin{aligned}\hat{L}_x\psi &= L_x\psi, \\ \hat{L}^2\psi &= \hat{L}^2\psi, \quad .\end{aligned}\quad (20.1)$$

həlli zamanı ixtiyari koordinat sistemindən istifadə etmək olar. Dekart sistemindən sferik sistemə keçərək,

$$\begin{aligned}x, y, z &\rightarrow r, \theta, \varphi, \\ x &= r \sin \theta \cos \varphi, \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \theta,\end{aligned}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}, \quad \cos \theta = \frac{z}{r}$$

və $\psi(x, y, z)$ dalğa funksiyaından sferik koordinatların

mürəkkəb funksiyası kimi törəmələri hesablasaq, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ operatorları üçün alırıq:

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (20.2)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (20.3)$$

²Ətraflı hesablamalar Əlavə B-də verilir

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(\frac{\sin\theta \cos^2\varphi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin\theta \sin^2\varphi}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}. \quad (20.4)$$

(20.2)-(20.4) ifadələrindən istifadə edərək asanlıqla, hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorunun $\hat{L}^2$ sferik koordinat sistemindəki yalnız bucaqlardan asılı olan ifadəsini alırıq:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\} = -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} \quad (20.5)$$

($\Delta_{\theta,\varphi}$ -sferik koordinatlarda Laplas operatorunun bucaq hissəsidir). $\hat{L}$ və $\hat{L}^2$ operatorlarının ifadələrindən görünür ki, onlar, yalnız polyar θ və φ azimutal bucaqlardan asılıdırlar. Deməli, ψ dalğa funksiyası da r ilə birlikdə bu bucaqlardan da asılıdır.

21. Hərəkət miqdarının proyeksiyası operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası. Maqnit kvant ədədi

Fəzanın izotropluğu, z oxunu fəzada ixtiyari istiqamət kimi seçməyə imkan verir. İmpuls momentinin bu ox üzrə proyeksiyası operatorunun məxsusi qiymət və məxsusi funksiyasını müəyyən edək. $\hat{L}_z$ operatorunun məxsusi qiymət və məxsusi funksiyası üçün tənlik aşağıdakı kimi yazılar:

$$\hat{L}_z \psi = L_z \psi, \quad \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi},$$

yaxud

$$\frac{d\psi_{L_z}}{\psi_{L_z}} = \frac{i}{\hbar} L_z d\varphi. \quad (21.1)$$

İnteqrallama apararaq alırıq:

$$\psi_{L_z} = \psi(r, \theta) e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi}. \quad (21.2)$$

Burada $c \equiv \psi(r, \theta)$ - ixtiyari funksiyadır.

$\varphi - 0$ -dan 2π -yədək qiymət alan dövrü dəyişən olduğundan, bir qiymətlilik kimi sərt tələbə (ümumiyyətlə, funksianın modulunun bir qiymətliliyi kifayətdir) görə, (21.1) tənliyinin həlli olan dalğa funksiyası aşağıdakı şərti ödəməlidir:

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi).$$

Yəni,

$$e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi} = e^{\frac{i}{\hbar} L_z (\varphi + 2\pi)},$$

yaxud

$$1 = e^{2\pi i \frac{L_z}{\hbar}}.$$

Sonuncu bərabərlik $\frac{L_z}{\hbar} = m$ -in sıfır da daxil olmaqla tam qiymətləri üçün ödənilir. Burada m *maqnit kvant ədədi* adlanır:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (21.3)$$

yəni hərəkət miqdarı momentinin fəzanın ixtiyari seçilmiş istiqaməti üzrə proyeksiyası, $\hbar$ -ın tam misillərinə bərabər qiymətlər alır. L_z proyeksiyasının müəyyən qiyməti məlum olduğu halda, digər iki proyeksiya (L_x və L_y) heç bir konkret qiymətə malik olmurlar.

(21.2)-dəki ixtiyari funksiya, $c \equiv \psi(r, \theta)$, $\psi_{L_z} \equiv \psi_m(\varphi) = c e^{im\varphi}$ dalğa funksiyasının ortonormallaşması şərti əsasında müəyyən olunur:

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \psi_n(\varphi) d\varphi = \delta_{mn}.$$

$m = n$ olduqda alarıq:

$$\int_0^{2\pi} |\psi_{L_z}|^2 d\varphi = \int_0^{2\pi} c^* e^{-im\varphi} c e^{im\varphi} d\varphi = 2\pi |c|^2 = 1.$$

Beləliklə, vahidə normallaşmış $\hat{L}_z$ operatorunun məxsusi funksiyası aşağıdakı kimi olur:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} . \quad (21.4)$$

22. Hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorunun məxsusi funksiyası və məxsusi qiyməti. Orbital kvant ədədi

İmpuls momentinin kvadratı operatorunun məxsusi funksiya və məxsusi qiyməti aşağıdakı tənlikdən tapılır:

$$\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi . \quad (22.1)$$

$\hat{L}^2$ operatorunun sferik koordinatlardakı (20.5) ifadəsini (22.1)-də istifadə etsək, aşağıdakı tənliyi alarıq:

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(\theta, \varphi) = L^2 \psi(\theta, \varphi). \quad (22.1a)$$

$\hat{L}^2$ operatorunun məxsusi qiymətlərini təyin etmək üçün tənliyin həlli aşağıdakı şəkildə axtarılır:

$$\psi(\theta, \varphi) = \phi(\varphi) \Theta(\theta). \quad (22.2)$$

(22.2) funksiyasını yuxarıdakı tənlikdə istifadə etsək, alarıq:

$$\phi(\varphi) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2} \Theta(\theta) \phi(\varphi) = 0 . \quad (22.3)$$

(22.3) tənliyinin həlləri ali riyaziyyat kursundan məlumdur ([3], mükəmməl həll üçün B Əlavəsinə bax). Dəlğa funksiyası üçün qoyulan standart şərtləri ödəyən həll yalnız $L^2 / \hbar^2 = l(l+1)$ olduqda mümkündür. Beləliklə, impuls momentinin kvadratı operatoru diskret məxsusi qiymətlərə malikdir:

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) . \quad (22.4)$$

Burada, l sıfır da daxil olmaqla müsbət tam ədəddir: $l=0,1,2,\dots$ l -in verilmiş qiymətində, m maqnit kvant ədədi $-l$ -dən müsbət $+l$ -dək $2l+1$ müxtəlif qiymət ala bilər. l -ə *orbital* və ya *azimutal*

kvant ədədi deyirlər. Xüsusi halda, əgər $l=0$ olarsa, onda $\bar{L}^2 = 0$; $l=1$ -də isə $\bar{L}^2 = 2\hbar^2$ olur və i.a.

(21.4) və (22.2)-ə əsasən $\hat{L}^2$ operatorunun məxsusi funksiyası aşağıdakı kimi olar:

$$\begin{aligned}\psi_{lm} &= \phi_m(\varphi)\Theta_l^m(\cos\theta) \equiv Y_l^m(\theta, \varphi) = \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}.\end{aligned}\quad (22.5)$$

Burada
$$P_l^m = (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}}{d(\cos \theta)^{l+|m|}} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^l}{2^l l!} -$$

Lejandr polinomudur (ətraflı hesablamalar üçün B Əlavəsinə bax).

Qeyd etdiyimiz kimi, bu funksiya, həmçinin $\hat{L}_z$ operatorunun da məxsusi funksiyası olmalıdır.

(22.4) və (22.5)-dən görünür ki, hər bir l üçün m $(2l+1)$ qiymət və Y_{lm} məxsusi funksiyası uyğun gəlir.

$\hat{L}_z$ və $\hat{L}^2$ operatorları ilə Y_{lm} funksiyasına təsir edək,

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Deməli, $\hat{L}_z$ и $\hat{L}^2$ operatorları uyğun olaraq $\hbar m$ və $\hbar^2 l(l+1)$ ($m=0, \pm 1, \dots, \pm l$, $l=0, 1, 2, \dots$) məxsusi qiymətlərinə və eyni bir məxsusi funksiya malik olurlar. Məsələn, $l=0$ olduqda, $m=0$ olur. Bu halda məxsusi funksiya $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ -dir; $l=0$, $m=0$,

$$m=1, m=-1 \text{ olduqda isə, məxsusi funksiya: } Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta.$$

İmpuls momenti kvadratının verilmiş qiymətlərində, impuls momentinin proyeksiyası $L_z = m\hbar$, $-l$ -dən $+l$ -dək $(2l+1)$

qiymət alır. Amma $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ və $\hat{L}_z$ kommutasiya etmədiklərindən eyni bir məxsusi funksiya malik deyillər. (22.5)-dəki vuruq, Y_l^m -in vahidə normallaşması

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

şərtindən alınır (ətraflı hesablamalar Əlavə B-də verilib).

23. Stasionar hallar

Əgər sistemin hamiltonianı zamandan asılı deyilsə ($\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$), onda (12.9),

$$i\hbar \frac{\partial \psi_E}{\partial t} = \hat{H} \psi_E$$

Şrödinger tənliyinin həllini, dəyişənlərə ayırmaqla,

$$\psi_E = \varphi(t) \varphi_E \quad (23.1)$$

şəklində axtarmaq olar. Burada φ_E -koordinatın funksiyası olaraq, zamandan asılı deyil və ψ_E kimi, Hamilton operatorunun məxsusi funksiyasıdır, yəni, aşağıdakı bərabərlik mövcuddur:

$$\hat{H} \varphi_E = E \varphi_E. \quad (23.2)$$

(23.1)-i (12.9) tənliyində istifadə edərək

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} \varphi_E = \varphi(t) \hat{H} \varphi_E,$$

və sonra (23.2) tənliyini nəzərə alaraq, aşağıdakı tənliyə gələrik:

$$d\varphi(t) \frac{1}{\varphi(t)} = -\frac{i}{\hbar} dt E.$$

Bu diferensial tənliyin həlli aşağıdakı kimidir:

$$\varphi(t) = C e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, \quad (23.3)$$

C - ixtiyari sabitdir.

(23.2)-dəki E məxsusi qiyməti, sistemin enerjisinin mümkün qiymətlərini göstərir. φ_E funksiyası isə enerjinin verilmiş qiyməti üçün sistemin halını müəyyənləşdirir. φ_E halları *stasionar hallar* adlanırlar.

Hamilton operatorunun məxsusi qiymətləri, həm diskret, həm də kəsilməz spektrə malikdirlər. Enerjinin bəzi intervallarında diskret, digərlərində kəsilməz spektrlərin mövcudluğu, qarışıq spektrin də mümkünlüyünü ortaya qoyur.

Əgər $\hat{H}$ operatoru diskret spektrə malikdirsə, (23.1) dalğa funksiyası, (23.3)-ə əsasən, aşağıdakı şəkildə olar:

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad (23.4)$$

Stasionar halların dalğa funksiyaları zamandan $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$ tezlikli

harmonik qanun ilə asılıdırlar. (23.4) ifadəsini ehtimal

düsturunda, $w_n(x, t) = |\psi_n(x, t)|^2$, istifadə etsək, stasionar

hallarda zərrəciyin fəzanın verilmiş nöqtəsində aşkar olunması ehtimalı sıxlığının zamandan asılı olmadığını şahidi olarıq:

$$\begin{aligned} w_n(x, t) &= |\psi_n(x, t)|^2 = \psi_n(x) \psi_n^*(x) = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n(x, 0)|^2 = e^0 |\psi_n(x, 0)|^2 = w_n(x, 0) \end{aligned}$$

Stasionar hallarda fiziki kəmiyyətin orta qiyməti və fiziki kəmiyyətə uyğun operatorun məxsusi qiymətinin gözlənilməsi ehtimalı da zamandan asılı deyil.

24a. Operatorların zamana görə diferensiallanması

Uyğunluq prinsipinə əsasən, klassik Puasson mötərizəsindən $\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [H, F]$ (burada H - Hamiltoniandır)

kvant mütərizəsinə keçərək, $\hat{F}$ operatorunun zamana görə diferensiallanması operatoru $\hat{F}$ üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$\dot{\hat{F}} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{F}] . \quad (24.1)$$

Əgər $\hat{F}$ operatoru zamandan asılı deyilsə, onda (24.1) tənliyinə əsasən $\dot{\hat{F}}$ operatoru aşağıdakı kimi olar:

$$\dot{\hat{F}} = [\hat{H}, \hat{F}] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{F} - \hat{F} \hat{H}) \quad (24.2)$$

Klassik Puasson mütərizələrinin xassələri Kvant Puasson mütərizələrinə də şamil olunur (ətraflı Əlavə A-ya bax).

Orta qiymət üçün $\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi dV$ ifadəsini diferensiallayaraq, F fiziki kəmiyyətinin orta qiymətinin zamana görə dəyişməsinə ifadə edən tənliyi alırıq:

$$\frac{d}{dt} \bar{F} = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi dV + \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi dV + \int \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} dV .$$

$$(12.9) \text{ Şrödinger tənliyi və ona qoşma olan } \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^*$$

tənliyindən istifadə edib, $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ -ni $-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi$ ilə, $\frac{\partial \psi^*}{\partial t}$ -ni isə, $\frac{i}{\hbar} \hat{H}^* \psi^*$ ilə əvəz edərək alırıq:

$$\dot{\bar{F}} = \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi dV + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^* \psi^*) \hat{F} \psi dV - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{F} (\hat{H} \psi) dV .$$

İkinci həddə, inteqralladı ifadədə $\hat{H}^* \psi^*$ və $\hat{F} \psi$ -nin yerlərini dəyişək, aşağıdakı ifadəyə gələrik:

$$\dot{\bar{F}} = \int \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi dV + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{F} \psi) \hat{H}^* \psi^* dV - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{F} (\hat{H} \psi) dV .$$

$\hat{H}$ operatorunun ermitliyinə və $\int (\hat{F} \psi) \hat{H}^* \psi^* dV = \int \psi^* \hat{H} \hat{F} \psi dV$ olduğuna görə alırıq:

$$\dot{\bar{F}} = \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{F} - \hat{F} \hat{H}) \right) \psi dV.$$

$\dot{\bar{F}}$ törəməsinin orta qiymətin ümumi düsturuna görə,

$$\dot{\bar{F}} = \int \psi^* \hat{F} \psi dV \quad \text{ifadəsi ilə} \quad \dot{\bar{F}} = \int \psi^* \left(\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] \right) \psi dV$$

düsturunun ((24.2) nəzərə alınmaqla) müqayisəsindən, nəticəyə gəlirik ki, fiziki kəmiyyətin orta qiymətinin törəməsi, onun törəməsinin orta qiyməti ilə üst-üstə düşür:

$$\dot{\bar{F}} = \overline{\dot{F}}. \quad (24.3)$$

24b. Koordinatın zamana görə törəməsi operatoru

Koordinat və impuls operatorlarının ($\hat{x}$ və $\hat{p}_x$) zamandan asılı olmamaları səbəbindən, (24.1)-ə əsasən, onların zamana görə törəməsi aşağıdakı tənlikləri alırız:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{x}} &= [\hat{H}, \hat{x}], \\ \dot{\hat{p}}_x &= [\hat{H}, \hat{p}_x], \end{aligned} \quad (24.4)$$

Hamiltonianın $\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + U(x, y, z, t)$ aşkar şəkildən və (24.2) düsturundan istifadə edərək (24.4) ifadəsindəki birinci kommutatoru hesablayaq:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{x}] &= \frac{i}{\hbar} \left\{ \left(\frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + U(x, y, z, t) \right) \hat{x} - \right. \\ &\quad \left. - \hat{x} \left(\frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + U(x, y, z, t) \right) \right\}. \end{aligned}$$

Məlum kommutatorlara $[\hat{p}_y^2, x] = 0$, $[\hat{p}_z^2, x] = 0$, $[y, U] = 0$, $[z, U] = 0$ və $[x, U] = 0$ -ə əsaslanaraq, alırız:

$$\dot{\hat{x}} = [\hat{H}, x] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} x - x \hat{H}),$$

yaxud

$$[\hat{H}, x] = \frac{i}{2m\hbar} (\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2). \quad (24.5)$$

İmpulsun proyeksiyası operatorunun aşkar şəklini ($\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$) nəzərə alaraq, axırıncı kommutatoru açaq:

$$\begin{aligned} (\hat{p}_x^2 x - x \hat{p}_x^2) \psi &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} x - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi = \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial}{\partial x} x \right) - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) = \\ &= -\hbar^2 \left(x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} x + \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) = \\ &= -\hbar^2 \left(x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) = -2\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \psi. \end{aligned}$$

İmpuls operatorunun aşkar şəklindən istifadə edib, (24.5)-ni

$$\hat{x} = [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i}{2m\hbar} \cdot (-2i\hbar \hat{p}_x) = \frac{1}{m} \hat{p}_x. \quad (24.6)$$

şəklində yazı bilərik. Yəni kvant mexanikasında “sürət” ($\hat{x}$) və impuls operatorları ($\hat{p}_x$), klassik mexanika ilə analoq təşkil edən münasibətlə bağlıdırlar.

25a. İmpulsun zamana görə törəməsi operatoru. Erenfest teoremi

Məlumdur ki, $U(x)$ qüvvə sahəsində zərrəciyin birölçülü hərəkətində tam enerji operatoru $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x)$ şəklində seçilir və “sürət” operatoru $\hat{x}$ impuls operatoru $\hat{p}_x$ ilə (24.6) vasitəsilə

əlaqəlidir. (24.2) düsturuna əsasən impulsun zamana görə törəməsi operatorunu $\hat{p}_x$ hesablayaq:

$$\begin{aligned}\hat{p}_x &= [\hat{H}, \hat{p}_x] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{H}) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \hat{p}_x + U \hat{p}_x - \frac{1}{2m} \hat{p}_x (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) - \hat{p}_x U \right\} = \\ &= \frac{i}{\hbar} [U(x), \hat{p}_x].\end{aligned}$$

Sonuncu kommutator ilə ψ -yə təsir edərək, koordinat təsvirində alırıq:

$$\begin{aligned}&\frac{i}{\hbar} (U \hat{p}_x - \hat{p}_x U) \psi = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(U \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial U}{\partial x} \right) \psi = \left(U \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (U \psi) \right) = \\ &= \left(U \frac{\partial \psi}{\partial x} - \left(U \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial U}{\partial x} \right) \right) = - \frac{\partial U}{\partial x} \psi.\end{aligned}$$

ψ -ni nəzərə almasaq, impulsun zamana görə törəməsi operatoru üçün aşağıdakı ifadəyə gələrik:

$$\hat{p}_x = - \frac{\partial U}{\partial x}. \quad (25.1)$$

(24.6) və (25.1) tənliklərini, həmçinin, $\bar{\dot{x}}$ və $\bar{\dot{p}}_x$ orta qiymətləri üçün də yazmaq olar:

$$\bar{\dot{x}} = \dot{\bar{x}} = \frac{1}{m} \bar{p}_x \quad (25.2)$$

və

$$\bar{\dot{p}}_x = \dot{\bar{p}}_x = - \frac{\partial \bar{U}}{\partial x}. \quad (25.3)$$

Bu tənliklər, Erenfest teoreminin (1927) məzmununu özündə əks etdirir və klassik hərəkət tənliklərinə keçidin mümkünlüyünü göstərir. ψ halı $x = \bar{x}$ nöqtəsi ətrafında qərarlaşmış dalğa

paketi kimi fərziyyə olunarsa, klassik tənliklərə keçidi avtomatik olaraq həyata keçirmək olar. $\dot{\bar{p}}_x$ -i, $\ddot{\bar{x}}$ vasitəsilə ifadə etsək alarıq:

$$\ddot{\bar{x}} = \frac{1}{m} \dot{\bar{p}}_x = \frac{1}{m} \bar{p}_x,$$

$$m \ddot{\bar{x}} = \dot{\bar{p}}_x = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x},$$

$$m \ddot{\bar{x}} = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x},$$

yəni dalğa paketinin mərkəzinin hərəkəti, klassik mexanikanın Nyuton tənliyi ilə ifadə olunur.

25b. Hərəkət integralı kvant tənlikləri

Aşağıdakı teoremi isbat edək: Əgər hər hansı bir $\hat{F}$ operatoru zamandan askar şəkildə asılı deyilsə və Hamilton operatoru $\hat{H}$ ilə kommutasiya edirsə, onda F kəmiyyətinin ölçülməsində hər hansı bir F_n qiymətinin alınması ehtimalı da zamandan asılı olmur.

Doğrudan da, bu ehtimal, t zaman anında, sistemin halını ifadə edən $\psi(x, t)$ dalğa funksiyasının $\hat{F}$ operatorunun məxsusi funksiyaları üzrə paylanma əmsalının modulunun kvadratı $|c_n(t)|^2$ ilə verilir. $\hat{F}$ operatoru Hamilton operatoru ilə kommutasiya etdiyindən, $[\hat{H}, \hat{F}] = 0$, aşağıdakı

$$\hat{H} \psi(x, t) = E_n \psi_n(x, t),$$

$$\hat{H} \psi(x, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_n}{\partial t}$$

tənliklərindən çıxır ki,

$$E_n \psi_n(x, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_n}{\partial t}.$$

Öz növbəsində bu tənliyin həlli göstərir ki, hər iki operator, aşağıdakı ümumi məxsusi funksiya malikdir:

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}.$$

$\psi(x, t)$ dalğa funksiyasını $\hat{F}$ operatorunun məxsusi funksiyaları üzrə sıraya ayıraraq

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x) = \sum_n c_n(t) \psi_n(x). \quad (25.4)$$

(25.4) tənliyinin hər tərəfini $\psi_n^*(x, t)$ -yə vurub, bütün fəza üzrə integrallasaq,

$$\begin{aligned} \sum_n c_n^*(0) c_n(0) e^{+\frac{i}{\hbar} E_n t} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dV = \\ = \sum_n c_n^*(t) c_n(t) \int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dV \end{aligned}$$

($\int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dV = 1$ normallaşma şərtini nəzərə alaraq) son nəticəyə gəlirik:

$$|c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 = \text{const}.$$

Klassik mexanikada olduğu kimi, kvant mexanikasında da, belə kəmiyyətlər hərəkət integralı adlanır. Deməli, əgər operator zamandan asılı deyilsə və Hamilton operatoru ilə kommutasiya edirsə, onda uyğun kvant mexaniki kəmiyyət hərəkət integralı olur.

26. Kvant mexanikasında saxlanma qanunları

Müxtəlif kvant mexaniki kəmiyyətlərin operatorlarını və Hamilton operatorunu bilərək, saxlanma qanunlarını almaq olar.

Klassik mexanikada olduğu kimi, kvant mexanikasında da saxlanma qanunlarının tapılması sistemin hərəkətinin öyrənilməsində çox vacibdir.

Əgər $\hat{I}$ operatoru hər hansı bir saxlanılan kəmiyyətə uyğundursa, onda həm ψ dalğa funksiyası, həm də

$$\psi' = e^{i\alpha\hat{I}}\psi$$

funksiyası Şrödinger tənliyini ödəyir. Burada α -ixtiyari həqiqi ədəddir. Yuxarıdakı ifadəyə daxil olan eksponent $e^{i\alpha\hat{I}}$ aşağıdakı sıra kimi başa düşülür:

$$e^{i\alpha\hat{I}} = 1 + i\alpha\hat{I} + \dots, . \quad (26.1)$$

Doğrudan da, $\psi' = e^{i\alpha\hat{I}}\psi$ dalğa funksiyasını Şrödinger tənliyində istifadə etsək, alırıq:

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{i\alpha\hat{I}}\psi = \hat{H} e^{i\alpha\hat{I}}\psi \quad (26.2)$$

və

$$\hat{H} e^{i\alpha\hat{I}}\psi = e^{i\alpha\hat{I}}\hat{H}\psi. \quad (26.3)$$

Aşağıdakı diferensiallama əməlinə

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(e^{i\alpha\hat{I}}\psi \right) = i\alpha \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} e^{i\alpha\hat{I}}\psi + e^{i\alpha\hat{I}} \frac{\partial \psi}{\partial t} = e^{i\alpha\hat{I}} \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

$\frac{\partial I}{\partial t} = 0$ şərtini nəzərə alsaq ($\hat{I}$ operatorunun saxlanan kəmiyyətə

cavab verdiyindən və $\hat{I}\hat{H} - \hat{H}\hat{I} = 0$ kommutasiya şərti ödəndiyindən), (26.2)-(26.3) düsturları avtomatik olaraq ödənilir.

Konkret misal kimi, sərbəst zərrəciyin Hamilton funksiyasına müraciət edək:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right).$$

Aşağıdakı sərtlərin ödənməsi şübhəsizdir:

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = [\hat{H}, \hat{p}_y] = [\hat{H}, \hat{p}_z] = 0$$

və

$$\hat{p}_x = \hat{p}_y = \hat{p}_z = 0,$$

yəni sərbəst zərrəcik hər hansı başlanğıc zaman anında impulsa malikdirsə, zaman keçdikcə onun (impulsun) qiyməti saxlanılır.

27. İncersiya operatoru və cütllük

Qeyd olunduğu kimi, kvant mexanikasında hər bir saxlanma qanununa, klassik mexanikanın analoji qanunu uyğun gəlir. Amma, klassik analoqu olmayan qanunlar da mövcuddur. Misal kimi, fəzanın incersiyası ilə bağlı olan qanunu, yəni koordinatların işarəsinin əksinə dəyişməsi ilə müşayiət olan, $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ koordinat incersiyası qanununu göstərmək olar.

Kvant mexanikasında incersiya çevrilməsi ilə daha bir saxlanma qanunu əlaqəlidir. İncersiya operatoru $\hat{I}$ daxil edək. Bu operatorla onun məxsusi funksiyası olan $\psi(\vec{r}, t)$ dalğa funksiyasına təsir edərək alırıq:

$$\hat{I}\psi(\vec{r}, t) = a\psi(\vec{r}, t). \quad (27.1)$$

Burada a -ixtiyari sabitdir. İncersiya operatoru ilə iki dəfə təsir etdikdə ilkin vəziyyətə gəlirik. Doğrudan da,

$$\hat{I} \cdot \hat{I}\psi(\vec{r}, t) = \hat{I} a\psi(\vec{r}, t) = a \hat{I}\psi(\vec{r}, t) = a^2\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t). \quad (27.2)$$

Müqayisə göstərir ki, $a^2 = 1$, yəni $a = \pm 1$. Beləliklə, aşağıdakı bərabərlik ödənilir:

$$\hat{I}\psi(\vec{r}, t) = \pm\psi(\vec{r}, t), \quad (27.3)$$

yəni incersiya zamanı nəinki $\vec{r}$ arqumenti, həmçinin dalğa funksiyası da işarəsini dəyişə bilər. Dalğa funksiyasının incersiya zamanı $a = +1$ yaxud, $a = -1$ ilə müşayiət edilməsi xassəsi, zərrəciyin daxili xüsusiyyətləri ilə bağlıdır. Əgər dalğa funksiyası

$$\hat{I}\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t),$$

bərabərliyi ödəyirsə, onda deyirlər ki, zərrəcik müsbət daxili cütllüyə malikdir. Əksinə

$$\hat{I}\psi(\vec{r}, t) = -\psi(\vec{r}, t),$$

bərabərliyi ödənilmədiyi halda zərrəcik mənfi daxili cütllüyə malikdir.

Hamiltonianı

$$\hat{H} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} U_{ik} (|\vec{r}_i - \vec{r}_k|)$$

şəklində olan qapalı sistemin cütlük şərtinə baxaq. Asanlıqla əmin olmaq olar ki, bu hamiltonian $\vec{r}_i \rightarrow -\vec{r}_i$ əvəzləməsində dəyişmir, yəni

$$\hat{I} \hat{H} \psi = \hat{H} \hat{I} \psi.$$

Deməli, qapalı sistemin Hamilton operatoru fəza inversiyası çevrilməsinə görə invariantdır. Buradan çıxır ki, $\hat{I}$ operatoru Hamilton operatoru $\hat{H}$ ilə kommutasiya edir

$$\hat{I} \hat{H} - \hat{H} \hat{I} = 0. \quad (27.4)$$

(27.1)-(27.3) tənliklərinə analogi olaraq, inversiya operatorunun λ məxsusi qiymətlərini tapa bilərik:

$$\hat{I}^2 \psi_\lambda = \psi_\lambda = \lambda \hat{I} \psi_\lambda = \lambda^2 \psi_\lambda. \quad (27.5)$$

Yəni ikiqat inikas nəticəsində dalğa funksiyası ilkin qiymətini təkrarlayır. Burada, ψ_λ - $\hat{I}$ inversiya operatorunun məxsusi funksiyasıdır. (27.5) tənliyindən alırıq ki, λ məxsusi qiymətləri ± 1 -ə bərabərdir. $\lambda = +1$ qiymətinə uyğun hal zərrəciyin müsbət cütlüyə malik olmasını göstərir. Əksinə, $\lambda = -1$ qiymətində zərrəcik mənfi cütlüyə malikdir.

Asanlıqla göstərmək olar ki, hərəkət miqdarı momentinin kvadratı və hərəkət miqdarı momentinin proyeksiyası operatoru inversiya çevrilmələrinə görə invariantdırlar:

$$[\hat{I}, \hat{L}_x] = 0, \quad [\hat{I}, \hat{L}_y] = 0, \quad [\hat{I}, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{I}, \hat{L}^2] = 0,$$

yəni bütün bu operatorlar eyni bir məxsusi funksiyaya malikdirlər. Deməli, aşağıdakı tənlik ödənilir:

$$\hat{I} Y_l^m(\theta, \varphi) = \lambda Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sisteminin cütlüyü, ayrı-ayrı zərrəciklərin cütlüklərinin hasili ilə müəyyənləşdirilir. Cütlüyün saxlanma qanunu, təbiətin ümumi qanunlarından biridir. Qapalı kvant mexaniki sistemin müəyyən cütlüyə malik

olan bir haldən, digər cütüklü hala keçə bilməməsi faktı – qadağan olunmuş keçidlər - həm atom, həm də nüvə fizikası eksperimentlərinin çoxsaylı materiallarında öz təsdiqini tapıb. Amma müasir dövrdə, cütüyün saxlanması qanununun universal fiziki qanun olmaması fikri mövcuddur. Elementar zərrəciklərin iştirakı ilə gedən bəzi proseslərdə, cütüyün saxlanması qanunu pozulur. CÜTLÜYÜN POZULMASI zəif qarşılıqlı təsir proseslərində müşahidə edilmişdir.

28. Enerji-zaman qeyri-müəyyənliyi

Orta kvadratik qiymətdən minimal kənara çıxma düsturunda, $\sqrt{\Delta F^2} \cdot \sqrt{\Delta R^2} \geq \frac{1}{2} \left| \sqrt{B^2} \right|$, zamandan asılı olmayan

$\hat{R}$ operatoruna uyğun R kəmiyyətinin orta kvadratik qiymətindən kənara çıxmasını

$$\overline{\Delta R^2} = \overline{(R - \bar{R})^2} = \overline{R^2} - 2\overline{R\bar{R}} + \overline{\bar{R}^2} = \overline{R^2} - \bar{R}^2, \text{ və}$$

$$\overline{\Delta F^2} \equiv \overline{\Delta E^2} = \overline{E^2} - \bar{E}^2 \text{ (} F \text{ kəmiyyətini } E \text{ enerji kimi qəbul etməklə)}$$

eyniliklərini nəzərə alıb, məlum $\bar{B} = (\hat{H}\hat{R} - \hat{R}\hat{H})$ bərabərliyinə və yuxarıda qeyd etdiyimiz orta kvadratik qiymətdən minimal kənara çıxma düsturuna əsasən “şərti olaraq” yazı bilərik:

$$\Delta E \cdot \Delta R \geq \frac{1}{2} \left| \sqrt{(\hat{H}\hat{R} - \hat{R}\hat{H})^2} \right|.$$

$\hat{R}$ operatorunun diferensiallanması düsturuna,

$$\hat{R} = \frac{\partial \hat{R}}{\partial t} + [\hat{H}, \hat{R}] = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{R} - \hat{R}\hat{H}) \text{ əsasən (} \hat{R} \text{ operatorunun}$$

zamandan asılı olmaması şərti əsasında) alırıq:

$$\hat{R} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{R} - \hat{R}\hat{H}).$$

Bu bərabərliyə əsasən, nəticə kimi əldə edirik:

$$\Delta E \cdot \Delta R \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{\dot{R}}{R} \right|. \quad (28.1)$$

Bu qeyri-müəyyənlik, enerjinin qeyri-müəyyənliyi ΔE ilə R kəmiyyətindəki ΔR qeyri-müəyyənliyini və R kəmiyyətinin orta qiymətinin dəyişmə sürətini əlaqələndirir. Əgər R -in orta qiymətinin, öz orta kvadratik kənara çıxması qiymətinin tərtibi qədər dəyişməsinə sərf olunan zaman intervalı anlayışını $\Delta t = \frac{\Delta R}{\dot{R}}$ kimi daxil etsək, (28.1) münasibətini aşağıdakı şəkildə yazı bilərik:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (28.2)$$

Enerjinin ΔE qeyri – müəyyənliyi və zamanın hər hansı bir Δt intervalı arasındakı bu münasibət, 1945-ci ildə L.İ. Mandelştam və İ.Y. Tamm tərəfindən nəzəri əsaslandırılmışdır. Qeyd edək ki, burada $\Delta E - \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ olduğuna görə, Ψ halında enerjinin qeyri-müəyyənliyi olaraq zamandan asılı olmur.

29. Spin. Spin operatoru

Ştern və Gerlax təcrübəsi (1921) göstərirdi ki, neytral atomlardan ibarət dəstə qeyri-bircins eninə maqnit sahəsindən keçərkən istiqamətindən kənara çıxaraq, ayrı-ayrı yeni dəstələrə bölünür. Bu fakt böyük ehtimalla, atomun mexaniki momentinin sahənin istiqaməti üzrə proyeksiyasının yalnız diskret qiymətlər ala bilməsi ilə əlaqədar ola bilərdi Doğrudan da hər bir müəyyən L_z qiymətinə, zərrəciyə təsir edən qüvvənin qiyməti və qeyri-bircins maqnit sahəsindəki hərəkət istiqamətindən kənara-çıxma qiyməti (istiqamətdən yayınma məsafəsi) uyğundur. Beləliklə hər bir yaranan dəstə verilmiş L_z qiymətinə malik atomlardan ibarət olur. Klassik nəzəriyyəyə əsasən, neytral atomun xarici $\vec{B}$ maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsiri hamiltoniana

$$V = -\vec{\mu}_L \vec{B},$$

əlavəsi ilə müəyyən olunur. Burada $\mu_L = \frac{1}{2c} \sum_a e_a \vec{r}_a \times \vec{v}_a$ - atomun maqnit momenti olub, elektronların hərəkəti

$$\vec{\mu}_L \approx -\frac{|e|\hbar}{2m_e c} \vec{L} \quad (29.1)$$

ilə bağlıdır ($\vec{L} = \frac{1}{2c} \sum_e \vec{r}_e \times \vec{p}_e$ - elektronun orbital momentidir).

Yəni, qeyri-bircins xarici maqnit sahəsində atoma

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} V = (\vec{\mu}_L \vec{\nabla}) \vec{B}$$

qüvvəsi təsir edir. Bir sıra eksperimental faktlar göstərir ki, elementar zərrəciklər (elektron, pozitron, proton, neytron və i.a.) özünə məxsus daxili sərbəstlik dərəcələrinə mlikdirlər. Bunlardan biri, *spin* adlanan, orbital hərəkətlə bağlı olmayan, *məxsusi hərəkət miqdarı momenti* kimi interpretasiya olunan kəmiyyətdir. Ulenbek və Qaudsmitin hipotezinə görə, elektron, nüvənin ətrafında fırlanma hərəkəti ilə əlaqədar olmayan momentə (spin $\hbar s$) malikdir, və onun proyeksiyaları aşağıdakı qiymətləri alır:

$$s_z = \pm \frac{1}{2}. \quad (29.2)$$

Ştern-Gerlax təcrübəsinə əsasən, elektronun məxsusi maqnit momentinə uyğun proyeksiyaları mütləq qiymətinə görə Bor maqnetonuna bərabərdir:

$$\mu_z = \mp \frac{|e|\hbar}{2m_e c} = \mp \mu_B. \quad (29.3)$$

Məxsusi maqnit momentinin spin mexaniki momentinə nisbəti (giromaqnit nisbəti)

$$\frac{\mu}{s} = \frac{e}{m_e c}, \quad (29.4)$$

atomun məxsusi maqnit momentinin, orbital hərəkət zamanı əldə olunan orbital momentinə (bax (29.1)) analogi nisbətindən düz iki dəfə böyük olur.

Ümumiyyətlə, fundamental zərrəciklərin daxili strukturu olmadığından, onlarda məxsusi momentin, yalnız fırlanmada özünü büruzə verməsinin təbiətini – yəni spinin əsl mənasını, zərrəciyin özünü relyativistik kvant sahəsinin elementar həyacanlanması kimi apardığı kvant sahə nəzəriyyəsində (elementar zərrəciklər fizikasının riyazi aparatı) axtarmaq lazımdır. *Yüksək spin fizikasının* müasir təsəvvürlərinə görə, təbiətdə spini 0, 1/2, 1, 2, 3/2 olan elementar zərrəciklər mövcuddur. Daha yüksək spinli zərrəciklər isə mürəkkəb quruluşa malikdirlər. Hıqqs bozonunun spini 0, *leptonların* (elektron, μ -mezon, τ -lepton və onlara uyğun neytrinolar) və kvarkların (*adronların* fundamental sub-hissələri), həmçinin onların antizərrəciklərinin spini 1/2 -ə bərabərdir. Vektor zərrəciklərin (qlüon, W , Z -bozonlar və foton) spini 1 -ə bərabərdir. *Qravitonun* spini 2-yə, qravitonun super partnyoru – qravitasiya sahəsinin hipotetik kvantı olan *qravitinonun* spini isə 3/2-dir.

Spini $s=1/2$ olan sistemin halına baxaq. Zərrəciyin dalğa funksiyası, üç fəza koordinatından başqa, zərrəciyin daxili halını xarakterizə edən, ixtiyari ox (məsələn, z) üzrə spinin proyeksiyasından da asılıdır:

$$\psi = \psi(x, s_z, t). \quad (29.5)$$

(29.2) düsturuna əsasən, (29.5) dalğa funksiyası aşağıdakı kimi yazılır:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (29.6)$$

Burada, elektron da daxil olmaqla əksər elementar zərrəciklərin spininin 1/2 olması ilə əlaqədar, onun (spinin) yalnız iki

proyeksiyasının $\psi_1 = \psi\left(x, \frac{\hbar}{2}, t\right)$ və $\psi_2 = \psi\left(x, -\frac{\hbar}{2}, t\right)$ mümkünlüyü öz əksini tapıb.

Spinin proyeksiyası $\hbar/2$ olan zərrəciyin t zaman anında dV həcmində aşkar olunması ehtimalı $|\psi_1|^2 dV$ kimi interpretasiya olunur, $|\psi_2|^2 dV$ isə, zərrəciyin bu dV həcm elementində, spinin z oxu üzrə proyeksiyasının $-\hbar/2$ -yə bərabər olduğu hal başa düşülür. $\psi = \psi(x, s_z, t)$ dalğa funksiyasının normallaşması üçün

$$\sum_{s_z} \int |\psi(x, s_z, t)|^2 dV = 1 \quad (29.7)$$

olmalıdır (cəmləmə, spinin bütün mümkün proyeksiyaları üzrə aparılır). Spinin qiymətinin, zərrəciyin zaman və fəzadakı yerindən asılı olmadığı halda, (29.6) funksiyası, spinin z oxu üzrə proyeksiyalarının uyğun olaraq $|c_1|^2$ və $|c_2|^2$

(c_1 və c_2 - ədədlər) ehtimalları ilə, spin dalğa funksiyası

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (29.8)$$

$\psi(x, t)$ funksiyasının hasili kimi verilir.

(29.7)-ə əsasən alırıq ki,

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (29.9)$$

Spinin operatoru anlayışını daxil edək. İmpuls momentinin komponentləri üçün olan (19.5) və (19.8) kommutasiya münasibətləri dönmə əməliyyatının ümumi xüsusiyyətləri ilə bağlı olduqlarından, spinin $\hat{s}$ vektor operatoru ilə ifadə olunduğu qeyri-relyativistik kvant mexanikası halında, spin operatorunun komponentləri $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ üçün kommutasiya münasibətləri, impuls momentinin proyeksiyaları operatorlarının kommutasiya münasibətləri ilə eyniyyət təşkil edirlər:

$$[\hat{s}_y, \hat{s}_z] = \hat{s}_y \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{s}_y = i \hbar \hat{s}_x,$$

$$[\hat{s}_z, \hat{s}_x] = \hat{s}_z \hat{s}_x - \hat{s}_x \hat{s}_z = i \hbar \hat{s}_y, \quad (29.10)$$

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = \hat{s}_x \hat{s}_y - \hat{s}_y \hat{s}_x = i \hbar \hat{s}_z.$$

Spin operatorunun kvadratı $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ spinin proyeksiya operatorları, $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ ilə kommutasiya edirlər:

$$\begin{aligned} \hat{s}_x \hat{s}^2 - \hat{s}^2 \hat{s}_x &= 0, \\ \hat{s}_y \hat{s}^2 - \hat{s}^2 \hat{s}_y &= 0, \\ \hat{s}_z \hat{s}^2 - \hat{s}^2 \hat{s}_z &= 0. \end{aligned} \quad (29.11)$$

Puasson mötərizələrinin xassələrindən istifadə edərək (29.11)-dəki birinci münasibəti isbat edək:

$$\begin{aligned} [\hat{s}_x, \hat{s}^2] &= [\hat{s}_x, \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2] = [\hat{s}_x, \hat{s}_x^2] + [\hat{s}_x, \hat{s}_y^2] + [\hat{s}_x, \hat{s}_z^2] = \\ &= [\hat{s}_x, \hat{s}_x \hat{s}_x] + [\hat{s}_x, \hat{s}_y \hat{s}_y] + [\hat{s}_x, \hat{s}_z \hat{s}_z] = \hat{s}_x [\hat{s}_x, \hat{s}_x] + [\hat{s}_x, \hat{s}_x] \hat{s}_x + \\ &+ \hat{s}_y [\hat{s}_x, \hat{s}_y] + [\hat{s}_x, \hat{s}_y] \hat{s}_y + \hat{s}_z [\hat{s}_x, \hat{s}_z] + [\hat{s}_x, \hat{s}_z] \hat{s}_z = \\ &= \hat{s}_y i \hbar \hat{s}_z + i \hbar \hat{s}_z \hat{s}_y + \hat{s}_z (-i \hbar) \hat{s}_y - i \hbar \hat{s}_y \hat{s}_z = \\ &= i \hbar (\hat{s}_y \hat{s}_z + \hat{s}_z \hat{s}_y - \hat{s}_z \hat{s}_y - \hat{s}_y \hat{s}_z) = 0. \end{aligned}$$

Analoji olaraq, digər münasibətlər də isbat olunur. Bu münasibətlərdən çıxır ki, tam spinin kvadratı və spinin ixtiyari ox üzrə proyeksiyası eyni zamanda $\hbar$ vahidlərində müəyyən $s(s+1)$ məxsusi qiymətlərinə (s - tam, yaxud yarım tam ədəddir) malikdirlər.

$s=1/2$ olan halda $\hat{s}^2$ spin matrisi və onun (spinin) proyeksiyaları operatorları, öz təsvirində aşağıdakı kimi, matris şəklində müəyyən olunurlar:

$$\hat{s}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (29.12)$$

Vektori spin operatoru anlayışını daxil edək

$$\hat{\vec{s}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}, \quad \vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z).$$

Bu operatorun komponentləri

$$\hat{s}_k = \frac{\hbar}{2} \sigma_k$$

yalnız iki məxsusi qiymətə, $\pm \hbar/2$ malikdirlər. (29.10) və (29.12)

kommütasiya münasibətlərindən çıxır ki, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$

operatorlarının müxtəlif proyeksiyaları bir biri ilə kommütasiya etmirlər, amma bu operatorun kvadratı $\hat{\sigma}^2$, proyeksiyaların operatorları ilə kommütasiya edir:

$$[\hat{\sigma}^2, \hat{\sigma}_i] = 0 \quad i = (x, y, z). \quad (29.13)$$

s_x , s_y , s_z matrislərindən $\hbar/2$ sabiti ilə fərqlənən σ_x , σ_y , σ_z matrisləri Pauli matrisləri adlanırlar,

$$\sigma^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (29.14)$$

Ranqı ikiyə bərabər olan ixtiyari matris vahid matris və σ_x , σ_y , σ_z matrislərindən qurula bilər. Qeyd edək ki, Pauli matrisləri öz aralarında kommütasiya etmirlər və $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij}$ bərabərliyi ödənilir. Başqa sözlə, Pauli matrisləri üçölçülü Klifford evklid cəbrini yaradırlar.

Tam hərəkət miqdarı momenti operatoru anlayışını daxil edək. Zərrəciyin tam hərəkət miqdarı momenti $\hat{j}$ orbital və spin momentlərinin cəmindən ibarətdir: $\hat{j} = \hat{L} + \hat{s}$.

Bu operatorlar müxtəlif dəyişənlərə təsir etdiklərindən (orbital moment operatoru - fəza dəyişənlərinə, spin operatoru isə - spin dəyişəninə), onlar kommütasiya edirlər və tam momentin proyeksiyası operatorunun kommütasiya münasibətləri, (29.10) və (29.11) münasibətlərinə uyğun olaraq yazılır:

$$\begin{aligned} [\hat{j}_y, \hat{j}_z] &= \hat{j}_y \hat{j}_z - \hat{j}_z \hat{j}_y = i\hbar \hat{j}_x, \\ [\hat{j}_z, \hat{j}_x] &= \hat{j}_z \hat{j}_x - \hat{j}_x \hat{j}_z = i\hbar \hat{j}_y, \\ [\hat{j}_x, \hat{j}_y] &= \hat{j}_x \hat{j}_y - \hat{j}_y \hat{j}_x = i\hbar \hat{j}_z, \\ [\hat{j}^2, \hat{j}_i] &= 0, \quad i = (x, y, z). \end{aligned} \quad (29.15)$$

30a. Pauli tənliyi

Artıq qeyd etdik ki, orbital hərəkət miqdarı momentinə ($\vec{L}$) malik olan yüklü zərrəcik xarici maqnit sahəsində maqnit momenti qazanır (bax (29.1)). Məlumdur ki, maqnit momentinə malik olan sistem bircins maqnit sahəsində $V = -\vec{\mu}_L \vec{B}$ potensial enerjiyə malik olur. Doğrudan da, $\vec{A} = [\vec{B} \times \vec{r}] / 2$ vektor potensiala malik maqnit sahəsində zərrəciyin hamiltonianının, $\vec{B}$ -nin dərəcələrinə görə sıraya ayrılmasından

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{mc} (\vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2$$

görünür ki, bu ifadədəki xətti həddi aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$V = -\frac{e}{2mc} [\vec{B} \times \vec{r}] \cdot \vec{p} = -\frac{e}{2mc} [\vec{r} \times \vec{p}] \cdot \vec{B} = -\frac{e}{2mc} \vec{L} \cdot \vec{B}$$

Bu ifadə öz növbəsində, (29.1) ifadəsini nəzərə almaqla, $V = -\vec{\mu}_L \vec{B}$ ilə üst-üstə düşür. Həmçinin, məxsusi hərəkət miqdarı momenti $\vec{s}$ -ə, (29.3) maqnit momenti ($\vec{\mu}_s$) uyğundur. *Giromaqnit nisbət* adlanan mütənasiblik əmsalı ($\vec{\mu}_s = g_s \vec{s}$, $g_s = e / mc$) isə iki dəfə böyük olur. Son mühakimə, Dirak tənliyinə əsaslanan 1/2 spinli relyativistik sahə nəzəriyyəsində öz dəqiq əsaslanmasını tapır.

Spinin nəzərə alınması (spin momentinin verilmiş istiqamətdə iki mümkün proyeksiyası) $2n^2$ tərtib cırlaşmaya gətirir. Amma, Pauli nəzəriyyəsində hidrogen atomu üçün, spin maqnit momentinin maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsirinin olmaması nəticəsində onun (hidrogen atomunun) spekteri dəyişmişdir. Məsələn, $(v/c)^2 \approx (e^2 / \hbar c)^2 \approx 5 \cdot 10^{-5}$ tərtibli relyativistik effektlərin hidrogen atomunda nəzərə alınması, spektrin incə quruluşunun əmələ gəlməsinə səbəb olur. Xüsusi halda, elektronun orbital hərəkəti ilə əlaqədar atomun daxilində mövcud olan maqnit sahəsinin, spin maqnit momenti ilə qarşılıqlı təsirini ifadə edən spin-orbital qarşılıqlı təsiri yaranır.

Beləliklə, Pauli, Ulenbek və Qoudsmitin hipotezi (1925) əsasında, elektronun hərəkətini ifadə edən, hal hazırda Pauli tənliyi adlanan tənliyi postulə edərək (1927), spin anlayışını kvant mexanikasına daxil etmiş oldu.

R. Feynmana istinad edərək,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_P \psi, \quad \hat{H}_P = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi - \hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} \quad (30.1)$$

Pauli tənliyinin riyazi və nəzəri əsaslandırılması məsələsinə baxaq. Spin maqnit momentinin maqnit sahəsində yaratdığı potensial enerjinin daxil edildiyi halda, Şrödinger tənliyinin analoqu sayılacaq Pauli tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_{\text{Sr}} - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \vec{B} \right) \psi, \quad (30.2)$$

qeyri-relyativistik limitdə Dirak tənliyinin xüsusi halı kimi təqdim olunur. Bu tənliyin aşkar göstərilməmiş vahid matrisə vurulmuş və maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsirin $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$ postulatına əsasən qurulan Şrödinger hamiltonianından (həmçinin, bax (12.7))

$$\hat{H}_{\text{Sr}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \quad (30.3)$$

və spinor adlanan ikikomponentli $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ (29.6) dalğa

funksiyasından istifadə edilərək qurulması fərz edilir (φ -skalyar potensialdır). Bu hamiltonian, ixtiyari $\vec{a}$ və $\vec{b}$ vektorları üçün, (29.14) Pauli matrislərindən alınan

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma}(\vec{a} \times \vec{b}),$$

eyniliyinə əsasən qurulması

$$\hat{H}_{\text{Sr}} = \frac{1}{2m} \left(\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}} \right)^2 + e\varphi \quad (30.4)$$

fərziyyəsində, digər hamiltonianla (Pauli hamiltonianı) üst-üstə düşür: $H_{\text{Şr}} = H_P$.

Doğrudan da,

$$(\hat{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}})^2 = \hat{\vec{p}}^2 + i\hat{\sigma} \cdot (\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{p}}),$$

formal bərabərliyini, aşağıdakı kommutatoru

$$[\hat{P}_i, \hat{P}_k] = \left[\hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i, \hat{p}_k - \frac{e}{c} A_k \right] = i\hbar \frac{e}{c} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} A_k - \frac{\partial}{\partial x_k} A_i \right)$$

$\hat{\vec{P}} \times \hat{\vec{P}} = i\hbar \frac{e}{c} \vec{B}$, $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ olduğunu nəzərə alaraq aşağıdakı tənliyə gələrik:

$$\frac{(\hat{\sigma} \cdot \hat{\vec{p}})^2}{2m} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}.$$

Yəni Pauli ideyasına oxşar olaraq, elektronun spin maqnit momentinin maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsir ifadəsini almış oluruq.

(30.1) tənliyində maqnit sahəsi koordinat və zamandan ixtiyari şəkildə asılıdır, yəni ümumi halda Pauli tənliyində dəyişənləri ayırmaq mümkün olmur. Əvvəlki müəhazirədəki mülahizələrə əsasən (bax 29-cu paragrafa.), bircins maqnit sahəsində koordinat, zaman və spinin proyeksiyasından

($\psi_1 = \psi\left(x, -\frac{\hbar}{2}, t\right)$, $\psi_2 = \psi\left(x, \frac{\hbar}{2}, t\right)$), asılı olan ikikomponentli

dalğa funksiyasını, $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ (29.6), $\psi(x, t)$ birkomponentli

funksiya və ikikomponentli - yalnız zamandan asılı olan, funksiyanın hasılı kimi yazmaq olur:

$$\psi(x, s_z, t) = \psi(x, t) \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}$$

Buradan da, adi Şrödinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_S \psi$$

və spin funksiyası üçün tənlik alınır:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) \psi(t).$$

30b. Zərrəciklərin eyniliyi. Pauli prinsipi

İndiyədək ayrı-ayrı zərrəciklərin halının təsvirini öyrənirdik. Çoxzərrəcikli sistemlərə keçərkən, eyni növ zərrəciklərin bir-birindən ayırd edilə bilinməməsi faktı ilə əlaqədar klassik analoqu olmayan qanunauyğunluqlar ortaya çıxır. Klassik sistemlərdə hər bir zərrəcik yalnız kütləsi ilə xarakterizə olunur, yəni hər hansı iki zərrəciyin kütlələri bərabərdirsə, onda bu zərrəcikləri təməmilə eyni hesab etmək olar. Hər bir zərrəciyin halı $t = 0$ zaman anında başlanğıc şərtlərə əsasən müəyyən olunur və onlar (zərrəciklər) müəyyən trayektoriyalar üzrə hərəkət edərək toqquşur və trayektoriyalarını dəyişirlər. Başqa sözlə, klassik mexanikada zərrəciklər öz individuallığını saxlayırlar. Belə məsələlərin kvant mexanikasında öyrənilməsi, trayektoriya anlayışının olmaması səbəbindən, çətinliklərlə qarşılaşır. Kvant ansamblı halında, məsələn, iki elektronun toqquşmasından sonra, Vilson kamerasında onların izlərini ayırd etmək mümkün olmur. Yəni, bu və ya digər faktlar göstərir ki, kvant zərrəciklərin eyniliyi, klassik zərrəciklərin eyniliyindən fərqlənərək, daha dərin təbiətə malikdir. Kvant mexanikasında zərrəciklərin dəqiq lokallaşmasının müəyyən oluna bilməməsi səbəbindən, zərrəciklərin eyniliyi, onların təməmilə bir-birlərindən seçilə bilməməsinə gətirir.

Tutaq ki, ikizərrəcikli sistemin (bundan sonra x işarələməsi altında, spin də daxil olmaqla, bütün koordinatların məcmusu başa düşüləcək) dalğa funksiyası $\psi(x_1, x_2)$ verilib.

Zərrəciklərin bir-birindən seçilə bilməməsi (eyniliyi) halında, zərrəciklərin yerlərinin dəyişdirilməsi, eyni bir dalğanı ifadə edən yeni $\psi(x_2, x_1)$ dalğa funksiyasına gətirər ki, bu dalğa funksiyaları bir-birindən yalnız müəyyən faza ilə fərqlənərlər:

$$\psi(x_2, x_1) = e^{i\alpha} \psi(x_1, x_2).$$

İki zərrəcikli sistemdə, zərrəciklərin yerlərinin iki dəfə - dəlbadal (ikiqat) dəyişdirilməsi əməliyyatları, bərabər hüquqlu (eyniyyət təşkil edən) əməliyyatlardır. Başqa sözlə, sistemin dalğa funksiyası ya simmetrik, yaxud da antisimmetrik olmalıdır:

$$\psi(x_2, x_1) = \pm \psi(x_1, x_2).$$

Digər tərəfdən, superpozisiya prinsipinə əsasən, fiziki sistemin bütün hallarının simmetriyaları eynidirlər.

Daha çox sayda zərrəciklər sistemində, bu qayda istənilən iki zərrəciyə tətbiq oluna bilər. Bununla belə, zərrəciklərin bir-birindən seçilə bilməməsi (eyniliyi) halında, tam dalğa funksiyası, zərrəciklərin yerdəyişməsinə görə ya simmetrik, ya da antisimmetrik olmalıdır.

Zərrəciklərin bu növ eyniliyi prinsipini ödəyən, qarşılıqlı təsirdə olmayan, N sayda, zərrəciyin simmetrik dalğa funksiyası, çoxsaylı zərrəciklər sistemləri üçün əvvəllər etdiyimiz mülahizələrə görə, aşağıdakı şəkildə olmalıdır:

$$\psi_s(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots}{N!}} \sum P \{ \psi_{n1}(x_1) \psi_{n2}(x_2) \dots \psi_{nN}(x_N) \}$$

$N_{n1}, N_{n2}, \dots$ - zərrəciklər çoxluğu içərisindəki eyni cür indekslərin sayıdır.

Məsələn, iki bozonun (sıfır da daxil olmaqla, spini tam qiymət alan zərrəciklər) dalğa funksiyası, yerdəyişmələrə görə simmetrikdir:

$$\psi(x_2, x_1) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1) \psi_b(x_2) + \psi_a(x_2) \psi_b(x_1)], & a \neq b \\ \psi_a(x_1) \psi_b(x_2), & a = b \end{cases}$$

Bütün yerdəyişmələrə görə antisimmetrik olan dalğa funksiyası aşağıdakı determinant şəklində verilə bilər:

$$\psi_A(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sqrt{\frac{1}{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) \dots \psi_1(x_N) \\ \dots \\ \psi_{n_N}(x_1) \dots \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix}.$$

Burada ixtiyari zərrəcik cütünün yerdəyişməsi, determinantın işarəsinin dəyişməsi ilə müşayiət olunan iki sütunun yerdəyişməsinə ekvivalentdir. n indeksinin üst-üstə düşməsi nəticəsində determinant sıfıra çevrilir.

Məsələn, iki fermionun (spini yarım tam olan zərrəciklər) dalğa funksiyası antisimmetrikdir:

$$\psi(x_2, x_1) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)], & a \neq b \\ 0, & a = b \end{cases}.$$

Yuxarıdakı mülahizələr, kvant sahə nəzəriyyəsindəki, iki zərrəciyin halının spinlərindən asılı olmasını ifadə edən Lyuders-Pauli teoreminin məzmununu əks etdirir. Yəni, spini tam qiymətlər alan zərrəciklərin (bozonların) dalğa funksiyaları simmetrik, spini yarım tam olan zərrəciklərin (fermionların) dalğa funksiyaları isə antisimmetrikdirlər. Axırıncı üçün, qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sistemində (fermionlar sistemi), onlar (zərrəciklər) müxtəlif bir-zərrəcikli hallarda olmalıdırlar. *Eyniyyət təşkil edən fermi-zərrəciklərin sistemində aparılan ölçmələr zamanı, eyni bir kvant halında olan iki və daha çox zərrəcik müşahidə oluna bilməz* (Pauli prinsipi, 1925). Orijinal şəkildə bu prinsipin ifadəsi aşağıdakı kimidir: *iki fermion eyni bir halda ola bilməz*. Bu prinsip, elektronlar sistemi olan atomun sabilliyini təmin etmiş olur.

Pauli prinsipi yarım tam spinə malik eyniyyət təşkil edən zərrəciklərdən ibarət sistemin statistik vəziyyətini təyin edərək, çoxelektronlu atomların və mürəkkəb nüvələrin təbiətinin qanunauyğunluqlarının öyrənilməsində mühüm rol oynayır.

31. Kvant mexanikasının matris təsviri

İlk mühazirədə söyləndiyi kimi, nəzəri tədqiqatlar nəticəsində paralel olaraq kvant fizikasının iki bərabər hüquqlu riyazi aparatı meydana gəlib: U. Heyzenberqin *matris mexanikası* (1925) və E. Şrödingerin *dalğa mexanikası* (1926). Bu iki nəzəriyyə, tam ekvivalent olaraq, mikrofizikanın - bərk cismin mikroskopik fizikası və maye fizikası, qeyri-relyativistik nüvə fizikasının fundamental nəzəriyyəsi olan *kvant mexanikasının* iki müxtəlif formasını təmsil edirlər.

Heyzenberq nəzəriyyəsinə görə, hər bir xətti operatora ($\hat{F}$), matris elementlərinin qiyməti müəyyən olan F matrisi qarşı qoymaq olar. X -təsvirindən F -təsvirinə keçərək,

$$\hat{R}\psi(x) = \varphi(x) \quad (31.1)$$

operator tənliyini ödəyən $\psi(x)$ dalğa funksiyasına təsir edən $\hat{R}$ operatorunu daxil edək. $\psi(x)$ və $\varphi(x)$ dalğa funksiyalarını, diskret spektrə malik $\hat{F}$ operatorunun uyğun olaraq $\psi_m(x)$ və $\psi_n(x)$ məxsusi funksiyaları üzrə sıraya ayıraq:

$$\psi(x) = \sum_m c_m \psi_m(x), \quad \varphi(x) = \sum_n d_n \psi_n(x). \quad (31.2)$$

Burada c_m və d_n amplitudlarının məcmusu, uyğun olaraq ψ və φ dalğa funksiyalarını F -təsvirində ifadə edir. (31.2) ayrılışlarını (31.1) operator tənliyində nəzərə alaraq:

$$\sum_n d_n \psi_n(x) = \sum_m c_m \hat{R} \psi_m(x).$$

Bu tənliyin hər iki tərəfini soldan $\psi_l^*(x)$ qoşma funksiyasına vuraq və sərbəst dəyişənlərin bütün oblastı üzrə integrallayaq:

$$\sum_n d_n \int \psi_l^*(x) \psi_n(x) dV = \sum_m c_m \int \psi_l^*(x) \hat{R} \psi_m(x) dV.$$

Daha sonra funksiyaların ortoqonallığından ($\int \psi_l^* \psi_n dV = \delta_{ln}$) istifadə edərək alırıq:

$$d_l = \sum_m R_{lm} c. \quad (31.3)$$

Burada $\hat{R}$ operatoru F -təsvirində

$$R_{lm} = \int \psi_l^*(x) \hat{R} \psi_m(x) dV \quad (31.4)$$

matrisi ilə verilərək, öz məğzinə görə, zərrəciyin m -halından l -halına keçidinin matris elementlərini ifadə edib, kvadratinin modulu ilə zərrəciyin l -halında yerləşməsinin ehtimalını müəyyənləşdirir. Əgər ψ_m , $\hat{R}$ operatorunun məxsusi funksiyasıdırsa, onda o ($\hat{R}$ operatoru) öz təsvirində aşağıdakı şəkildə olar:

$$R_{ml} = \int \psi_m^* \hat{R} \psi_l dV = R_l \int \psi_m^* \psi_l dV = R_l \delta_{ml} . \quad (31.5)$$

Buradan çıxır ki, operatorun öz təsvirinə uyğun matrisi diaqonaldır, yəni yalnız $m=l$ olan matris elementləri sıfırdan fərqlidirlər.

R_{ml} -ə qoşma olan R_{ml}^* matris elementindən

$$R_{ml}^* = \left(\int \psi_m^* \hat{R} \psi_l dV \right)^* = \int \psi_m \hat{R}^* \psi_l^* dV ,$$

və $\int \psi_m \hat{R}^* \psi_l^* dV = \int \psi_l^* \hat{R} \psi_m dV$ ermitlik şərtindən, matrisin ermitliyi adlanan, matris elementlərinin aşağıdakı xüsusiyyəti alınır:

$$R_{ml}^* = R_{lm} . \quad (31.6)$$

(31.2) ayrılışını (31.6) ümumi düsturunda istifadə etməklə, hər hansı bir R kəmiyyətinin orta qiymətini tapırıq:

$$\begin{aligned} \bar{R} &= \int \psi^* \hat{R} \psi dV = \\ &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int \psi_m^* \hat{R} \psi_n dV = \sum_m \sum_n c_m^* R_{mn} c_n . \end{aligned}$$

Ermit operatorlar üçün cəmləmə qaydaları da, ermit matrislər üçün doğrudur.

Yekun olaraq qeyd edək ki, kvant mexanikasında hər bir fiziki kəmiyyətə, matris elementləri (31.4) düsturu ilə müəyyən olunan R ermit matrisi qarşı qoyula bilər. Həmçinin, qeyd edək

ki, kvant mexanikasının matris təsvirində kvant mexaniki tənlilikləri, klassik kəmiyyətlərin uyğun matris ilə əvəzlənməsi yolu ilə klassik tənliliklərin əsasında qurmaq mümkündür.

32. Kəsilməz spektr halında matris təsvirinin Dirak işarələmələri. Momentlərin matris təsviri

Əvvəlki bölmədə verilən, diskret spektr halı üçün yazılmış düsturları asanlıqla, cəm işarələrini inteqrallama ilə əvəz etməklə, kəsilməz spektr halı üçün də yazmaq olar.

Xətti ermit operatorlar nəzəriyyəsi və ermit matrislər metodu (həmçinin, bizim mühazirələr kursuna daxil olmayan, funksional metodlar) birlikdə, kvant mexanikasının vahid hesablama aparatını təşkil edir.

İki matrisin hasilinin $L = FR$ matris elementi aşağıdakı kimi müəyyən olunur:

$$L_{\alpha\beta} = \int F_{\alpha\gamma} R_{\gamma\beta} d\gamma.$$

Burada inteqrallama bütün fəza üzrə aparılır və I matrisi Dirakın δ -funksiyası ilə əvəz olunur:

$$I_{\alpha\beta} = \delta(\alpha - \beta),$$

yəni ixtiyari F matrisi üçün $IF = FI = F$ bərabərliyi ödənilir.

Abstrakt Hilbert fəzasındakı hallar əvəzinə, $\{|F\rangle\}$ bazisi üçün bütün ehtimal amplitudlarının məcmusuna baxmaq olar:

$$\psi(F) = \langle F | \psi \rangle.$$

ψ dalğa funksiyası - yəni (və ya) hər hansı bir təsvirdə (koordinat sistemində) halın komponentlərinin məcmusu, Dirak işarələmələrində, $|\psi\rangle$ - ket-vektor ilə, baxılan funksiya kompleks olan funksiya uyğun hal isə $\langle\psi|$ - bra-vektor (ingilis sözü olub, *bracket* – mötərizə mənası daşıyır) ilə yazılır. Bra-vektor və ket-vektorun skalyar hasili aşağıdakı kimidir:

$$\int \psi_b^*(x) \psi_a(x) dx = \langle b | a \rangle.$$

Bu ifadə b -təsvirində dalğa funksiyası kimi başa düşülür:

$$\psi_a(x) = \int F_a(b) \psi_b(x) db, \quad (32.1)$$

və a halı b -təsvirində aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$F_a(b) = \int \psi_b^*(x) \psi_a(x) dx = \langle b|a \rangle. \quad (32.2)$$

Dirak işarələmələrində x -təsvirində a halının dalğa funksiyası $\psi_a(x)$ aşağıdakı kimi yazılır:

$$\psi_a(x) = \langle x|a \rangle.$$

Bu işarələmələrdə (32.1) paylanması aşağıdakı kimidir:

$$\langle x|a \rangle = \int_b \langle x|b \rangle \langle b|a \rangle db.$$

Ermitlek şərtinə görə, (32.2)-dən çıxır ki,

$$\langle b|a \rangle = \langle a|b \rangle^*,$$

yəni bu ifadə, a halının b -təsvirində dalğa funksiyasını, b halının a -təsvirində dalğa funksiyası ilə əlaqələndirir. Koordinat təsvirində, impulsu məlum olan halın dalğa funksiyası $\psi_p(\vec{r})$ aşağıdakı şəkildədir:

$$\psi_p(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}\vec{r}} = \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle.$$

n, l, m kvant ədədləri məlum olan halın dalğa funksiyası $\psi_{nlm}(x)$, $|nlm\rangle$ kimi, kompleks qoşma funksiya $\psi_{nlm}^*(x)$ isə $\langle nlm|$ kimi yazılır. Uyğun olaraq, koordinat təsvirində impuls momenti operatorunun məxsusi funksiyası aşağıdakı kimidir,

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = \left\langle \frac{\vec{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle.$$

Burada, $\left\langle \frac{\vec{r}}{r} \middle| l, m \right\rangle$ l, m təsvirindən koordinat təsvirinə, əksinə, $\left\langle l, m \middle| \frac{\vec{r}}{r} \right\rangle$ - koordinat təsvirindən bucaq təsvirinə keçidi yerinə yetirir. Əgər θ, φ bucaqları, impulsun istiqamətini müəyyən

edirlərsə, $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle = \left\langle \frac{\bar{p}}{p} \middle| l, m \right\rangle$ funksiyası l, m

təsvirindən impuls təsvirinə keçidi təmin edir.

Dirak işarələmələrində F_{ba} elementi aşağıdakı şəkllə malikdir:

$$F_{ba} = \int \psi_b^* \hat{F} \psi_a dV = \langle b | F | a \rangle .$$

Moment operatorunun matris yazılış forması, nəinki yalnız fəzada hərəkəti ifadə edən L orbital momentilə bağlı hərəkət miqdarı momentinin xassələrinin keyfiyyətcə izahına imkan verir, həm də fəza hərəkəti ilə əlaqədar olmayan, məxsusi hərəkət momentinin (spin S) hesablanmasına və bütövlükdə, tam hərəkət miqdarı momentinin $j = L + S$ (bax, bölmə 29.) müəyyənləşdirilməsinə də imkan yaradır.

$\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ matrisləri diaqonal təsvirdə, və $\hat{H}$ enerji matrisinin Dirak işarələmələrində aşağıdakı matris elementlərinə malikdirlər:

$$\begin{aligned} \langle m' j' n' | \hat{J}^2 | m j n \rangle &= J_j^2 \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} , \\ \langle m' j' n' | \hat{J}_z | m j n \rangle &= m \hbar \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} , \\ \langle m' j' n' | \hat{J}_x | m j n \rangle &= (J_x)_{m'm} \delta_{jj'} \delta_{nn'} , \\ \langle m' j' n' | \hat{J}_y | m j n \rangle &= (J_y)_{m'm} \delta_{jj'} \delta_{nn'} , \\ \langle m' j' n' | \hat{H} | m j n \rangle &= E_{jn} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} . \end{aligned} \quad (32.3)$$

Burada m, j, n indeksləri, uyğun olaraq impuls momentinin z oxu üzrə proyeksiyasının, $J_z = m \hbar$ (m -maqnit kvant ədədidir) və tam momentin (j) qiymətlərini xarakterizə edən, baxılan matrislərin sətir və sütunlarının nömrələridir. n ədədi isə, sistemin enerji səviyyələri ilə bağlıdır. Bütün bu matrislər $\hat{J}^2$ və $\hat{H}$ matrisləri ilə kommutasiya etdiklərindən, j və n indekslərinə görə diaqonaldırlar.

Hərəkət miqdarı momentləri j_1 və j_2 məlum olan iki qarşılıqlı təsirdə olmayan alt sistem üçün $\hat{J}_1\hat{J}_2 - \hat{J}_2\hat{J}_1 = 0$ kommutasiya şərti ödənildiyindən, (29.13) kommutasiya münasibətlərini, $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ tam moment operatoru da ödəyir. Yəni bu iki alt sistemin tam momentləri ($\hat{J}_1$ və $\hat{J}_2$) və onların Z oxu üzrə proyeksiyalarını xarakterizə edən j_1, j_2 və m_1, m_2 kvant ədədləri verildiyi halda bütövlükdə sistemin halı tam verilmiş hesab olunur. Verilmiş j_1, j_2 üçün, hər bir m_1 və m_2 , uyğun olaraq $(2j_1 + 1)$ və $(2j_2 + 1)$ qiymətləri alırlar.

II HİSSƏ. ŞRÖDİNGER TƏNLIYININ BƏZİ TƏTBİQLƏRİ

Real fiziki halların öyrənilməsi zamanı, ilk növbədə, Şrödinger tənliyinin həllərinin ümumi xüsusiyyətlərini araşdırmaq və bu tənliyin tətbiq həddlərini müəyyənləşdirmək zərurəti ortaya çıxır. Bu hissə, məhz bu tip məsələlərə həsr olunub.

33. Birölçülü düzbucaqlı potensial çuxur

Zərrəciyin qüvvə sahəsində birölçülü hərəkətini öyrənək. Belə hərəkətə ən sadə misal kimi, $x=0$ və $x=l$ sərhədli potensial divara malik, $0 \leq x \leq l$ məsafədə məhdudlaşan birölçülü çuxurda sərbəst hərəkət uyğundur. Çuxurun sərhədlərində zərrəciyə sonsuz böyük qüvvələr təsir edir, yəni zərrəcik fəzanın məhdud hissəsində qərarlaşıb. Başqa sızla desək, zərrəcik finit hərəkət edir. Bu sadə misal əsasında kvant mexaniki sistemlərin ümumi xarakter daşıyacaq bir sıra xüsusiyyətlərini müəyyənləşdirmək olur. Bu model müəyyən xətlər çərçivəsində metaldakı elektronlar və ya nüvədəki nuklonlar sistemlərini tədqiq etməyə imkan yaradır.

Şübhəsizdir ki, uyğun (4.9) Şrödinger tənliyinin ümumi həllini iki həddə qurmaq lazımdır: $0 < x < l$ parçasının daxilində və onun xaricində. Çuxurun daxilində hərəkət edən zərrəciyin enerji spektrini və dalğa funksiyasını müəyyənləşdirmək məqsədilə Şrödinger tənliyinin

$$\Delta \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\psi(x) = 0 \quad \text{həllinin sərhəd şərtlərini}$$

müəyyən edək. Dalğa funksiyası həm $0 < x < l$ parçasının xaricində və kəsilməzlik şərtinə görə həm də $x=0$ və $x=l$ nöqtələrində sıfıra bərabər $\psi(0) = \psi(l) = 0$ olmalıdır.

Təfərrüata varmadan, bu şərtlər daxilində $0 < x < l$ oblastında stasionar hallar üçün ikinci tərtib adi diferensial tənlik olan (4.9) Şrödinger tənliyinin

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (33.1)$$

(burada nəzərə alınmışdır ki, $U(x)=0$) ümumi həlli aşağıdakı kimidir:

$$\psi(x) = A \sin(kx + \alpha). \quad (33.2)$$

Burada

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (33.3)$$

$\psi(0)=0$ nöqtəsində $\psi(0) = A \sin \alpha$ olduğu (yəni $\alpha=0$) və $\psi(l)=0$ nöqtəsində sərhəd şərtinin ödənilməsi (yəni $\psi(l) = A \sin(kl) = 0$ olması üçün), kl argumenti $n=1,2,3,\dots$ şərtilə πn qiymətlərini almalıdır:

$$k = \frac{\pi}{l} n. \quad (33.4)$$

Burada n kvant ədədləri adlanaraq, sıfırdan fərqli bütün tam qiymətləri alır. (33.3) və (33.4) düsturları, çuxurun daxilində hərəkət edən zərrəciyin enerjisinin diskret, yəni kvantlanmış qiymətlərini,

$$E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2. \quad (33.5)$$

müəyyənləşdirməyə imkan yaradır. Gördüyümüz kimi, bu nəticə heç bir əlavə fərziyyəyə söykənmədən təbii üsulla ortaya çıxdı. Enerji üçün

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} \quad (33.6)$$

ifadəsi (33.5) düsturundan $n=1$ olduqda alınaraq, zərrəciyin ən minimal enerjiyə malik olduğu hala, əsas (normal) hala uyğundur. Digər hallar, həyacanlanmış hallar adlanırlar. (33.6)

düsturu, qeyri-müəyyənlik münasibəti ilə birlikdə zərrəciyin impuls və enerjisini həm keyfiyyətcə, həm də kəmiyyətcə müəyyən etməyə imkan verir. Qeyri-müəyyənlik prinsipinə əsasən, impulsun mütləq xətası və onun (impulsun) qeyri-müəyyənliyindən $\Delta p \sim \frac{\hbar}{l}$ (l -zərrəciyin hərəkət oblastının ölçüsüdür) irəli gələn zərrəciyin minimal enerjisinin

$$E = \frac{p^2}{2m} > \frac{\hbar^2}{2ml^2}, \quad (33.6)$$

düsturu ilə eyni bir tərtibə malik olması, yuxarıda, nümayiş etdirdiyimiz potensial çuxur modeli üçün stasionar Şrödingər tənliyinin həllinin keyfiyyətcə dəqiqliyini bir daha təsdiq edir.

Bəzi kəmiyyət qiymətləndirmələri gətirək.

(33.6) tənliyində, atomun ölçüsünün l , elektronun kütləsinin (m) və Plank sabitinin qiymətlərini ($l = 5 \cdot 10^{-8} \text{ sm}$, $m = 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ qr}$, $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ erq} \cdot \text{san}$) nəzərə alsaq, potensial çuxur modelində minimal enerjinin

$$\begin{aligned} E &= \frac{(3,14)^2 (1,054 \cdot 10^{-27} \text{ erq} \cdot \text{san})^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ qr} \cdot (5 \cdot 10^{-8} \text{ sm})^2} \approx \frac{10^{-54} \text{ erq} \frac{\text{qr} \cdot \text{sm}^2}{\text{san}^2} \text{ san}^2}{50 \cdot 10^{-28} \cdot 10^{-16} \text{ qr} \cdot \text{sm}^2} = \\ &= 2 \cdot 10^{-12} \text{ erq} . \end{aligned}$$

düzgün tərtibə ($1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ erq}$) uyğun gəldiyinin şahidi olarıq.

Nüvədə yerləşən nuklonun ($l \sim 10^{-12} \text{ sm}$, $m \sim 10^{-24} \text{ gr}$ – nuklonun kütləsi) enerjisi üçün aşağıdakı qiyməti alarıq:

$$E = \frac{(3,14)^2 (1.054 \cdot 10^{-27} \text{erq} \cdot \text{san})^2}{2 \cdot 10^{-24} \text{qr} \cdot (10^{-12} \text{sm})^2} \approx 5 \cdot \frac{10^{-54} \text{erq} \frac{\text{qr} \cdot \text{sm}^2}{\text{san}^2} \text{san}^2}{10^{-24} \cdot 10^{-24} \text{qr} \cdot \text{sm}^2} =$$

$$= 5 \cdot 10^{-6} \text{erq} .$$

Bu qiymət, eksperimentlərdə alınmış qiymətə tam uyğundur.

Potensial çuxurdakı zərrəciyin impulsunun kvadratının orta qiymətini müəyyənəndirək. Əgər ψ_n dalğa funksiyası vahidə normallaşmayıbsa, impulsunun kvadratının orta qiyməti üçün alırıq:

$$\overline{p_x^2} = \frac{\int_0^l \psi^* \hat{P}_x^2 \psi dV}{\int_0^l |\psi|^2 dV} = \frac{\int_0^l \psi^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) A_n \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dV}{\int_0^l |\psi|^2 dV} =$$

$$= \hbar^2 \frac{\pi^2 n^2}{l^2} \frac{\int_0^l \psi^* A_n \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dV}{\int_0^l |\psi|^2 dV} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{l^2} .$$

Zərrəciyin $E_n = \frac{\overline{p_x^2}}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$ enerjisi, klassik zərrəciyin çuxurda xətti hərəkətinin enerjisinə analojidir, yəni n kvant ədədinin böyük qiymətlərində, kvant mexaniki münasibətlər klassik fizikanın ifadələrinə keçirlər.

İki qonşu enerji səviyyəsi arasındakı məsafə ($\Delta n = 1$ olduqda) aşağıdakı düstur ilə verilir:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1) .$$

Yəni zərrəciyin kütləsinin və onun hərəkət oblastının ölçüsünün l azalması ilə səviyyələr arası məsafə artır.

Potensial çuxurun n -ci enerji səviyyəsinə uyğun olan dalğa funksiyasındakı A_n sabiti $\int_0^l |\psi_n|^2 dx = 1$ normallaşma şərtindən tapılır,

$$|A_n|^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{\pi n}{l} x\right) dx = \frac{|A_n|^2}{2} \int_0^l \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{l} x\right)\right) dx = \frac{|A_n|^2 l}{2} = 1.$$

Buradan alırıq:

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{l}},$$

yəni sabitin qiyməti n kvant ədədindən asılı deyildir. Potensial çuxurdakı zərrəciyin normallaşmış dalğa funksiyası aşağıdakı şəkli alır:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{\pi n}{l} x\right).$$

Beləliklə, ən sadə kvant mexaniki sistemin tədqiqi bizi, təməmilə ümumi xarakter daşıyan, aşağıdakı nəticələrə gətirir: potensial çuxurda hərəkət edən mikrozərrəciyin enerjisi diskret qiymətlər alır; hətta $E = E_1$ olduqda, yəni normal halda, zərrəcik kinetik enerjisi sıfıra bərabər olan tam sükunət halında olmur; enerji səviyyələrinin diskret xarakteri, zərrəciyin kütləsinin, və onun (zərrəciyin) hərəkət etdiyi oblastın kiçik qiymətlərində aşkar olunur; n kvant ədədinin böyük qiymətlərində, kvant mexaniki münasibətlər, klassik fizikanın düsturlarına keçir.

34. Ehtimal seli sıxlığı. Kəsilməzlik tənliyi

Zamandan asılı olmayan, ixtiyari potensial sahədə zərrəciyin hərəkətini ifadə edən

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi$$

Şrödinger tənliyini və zərrəciyin $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ halında olarkən, onun koordinatlarının ölçülməsi ehtimalı sıxlığının zamandan asılı olmamasını $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r}, 0)|^2$ nəzərə alsaq, zərrəciyin V həcmində aşkar olunması ehtimalından $(\int_V |\psi|^2 dV)$,

dalğa funksiyasının fəza və zamanda dəyişməsinin müəyyən bir qanununu almış olarıq.

$\int_V |\psi|^2 dV$ integralının zamana görə törəməsini

müəyyənləşdirək. Bu məqsədlə stasionar hallar üçün (4.9) Şrödinger tənliyindən, həmçinin qoşma funksiya üçün

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + U \psi^*$$

tənliyindən istifadə edək.

Yuxarıda söylədiklərimiz əsasında alarıq:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int \psi^* \psi dV &= \int \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) dV = \\ &= \int \left(-\frac{\hbar}{2mi} \psi^* \Delta \psi + \frac{U \psi}{i\hbar} \psi^* + \psi \frac{\hbar}{2mi} \Delta \psi^* - \psi \frac{U \psi^*}{i\hbar} \right) dV = \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \int (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) dV = \frac{\hbar}{2mi} \int \operatorname{div} (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi) dV. \quad (34.1) \end{aligned}$$

Gauss-Ostrogradski teoreminə əsasən,

$$\int_V \operatorname{div} (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi) dV = \oint_S (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi) d\vec{S}$$

(S - V həcmiə əhatə edən səthin sahəsidir) (34.1) münasibətini kəsilməzlik tənliyi şəklində yazmaq olar:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = \frac{\hbar}{2mi} \oint_S (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi) d\vec{S}. \quad (34.2)$$

$\int_V |\psi|^2 dV$ ifadəsi zərrəciyin t zaman anında V həcmində olma ehtimalını göstərdiyindən, divergensiya işarəsi altındakı vektoru

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (34.3)$$

təbii olaraq ehtimalın cərəyan sıxlığı kimi başa düşmək olar. Bu vektorun $d\vec{S}$ səth elementindən axan seli, zərrəciyin bu səth elementini vahid zaman intervalında keçməsi ehtimalını ifadə edir. (34.2) tənliyi, kompleks dəyişənlər terminində, həm diferensial

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad (34.4)$$

həm də integral

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV + \oint_S \vec{j} d\vec{S} = 0$$

formalarda yazıla bilər. Sonuncu düstur göstərir ki, ehtimal sıxlığı, ehtimalın saxlanması qanununu təmin edir: əgər zərrəciyin V həcmində olma ehtimalı kiçilirsə (böyüyürsə), onda zərrəciyin, səth elementi oblastını bayır istiqamətindən (içəridən) keçməsinin sıfırdan fərqli ehtimalı yaranır. Qeyd etmək lazımdır ki, (34.4) tənliyi, Şrödinger tənliyinin nəticəsi olaraq, çıxarılışı üçün $\hbar \rightarrow 0$ limitinə keçidinin tətbiq olunmamağı ilə yanaşı, $|\psi|^2$ və $\vec{j}$ kəmiyyətləri, uyğun olaraq, klassik elektrodinamikadakı yük sıxlığına və cərəyan sıxlığına analoqluq təşkil edirlər.

(34.4) münasibətinin aşağıdakı kimi

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

yazılışını zərrəciklərin sayının saxlanması qanunu ifadə edir.

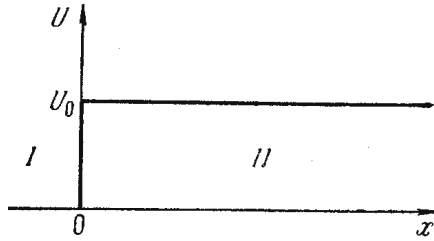
Sərbəst hərəkət halının şərhinə qayıdaq. Müstəvi dalğanın $\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$ ifadəsini (34.3) tənliyində istifadə edək,

$$\begin{aligned}
\vec{j} &= \frac{\hbar}{2mi} \left(A^* e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} - A e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} A^* e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} \right) = \\
&= \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} \frac{i}{\hbar} \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} - e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} \left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} \right) = \\
&= \frac{\hbar}{2mi} \frac{i}{\hbar} \vec{p} |A|^2 (e^0 + e^0) = \frac{\vec{p}}{2m} 2|A|^2 = \frac{1}{m} \vec{p} |A|^2.
\end{aligned}$$

Qeyd edək ki, əgər sistemin halı həqiqi ψ dalğa funksiyası ilə ifadə olunursa, (34.3) düsturundan göründüyü kimi, ehtimal sıxlığı $\vec{j}$ sıfıra yuvarlanır.

35. Potensial çəpər

Zərrəciyin qüvvə sahəsində birölçülü hərəkətinə, növbəti sadə misal kimi, şəkil 2-də göstərilən pilləvari potensialı seçək. Bu modelə görə, yalnız fəzanın məhdud bir oblastında zərrəciyə qüvvələr təsir edir, bu oblastdan kənarda isə zərrəcik tam sərbəstdir. Klassik mexanikanın qanunlarına görə, zərrəciyin potensial divarın hündürlüyündən kiçik enerji ($E < U_0$) ilə, Şəkil 2-yə əsasən soldan sağa hərəkəti divar tərəfindən dəf edilir və o (zərrəcik) geri dönərək sonsuzluğa gedir, yəni klassik fizika qanunlarına əsasən zərrəciyin $x > 0$ oblastında olması qeyri mümkündür. Əks halda tam enerjinin potensial enerjidən kiçik olması və kinetik enerjinin mənfi qiymət alması mənasızlığı ortaya çıxır.



Şəkil 2.

$E > U_0$ olduqda klassik zərrəcik maneə hiss etmədən divarın üzərindən keçərək, $x > 0$ oblastına daxil olub, $E - U_0$ kinetik enerjisi ilə hərəkət etməli idi.

Yuxarıda söylədiyimiz hər iki hal kvant zərrəciyinə şamil olunmur. Zərrəciyin hərəkətini, kvant mexanikası qanunları ilə təsvir etmək üçün, U potensialı sahədəki zərrəciyin stasionar halları üçün (4.9) Şrödinger tənliyini,

$$\left. \begin{aligned} k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2}, \\ k'^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) \end{aligned} \right\} \quad (35.1)$$

vuruqlarını daxil edərək hər iki oblast (I oblast $-\infty$ -dan $x = 0$ -a uzanır, II isə 0 -dan $x = \infty$ -dək yayılıb) üçün yazaq:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi &= 0, & x < 0 \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + k'^2\psi &= 0, & x > 0 \end{aligned} \right\} . \quad (35.2)$$

(35.2) tənlikləri, ikinci tərtib bircins xətti diferensial tənliklərdir. Məlum teoremə görə, əgər ψ_1 və ψ_2 funksiyaları bu iki tənlikdən birinin xətti asılı olmayan həlləridirsə, onda bu tənliyin ümumi həllini aşağıdakı şəkildə yazmaq olar:

$$\psi = A_1\psi_1 + A_2\psi_2 . \quad (35.3)$$

Burada A_1 və A_2 ixtiyari sabitlərdir. Əgər (35.2) tənliyinin məxsusi həlləri kimi

$$\psi = e^{\alpha x},$$

$$\psi = e^{\alpha' x},$$

funksiyaları seçsək, onda $\frac{d\psi}{dx} = \alpha\psi$ və $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \alpha^2\psi$

diferensiallarını nəzərə almaqla, (35.2) diferensial tənliklərinin xarakteristik tənlikləri aşağıdakı kimi olarlar:

$$\left. \begin{aligned} \alpha^2 + k^2 &= 0 \\ \alpha'^2 + k'^2 &= 0 \end{aligned} \right\}.$$

Buradan alırıq ki,

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \pm ik \\ \alpha' &= \pm ik' \end{aligned} \right\}.$$

Deməli, (35.2) tənliyinin həlləri aşağıdakı kimi olur:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad x < 0, \\ \psi(x) &= A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}, \quad x > 0. \end{aligned} \quad (35.4)$$

Məsələnin şərtlərinə görə, bu ifadələrdəki e^{ikx} həddləri X oxunun müsbət istiqamətində yayılan dalğaları, e^{-ikx} həddləri isə əks istiqamətdə yayılan dalğaları ifadə edirlər. A_1, B_1, A_2, B_2 amplitudlarını müəyyən etmək üçün zərrəciklər selinin sıxlığı üçün (34.3) düsturundan istifadə edərək çəpərə düşən zərrəciklər selinin sıxlığını hesablayaq:

$$\begin{aligned} j_0 &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = \\ &= \frac{\hbar}{2mi} \left(A_1^* e^{-ikx} \frac{\partial}{\partial x} A_1 e^{ikx} - A_1 e^{ikx} \frac{\partial}{\partial x} A_1^* e^{-ikx} \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2mi} |A_1|^2 (e^{-ikx} ik e^{ikx} - e^{ikx} (-ik) e^{-ikx}) = \end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar i k}{2mi} |A_1|^2 (e^0 + e^0) = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2.$$

Qəbul edək ki, zərrəciklər seli, I və II oblastlarının sərhədini $x=0$ nöqtəsində haqlayır. Onda, $A_1=1$ olması təbii sayılmalıdır.

Digər üç B_1, A_2, B_2 sabitlərini müəyyən etmək üçün, dalğa funksiyasının I və II oblastlarının sərhəd nöqtəsində ($x=0$) davranışını araşdıraraq.

Dalğa funksiyasına və onun törəməsinə qarşı qoyulan ümumi tələblərə görə, onlar (dalğa funksiyası və törəməsi) potensial enerjinin tükəndiyi nöqtədə belə kəsilməz olmalıdırlar, yəni $x=0$ -da aşağıdakı bərabərliklər ödənməlidir:

$$\psi(+0) = \psi(-0), \quad (35.5)$$

$$\psi'(+0) = \psi'(-0). \quad (35.6)$$

x oxunun müsbət istiqamətində yayılan zərrəciklər seli verilibsə,

onda $E > U_0$ olduqda (yəni, $k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)$ -in həqiqi

qiymətlərində), dalğa funksiyasının $e^{-ik'x}$ həddinin daxil olduğu toplanan, əks istiqamətdə yayılan dalğanı təmsil edir. Deməli, B_2 sabiti üçün $B_2=0$ qiyməti seçilməlidir, yəni II oblastda əks olunan dalğa mövcud deyil, və uyğun mühakimə kimi, sağdan sola yayılan dalğa anlayışı da yersiz fikirdir. (35.5)-(35.6) münasibətlərinə əsaslanaraq, digər iki integrallama sabitini, A_2 və B_1 -i tapmaq bir o qədər də çətin deyil. $B_2=0$ -in digər əsaslanmasını gətirək: $E < U_0$ olduqda (yəni, k' -sırf xəyali kəmiyyətdirsə), onda $e^{-ik'x}$ funksiyası $x \rightarrow -\infty$ -da eksponensial artaraq, dalğa funksiyasının sonlu olması tələbini pozar. Buna görə də, k' xəyali qiymətlərində ($E < U_0$ halında) B_2 sabiti sıfıra bərabər götürülməlidir.

35a. Tam enerjinin potensial çəpərin hündürlüyündən böyük ($E > U_0$) olduğu hal

Zərrəciyin tam enerjisi potensial çəpərin hündürlüyündən çox olduqda ($E > U_0$), (35.5)-(35.6) ifadələrindən və (35.4) həllərindən aşağıdakı nəticələri alırıq:

$$\begin{aligned}\psi(+0) &= \psi(-0) = A_1 e^{ik \cdot 0} + B_1 e^{-ik(-0)} = 1 + B_1 = \\ &= \psi(+0) = \psi(-0) = A_2 e^{ik' \cdot 0} + 0 \cdot e^{-ik'(-0)} = A_2, \\ (A_2 &= 1 + B_1), \\ \psi'(x)|_{x=0} &= A_1 i k e^{ik \cdot 0} + B_1 (-ik) e^{-ik(-0)} = A_1 i k - B_1 i k = \\ &= ik - ik B_1 = ik(1 - B_1) = \\ &= \psi'(x)|_{x=0} = A_2 i k' e^{ik' \cdot 0} + 0 \cdot (-ik') e^{-ik'(-0)} = A_2 i k'.\end{aligned}$$

Nəticədə, müəyyən edirik ki,

$$\begin{aligned}A_2 &= 1 + B_1, \\ k'A_2 &= k(1 - B_1),\end{aligned}$$

və uyğun olaraq, A_2 və B_1 üçün aşağıdakı son ifadələri alırıq:

$$\begin{aligned}A_2 &= 1 + \frac{k - k'}{k + k'} = \frac{2k}{k + k'}, \\ B_1 &= \frac{k - k'}{k + k'}.\end{aligned}\tag{35.7}$$

Zərrəciklər selinin enerjisinin potensial çəpərin hündürlüyündən böyük olmasına ($E > U_0$) baxmayaraq, əks olunan dalğanın amplitudu (B_1) sıfırdan fərqlidir. Yəni, dalğa qismən səpilir (əks olunur) və qismən də II oblasta keçir. Bu fakt mikrozərrəciyin sırf dalğa təbiəti ilə bağlıdır. Əks olunan zərrəciklər selinin sıxlığının (j_r) çəpərə düşən zərrəciklər selinin sıxlığına (j_0) nisbətini R səpilmə (əks olma) əmsalı və çəpəri keçən zərrəciklər selinin sıxlığının (j_D) çəpərə düşən zərrəciklər selinin sıxlığına (j_0) nisbətini D keçmə (nüfuz etmə) əmsalı adlandırırıq.

Zərrəciklər seli sıxlığı üçün (34.3), $\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$ və

dalğa funksiyaları üçün (35.4) düsturlarından istifadə edərək, alırıq:

($A_1 = 0$ olduğundan)

$$j_r = \frac{\hbar k}{m} |B_1|^2 = \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2$$

və ($B_2 = 0$ olduğundan)

$$j_D = \frac{\hbar k'}{m} |A_2|^2 = \frac{\hbar k'}{m} \frac{4k^2}{(k + k')^2}.$$

Həmçinin, $j_0 = \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2 = \frac{\hbar k}{m}$ olduğunu nəzərə alsaq, əks olma

və nüfuz etmə əmsallarının yekun ifadələrini əldə etmiş oluruq:

$$R = \frac{j_r}{j_0} = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2; \quad D = \frac{j_D}{j_0} = \frac{4k k'}{(k + k')^2}. \quad (35.8)$$

ifadələrindən çıxır ki, verilmiş E enerjili zərrəciklər üçün, əks olunma və keçmə əmsalları, zərrəciklərin hərəkət istiqamətindən asılı deyildirlər, yəni, k və k' -ə görə simmetrikdirlər. Soldan sağa hərəkət edən zərrəciklərin, $x=0$ nöqtəsindən əks olunmasının ehtimalı, sağdan sola hərəkət edən zərrəciklərin $x=0$ nöqtəsindən əks olunmasının ehtimalına bərabər olaraq, aşağıdakı ifadə alınır:

$$R + D = 1. \quad (35.9)$$

**35b. Tam enerjinin potensial çəpərin
hündürlüyündən kiçik ($E < U_0$) olduğu hal.
Tunel effekti**

Yuxarıda qeyd olunduğu kimi, klassik mexanika qanunlarına görə, soldan sağa hərəkət edən, enerjisi potensial çəpərin enerjisindən kiçik ($E < U_0$) olan zərrəcik, çəpərdən əks olunur, və zərrəcik heç cür *II* oblastda ola bilməz. Kvant mexanikasının qanunlarına görə, vəziyyət fərqlidir.

Çəpərin enerjisindən kiçik ($E < U_0$) enerjilər halında, k' - xəyali kəmiyyət kimi, təbii olaraq $k' = i\kappa$ şəklində yazılmalıdır. Onda, (35.1) düsturuna əsasən alırıq,

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}, \quad (35.10)$$

yəni $B_1 = \frac{k - k'}{k + k'}$ kompleks kəmiyyət olaraq, əks olunma əmsalı aşağıdakı qiyməti alır:

$$R = |B_1|^2 = \left| \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right|^2 = 1. \quad (35.11)$$

(35.11) və (35.9) ifadələrinə əsasən nüfuz etmə əmsalı sıfıra bərabər olur: $D = 0$.

Ali həndəsədən məlum olan loqarifmik spiral əmsalı üçün

$$\begin{aligned} \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} &= \frac{(k - i\kappa)^2}{k^2 + \kappa^2} = \frac{k^2 - \kappa^2 - 2ik\kappa}{k^2 + \kappa^2} = \\ &= \sqrt{\left(\frac{k^2 - \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} \right)^2 + \left(\frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \right)^2} e^{-i\delta} = \\ &= \frac{\sqrt{k^4 - 2k^2\kappa^2 + \kappa^4 + 4k^2\kappa^2}}{k^2 + \kappa^2} e^{-i\delta} = \\ &= \frac{\sqrt{k^4 + 2k^2\kappa^2 + \kappa^4}}{k^2 + \kappa^2} e^{-i\delta} = \end{aligned}$$

$$= \frac{k^2 + \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} e^{-i\delta} = e^{-i\delta},$$

düsturuna əsasən əks olunan dalğa növbəti şəkildə olur:

$$\psi_r = B_1 e^{-ikx} = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} e^{-ikx} = e^{-i\delta} e^{-ikx} = e^{-i(kx + \delta)}, \quad (35.12)$$

yəni əks olunma dalğasının fazasının sürüşməsinə səbəb olur.

Yuxarıda verilmiş loqarifmik spiral əmsalı üçün

$$\rho = \sqrt{a^2 + b^2} e^{-i\delta} = \sqrt{\left(\frac{k^2 - \kappa^2}{k^2 + \kappa^2}\right)^2 + \left(\frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2}\right)^2} e^{-i\delta}$$

düsturuna əsasən əks olunan dalğanın δ faza sürüşməsinə müəyyən etmək üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \delta &= \frac{b}{a} = \frac{\frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2}}{\frac{k^2 - \kappa^2}{k^2 + \kappa^2}} = \frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2}, \\ \delta &= \operatorname{arctg} \frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2}. \end{aligned} \quad (35.13)$$

Beləliklə, hətta tam əks olunma baş verərsə belə, *II* oblastda ($x > 0$) dalğa funksiyası sıfırdan fərqlidir:

$$\psi(x) = A_2 e^{-\kappa x} = \frac{2k}{k + i\kappa} e^{-\kappa x}, \quad (35.14)$$

$x > 0$ oblastında zərrəciyin x nöqtəsində aşkarlanması ehtimalı sıxlığı aşağıdakı kimidir:

$$|\psi|^2 = \psi \psi^* = \frac{2k}{k + i\kappa} \frac{2k}{k - i\kappa} e^{-\kappa x} e^{-\kappa x} = \frac{4k^2}{k^2 + \kappa^2} e^{-2\kappa x}. \quad (35.15)$$

Bu, kvant zərrəciklərin təbiətinin klassik zərrəciklərdən əhəmiyyətli dərəcədə fərqləndiyinin daha bir təsdiqidir.

$E < U_0$ olduqda klassik zərrəcik heç cür $x > 0$ oblastında ola bilməzdi. Amma kvant zərrəciyi müəyyən ehtimal ilə bu oblasta nüfuz edə bilər. Enerji nöqtəyi-nəzərindən qadağan olunmuş oblasta zərrəciyin nüfuz etməsi hadisəsi *tunel effekti*

adlanır. Zərrəciyin sərhəddən içəri, II oblastda olmasının ehtimalının sıfırdan fərqli olduğu δx məsafəsi, $\delta x \approx \frac{1}{\kappa}$ tərtibindədir, və $x \gg \delta x$ olduqda, (35.5) ehtimal sıxlığı eksponensial qanunla kiçilir. Məsələn, (35.10) düsturuna əsaslanaraq, $\delta x \approx \frac{1}{\kappa}$ və $U_0 - E \approx 1\text{eV}$, olduğunu nəzərə alsaq, elektronun II zonaya nüfuz etdiyi effektiv dərinlik (δx) üçün alırıq:

$$\delta x \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}} \approx \frac{10^{-27}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-28} \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}}} \approx 10^{-8} \text{ sm},$$

yəni tunel effekti yalnız mikroskopik ölçülərdə baş verir.

$\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \geq \hbar \kappa$ qeyri-müəyyənlik münasibətinə görə, II oblastda

zərrəcik artıq əvvəlki E enerjisinə malik olmayacaq. Yəni zərrəciyin II oblastda olması üçün, o, kiçik $\Delta x \leq \delta x$ intervalında lokallaşmalı, həm enerjisini, həm də halını dəyişməlidir. İmpuls üçün fundamental qeyri-müəyyənlik münasibətindən, həmçinin zərrəciyin kinetik enerjisinin aşağıdakı qeyri-müəyyənlik münasibəti də alınır:

$$\Delta E_{kin} \geq \frac{\Delta p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}.$$

κ üçün (35.10) ifadəsini istifadə edərək alırıq ki,

$$\Delta E_{kin} \geq U_0 - E,$$

yəni, çəpərin altında lokallaşan zərrəciyin enerjisinin qeyri-müəyyənliyi, çəpəri keçmək üçün ona lazım olan enerjiden çoxdur.

36. Xətti ossilyator

Xətti ossilyator modeli bərk cisimlər fizikasında, radiofizikada, optikada, elementar zərrəciklər fizikasında və

fizikanın digər bölmələrində çoxsaylı tətbiq sahələrinə malikdir. Ümumiyyətlə, öz mahiyyətinə görə, bir-biri ilə rabitədə olan iki harmonik ossilyator – xətti mexanikadır; çox sayda qeyri-relyativistik ossilyatorlar problemi – klassik və kvant statistikasının problemidir; sonsuz sayda rabitəli relyativistik kvant ossilyatorlar sistemi – kvant sahə nəzəriyyəsidir (elementar zərrəciklər fizikasının riyazi aparatı).

Daha mürəkkəb kvant sistemlərə keçmədən fikrimizi xətti harmonik ossilyatorun nəzəriyyəsində cəmləyək. Belə ossilyator, tarazılıq mərkəzi ətrafında kiçik xətti rəqslər edən kvant zərrəciyinin analoqunu özündə əks etdirir. Atom sistemlərindəki kiçik rəqslərə misal kimi, atomların molekuldakı kiçik rəqslərini göstərmək olar.

Kvant nəzəriyyəsində ossilyator modelinin qurulmasının müxtəlif metodları mövcuddur. Bunlardan biri hallar fəzasının (Fok fəzası) cəbri metodudur.

Xətti harmonik ossilyatorun potensial enerjisi düsturunu

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

(4.9) Şrödinger tənliyində istifadə etsək, alarıq:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi = E \psi. \quad (36.1)$$

(36.1) tənliyinin hər iki tərəfini $-\frac{2m}{\hbar^2}$ kəmiyyətinə vurub,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = 0,$$

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \text{ əvəzləməsini və}$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (36.2)$$

əmsalını daxil edib, $\frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2}$ ikiqat törəməsini tədqiq etdiyimiz tənlikdə nəzərə alsaq, aşağıdakı tənliyə gələrik:

$$\frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \xi^2 \right) \psi = 0 .$$

Bu tənliyin hər iki tərəfini $\frac{\hbar}{m\omega}$ əmsalına vurub,

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \frac{2}{\hbar\omega} \left(E - \frac{\omega\hbar}{2} \xi^2 \right) \psi = 0$$

(36.2) əvəzləməsindən istifadə etməklə, tənliyi daha kompakt şəkildə yazı bilərik:

$$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi^2\psi = \lambda\psi . \quad (36.3)$$

(36.3) tənliyi, öz formasına görə, $\hat{F} = -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2$ operatorunun

λ məxsusi qiymət və ψ məxsusi funksiyasının təyin etmək üçün yazılmış tənlikdir. Bu səbəbdən dalğa funsiyasının üzərinə bütün standart tələblər qoyulur.

(36.3) tənliyinin ümumi həllini tapmaq üçün argumentin böyük qiymətlərində ($\xi \gg \lambda$) $\psi(\xi)$ funksiyasının asimptotik davranışını müəyyənləşdirək. Bu məqsədlə, yuxarıdakı tənlikdə $\xi^2\psi$ həddinə nisbətən, $\lambda\psi$ həddinin çox kiçik olması səbəbindən, onu nəzərə almayaraq, alınmış

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi = 0 \quad (36.4)$$

tənliyin asimptotik həllini aşağıdakı şəkildə axtaraq:

$$\psi_a = e^{a\xi^2} . \quad (36.5)$$

Aşağıdakı törəmələri müəyyən edib,

$$\psi'_a = 2a \xi e^{a\xi^2},$$

$$\begin{aligned}\psi''_a &= 2a \xi' e^{a\xi^2} + 2a \xi (a\xi^2)' e^{a\xi^2} = 2a e^{a\xi^2} + 4a^2 \xi^2 e^{a\xi^2} = \\ &= (2a + 4a^2 \xi^2) e^{a\xi^2} \approx 4a^2 \xi^2 e^{a\xi^2}.\end{aligned}$$

(36.4) tənliyində istifadə etsək, aşağıdakı xarakteristik tənliyə gələrik:

$$(4a^2 - 1) \xi^2 e^{a\xi^2} = 0.$$

Buradan alırıq ki, $a = \pm \frac{1}{2}$.

$\xi \gg \lambda$ olduqda ümumi asimptotik həll üçün alırıq:

$$\psi_a = c_1 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} + c_2 e^{\frac{1}{2}\xi^2}.$$

Burada c_1 və c_2 ξ -nin funksiyalarıdır. Sonsuzluqda (yəni,

$\xi \rightarrow \pm\infty$ limitində), $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ vuruğunun daxil olduğu hədd dağılır.

Bu, dalğa funksiyası üzərinə qoyulan standart şərtlərlə uzlaşmadığından, dalğa funksiyasının asimptotik ifadəsində axırıncı həddən imtina etsək, alırıq:

$$\psi(\xi) = C e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (36.6)$$

Burada $C = f(\xi)$ - naməlum funksiyadır.

Aşağıdakı ikiqat törəməni hesablayaq:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi}{d\xi^2} &= \frac{d}{d\xi} \frac{d}{d\xi} \left(f(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \right) = \frac{d}{d\xi} \left(f(\xi) (-\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} + e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{df(\xi)}{d\xi} \right) = \\ &= f(\xi) (-\xi) (-\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} - f(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} - \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{df(\xi)}{d\xi} - \\ &\quad - \xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{df(\xi)}{d\xi} + e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} =\end{aligned}$$

$$= \xi^2 e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi) - f(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} - 2\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{df(\xi)}{d\xi} + e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2},$$

və (36.3) tənliyini yenidən yazaq

$$e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \frac{df(\xi)}{d\xi} - f(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} + \lambda e^{-\frac{\xi^2}{2}} f = 0,$$

yaxud

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} - 2\xi \frac{df}{d\xi} + (\lambda - 1)f = 0. \quad (36.7)$$

$\xi = 0$ nöqtəsi (36.7) tənliyinin xüsusi nöqtəsi olmadığından, bu tənliyin həllini üstlü funksiya şəklində axtaraq:

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k. \quad (36.8)$$

Aşağıdakı törəmələri

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\xi} &= \sum_{k=0}^n k a_k \xi^{k-1}, \\ \frac{d^2 f}{d\xi^2} &= \sum_{k=0}^n k(k-1) a_k \xi^{k-2} = \sum_{k=0}^{n-2} (k+2)(k+1) a_{k+2} \xi^k, \end{aligned} \quad (36.9)$$

müəyyən edib, tədqiq etdiyimiz (36.7) tənliyində istifadə etsək, alarıq:

$$\left\{ \sum_{k=0}^{n-2} (k+2)(k+1) a_{k+2} - \sum_{k=0}^n (2k+1-\lambda) a_k \right\} \xi^k = 0. \quad (36.10)$$

$\sum_k a_k \xi^k$ üstlü sırasının eynilik kimi sıfıra bərabər olması üçün a_k

vuruqları sıfıra yuvarlanmalıdırlar. ξ^k -nin qarşısındakı vuruğu sıfıra bərabər etməklə, aşağıdakı rekurent düsturu alarıq:

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} a_k. \quad (36.11)$$

$a_n \neq 0$, $a_{n+2} = 0$ fərziyyəsində (36.11) düsturundan aşağıdakı şərtin ödənilməsi çıxır:

$$2n+1-\lambda=0. \quad (36.12)$$

Burada n ixtiyari tam ədəddir.

(36.2) ifadəsində $\lambda=2n+1$ şərtini nəzərə alsaq, enerji üçün aşağıdakı düstura gələrik

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (36.13)$$

Yəni, ossilyatorun enerjisi, enerji səviyyələri bir-birindən $\hbar \omega$ -ya bərabər məsafələrdə yerləşən diskret qiymətlər alır. Bu ifadəni, kinetik enerjinin klassik ifadəsi ($E = \frac{m \omega^2 a^2}{2}$) və Bor nəzəriyyəsiindən irəli gələn ifadə ($E_n = \hbar \omega n$) ilə müqayisə etsək, görürük ki, $n = 0$ olduqda, enerji sıfırdan fərqli qiymət alır:

$$E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}.$$

Beləliklə, n -ci həyacanlaşmış hala uyğun olan dalğa funksiyasını aşağıdakı şəkildə yazı bilərik:

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} f_n(\xi). \quad (36.14)$$

Burada, A_n normallaşma şərtindən irəli gələn vuruqdur $f_n(\xi) = H_n(\xi)$ isə (36.11) münasibəti ilə təyin olunan vuruqlara malik n -tərtibli Çebışev-Ermit polinomu

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \quad (36.15)$$

olub,

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0 \quad (36.16)$$

diferensial tənliyin həllərini ifadə edir.

(36.12) düsturunu nəzərə alanda, bu tənlik (36.7) tənliyinin üzərinə düşür.

Çebişev-Ermit polinomunun ilk, bir neçə həddini yazaq:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \quad H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_n(\xi) &= (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2\xi)^{n-2} + \\ &\quad \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2\xi)^{n-4} + \dots \end{aligned} \quad (6.17)$$

Çebişev-Ermit polinomunun ümumi ifadəsini bilərək, normallaşma integralini hesablaya bilərik.

Aşağıdakı normallaşma şərtini

$$\int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn},$$

və $\psi_n(\xi)$ -nin aşkar şəklini

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad H_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$$

nəzərə alıb, $\xi = \frac{x}{x_0}$ əvəzləməsini edərək, aşağıdakı integralı

hesablaraq:

$$x_0 |A_n|^2 \int e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi =$$

$$(-1)^n x_0 |A_n|^2 \int e^{-\xi^2} H_n(\xi) e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi =$$

$$(-1)^n x_0 |A_n|^2 \int e^{-\xi^2} e^{\xi^2} H_n(\xi) \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi = \delta_{nn},$$

($|A_n|^2 = A_n A_n$ - şərti əvəzləmədir).

n -qat hissə-hissə integrallamadan sonra, alırıq:

$$x_0 A_n A_{n'} \int e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) d\xi = \delta_{nn'}.$$

Əgər $n > n'$ olduğunu nəzərə alsaq, onda $H_n(\xi)$ funksiyasının n - qat törəməsi sıfıra yuvarlanır, yəni $\psi_n(x)$ funksiyasının ortoqonallıq şərti ödənilir.

$n = n'$ olduqda $\delta_{nn'} = 1$ olur və uyğun olaraq alınır ki,

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!.$$

Puasson integralının qiymətinin $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$ olduğunu nəzərə alaraq,

$$x_0 A_n A_{n'} 2^n n! \int e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

şərtindən A_n vuruğu üçün alırıq:

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}}.$$

Beləliklə, dalğa funksiyası aşağıdakı şəkllə malik olar:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi),$$

və yaxud $(\xi = \frac{x}{x_0})$ və $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$, $x_0 = \frac{x}{\xi} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ nəzərə alınsa),

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \cdot \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right),$$

Qeyd edək ki, ossilyatorun əsas səviyyəsinə ($n=0$) cavab verən dalğa funksiyası heç bir nöqtədə sıfıra çevrilmir. $n=1$ olan səviyyəyə uyğun dalğa funksiyası isə yalnız $x=0$ nöqtəsində sıfıra çevrilir.

Sonda qeyd edək ki, ossilyatorun enerjisinin mümkün olan ən kiçik qiymətinin ($\frac{\hbar\omega}{2}$) sıfırdan fərqli olması, onun (ossilyatorun) mütləq sükunətdə ola bilməməsini göstərir. Eksperimental olaraq, sıfırıncı enerji (E_0), mütləq sıfıra yaxın temperaturda, kristaldan işığın səpilməsi zamanı müşahidə oluna bilər. Mütləq sıfırda, kristal ən aşağı (əsas) enerji səviyyəsində olur. Buna baxmayaraq, atomlar sıfırıncı rəqslərini edərək, işığın səpilməsini yaradırlar.

37. Kvaziklassik yaxınlaşma və klassik mexanikanın tənliklərinə keçid

Kvant mexanikasının vacib ümumi prinsiplərindən biri olan, *uyğunluq prinsipini* $\hbar \rightarrow 0$ həddində kvant mexanikasının qanun və münasibətlərinin, klassik mexanikanın uyğun qanun və münasibətlərinə keçidinin mümkün olduğunu göstərir. Xüsusi halda, çox böyük kütləyə malik zərrəcik üçün, $\hbar/m$ nisbəti o qədər kiçikdir ki, onun (zərrəciyin) koordinatı və impulsu praktik olaraq konkret qiymətlərə malik olur, yəni, kvant mexanikası, klassik mexanikanı, $\hbar \rightarrow 0$ limitində öz “tərkibində” saxlayır. Bu isə, öz növbəsində, bəzi kvant-mexaniki kəmiyyətlər və məfhumlar ilə klassik mexanikadakı analoqlar arasında əlaqə qurmağı mümkün edir. Digər tərəfdən, $\hbar \rightarrow 0$ limitində Şrödinger tənliyi mənasını itirir. Bundan əvvəlki mühazirələrdə (Bölmə 34), $\hbar \rightarrow 0$ limitinə keçid edilmədən Şrödinger tənliyinin dəqiq nəticəsi kimi, zərrəciklərin sayının saxlanması qanunu $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0$ müəyyən edilmişdir. Digər bir metoda,

Vensel-Kramers-Brillüen metoduna (1926) müraciət edək

Şrödinger tənliyinin təxmini həlli bu metod əsasında, kvant mexanikasının düsturlarının $\hbar \rightarrow 0$ limitində, klassik mexanika tənliklərinə keçməsinə göstərərək riyazi olaraq uyğunluq prinsipinin mövcudluğunu isbat edək.

ψ dalğa funksiyasını aşağıdakı şəkildə seçərək

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (37.1)$$

(S , $\vec{r}$ və t -nin funksiyasıdır: $S(\vec{r}, t)$), (4.9) Şrödinger tənliyini açıq şəkildə yazaq:

$$i\hbar \frac{\partial e^{\frac{i}{\hbar}S}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta e^{\frac{i}{\hbar}S} + U\psi. \quad (37.2)$$

Tənliyin sol tərəfində zamana görə, sağ tərəfində isə koordinata görə törəmələri hesablayaraq,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial e^{\frac{i}{\hbar}S}}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial S}{\hbar \partial t} e^{\frac{i}{\hbar}S} = -\frac{\partial S}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar}S} = -\frac{\partial S}{\partial t} \psi, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 e^{\frac{i}{\hbar}S} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} e^{\frac{i}{\hbar}S} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \left(\frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla} S) e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r}, t)} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla}^2 S) e^{\frac{i}{\hbar}S} + \frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla} S) \frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla} S) e^{\frac{i}{\hbar}S} \right] = \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 e^{\frac{i}{\hbar}S} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} e^{\frac{i}{\hbar}S} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \left(\frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla} S) e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r}, t)} \right) = \\ &= \left(-\frac{i\hbar}{2m} \Delta S + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 \right) \psi \end{aligned}$$

(37.2) tənliyində yerinə yazıb,

$$-\frac{\partial S}{\partial t} \psi = \left(-\frac{i\hbar}{2m} \Delta S + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 \right) \psi + U\psi.$$

ψ -ni xaric etsək nəhayət alırıq:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \Delta S + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + U \quad (37.3)$$

$\frac{\hbar}{i}$ -nin dərəcələri üzrə düzülmüş

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots, \quad (37.4)$$

sırasını nəzərə alaraq, (37.3) tənliyini yenidən yazaq:

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial t} \left(S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \right) = \\ & = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{\nabla} S_0 + \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \vec{\nabla} S_2 + \dots \right\}^2 - \\ & - \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 S_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 S_1 + i \frac{\hbar^3}{2m} \vec{\nabla}^2 S_2 + \dots + U, \end{aligned}$$

yaxud

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial t} S_0 - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} S_1 - \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{\partial}{\partial t} S_2 = \\ & = \frac{1}{2m} \left\{ \left(\vec{\nabla} S_0\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \vec{\nabla} S_2\right)^2 + 2 \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} S_0 \vec{\nabla} S_1 + 2 \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \vec{\nabla} S_0 \vec{\nabla} S_2 \right\} - \\ & - \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 S_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 S_1 + i \frac{\hbar^3}{2m} \vec{\nabla}^2 S_2 + U, \end{aligned}$$

$\hbar$ -ın eyni dərəcələri üzrə vuruqları bərabərləşdirib, $\hbar$ -a görə sıfırıncı və birinci tərtib həddlərlə kifayətlənsək, aşağıdakı iki tənliyi alırıq:

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\vec{\nabla} S_0\right)^2 + U, \quad (37.5)$$

$$-\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{m} \vec{\nabla} S_0 \vec{\nabla} S_1 + \frac{1}{2m} \Delta S_0. \quad (37.6)$$

Birinci tənlik, S_0 təsir funksiyası üçün klassik mexanikanın Hamilton-Yakobi tənliyidir.

İkinci tənliyi araşdıraraq. (37.6) tənliyini soldan, zərrəciyin, fəzanın verilmiş nöqtəsində olması ehtimalı sıxlığına $\rho = |\psi|^2 = e^{2S_1}$ vuraq:

$$-\rho \frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{\rho}{m} \bar{\nabla} S_0 \bar{\nabla} S_1 + \rho \Delta S_0 \frac{1}{2m}. \quad (37.7)$$

Aşağıdakı törəmələrdən,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 2 \frac{\partial S_1}{\partial t} e^{2S_1} = 2 \frac{\partial S_1}{\partial t} \rho,$$

$$\bar{\nabla} \rho = \bar{\nabla} e^{2S_1} = 2 \bar{\nabla} S_1 e^{2S_1} = 2 \bar{\nabla} S_1 \rho,$$

və ya

$$\rho \frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t},$$

$$\frac{\bar{\nabla} \rho}{2} = \rho \bar{\nabla} S_1$$

istifadə edərək (37.7) tənliyini yenidən yazaq:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{1}{m} \bar{\nabla} S_0 \frac{\bar{\nabla} \rho}{2} + \rho \Delta S_0 \frac{1}{2m} = \frac{1}{2m} (\bar{\nabla} S_0 \bar{\nabla} \rho + \rho \bar{\nabla}^2 S_0) = \\ &= \frac{1}{2m} \bar{\nabla} (\rho \bar{\nabla} S_0) = \frac{1}{2m} \operatorname{div} (\rho \bar{\nabla} S_0), \end{aligned}$$

yaxud

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{m} (\bar{\nabla} S_0 \bar{\nabla} \rho + \rho \Delta S_0) = \operatorname{div} \left(\frac{1}{m} \rho \bar{\nabla} S_0 \right). \quad (37.8)$$

(37.6) tənliyinə ekvivalent olan bu tənlik göstərir ki, zərrəcik klassik mexanikada hansı trayektoriya və sürətlə hərəkət edərsə, kvant mexanikasında ehtimal sıxlığı da fəzada həmin “trayektoriya” və “sürətlə” ($\vec{v} = \frac{1}{m} \bar{\nabla} S_0$) hərəkət edir. Beləliklə, bu

tənlik kəsilməzlik tənliyinin analoqudur.

37a. Kvaziklassik yaxınlaşmada zərrəciyin stasionar hallarının dalğa funksiyası

Dalğa funksiyasının

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(x) \quad (37.9)$$

ifadəsindən istifadə edərək, kvaziklassik yaxınlaşmada zərrəciyin stasionar halları üçün analogi funksiyanı müəyyən edək. Bunun üçün birölçülü hərəkət ilə kifayətlənək.

(37.1) və (37.3) düsturlarında

$$S_0(x, t) = -Et + S_0'(x) \quad (37.10)$$

ifadəsini (S_1, S_2 və i.a. zamandan asılı olmadıqları fərz olunur) nəzərə alıb (37.5) tənliyində istifadə etsək, alarıq:

$$-\frac{\partial(-Et + S_0'(x))}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left[\vec{\nabla}(-Et + S_0'(x)) \right]^2 + U(x),$$

yaxud

$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{dS_0'}{dx} \right)^2 + U(x). \quad (37.11)$$

(37.11) tənliyini formaca bir qədər dəyişərək

$$2m(E - U(x)) = \left(\frac{dS_0'}{dx} \right)^2,$$

alarıq ki,

$$dS_0' = \pm \sqrt{2m(E - U(x))} dx.$$

Bu ifadədə inteqrallama apardıqdan sonra, gözlənilirdiyi kimi, klassik mexanikanın aşağıdakı tənliklərini alarıq:

$$S_0' = \pm \int_0^x p(x) dx, \quad (37.12)$$

$$p(x) = \pm \sqrt{2m(E - U(x))}.$$

(37.6) tənliyindən S_1 -i müəyyən edək. Onun (S_1) zamandan asılı olmadığını ($\frac{\partial S_1}{\partial t} = 0$) (37.10) tənliyində nəzərə alıb, diferensiallama aparsaq

$$0 = \frac{1}{m} \frac{d}{dx} (-Et + S'_0(x)) \frac{dS_1}{dx} + \frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} (-Et + S'_0(x)),$$

alırıq ki,

$$\frac{dS'_0}{dx} \frac{dS_1}{dx} + \frac{1}{2} \frac{d^2 S'_0}{dx^2} = 0.$$

Beləliklə, kiçik forma dəyişikliyindən sonra aşağıdakı ifadəni yazaq:

$$\frac{dS'_0}{dx} \frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{d^2 S'_0}{dx^2},$$

yaxud

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{\frac{d^2 S'_0}{dx^2}}{\frac{dS'_0}{dx}} = -\frac{1}{2} \frac{\frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \left(\pm \int_0^x p(x) dx \right)}{\frac{d}{dx} \left(\pm \int_0^x p(x) dx \right)}.$$

$$p(x) = \frac{d}{dx} \left(\pm \int_0^x p(x) dx \right) \quad \text{olduğunu nəzərə alıb, yuxarıdakı}$$

tənlikdən alırıq:

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{\frac{dp}{dx}}{p} = -\frac{1}{2p} \frac{dp}{dx}.$$

$$\int dS_1 = -\frac{1}{2} \int \frac{dp}{p} \quad \text{-da integrallamadan sonra } S_1 \text{ üçün son}$$

nəticəyə gələrik:

$$S_1 = -\frac{1}{2} \ln p.$$

Dalğa funksiyasının (37.2) ifadəsinə əsasən, (37.4), (37.10) və (37.12) düsturlarından, stasionar hallar üçün alırıq:

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= e^{\frac{i}{\hbar}S} = e^{\frac{i}{\hbar}\left(S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1\right)} = e^{\frac{i}{\hbar}\left(-Et + S_0'(x) + \frac{\hbar}{i}S_1\right)} = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{S_1} e^{\frac{i}{\hbar}S_0'(x)} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{-\frac{1}{2}\ln p(x)} e^{\pm \frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{1}{e^{\frac{1}{2}\ln p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \frac{1}{e^{\ln \sqrt{p(x)}}} e^{\pm \frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} = \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} \\ p(x) &= \pm \sqrt{2m(E - U(x))}.\end{aligned}$$

Aydın olur ki, dalğa funksiyası $E - U$ fərqlinin işarəsindən əsaslı sürətdə asılıdır.

$E > U$ olduqda impuls həqiqi kəmiyyət olur. Dalğa funksiyasının bu halda ifadəsi, klassik mexanikanın icazə verdiyi oblastda zərrəciyin hərəkətini təsvir edərək, aşağıdakı ossilyasiya şəklində olur:

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} + \frac{c_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx}, \quad E > U.$$

$E < U$ olduqda isə, yəni klassik mexanikaya görə qadağan olunmuş oblastda impuls xəyali olur və dalğa funksiyası eksponensial ifadələrin cəmi kimi verilir:

$$\psi(x) = \frac{c_1}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx} + \frac{c_2}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx}, \quad E < U.$$

$E = U$ dönmə nöqtəsində impuls sıfıra çevrilir $p = 0$ və dalğa funksiyasının ifadəsi tamamilə mənasını itirir.

38. Stasionar həyacanlaşma nəzəriyyəsi

Stasionar halların öyrənilməsi, həmçinin qeyri-stasionar Şrödinger tənliyinin həlli kvant mexanikasında fiziki nəticələrə gəlmək üçün çox vacib yerlərdən birini tutur. Yuxarıda

öyrəndiyimiz, yalnız bəzi sadə məsələlər üçün birinci tərtib xətti diferensial tənlik olan Şrödinger tənliyinin dəqiq həlli mövcuddur. Əksər hallarda, Şrödinger tənliyinin dəqiq həllini tapmaq böyük riyazi çətinliklər ilə üzləşir. Buna görə də, kvant mexanikasında məsələlərin həllinin təqribi metodları geniş tətbiq olunur. Bu metodlar sırasına iterasiya (ardıcıl yaxınlaşmalar) metodu, variasiya metodu və digərləri daxildir.

Hər hansı bir kəmiyyətin diskret spektr halında (spektrinin müəyyən edilməsi məsələsinin həlli məlum olan kəmiyyətin qiymətinə yaxın qiymətlərdə), ona uyğun operatorun məxsusi funksiyalarının və məxsusi qiymətlərinin tapılması üçün iterasiya nəzəriyyəsi məlumdur.

İterasiya metodunu zamandan asılı olmayan, sadə kvant-mexaniki sistemin $\hat{H}$ Hamilton operatoruna tətbiq edək, yəni stasionar Şrödinger tənliyinin həllərini quraq. Bu metod, stasionar həyacanlaşma nəzəriyyəsi adlanır və riyaziyyatdan məlum olan, kiçik parametmə görə paylanmanın qurulması variantlarından birinə analoq təşkil edir.

Fərz edək ki, $\hat{H}$ operatoru özü-özünə qoşma olan iki operatorun cəmi kimi göstərilə bilər

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' . \quad (38.1)$$

Burada $\hat{H}'$ həyacanlaşma operatorunu, $\hat{H}_0$ operatoruna nisbətən kiçik qəbul etmək olar (yəni, $\hat{H}'$ operatorunun üstləri üzrə qurulan sıra, bütün spektral oblastda sonlu olmasa belə, axtarılan, məhdud spektr intervalında sonludur).

Şrödinger tənliyini aşağıdakı şəkildə yazaq:

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}')\psi = E\psi . \quad (38.2)$$

Təyin olunmasına baxmayaraq, Hamilton operatoru ermit olduğundan ($\hat{H} = \hat{H}^+$), əvvəldən məlum olması fərz edilən, ortonormallaşmış məxsusi funksiyaların tam sisteminin mövcudluğu üçün, həyacanlaşmamış Hamiltonian üçün də, ermitlik şərtinin ödənilməsi vacibdir. $\hat{H}_0$ operatorunun diskret spektrinə aid olan həyacanlaşmış hallara baxaq. Bununla belə,

$\hat{H}_0$ operatoru, diskret spektrli məxsusi funksiyalarla yanaşı, kəsilməz spektrə malik məxsusi funksiyalara da malik ola bilər. Yaxınlaşmada, sıfırıncı həddə uyğun həlli aşağıdakı şəkildə yazmaq

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)}. \quad (38.3)$$

Burada, şərtləşdiyimiz kimi, həyacanlaşmamış sistemin $\psi^{(0)}$ dalğa funksiyası məlumdur. Şərti olaraq $\hat{H}_0$ Hamilton operatoru həyacanlaşmamış operator, $\psi^{(0)}$ -həyacanlaşmamış dalğa funksiyası, $\hat{H}'$ isə həyacanlaşma operatoru adlandırılacaq. Onda, (38.2) tənliyinin həlli üçün, ardıcıl yaxınlaşma metodundan istifadə etmək olar. $\hat{H}'$ həyacanlaşma operatorunun təsiri altında sistemin halı nisbətən zəif dəyişir.

$\hat{H}_0$ operatorunun məxsusi funksiyaları üçün

$$\psi(x) = \sum_k c_k \psi_k^{(0)}, \quad (38.4)$$

sırasını (38.2) tənliyində istifadə etsək, alarıq:

$$\sum_k \hat{H}' c_k \psi_k^{(0)} = \sum_k c_k E \psi_k^{(0)} - \sum_k \hat{H}_0 c_k \psi_k^{(0)}.$$

Burada (38.3) tənliyini də nəzərə alsaq:

$$\sum_k \hat{H}' c_k \psi_k^{(0)} = \sum_k c_k (E - E_k^0) \psi_k^{(0)}.$$

Əgər, $\hat{H}_0$ operatoru həmçinin kəsilməz spektrə də malikdirsə, onda (38.4) iənliliyinə uyğun inteqral əlavə olunmalıdır.

Sonuncu tənliyin hər iki tərəfini soldan $\psi_m^{(0)*}$ funksiyasına vurub, bütün fəza üzrə inteqrallayaq:

$$\int \sum_k \psi_m^{(0)*} \hat{H}' \psi_k^{(0)} c_k dV = \sum_k c_k (E - E_k^0) \int \psi_m^{(0)*} \psi_k^{(0)} dV.$$

$\psi_k^{(0)}$ funksiyasının ortoqonallığından ($\int \psi_m^{(0)*} \psi_k^{(0)} dV = \delta_{mk}$) istifadə edib,

$$H'_{mk} = \int \psi_m^{(0)*} \hat{H}' \psi_k^{(0)} dV, \quad (38.5)$$

əvəzləməsini nəzərə alsaq, taparıq:

$$c_m(E - E_m^0) = \sum_k H'_{mk} c_k, \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (38.6)$$

(38.5) ifadəsi həyacanlaşma operatorunun matris elementidir. (38.6) tənliklər sistemi, enerji təsvirindəki Şrödinger tənliyini özündə əks etdirərək (38.2) tənliyinə tam ekvivalentdir.

Həyacanlaşma operatorunun kiçik olması ilə əlaqədar, baxdığımız məsələdə, enerji səviyyələrinin qiyməti və məxsusi dalğa funksiyaları, uyğun olaraq, həyacanlaşmamış sistemin enerji səviyyələrinin qiymətinə və dalğa funksiyalarına çox yaxın olduqlarından, enerji səviyyələrini və dalğa funksiyalarını aşağıdakı sıralar şəklində axtaraq:

$$\left. \begin{aligned} E &= E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots, \\ c_m &= c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots, \end{aligned} \right\}. \quad (38.7)$$

Burada $E^{(0)}$, $c_m^{(0)}$ - həyacanlaşmamış qiymətlərdir. $E^{(1)}$, $c_m^{(1)}$ - birincitərtib düzəlişlər, $E^{(2)}$, $c_m^{(2)}$ isə həyacanlaşmanın kvadratı tərtibində düzəlişlərdir və i.a.

n - ci enerji səviyyəsinə və həyacanlaşmamış sistemin n - ci enerji səviyyəsinə uyğun məxsusi funksiyaya edilən düzəlişlər aşağıdakı kimidir:

$$\left. \begin{aligned} E &= E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \\ c_m &= c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots, \end{aligned} \right\}. \quad (38.8)$$

Ümumi halda, bu o demək deyil ki, $\psi(x)$ funksiyası $\psi_k^{(0)}$ məxsusi funksiyasına yaxındır (bax, (38.4)), amma $E_n^{(0)}$ məxsusi qiymətləri içərisində üst-üstə düşəni yoxdursa, yəni, $\hat{H}_0$ həyacanlaşmamış hamiltonianın spektri cırılmaıbsa, onda, doğrudan da, $\psi(x)$ funksiyası $\psi_k^{(0)}$ -a yaxın qiymət alır.

Daha sonra, həyacanlaşmamış halın n - ci enerji səviyyəsinin cırılmadığını fərz edək. Digər səviyyələr üçün bu şərt vacib deyil. Sıfırıncı yaxınlaşmada dalğa funksiyası, $\psi_n^{(0)}$ funksiyası ilə üst-üstə düşür. (38.4) ifadəsinə əsasən alırıq ki,

$$\psi = \sum_k c_k^{(0)} \psi_k^{(0)} = \psi_n^{(0)}, \quad c_k^{(0)} = \delta_{kn}, \quad (38.9)$$

yəni sıfırıncı yaxınlaşmanın tənliyi $\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E^{(0)} \psi_n^{(0)}$ kimi olur.

Sonrakı iterasiyanı qurmaq üçün (38.8) sistemini (38.6) tənliyində istifadə edək:

$$\begin{aligned} & (\delta_{mn} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)}) (E_n^{(0)} - E_m^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}) = \\ & = \sum_k H'_{mk} (\delta_{kn} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)}). \end{aligned} \quad (38.10)$$

Burada eyni tərtibli həddləri bərabərləşdirmək lazımdır. Bərabərliyin sol tərəfində, üstlərinin cəmi 1 olan həddləri, sağ tərəfdə isə üstü 0 olan həddi (yəni δ_{kn}) seçib ayıraraq, birinci addım üçün aşağıdakı münasibəti alırıq:

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) c_m^{(1)} + E_n^{(1)} \delta_{mn} = \sum_k H'_{mk} \delta_{kn} = H'_{mn}. \quad (38.11)$$

$m = n$ olduğunu nəzərə alsaq, (38.5) düsturuna əsasən alırıq:

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{H}' \psi_n^{(0)} dV, \quad (38.12)$$

yəni, enerjiyə birinci tərtib düzəliş, $\psi_n^{(0)}$ həyacanlaşmamış halında, həyacanlaşmanın orta qiymətinə bərabərdir. $m \neq n$ olduqda, ($\delta_{mn} = 0$ olduğundan) dalğa funksiyasına birinci tərtib düzəlişi tapırıq:

$$c_m^{(1)} = \frac{H'_{mn}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})}. \quad (38.13)$$

Yuxarıdakılara analogi olaraq, (38.10) tənliyindən ikinci tərtib düzəlişləri də tapmaq olar. Bu məqsədlə, ikinci tərtib kiçikliyə görə tənliyi yazıb, bərabərliyin sol tərəfindəki üstlərinin cəmi 2 olan həddləri, sağ tərəfdə isə üstü 1 olan həddi (yəni, $c_k^{(1)}$) seçib ayırıq:

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) c_m^{(2)} + c_m^{(1)} E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \delta_{mn} = \sum_k H'_{mk} c_k^{(1)}. \quad (38.14)$$

$m \neq n$ olduqda ($\delta_{mn} = 0$ olduğuna görə, sol tərəfdəki üçüncü hədd buraxılır), həyacanlaşmamış dalğa funksiyasına ikinci tərtib düzəlişi tapırıq:

$$c_m^{(2)} = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left(\sum_k H'_{mk} c_k^{(1)} - E_n^{(1)} c_m^{(1)} \right). \quad (38.15)$$

$c_n^{(1)}$ və $c_n^{(2)}$ amplitudları normallaşma şərtindən alınır.

Dalğa funksiyasının (38.4) ifadəsindən alarıq:

$$\int \psi \psi^* dV = \int \sum_k c_k \psi_k^{(0)} c_k^* \psi_k^{(0)*} dV = \sum_k |c_k|^2 = 1, \quad (38.16)$$

(38.8) sistemindəki ikinci ifadəni (38.16) integralında istifadə etsək, alarıq:

$$\begin{aligned} \int \sum_k \left(c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} \right) \psi_k^{(0)} \left(c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} \right)^* \psi_k^{(0)*} dV = \\ = \sum_k |c_k|^2 \int \sum_k \psi_k^{(0)} \psi_k^{(0)*} dV = \sum_k |c_k|^2 = \\ \sum_k \left| \delta_{kn} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} \right|^2 = 1. \end{aligned} \quad (38.17)$$

Açıq şəkildə yazılmış (38.17) ifadəsində

$$\begin{aligned} \sum_k \left(c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} \right) \left(c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} \right)^* = \\ = \sum_k \left\{ c_k^{(0)} \left(c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} \right)^* + c_k^{(1)} \left(c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} \right)^* + \right. \\ \left. + c_k^{(2)} \left(c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)} \right)^* \right\} = 1 \end{aligned}$$

eyni tərtib kiçiklikdə olan həddləri seçərək, ayrı-ayrı bərabərliklər kimi yazıb,

$$\begin{aligned} \sum_k c_k^{(0)} c_k^{(0)*} = \sum_k \left(c_k^{(0)} c_k^{(1)*} + c_k^{(1)} c_k^{(0)*} \right) = 0, \\ \sum_k \left(c_k^{(0)} c_k^{(1)*} + c_k^{(1)} c_k^{(0)*} \right) = \sum_k \left(c_k^{(0)} c_k^{(2)*} + c_k^{(2)} c_k^{(0)*} \right) + \sum_k c_k^{(1)} c_k^{(1)*} = 0, \end{aligned}$$

$c_k^{(0)} = \delta_{kn}$, olduğunu nəzərə alsaq, tapırıq:

$$\left. \begin{aligned} c_n^{(1)} + c_n^{(1)*} &= 0, \\ c_n^{(2)} + c_n^{(2)*} + \sum_k |c_k^{(1)}|^2 &= 0 \end{aligned} \right\}. \quad (38.18)$$

Bu münasibətlərdən çıxır ki, $c_n^{(1)}$ və $c_n^{(2)}$ amplitudlarının xəyali hissələri ixtiyari kəmiyyətlərdir, çünki, dalğa funksiyası öz təbiətinə görə, $e^{i\alpha}$ faza vuruğu dəqiqliyi ilə müəyyən olunur. Bu vuruğun sıraya ayrılmasına əsasən, α əmsalını da sıra şəklində göstərmək olar. Onda $c_n^{(1)}$ və $c_n^{(2)}$ amplitudlarının ixtiyariliyini qəbul etmək olar. Yəni $c_n^{(1)} \equiv c_n^{(1)*}$ və $c_n^{(2)} \equiv c_n^{(2)*}$ götürmək olar. Beləliklə, (38.18) ifadələrindən alırıq:

$$\left. \begin{aligned} c_n^{(1)} &= 0, \\ c_n^{(2)} &= -\frac{1}{2} \sum_k |c_k^{(1)}|^2 = 0 \end{aligned} \right\}.$$

$k = n$ həddini nəzərə almayıb (ştrix ilə işarələyib) (38.13),

$$c_k^{(1)} = \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \text{ düsturuna əsasən yazı bilərik:}$$

$$\left. \begin{aligned} c_n^{(1)} &= 0, \\ c_n^{(2)} &= -\frac{1}{2} \sum_k \frac{|H'_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \end{aligned} \right\}. \quad (38.19)$$

(38.12) və (38.13)-ə əsasən, $E_n^{(1)} = H'_{nn}$ olduğunu nəzərə alıb, (38.15) düsturundan, $m \neq n$ götürüldükdə, amplituda ikinci addım düzəlişini ($c_m^{(2)}$) alırıq,

$$c_m^{(2)} = \sum_k \frac{H'_{mk} H'_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \frac{H'_{mn} H'_{nn}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}. \quad (38.20)$$

(38.14) tənliyində, $m = n$ olduğunu qəbul etsək, alırıq:

$$c_n^{(1)} E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \delta_{nn} = \sum_k H'_{nk} c_k^{(1)}.$$

$\delta_{nn} = 1$, $c_n^{(1)} = 0$ və $c_k^{(1)} = \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$ ifadələrini nəzərə alsaq,

sistemin enerjisinə ikinci tərtib düzəlişi tapırıq:

$$E_n^{(2)} = \sum_k \frac{H'_{nk} H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (38.21)$$

(38.8), (38.12) və (38.21) düsturlarına əsasən ikinci tərtib düzəli.dəqiqliyi ilə sistemin tam enerjisi aşağıdakı ifadə ilə müəyyən olunur:

$$E = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_k \frac{|H'_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (38.22)$$

Onda sistemin həyacanlaşmış halda dalğa funksiyası aşağıdakı şəkildə olar,

$$\psi = \psi_n^{(0)} + H'_{nn} \psi_n^{(0)} + \sum_k \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)} + \dots. \quad (38.23)$$

Sonuncu ifadədən çıxır ki,

$$|H'_{nk}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|$$

münasibətinin ödəndiyi səbəbindən, birinci tərtib düzəliş doğrudan da çox kiçikdir.

Həmçinin, həyacanlaşmamış Hamilton operatorunun çox-qat cırlaşmış məxsusi qiymətlərə malik olduğu halda da, həyacanlaşma nəzəriyyəsini tətbiq etmək olar.

39. Sferik-simmetrik (mərkəzi) sahədə hərəkət

Real fiziki sistemlərin xassələrinin öyrənilməsində sadə nümunə kimi, qarşılıqlı təsirin potensial enerjisinin yalnız aralarındakı məsafədən asılı olan, elektron və nüvənin təşkil etdiyi hidrogen atomunu seçək. Elektron və nüvənin kütlələri arasındakı böyük fərqə ($m_e \ll m_n$) nəzərə alınsa, elektronun $U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ potensiallı nüvə sahəsində hərəkətini, μ

($\mu = \frac{m_e m_n}{m_e + m_n} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_n}} \approx m_e$) gətirilmiş kütləli bir zərrəciyin,

$U(r)$ sahəsində hərəkəti kimi baxıla bilər. Protonun kütləsi də nəzərə alınmasa, hidrogen atomunun öyrənilməsi, elektronun sükunətdə olan mərkəzin kulon sahəsində (mərkəzi sahə - sferik-simmetrik sahə) hərəkəti məsələsinə gətirilər.

Kulon sahəsindəki hərəkəti öyrənməkdən öncə bu hal üçün yazılmış Şrödinger tənliyinin

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)]\psi = 0 \quad (39.1)$$

ümumi həllini araşdırmaq.

Ümumi şəkildə, üçölçülü halda, (39.1) Şrödinger dalğa tənliyini analitik həll etmək üçün texniki imkan olmadığından, baxılan məsələdə simmetriya qanunlarına əsaslanıb, dəyişənlərin ayrılması yolu ilə diferensial tənliklərdən ibarət sistemə gələ bilərik.

Məlumdur ki, verilmiş sistemin hamiltonianı

$$(\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U(r)) \text{ fəza inversiyasına } (x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z)$$

nəzərə alın invariantdır. $\hat{I}$ İnversiya operatoru, hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatoru $\hat{L}^2$ və hərəkət miqdarı momentinin ixtiyari proyeksiyası operatoru $\hat{L}_z$, $\hat{H}$ Hamilton operatoru ilə kommutasiya etdiklərindən, bu operatorlar, eyni bir, ψ məxsusi funksiyasına malik olurlar. Bu məxsusi funksiyanı (39.1) tənliyi də daxil olmaqla, aşağıdakı

$$\hat{L}^2\psi = L^2\psi, \hat{L}_z\psi = L_z\psi, \hat{I}\psi = I\psi, \quad (39.2)$$

tənlikləri vasitəsilə müəyyən etmək olar. Mərkəzi sahədə hərəkət edən zərrəciyin sferik koordinat sistemində yazılmış dalğa tənliyində, dəyişənlərin bölünməsi əməliyyatını həyata keçirmək olar. Bölmə 20-dəki, dekart sistemindən (x, y, z) sferik sistemə (r, θ, φ) keçid düsturlarına, və Laplas operatorunun sferik koordinatlarda ifadəsinə

$$\Delta_{r,\theta,\varphi} = \nabla_r^2 + \frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2}{r^2}.$$

(burada

$$\nabla_r^2 = \Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right),$$

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2 = \Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2},$$

əsaslanaraq, (39.1) və (39.2) tənliklərindən sferik koordinat sistemində aşağıdakı tənlikləri yazı bilərik:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta,\varphi} \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi &= 0, \\ -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi} \psi &= L^2 \psi, \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi &= L_z \psi, \\ \hat{I} \psi &= I \psi. \end{aligned} \right\} \quad (39.3)$$

Birinci tənlikdən başqa, (39.3) sisteminin digər üç tənliyinin həlləri, 21-22 Bölmələrindən məlum olub, yalnız θ və φ bucaq dəyişənlərindən asılıdırlar. ψ dalğa funksiyasını r dəyişənindən asılı olması ($\psi(r, \theta, \varphi)$), birinci tənliyin həllini aşağıdakı şəkildə

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi), \quad (39.4)$$

şəklində axtarmaq lazım olduğunu göstərir. (39.3) sistemindəki birinci tənliyə, hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatorunu

($-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} = \Delta_{\theta,\varphi}$) daxil edərək, onu aşağıdakı şəkildə yazıaq:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0. \quad (39.5)$$

(39.4) funksiyasını (39.5) tənliyində istifadə edib, hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatorunun məxsusi funksiyası üçün,

$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi)$ tənliyini nəzərə alsaq, dalğa funksiyasının radial hissəsi ($R(r)$) üçün aşağıdakı tənliyə gələrik:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] R = 0, ,$$

və ya

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] R = 0 . \quad (39.6)$$

Qeyd etmək lazımdır ki, dalğa funksiyasının bucaq hissəsi $Y_l^m(\theta, \varphi)$, zərrəciyin hərəkət miqdarı momenti kvadratının (L^2) (l orbital kvant ədədi) və hərəkət miqdarı momentinin z oxu üzrə proyeksiyası (L_z) (m maqnit kvant ədədi) ilə müəyyən olunursa, ψ dalğa funksiyasının radial hissəsi ($R(r)$) $U(r)$ potensial enerjisindən asılı olur.

Yeni

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (39.7)$$

funksiyasını daxil etsək, (39.6) tənliyini prinsipcə yeni formada yazı bilərik:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] u(r) = 0 . \quad (39.8)$$

Yəni radial funksiya üçün (39.6) tənliyi

$$U_{eff}(\vec{r}) = U(\vec{r}) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}, \quad (39.9)$$

effektiv potensiallı sahədə zərrəciyin birölçülü hərəkətini ifadə edən tənliyə çevrilir. Burada $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ kəmiyyəti, mərkəzə qaçma

enerjisi kimi izah oluna bilər. Potensial enerji konkretləşdirilməyə belə, qüvvə mərkəzinə çox yaxın, və qüvvə mərkəzindən çox uzaq məsafələrdə dalğa funksiyasının davranışı haqqında müəyyən nəticələrə gəlmək olar.

(39.8) ikinci tərtib diferensial tənliyinin həlli, məlum olduğu kimi, aşağıdakı şəkildədir:

$$u(r) = c_1 u_1(r) + c_2 u_2(r). \quad (39.10)$$

Dalğa funksiyasına qarşı qoyulan standart şərtlərlə yanaşı, dalğa funksiyasının sonlu olması tələbi ($r=0$ -da $u(r)=0$) ilə yanaşı $u(r)$ funksiyasının r -in bütün dəyişmə oblastında $(0, \infty)$ xüsusi nöqtələrinin olmaması tələbini ortaya qoyan normallaşma şərti də ödənməlidir. (39.8) tənliyinin həllinin xarakteri, enerjinin qiymətinin (E) potensial enerji ilə $u(r)|_{r \rightarrow \infty} = C$ limitində müqayisəsindən nəzərə çarpacaq dərəcədə asılıdır. C ixtiyari sabit olduğundan, onu sıfır götürüb aşağıdakı iki halı ayırd etmək olar: $E > 0$ və $E < 0$.

(39.8) tənliyində, 0 və ∞ -da xüsusi nöqtələrin mövcudluğu, bu nöqtələr ətrafında həllərin tapılmasını prinsiplial olaraq ortaya çıxarır.

39a. Radial Şrödinger tənliyinin $r \rightarrow \infty$ limitində həlli

(39.8) tənliyində $\frac{1}{r^2}$ kiçik həddini $u(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0$ olduqda, nəzərə almasaq aşağıdakı tənliyə gələrik:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u(r) = 0, \quad (39.11)$$

$E > 0$ olduqda, $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$ və $E < 0$ halında $\lambda^2 = -\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}$ əvəzləməsini apararaq, (39.11) tənliyini aşağıdakı iki tənlik kimi yazaq,

$$u''(r) + k^2 u(r) = 0, \quad E > 0, \quad (39.12)$$

$$u''(r) - \lambda^2 u(r) = 0, \quad E < 0 \quad (39.13)$$

(yuxarı indeks iki ştrix, r üzrə ikiqat törəməni göstərir).

Xarakteristik tənliklərə

$$\mu^2 + k^2 = 0, \quad \mu = \pm ik,$$

$$\mu^2 - \lambda^2 = 0, \quad \mu = \pm \lambda$$

əsasən, uyğun həlləri yazaq:

$$u(r) = ae^{ikr} + be^{-ikr}, \quad E > 0, \quad (39.14)$$

$$u(r) = a_1 e^{-\lambda r} + b_1 e^{\lambda r}, \quad E < 0 \quad (39.15)$$

(39.7) funksiyasına əsasən, $r \rightarrow \infty$ limitində (39.6) tənliyinin asimptotik həlli aşağıdakı kimi olur:

$$R(r) = a \frac{e^{ikr}}{r} + b \frac{e^{-ikr}}{r}, \quad E > 0, \quad (39.16)$$

$$R(r) = a_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r} + b_1 \frac{e^{\lambda r}}{r}, \quad E < 0. \quad (39.17)$$

$E < 0$ olduqda (39.16) həlli a, b üçün sonlu və kəsilməz olur. Radial funksiya, qüvvə mərkəzindən uzaq məsafədə dağılan və yığılan sferik dalğaların superpozisiyasını ifadə edir. Bu halda, r -in kifayət qədər böyük qiymətlərində ($r \rightarrow \infty$) zərrəciyin radiusu $r, r + dr$ qiymətləri ilə müəyyən olunan sferik zolaqda müşahidə olunması ehtimalı sonlu qiymət alır:

$$dW(r) = W(r) d\bar{r} \approx |R|^2 r^2 dr d\Omega = 4\pi \left| ae^{ikr} + be^{-ikr} \right|^2 dr. \quad .$$

Bu hal, klassik mexanikada periodik olmayan orbitlər üzrə hərəkətə uyğun olaraq, zərrəciyin sonsuzluqdan qüvvə mərkəzinə yaxınlaşmasını və əksinə yenidən qüvvə mərkəzindən sonsuzluğa uzaqlaşmasını ifadə edir (infiniit hərəkət).

Zərrəciyin kinetik enerjisinin həmişə müsbət olması ilə əlaqədar, mənfi enerjilər oblastında ($E < 0$) tam enerjinin mənfi qiymət alması, yalnız zərrəciyin mərkəzə cəzb olunması halında mümkündür. $r \rightarrow \infty$ limitində həllin sonlu olmasını təmin etmək üçün, $b_1 = 0$ olması zəruridir. Onda həllin yuxarıdakı ifadəsi aşağıdakı şəkildə olar:

$$R(r) = a_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r}. \quad (39.18)$$

Bu halda zərrəciyin qüvvə mərkəzindən sonsuz uzaq məsafədə olması ehtimalı

$$dW(r) = W(r) d\bar{r} \approx |R|^2 r^2 dr d\Omega = 4\pi |a_1 e^{-\lambda r}|^2 dr ,$$

sıfıra yaxınlaşır $W(r) \rightarrow 0$. Deməli, enerjinin mənfi qiymətlərində ($E < 0$) zərrəcik finit hərəkət edir. Bu hal, zərrəciyin klassik mexanikada qüvvə mərkəzi yaxınlığında hərəkətinə uyğundur.

39b. Radial tənliyinin $r \rightarrow 0$ limitində həlli

$r \rightarrow 0$ limitində, kiçik məsafələrdə (39.8) radial tənliyin həllinin xarakterini araşdıraraq. Qüvvə mərkəzi yaxınlığında qarşılıqlı-təsinin potensial enerjisinin zəif dəyişməsinə (yəni, $\lim_{r \rightarrow 0} u(r)r^2 = 0$) fərz edib və $\frac{2\mu E}{\hbar^2}$ kəmiyyətinin $\frac{l(l+1)}{r^2}$ həddinə nisbətən sonsuz kiçik olmasını nəzərə alsaq, (39.8) tənliyi aşağıdakı şəkllə düşər:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) = 0. \quad (39.19)$$

$u(r) = r^s$ şəklində həll axtarsaq, xarakteristik tənlikdən

$$s(s-1) - l(l+1) = 0,$$

alarıq: $s = -l$, $s = l+1$.

$r \rightarrow 0$ limitində $R(r)$ funksiyasının qeyri-məhdud şəkildə artması ilə əlaqədar olaraq $s = -l$ qiymətindən imtina edirik.

Beləliklə, kiçik məsafələrdə $u(r) \approx r^{l+1}$ olduğu qənaətinə gəlirik. Onda dalğa funksiyasının radial hissəsi aşağıdakı şəkildə olar:

$$R(r) = ar^l. \quad (39.20)$$

(39.1) Şrödinger tənliyinin ümumi həllini, (39.4) dalğa funksiyalarının superpozisiyası kimi yaza bilərik:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} c_{lm} R_l(r) Y_l^m(\theta, \varphi).$$

φ azimut bucağından asılı olmayan həll daha sadə ($m=0$ olan halda) ifadəyə malik olur:

$$\psi(r, \theta) = \sum_l c_l R_l(r) P_l(\cos \theta).$$

40. Kulon sahəsində elektronun hərəkəti

Zərrəciyin atom nüvəsinin kulon sahəsində hərəkəti, kvant mexanikasının fundamental problemlərindən biri olan, elektronun mərkəzi simmetrik sahədə hərəkətinin xüsusi halı sayılır. Belə atom sisteminə misal kimi, hidrogen atomunu göstərmək olar. Nüvənin və elektronun hərəkəti məsələsinə, μ gətirilən kütləli bir zərrəciyin digər zərrəciyin kulon sahəsindəki hərəkəti kimi baxılır, yəni nüvəni sonsuz ağır sayaraq, onu tərpənməz kulon mərkəzi ilə əvəz etmək olar (nüvənin kütləsinin sonlu olması halı, hidrogenəbənzər sistemləri öyrənəcəyimiz növbəti bölmədə nəzərə alınacaq). Əvvəlki mühazirədə (Bölmə 39) əldə etdiyimiz nəticələr, bu tip məsələlərin həllində də öz qüvvəsini saxlayaraq, Şrödinger tənliyinin analitik həllini tapmağa imkan yaradırlar ki, bu da öz növbəsində, atom sistemlərində ümumi kvantmexaniki qanunauyğunluqların ortaya çıxarılmasına səbəb olur.

Yükü eZ (e - protonun yükü, Z - periodik sistemdə nüvənin sıra nömrəsi) olan nüvənin sahəsində hərəkət edən elektronun potensial enerjisindən (Kulon potensialı)

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (40.1)$$

istifadə edərək (39.7) radial $R(r)$ dalğa funksiyası üçün Şrödinger tənliyini

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{r} \right] R = 0 \quad (40.2)$$

yazaq

Asanlıqla göstərmək olar ki, $E > 0$ olduqda, $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \bar{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{r}$

hamiltonianının spektri kəsilməz olub, elektronun sonsuzluqdan qüvvə mərkəzinə və əks istiqamətdə hərəkətinə (infinat hərəkət)

uyğun gələrək, elektron və nüvənin rabitəli halına uyğun olmasa belə, elektronun finit hərəkətinə uyğun olan enerjinin diskret qiymətlər aldığı hallarda enerjisi mənfi olur, $E < 0$. Qarşıda, məhz bu diskret spektrin və R məxsusi funksiyaların tapılması məsələsi durur.

Yeni uzunluq ölçüsünə malik aşağıdakı kəmiyyət

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad (40.3)$$

daxil edək (burada e elektronun yükü, μ gətirilmiş kütlə və $\hbar$ Plank sabitidir). $\mu = m_e$ olduqda yarımklassik nəzəriyyədə birinci Bor orbitinin radiusu alınır - $a = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ sm}$ və enerjinin atom vahidi (*ridberq*) müəyyənləşdirilir:

$$Ry = \hbar R = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 2,18 \cdot 10^{-11} \text{ erq} = 13,6 \text{ eV} . \quad (40.3a)$$

Burada Ry -şüalanmanın tezlik spektrinin ifadəsinə daxil olan *Ridberq sabitidir*. Bundan sonra enerji vahidi kimi

$$E_0 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a} \quad (40.4)$$

kəmiyyətindən istifadə olunacaq, kulon vahidlər sistemi (e , μ və a) daxil ediləcək. $\mu = m_e$ olduqda alırıq ki, $E_0 = 4,3 \cdot 10^{-11} \text{ erq} = 27,07 \text{ eV}$. (40.2) tənliyinə, ρ ölçüsüz dəyişəni və ε kəmiyyətini daxil etsək

$$\rho = \frac{r}{a}, \varepsilon = -\frac{E}{E_0} = -\frac{E}{e^2} a = -\frac{\hbar^2}{\mu e^4} E , \quad (40.5)$$

alarıq:

$$\frac{1}{a^2} \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho a^2} \frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{a^2 \rho^2} R + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{Ze^2}{a\rho} \frac{2\mu}{\hbar^2} \right] R = 0 .$$

Bu tənliyin hər iki tərəfini a^2 -a vurub, (40.3) ifadəsindən istifadə edək:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[\frac{\hbar^4}{\mu^2 e^4} \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \frac{Ze^2}{\rho} \frac{2\mu}{\hbar^2} \right] R = 0 ,$$

yaxud

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[2 \frac{\hbar^2}{\mu e^4} E - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} \right] R = 0 .$$

(40.5)-dəki $\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{\mu e^4} E$ əvəzləməsindən istifadə etsək, alarıq:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[-2\varepsilon - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} \right] R = 0 . \quad (40.6)$$

$\rho = \frac{r}{a}$, $a = \hbar^2 / \mu e^2$, əvəzləmələrindən istifadə etsək, radial

Şrödinger tənliyinin ümumi həllinin mənfi enerjidəki ($E < 0$) (39.18) ifadəsindən alarıq:

$$R(r) \approx \frac{e^{-\lambda r}}{r} = e^{-\sqrt{2\varepsilon} \rho} .$$

Bu həllə əsasən, (40.6) tənliyinin həllini aşağıdakı şəkildə axtaraq:

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\beta \rho} v(\rho), \quad \beta = \sqrt{2\varepsilon} . \quad (40.7)$$

Aşağıdakı

$$\begin{aligned} \frac{dR}{d\rho} &= \frac{d}{d\rho} \rho^l e^{-\beta \rho} v(\rho) = \\ &= \rho^l e^{-\beta \rho} \frac{dv(\rho)}{d\rho} - \beta \rho^l e^{-\beta \rho} v(\rho) + l \rho^{l-1} e^{-\beta \rho} v(\rho) = \\ &= \rho^l e^{-\beta \rho} \left[\frac{d}{d\rho} - \beta + \frac{l}{\rho} \right] v(\rho), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 R}{d\rho^2} &= \frac{d}{d\rho} \frac{dR}{d\rho} = \\
&= \frac{d}{d\rho} \left[\rho^l e^{-\beta\rho} \frac{dv(\rho)}{d\rho} - \beta\rho^l e^{-\beta\rho} v(\rho) + l\rho^{l-1} e^{-\beta\rho} v(\rho) \right] = \\
&= \rho^l e^{-\beta\rho} \frac{d^2 v(\rho)}{d\rho^2} - \beta\rho^l e^{-\beta\rho} \frac{dv(\rho)}{d\rho} + l\rho^{l-1} e^{-\beta\rho} \frac{dv(\rho)}{d\rho} - \\
&- \beta\rho^l e^{-\beta\rho} \frac{dv(\rho)}{d\rho} + \beta^2 \rho^l e^{-\beta\rho} v(\rho) - \beta l \rho^{l-1} e^{-\beta\rho} v(\rho) + \\
&+ l\rho^{l-1} e^{-\beta\rho} \frac{dv(\rho)}{d\rho} - \beta l \rho^{l-1} e^{-\beta\rho} v(\rho) + l(l-1)\rho^{l-2} e^{-\beta\rho} v(\rho) = \\
&= \rho^{l-1} e^{-\beta\rho} \left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} - \beta\rho \frac{d}{d\rho} + l \frac{d}{d\rho} - \beta\rho \frac{d}{d\rho} + \beta^2 \rho - \beta l + l \frac{d}{d\rho} - \right. \\
&\left. - \beta l + \frac{l(l-1)}{\rho} \right] v(\rho) = \rho^{l-1} e^{-\beta\rho} \cdot
\end{aligned}$$

$$\cdot \left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\beta\rho \frac{d}{d\rho} + 2l \frac{d}{d\rho} + \beta^2 \rho - 2\beta l + \frac{l(l-1)}{\rho} \right] v(\rho),$$

törəmələri (40.6) tənliyində istifadə edib, $\beta^2 = 2\varepsilon$ olduğunu nəzərə almaqla, $\frac{d}{d\rho}$ diferensialını tərtibləri üzrə qruplaşma aparsaq, bəzi sadələşdirmələrdən sonra alarıq:

$$\begin{aligned}
&\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2 \frac{dv}{d\rho} [-\beta\rho + l + 1] + \\
&+ 2v \left[-\beta l + \frac{l(l-1)}{2\rho} - \frac{l}{\rho} - \frac{l(l+1)}{2\rho} - \beta + Z \right] = 0,
\end{aligned}$$

və ya

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2 \frac{dv}{d\rho} [l - \beta\rho + 1] + 2v[Z - \beta - \beta l] = 0. \quad (40.8)$$

Daha sonra bir yeni

$$\xi = 2\beta\rho \quad (40.9)$$

dəyişəni daxil etsək, alırıq:

$$2\beta\xi \frac{d^2 v(\xi)}{d\xi^2} + 4\beta \frac{dv(\xi)}{d\xi} \left[l + 1 - \beta \frac{\xi}{2\beta} \right] + 2v(\xi)[Z - \beta - \beta l] = 0,$$

yaxud

$$\xi v' + v' [2l + 2 - \xi] + v \left[-1 - l + \frac{Z}{\beta} \right] = 0, \quad (40.10)$$

Son addım olaraq, qarşımızda bu tənliyin həlli problemi durur.

(40.10) tənliyinin həllini aşağıdakı şəkildə axtaraq:

$$v(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k. \quad (40.11)$$

Bu ifadə ilə, $\rho \rightarrow 0$ limitində R -in düzgün asimptotikasını müəyyən etmək üçün, $a_0 \neq 0$ olduğunu qəbul edib, aşağıdakı törəmələri nəzərə alsaq,

$$v'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k \xi^{k-1}, \quad v''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) \xi^{k-2},$$

növbəti tənliyə gələrik:

$$\xi \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) \xi^{k-2} + [2l + 2 - \xi] \sum_{k=0}^{\infty} a_k k \xi^{k-1} + \left[\frac{Z}{\beta} - l - 1 \right] \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0,$$

və ya

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k [k(k-1) + k(2l+2)] \xi^{k-1} + \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \left[\frac{Z}{\beta} - l - 1 - k \right] = 0.$$

Birinci sırada indeksləri dəyişərək, $k \rightarrow k+1$,

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} [k(k+1) + (k+1)(2l+2)] \xi^k = - \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \left[\frac{Z}{\beta} - l - 1 - k \right] \quad (40.12)$$

sıranın vuruqları üçün aşağıdakı rekurent düsturu alırıq:

$$a_{k+1} = \frac{k+l+1-\frac{Z}{\beta}}{(k+1)(2l+2+k)} a_k. \quad (40.13)$$

Dalamber əlamətinə görə, bütün ρ dəyişənləri üçün sıra yığılan olur: $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+1}}{a_k} = 0$

a_k əmsalları (40.13) düsturunu ödəyən, (40.11) ifadəsi ilə müəyyən olunan v funksiyası, aşağıdakı cırılmış hipergeometrik funksiya ilə müəyyən oluna bilər:

$$v = A \cdot F\left(1+l-\frac{Z}{\beta}, 2l+2, \xi\right). \quad (40.14)$$

$\xi \rightarrow \infty$ limitində (40.11) sırasının, üstlü funksiya (e^ξ) kimi dağılması, qüvvə mərkəzindən böyük məsafələrdə, dalğa funksiyasının üzərinə qoyulan sonluluq şərti ilə ziddiyyət təşkil edir. Dalğa funksiyası üzərinə qoyulan standart şərtləri ödəməklə yanaşı, (40.10) tənliyinin həlli olan funksiyanı müəyyən etmək üçün, ossilyator məsələsində olduğu kimi, sıranın müəyyən bir həddə üzülməsi, yəni polinoma gətirilməsi tələb olunur. Əgər, $k = n_r$ qiymətində a_{n_r+1} əmsalı sıfıra yönəliрсə, (40.13)-ə əsasən, sonrakı a_{n_r+2} , a_{n_r+3} və i.ə., əmsallar da sıfıra yönəlir. Bu halda, sonsuz sıra n_r dərəcəli polinoma gətirilir. ξ -nin böyük qiymətlərində, $v(\xi)$, üstlü funksiya qanunu ilə böyüməyə başlayacaq. Bununla əlaqədar (40.7) dalğa funksiyası, eksponensial vuruq hesabına, sonsuzluqda sıfıra yönəlir. $\xi \rightarrow 0$ olduqda isə $v(\xi)$ polinomu a_0 kəmiyyətinə yaxınlaşır. Həmçinin, (40.7) dalğa funksiyası da, ya sıfıra yönəlir, ya da ki, sabitə çevrilir. Yəni, standart şərtlər tam ödənilir.

Sıranın a_{n_r+1} əmsalının, (40.13) rekurent düsturunda sıfıra çevrilməsi üçün, aşağıdakı ifadənin də sıfır olması

$$n_r + l + 1 - \frac{Z}{\beta} = 0 \quad (40.15)$$

tələb olunur.

n_r -in sıfır da daxil olmaqla tam qiymətləri həmçinin də $n_r + l + 1$ -in də tam qiymətlər alması ortaya çıxır. Burada, n_r - *radial kvant ədədidir*. $n = n_r + l + 1$ *baş kvant ədədi* adlanır. l *azimut kvant ədədinin* fiksə olunmuş qiymətlərində alırıq:

$$n \geq l + 1.$$

(40.15) müəyyənliyi sistemin enerji səviyyələrinin yerini göstərir. $\beta = \sqrt{2\varepsilon}$ ifadəsini nəzərə alaraq, (40.15) düsturundan

$$(n - \frac{Z}{\beta} = 0) \text{ alırıq ki,}$$

$$\sqrt{2\varepsilon} = \frac{Z}{n},$$

yaxud,

$$\varepsilon = \frac{Z^2}{2n^2}. \quad (40.16)$$

Atom vahidlərindən adi (40.5), $\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{\mu e^4} E$ dəyişənlərə keçərək,

alırıq:

$$E_n = -\varepsilon \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} eV. \quad (40.17)$$

Bu ifadə, N. Bor tərəfindən, kvant mexanikasının yaranmasından da qabaq alınmış düsturla uyğunluq təşkil edərək, hidrogen atomu və hidrogenəbənzər ionların diskret enerji səviyyələrini müəyyən edir. Enerji səviyyələri, yalnız n baş kvant ədədindən asılıdır. Xüsusi halda, $n=1$ qiymətinə, kulon sahəsində zərrəciyin ən aşağı enerji səviyyəsi (*əsas hal*) uyğun gəlir. n -nin artması ilə səviyyələr arasındakı məsafə azalaraq ($\Delta E \rightarrow 0$) bir-birini örtürlər. Yəni, diskret spektr kəsilməz spektr ilə əvəz olunur.

(40.9), $\xi - 2\beta\rho$ düsturuna uyğun olaraq, (40.7) funksiyası və radial Şrödinger tənliyinin mənfi enerjilərdə $E < 0$ (39.18)

ümumi həllinə, $R(r) \approx \frac{e^{-\lambda r}}{r} = \frac{e^{-\sqrt{2\varepsilon}\rho}}{\rho a} \approx e^{-\frac{\xi}{2}}$, əsasən, R_{nl} radial

funksiyası üçün alırıq:

$$R_{nl}(\xi) = \text{const} \cdot e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l v(\xi). \quad (40.18)$$

Əmsalları (40.13) rekurent düsturla müəyyən olunan, $v(\xi)$ funksiyası, aşağıdakı Laqer çoxhədlilərinin törəmələri

$$L_n(\xi) = e^\xi \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi} \xi^n), \quad (40.19)$$

vasitəsilə təyin edilən, ümumiləşmiş Laqer $L_{n+l}^{2l+1}(\xi)$ polinomu ilə verilir.

Beləliklə, radial funksiya, aşağıdakı şəkli alır:

$$R_{nl}(\xi) = A_{nl} e^{-\frac{1}{2}\xi} \xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi). \quad (40.20)$$

$L_n^m(\xi)$, aşağıdakı çoxhədlini göstərir,

$$L_n^m(\xi) = \frac{d^m}{d\xi^m} L_n(\xi). \quad (40.21)$$

(40.20) ifadəsindəki A_{nl} vuruğu, R_{nl} funksiyasının vahidə normallaşması şərtindən tapılır:

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 dr = 1.$$

Aşağıdakı məlum inteqraldan

$$\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

istifadə edərək alırıq:

$$A_{nl} = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}} \left(\frac{2Z}{na} \right)^{3/2}.$$

n və l kvant ədədlərinə uyğun radial $R_{nl}(\rho)$ funksiya üçün alırıq:

$$R_{10} = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a^3}}e^{-Z\rho}. \quad (40.22)$$

Burada (40.3), (40.5) və (40.9) düsturları əsasında, ξ -nin əvəzinə, yenidən ρ dəyişənləri daxil edilib.

$\psi(r, \theta, \varphi)$ tam dalğa funksiyası, öz fiziki məzmununa görə, R_{nl} radial funksiyasının, hərəkət miqdarı momenti kvadratının məxsusi funksiyasına hasilindən ibarət olur:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

E_n enerisi, (40.17) düsturuna əsasən, yalnız n baş kvant ədədindən asılıdır. Əgər, bu ədəd verilibsə, onda (40.16) ifadəsindən çıxır ki, l orbital kvant ədədi aşağıdakı qiymətləri alar:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (n_r = n-1, n-2, \dots, 0).$$

l -in verilmiş qiymətlərində, m maqnit kvant ədədi aşağıdakı qiymətləri alar:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Hər bir l -ə uyğun m ədədi ilə fərqlənən $2l+1$ funksiya uyğun gəlir. l -in 0-dan $n-1$ -ə qədər qiymətlər ala bilməsi səbəbindən, dalğa funksiyalarının tam sayı aşağıdakı kimidir:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$

Yəni, hər bir E_n kvant səviyyəsinə, n^2 sayda müxtəlif hallar uyğundur. Başqa sözlə, n^2 -qat kulon cırılması halı mövcuddur.

41. Hidrogen atomu

Nüvənin hərəkətini nəzərə almadan, hidrogen atomunu ($Z=1$) daha ətraflı öyrənək. Enerji səviyyələri (40.17) formulu ilə müəyyən edilir. $E_1 = -Ry = 13,6\text{eV}$ əsas halın enerjisidir.

$I = |E_1|$ isə hidrogen atomunun ionlaşma potensialıdır. Bu potensial, elektronun atomdakı rabitə enerjisinə bərabər olub,

elektronu atomdan qoparmaq üçün görülmək iş ilə müəyyən olunur. Nisbilik nəzəriyyəsi əsasında, elektronun kvant mexanikası və elektromaqnit sahəsinin birləşməsinə ifadə edən kvant elektrodinamikası, Borun spektral xəttlərin tezlik ilə əlaqəsi hipotezini, $\hbar\omega = E_m - E_n$, təsdiq edir. $\frac{E_n}{\hbar}$ kəmiyyəti, spektral term adlanır. Spektral termlərin fərqi, atomun şüalandırdığı elektromaqnit dalğalarının tezliyini göstərir. (40.17), $E_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}$ ifadəsini yuxarıdakı spektral termlərin fərqi düsturunda, ($\hbar\omega = E_m - E_n$) istifadə etsək, məşhur Balmer düsturunu alırıq:

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = RZ^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad m > n. \quad (41.1)$$

Burada, R - Ridberq sabitidir (bax (40.3a)).

n baş kvant ədədini fiksə edib, m kvant ədədini dəyişsək, müxtəlif spektral seriyaları alırıq. Beləliklə, əgər (41.1) formulunda $n=1$ götürsək, Layman seriyasını (spektrin ultrabənövşəyi hissəsi) alırıq. $n=2$ - Balmer seriyasıdır (ilk dörd xətt spektrin görünən hissəsinə düşür). $n=3$ -Paşen seriyasıdır (spektrin infraqırmızı hissəsidir). Hidrogenəbənzər ionlar üçün, tezliklərin Z^2 dəfə böyüdüklərinə səbəb, uyğun spektral xətlər, daha qısa dalğa uzunluqları oblastına tərəf sürüşürlər.

Atomun vacib xarakteristikası kimi, stasionar hallar arası keçidlərin w_{nm} ehtimalı, uyğun spektral xətlərin intensivliyini, yəni ω_{nm} tezliyində W_{nm} şüalanma gücünü müəyyən edir. $\tau_{nm} = 1/\omega_{nm}$ kəmiyyəti isə E_n enerji səviyyəsində, $n \rightarrow n'$ keçidlərinə nəzərən, elektronun orta yaşama müddəti, yaxud $W_{nm} = \hbar\omega_{nm}w_{nm}$ gücündə olan və $\hbar\omega_{nm}$ qədər enerjiyə malik fotonun buraxılması üçün lazım olan zaman intervalı mənasını daşıyır.

Hidrogen atomunun əsas halı ψ_{100} , $n=1, l=0$, və $m=0$ kvant ədədləri ilə təyin olunur. Burdan çıxır ki, dalğa

funksiyasının bucaq hissəsi $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ sabitinə bərabər olur (bax bölmə 22-yə), yəni sferik-simmetrik şəkllə malikdir. Əsas halda $\psi_{100} = R_{10}Y_{00}$ olan elektronun nüvədən məlum məsafədə yerləşməsi ehtimalı aşağıdakı düsturla verilir:

$$dW_{10} = |\psi_{100}|^2 4\pi r^2 dr.$$

Dalğa funksiyasının radial hissəsi ($R_{10} = 2\sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} e^{-Z\rho}$) üçün (40.22) düsturundan alınır ki, $n_r = n - l - 1 = 0$. Beləliklə, ehtimalın aşkar şəklini alırıq:

$$W_{10} = \frac{4}{a_B^3} e^{-\frac{2r}{a_B}} r^2,$$

yəni r -dən asılı olaraq kiçilməsinə baxmayaraq, ehtimal bütün fəzada sıfırdan fərqli olur. $\frac{dw}{dr} = 0$ şərti ilə müəyyən olunan ehtimal öz maksimumuna $r = r_m$ məsafəsində çatır. Beləliklə, birinci Bor orbiti üçün alırıq ki,

$$r = a_B.$$

Bu, elektronun ən böyük ehtimalla aşkar oluna biləcəyi, nüvəyə qədər olan məsafədir.

$r_m \gg a_B$ məsafəsində, $w(r)$ ehtimal sıxlığı eksponensial qaqnunla azaldığından, hidrogen atomunun ölçüsü $a_B \approx 10^{-8} \text{ sm}$ tərtibindədir.

Koordinatlara görə paylanmanın sferik-simmetrik olduğu əsas haldan $l = 0$ fərqli olaraq, həyacanlaşmış halda $l \neq 0$, ehtimal aşağıdakı kimidir:

$$w(\theta, \varphi) \equiv |Y_l^m|^2 \approx (P_l^m(\cos \theta))^2.$$

Qeyd etməliyik ki, bəzi sferik funksiyaların (Y_l^m) aşkar şəklindən də görüldüyü kimi, ehtimalın bucağa görə paylanması, bütün sferik-simmetrik potensiallar üçün eynidir. l orbital ədədinə

görə, enerji səviyyələrinin cırlaşması, yalnız $\frac{1}{r}$ kulon potensialı və üçölçülü ossilyator potensialı r^2 üçün xarakterikdir. V.A. Fokun (1935) apardığı hesablamalara görə, Kulon sahəsindəki mümkün təsadüfi cırlaşmalar əlavə hərəkət inteqralına gətirir:

$$\hat{\vec{A}} = \frac{\vec{r}}{r} + \frac{1}{2ma} \left(\hat{\vec{L}} \times \vec{p} - \vec{p} \times \hat{\vec{L}} \right),$$

$\left[\hat{\vec{A}}, \hat{L}^2 \right] \neq 0$. Müşahidə olunan $\hat{\vec{A}}$ kəmiyyəti, klassik mexanikadakı Runge-Lens vektoruna (ekssentrisitet vektoru) analoqdur.

41a. Nüvənin hərəkəti nəzərə alınan halda hidrogen atomu və birqat ionlaşmış helium nüvəsinin spektral seriyası

Nüvənin real kütləsini m_n nəzərə almaqla, iki zərrəcikli sistemin (elektron və nüvə) hamiltonianını yazaq:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_n} + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|). \quad (41.2)$$

Nisbi radius-vektoru

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

və kütlə mərkəzinin radius-vektorunu

$$\vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_1 + m_n \vec{r}_2}{m_e + m_n},$$

müəyyən edib, impuls operatorları daxil etsək,

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla}_r, \hat{\vec{P}} = -i\hbar \vec{\nabla}_R$$

aşağıdakı

$$\frac{\partial}{\partial x_k} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial x_k} \cdot \vec{\nabla}_r + \frac{\partial \vec{R}}{\partial x_k} \cdot \vec{\nabla}_R$$

diferensiala əsasən, yeni terminlərdə hamiltonianı qurmuş olarıq:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{\hat{P}^2}{2M} + U(r). \quad (41.3)$$

Burada, $\mu = \frac{m_e m_n}{m_e + m_n} = m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_n}\right)$ gətirilmiş kütlə,

$M = m_e + m_n$ – atomun tam kütləsidir.

(41.3) hamiltonianının Ψ məxsusi funksiyasını, $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ kommutativliyinə görə, kütlə mərkəzinin $\vec{P}$ impulsu

ilə hərəkətini ifadə edən $e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{R}}$ eksponensial funksiyası və nisbi hərəkətin ψ dalğa funksiyasının hasili kimi yazmaq olar:

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}) = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{R}} \psi(r).$$

Bu ifadə kütlə mərkəzi sistemində ($\vec{P} = 0$) bir zərrəcik məsələsinə - μ gətirilmiş kütləli zərrəciyin sükunətdə olan kulon mərkəzində hərəkətinə gətirilir:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + U(r) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}).$$

Nüvənin sonsuz kütləyə malik olması fərz edilən halda, enerji spektri, Ridberq sabitinin aşağıdakı əvəzlənməsi ilə müəyyən olunur:

$$R \equiv R_\infty = \frac{m_e e^4}{2\hbar^3} \rightarrow R_{m_n} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^3} \cong R_\infty \left(1 - \frac{m_e}{m_n}\right) \quad (41.4)$$

Nüvənin hərəkətinin nəzərə alındığı halda, hidrogenəbənzər atomun şüalanması spektri, (41.1) və (41.4) ifadələrinə əsasən, aşağıdakı düsturla verilir:

$$\omega = Z^2 R_\infty \left(1 - \frac{m_e}{m_n}\right) \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

(tezliyin Z^2 dəfə artması ilə əlaqədar olaraq, hidrogenəbənzər ionlar üçün uyğun spektral xəttlər, daha qısa dalğalar oblastına sürüşürlər). Sonuncu düsturdan Balmer seriyası ($n = 2$) üçün alırıq:

$$\omega_{2m} = R_{\infty}(1-\delta)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2}\right),$$

$\delta = \frac{m_e}{m_n}$. Nüvənin nuklon strukturunun müxtəlifliyinə əsasən,

hidrogenin izotoplarının şüalanma spektrinə edilən düzəlişlər də müxtəlif olmalıdırlar, yəni bu izotopların uyğun spektral xəttləri bir-birinə nisbətən müəyyən faza qədər yerlərini dəyişmiş olurlar:

hidrogen $H(p)$ üçün - $\delta_H = 1/1840$; deuterium $D=^2_1H(pn)$ üçün - $\delta_D = 1/1840$; tritium $T=^3_1H(pnn)$ üçün - $\delta_T = 1/5520$.

Spektroskopik metod ilə izotopların təbii qarışığında, təbii suda hidrogen izotoplarının nisbi konsentrasiyasını tapmaq olur:

$$D/H = 1/6800 \text{ və } T/H \approx 10^{-18}.$$

Günəşin şüalanma spektrinin Pikering seriyasını,

$$\omega_{2nl} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_l^2} \right), \text{ da asanlıqla izah etmək olur: } n_l \text{ kvant ədədi,}$$

hidrogen üçün qadağan olunmuş sayılan, həm tam, həm də yarım tam qiymətlər alır $n_l = 5/2, 3, 7/2, 4, 9/2, \dots$. Spektroskopik ölçmələr

$$R_H = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{1840} \right) \rightarrow R_{He} = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{7360} \right)$$

əvəzləməsi ilə düzəliş etməyə imkan verir. $n_l = n/2$ olduğunu qəbul edərək, hidrogenəbənzər ion olan, birqat ionlaşmış helium atomunun $^4_2He^+(ppnn)$ spektral xətti üçün düstur alınır:

$$\omega_{4n}^{He} = 4R_{He} \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 5, 6, 7, \dots, .$$

Əlavə A

Heyzenberq bərabərsizliyinin riyazi əsaslandırılması

Əgər iki F və R fiziki kəmiyyətlərini eyni zaman anında ölçmək mümkün deyilsə, onda $\hat{F}$ və $\hat{R}$ operatorları kommutasiya etmirlər, yəni aşağıdakı münasibəti doğrudur:

$$\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F} = i\hat{B}. \quad (\text{A1})$$

Burada $\hat{B}$ ixtiyari ermit operatorudur.

Aşağıdakı integrala baxaq:

$$J(\alpha) = \int |(\alpha \hat{F} - i\hat{R})\psi|^2 dV = \int (\alpha \hat{F} - i\hat{R})\psi \cdot (\alpha \hat{F}^* + i\hat{R}^*)\psi^* dV. \quad (\text{A2})$$

Burada ψ -dalğa funksiyasıdır, α isə ixtiyari həqiqi parametrdir. Fərz edək ki, (A2) integralı müsbət qiymət alır: $J(\alpha) \geq 0$. $\hat{F}$ və $\hat{R}$ operatorlarının ermitlik şərtindən alırıq:

$$\begin{aligned} J(\alpha) &= \int \psi^* (\alpha \hat{F} + i\hat{R}) (\alpha \hat{F} - i\hat{R}) \psi dV = \\ &= \int \psi^* (\alpha^2 \hat{F}^2 - i\alpha \hat{F}\hat{R} + i\alpha \hat{R}\hat{F} + \hat{R}^2) \psi dV = \\ &= \int \psi^* (\alpha^2 \hat{F}^2 - i\alpha (\hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F}) + \hat{R}^2) \psi dV. \end{aligned}$$

(A.1)-ə əsasən əldə edirik ki,

$$\begin{aligned} J(\alpha) &= \int \psi^* (\alpha^2 \hat{F}^2 + \alpha \hat{B} + \hat{R}^2) \psi dV = \\ &= \alpha^2 \int \psi^* \hat{F}^2 \psi dV + \alpha \int \psi^* \hat{B} \psi dV + \int \psi^* \hat{R}^2 \psi dV. \end{aligned}$$

Orta qiymət düsturuna, $\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi dV$ görə alırıq,

$$J(\alpha) = \alpha^2 \overline{F^2} + \alpha \overline{B} + \overline{R^2}.$$

Orta kvadratik kənarə çıxmanı müəyyən edək:

$$\begin{aligned} \overline{\Delta F^2} &= \overline{(F - \bar{F})^2} = \overline{F^2} + \overline{(\bar{F})^2} - 2\overline{F\bar{F}} = \overline{F^2} + \overline{\bar{F}^2} - 2\overline{F\bar{F}} = \\ &= \overline{F^2} + \overline{\bar{F}\bar{F}} - 2\overline{F\bar{F}} = \overline{F^2} + \overline{\bar{F}^2} - 2\overline{F\bar{F}} = \overline{F^2} + \overline{\bar{F}^2} - 2\overline{F\bar{F}} = \\ &= \overline{F^2} - \overline{\bar{F}^2}, \end{aligned}$$

$$\overline{\Delta R^2} = \overline{R^2} - \overline{\bar{R}^2}$$

Ümumiliyi pozmadan, $\overline{F} = 0$ və $\overline{R} = 0$ olduğunu qəbul edə bilərik. Onda $\overline{\Delta R^2} = \overline{R^2}$, və uyğun olaraq alırıq ki,

$$J(\alpha) = \alpha^2 \overline{\Delta F^2} + \alpha \overline{B} + \overline{\Delta R^2}.$$

α -ya görə kvadratik olan üçhəddli mənfəi olmadığından,

$$\alpha^2 \overline{\Delta F^2} + \alpha \overline{B} + \overline{\Delta R^2} \geq 0,$$

onda α üçün alınır:

$$\alpha = -\frac{b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a},$$

və yaxud,

$$4ac \geq b^2.$$

Yəni, aşağıdakı tənəsüb mövcuddur:

$$4\overline{\Delta F^2} \overline{\Delta R^2} \geq \overline{B^2},$$

yaxud,

$$\sqrt{\overline{\Delta F^2}} \cdot \sqrt{\overline{\Delta R^2}} \geq \frac{1}{2} |\overline{B}|. \quad (\text{A3})$$

Bu formul ΔF və ΔR xətalاری arasındaki münasibəti ifadə edir.

Xüsusi halda, $F = p_x$, $R = x$ olduqda, $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

ifadələrini nəzərə alaraq tapırıq:

$$iB = p_x x - x p_x = -i\hbar,$$

yaxud da

$$B = -\hbar.$$

Nəticədə alırıq ki,

$$\sqrt{\overline{\Delta p_x^2}} \cdot \sqrt{\overline{\Delta x^2}} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (\text{A4})$$

Yəni, (A3) qeyri müəyyənlik münasibəti ümumi xarakter daşıyır.

Kvant Puasson môtərizələri

Dirakın fərziyyəsinə görə, klassik mexanikada olduğu kimi, kvant mexanikasına da Puasson môtərizələri anlayışını daxil etmək olar. Beləliklə, əgər iki, F , R klassik kəmiyyət üçün aşağıdakı Puasson môtərizəsi mövcuddursa,

$$[F, R] = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial R}{\partial q_i} - \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial R}{\partial p_i} \right),$$

onda bu kəmiyyətlərə uyğun olan $\hat{F}$, $\hat{R}$ operatorları üçün $[\hat{F}, \hat{R}]$ kvant Puasson môtərizəsi mövcuddur.

Bu fərziyyəni aşağıdakı kimi əsaslandıraraq. Puasson môtərizəsi vasitəsilə klassik Hamilton tənliyi aşağıdakı şəkildə olur:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (A5)$$

Burada $q_1, q_2, \dots, q_n$ - ümumiləşmiş koordinatLAR və $p_1, p_2, \dots, p_n$ - ümumiləşmiş impulslardır.

Əgər F koordinat, impuls və zamanın hər-hansı bir funksiyasıdırsa,

$$F = F(q_1, q_2, \dots, q_n, p_1, p_2, \dots, p_n, t).$$

onda zamana görə tam törəmə aşağıdakı kimi olur:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right).$$

(A5) düsturundan istifadə edərək alırıq:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + [H, F].$$

Burada $[H, F]$ simvolu

$$[H, F] = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} \right)$$

ilə, H və F kəmiyyətlərinin Puasson môtərizəsi işarə edilmişdir. Daha sonra fərz edilir ki, kvant Puasson môtərizələrinin xassələri, dəqiqliklə klassik Puasson

mötərizələrinin xassələrinə uyğun olub, kvant mötərizələri üçün müəyyən ardıcılıq mövcuddur.

Kvant Puasson mötərizələrinin bəzi xassələrini göstərək:

$$\begin{aligned}
 [\hat{F}, \hat{R}] &= -[\hat{R}, \hat{F}] \\
 [\hat{F}, c] &= 0, \quad c \text{ -sabitdir,} \\
 [\hat{F}_1 + \hat{F}_2, \hat{R}] &= [\hat{F}_1, \hat{R}] + [\hat{F}_2, \hat{R}], \\
 [\hat{F}, \hat{R}_1 + \hat{R}_2] &= [\hat{F}, \hat{R}_1] + [\hat{F}, \hat{R}_2], \\
 [\hat{F}_1 \hat{F}_2, \hat{R}] &= [\hat{F}_1, \hat{R}] \hat{F}_2 + \hat{F}_1 [\hat{F}_2, \hat{R}], \\
 [\hat{F}, \hat{R}_1 \hat{R}_2] &= [\hat{F}, \hat{R}_1] \hat{R}_2 + \hat{R}_1 [\hat{F}, \hat{R}_2], \\
 [\hat{F}_1 [\hat{F}_2, \hat{F}_3]] + [\hat{F}_3 [\hat{F}_1, \hat{F}_2]] + [\hat{F}_2 [\hat{F}_3, \hat{F}_1]] &= 0.
 \end{aligned}$$

Əlavə B

Bəzi hesablamalar

Dekart koordinatlarından sferik koordinatlara keçid adı qaydada həyata keçirilir:

$$\begin{aligned}x, y, z &\rightarrow r, \theta, \varphi, \\x &= r \sin \theta \cos \varphi = \rho \cos \varphi, \\y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\z &= r \cos \theta, \\r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \\tg \varphi &= \frac{y}{x}, \cos \theta = \frac{z}{r},\end{aligned}$$

və

$$\cdot \varphi = \arctg \frac{y}{x}, \ar \cos \theta = \frac{z}{r}, \quad (\text{B1})$$

Ətraflı hesablamaları təqdim edək. Aşağıdakı törəmələri müəyyənləşdirək:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{2x}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{x}{r} = \frac{r \sin \theta \cos \varphi}{r} = \sin \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= -\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{z}{r}\right)^2}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{z}{r}\right) = -\frac{z}{\sqrt{1 - \cos^2 \theta}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}\right) = \\ &= -\frac{z}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left((x^2 + y^2 + z^2)^{-1/2}\right) = \\ &= -\frac{z}{\sin \theta} \left(-\frac{1}{2}\right) (x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2} \cdot 2x =\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{z \cdot x}{r^3 \sin \theta} = \frac{r \cos \theta \ r \sin \theta \cos \varphi}{r^3 \sin \theta} = \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}, \\
\frac{\partial \varphi}{\partial x} &= \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \cdot \left(\frac{y}{x}\right)'_x = \frac{x^2 y}{x^2 + y^2} \left(\frac{1}{x}\right)' = \frac{x^2 y}{x^2 + y^2} \left(-\frac{1}{x^2}\right) = \\
&= -\frac{y}{x^2 + y^2} = \frac{r \sin \theta \sin \varphi}{r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi} = \\
&= -\frac{r \sin \theta \sin \varphi}{r^2 \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi)} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta}
\end{aligned}$$

Nəticədə,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \\
&= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (B2)
\end{aligned}$$

$\frac{\partial}{\partial y}$ diferensialı analoji olaraq hesablanır:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \\
\frac{\partial r}{\partial y} &= \frac{y}{r} = \frac{r \sin \theta \sin \varphi}{r} = \sin \theta \sin \varphi, \\
\frac{\partial \theta}{\partial y} &= -\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{z}{r}\right)^2}} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) = \\
&= \frac{z \cdot y}{r^3 \sin \theta} = \frac{r \cos \theta \ r \sin \theta \sin \varphi}{r^3 \sin \theta} = \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi}{\partial x} &= \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \cdot \left(\frac{y}{x}\right)'_x = \frac{1}{\frac{x^2 + y^2}{x^2}} \frac{1}{x} = \frac{x}{x^2 + y^2} = \\ &= \frac{x}{x^2 + y^2} = \frac{r \sin \theta \cos \varphi}{r^2 \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi)} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta}\end{aligned}$$

Nætícadø,

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{B3})$$

vø

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial z},$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{2z}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{z}{r} = \frac{r \cos \theta}{r} = \cos \theta$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{z}{r}\right)^2}} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{z}{r}\right) = -\frac{r}{\sqrt{r^2 - z^2}} \frac{r - z r'_z}{r^2} = \\ &= -\frac{r}{\sqrt{r^2 - z^2}} \frac{r - z \frac{2z}{2r}}{r^2} = -\frac{r}{\sqrt{r^2 - z^2}} \frac{\frac{r^2 - z^2}{r}}{r^2} = \\ &= -\frac{r(r^2 - z^2)}{\sqrt{r^2 - z^2} r^3} = -\frac{\sqrt{r^2 - z^2}}{r^2} = -\frac{r \sqrt{1 - \cos^2 \theta}}{r^2} = -\frac{\sin \theta}{r}, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0.\end{aligned}$$

Nætícadø,

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}. \quad (\text{B4})$$

(B2)-(B4) törəmələrini $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ -in ifadələrində nəzərə alsaq tapırıq:

1)

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i\hbar \left(r \sin \theta \sin \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) - \\
 &\quad - r \cos \theta \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \\
 &= -i\hbar \left(r \sin \theta \sin \varphi \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \sin^2 \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - r \cos \theta \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \right. \\
 &\quad \left. - \cos^2 \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \\
 &= -i\hbar \left(-\sin \varphi (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) \frac{\partial}{\partial \theta} - \right. \\
 &\quad \left. - \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \hat{L}_x. \quad (B5)
 \end{aligned}$$

2)

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = \\
 &= -i\hbar \left(r \cos \theta \left(\sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - r \sin \theta \cos \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) = \\
 &= -i\hbar \left(r \cos \theta \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \sin \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sin^2 \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = \\
 &= -i\hbar \left(\cos \varphi (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \\
 &= -i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \hat{L}_y. \quad (B6)
 \end{aligned}$$

3)

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \\
&= -i\hbar \left(r \sin \theta \cos \varphi \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - r \sin \theta \sin \varphi \left(\sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \varphi \cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right) \right) = \\
&= -i\hbar \left(\frac{\sin \theta \cos^2 \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\sin \theta \sin^2 \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} = \hat{L}_z. \quad (B7)
\end{aligned}$$

Beləliklə, $\hat{L}^2$ operatorunun sferik koordinatlarda ifadəsini

$$\begin{aligned}
\text{yazarıq: } \hat{L}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}_x \hat{L}_x + \hat{L}_y \hat{L}_y + \hat{L}_z \hat{L}_z = \\
&= -\hbar^2 \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \times \\
&\quad \times \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi(\theta, \varphi) - \\
&\quad - \hbar^2 \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \times \\
&\quad \times \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi(\theta, \varphi) - \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} = \\
&= -\hbar^2 \left[\sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \psi_{\theta, \varphi} + \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \theta} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \cos^2 \varphi \frac{\partial^2 \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \theta^2} - \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\cos \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \theta} \right) + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial^2 \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi^2} \Bigg] = \\
& - \hbar^2 \left[(\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi) \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \psi_{\theta, \varphi} + \right. \\
& + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \left(\cos \theta \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \theta} + \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} \right) + \\
& + \operatorname{ctg}^2 \theta \cos \varphi \left(-\sin \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} + \cos \varphi \frac{\partial^2 \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi^2} \right) - \\
& - \cos \varphi \sin \varphi \left(-\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} \right) - \\
& - \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \left(-\sin \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \theta} + \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \theta} \right) + \\
& \left. + \operatorname{ctg}^2 \theta \sin \varphi \left(\cos \varphi \frac{\partial \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi} + \sin \varphi \frac{\partial^2 \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{\partial^2 \psi_{\theta, \varphi}}{\partial \varphi^2} \right] = \\
& = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi
\end{aligned}$$

Nəticədə alırıq:

$$\hat{\bar{L}}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \varphi}. \quad (\text{B8})$$

İndi isə hərəkət miqdarının kvadratı operatorunun məxsusi qiymət və məxsusi funksiyasını müəyyən edək. Uyğun tənliyi yazaq:

$$\hat{\bar{L}}^2 \psi = \bar{L}^2 \psi. \quad (\text{B9})$$

$\hat{\bar{L}}^2$ -nin sferik koordinatlardakı ifadəsindən istifadə etsək, aşağıdakı tənliyə gələrik:

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(\theta, \varphi) = \bar{L}^2 \psi(\theta, \varphi).$$

$\hat{L}^2$ operatorunun məxsusi funksiyaları üçün tənliyin həlli aşağıdakı kimidir:

$$\psi(\theta, \varphi) = \phi(\varphi)\Theta(\theta). \quad (\text{B10})$$

Daha sonra alarıq:

$$\phi(\varphi) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2} \Theta(\theta) \phi(\varphi) = 0. \quad (\text{B11})$$

$\hat{L}^2$ operatorunun məxsusi funksiyaları üçün tənlik, sferik funksiyalar üçün tənlik kimi ali riyaziyyat kursundan məlumdur. Tənliyin hər iki tərəfini $\frac{\sin^2 \theta}{\Theta(\theta)\phi(\varphi)}$ -ya vuraq və ikinci həddi

tənliyin sol tərəfinə keçirək:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \sin^2 \theta \frac{L^2}{\hbar^2} = - \frac{1}{\phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \phi(\varphi)}{\partial \varphi^2}. \quad (\text{B12})$$

Bu tənliyin sol tərəfi θ polyar bucağın funksiyası, sağ tərəfi isə φ azimut bucağının funksiyasıdır. Onda tənliyin hər iki tərəfini formal olaraq λ^2 sabitinə bərabər hesab edək. Nəticədə iki tənlik alarıq:

$$- \frac{1}{\phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = \lambda^2 \quad (\text{B13})$$

və (λ^2 sabitini maqnit kvant ədədi kimi təsəvvür edək)

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{L^2}{\hbar^2} \sin^2 \theta \cdot \Theta(\theta) = \lambda^2 \Theta(\theta). \quad (\text{B14})$$

(B13) tənliyini,

$$\frac{\partial^2 \phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \lambda^2 \phi(\varphi) = 0.$$

həll edək. Bu tənlik ikinci tərtib xətti diferensial tənlikdir:

$$\phi''(\varphi) + \lambda^2 \phi(\varphi) = 0. \quad (\text{B15})$$

Həlli aşağıdakı şəkildə axtaraq,

$$\phi(\varphi) = e^{k\varphi}, \quad (\text{B16})$$

k –sabitdir.

Onda,

$$\phi'(\varphi) = k e^{k\varphi}, \quad \phi''(\varphi) = k^2 e^{k\varphi}.$$

(B15) təniliyinə əsasən alarıq:

$$e^{k\varphi} (k^2 + \lambda^2) = 0.$$

$e^{k\varphi} \neq 0$ olduğundan xarakteristik tənliyi alarıq

$$k^2 + \lambda^2 = 0, \quad k = \pm i\lambda. \quad (\text{B17})$$

Onda (B15) tənliyinin həlli aşağıdakı şəkildə olar

$$\phi(\varphi) = c_1 e^{-i\lambda\varphi} + c_2 e^{i\lambda\varphi}.$$

Qərarlaşdıığımız kimi, $\lambda \equiv m$ maqnit kvant ədədini ifadə edərək diskret qiymətlər alır. Yuxarıdakıları ümumiləşdirərək, həlli aşağıdakı kimi yazaq,

$$\phi_m = c e^{im\varphi}.$$

Aşağıdakı normallaşma şərtindən

$$\int_0^{2\pi} \phi_{m'}^*(\varphi) \phi_b(\varphi) d\varphi = \delta_{m'm},$$

$m' = m$ olduğunu nəzərə alıb, integralı açsaq, alarıq ki,

$$2\pi c = 1, \quad c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Beləliklə Δ_φ operatorunun normallaşmış funksiyası aşağıdakı şəkllə malik olur:

$$\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (\text{B18})$$

Bu funksiya $\hat{L}_z, \hat{L}_x, \hat{L}_y$ operatorlarının məxsusi funksiyalarına uyğundur.

(B14) tənliyinin həlli. Tənliyin hər iki tərəfini $\sin^2 \theta$ -na bölək:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = 0.$$

Yeni, $z = \cos \theta$ dəyişəni daxil edərək alarıq,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta(z)}{\partial \theta} &= \frac{\partial z(\theta)}{\partial \theta} \frac{\partial \theta(z)}{\partial z} = -\sin \theta \frac{\partial \theta(z)}{\partial z}, \\
-\frac{\sin \theta}{\sin \theta} \frac{d}{dz} \left(-\sin^2 \theta \frac{d\theta(z)}{dz} \right) &+ \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) \theta(z) = 0, \\
\frac{d}{dz} \left((1-z^2) \frac{d\theta(z)}{dz} \right) &+ \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) \theta(z) = 0. \quad (B19)
\end{aligned}$$

$z = \pm 1$ qiymətlərində, $\frac{m^2}{1-z^2}$ tipli həddlərdə sinqulyarlıq yaranır.

Bu sinqulyarlığı yox etmək üçün (B19) tənliyinin həllini aşağıdakı kimi axtaraq,

$$\theta(z) = (1-z^2)^{\nu/2} u(z). \quad (B20)$$

(B19) tənliyini aşağıdakı şəkildə yazaq,

$$(1-z^2) \frac{d^2 \theta(z)}{dz^2} - 2z \frac{d\theta(z)}{dz} + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) \theta(z) = 0.$$

Daha sonra (B20)-ni tətbiq edək:

$$\begin{aligned}
(1-z^2) \left[\frac{d}{dz} \left[\frac{d}{dz} \left((1-z^2)^{\nu/2} u(z) \right) \right] \right] &- 2z \frac{d}{dz} \left((1-z^2)^{\nu/2} u(z) \right) + \\
&+ \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) (1-z^2)^{\nu/2} u(z) = 0,
\end{aligned}$$

və yaxud

$$\begin{aligned}
(1-z^2) \frac{d}{dz} \left[\left((1-z^2)^{\nu/2} u'(z) - \frac{\nu}{2} 2z(1-z^2)^{\nu/2-1} u(z) \right) \right] &- \\
- 2z \left((1-z^2)^{\nu/2} u'(z) \right) + 2z \frac{\nu}{2} 2z(1-z^2)^{\nu/2-1} u(z) &+ \\
+ \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) (1-z^2)^{\nu/2} u(z) &= 0, \\
(1-z^2) \frac{d}{dz} \left[\left((1-z^2)^{\nu/2} u'(z) - \frac{\nu}{2} 2z(1-z^2)^{\nu/2-1} u(z) \right) \right] &-
\end{aligned}$$

$$-2z(1-z^2)^{\nu/2}u'(z) + 2z\frac{\nu}{2}2z(1-z^2)^{\nu/2-1}u(z) + \\ + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) (1-z^2)^{\nu/2}u(z) = 0,$$

yaxud da ki,

$$(1-z^2) \left[(1-z^2)^{\nu/2}u''(z) - u'(z)\frac{\nu}{2}2z(1-z^2)^{\nu/2-1} - \right. \\ \left. - \nu(1-z^2)^{\nu/2-1}u(z) + \nu z 2z \left(\frac{\nu}{2} - 1 \right) (1-z^2)^{\nu/2-2}u(z) - \nu z (1-z^2)^{\nu/2-1}u'(z) \right] - \\ - 2z(1-z^2)^{\nu/2}u'(z) + \\ + 2\nu z^2(1-z^2)^{\nu/2-1}u(z) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) (1-z^2)^{\nu/2}u(z) = 0, \\ (1-z^2) \left[u''(z) - \nu z \frac{u'(z)}{1-z^2} - \nu \frac{u(z)}{1-z^2} + 2\nu z^2 \left(\frac{\nu}{2} - 1 \right) \frac{u(z)}{(1-z^2)^2} - \nu z \frac{u'(z)}{1-z^2} \right] + \\ + 2zu'(z) + 2\nu z^2 \frac{u(z)}{1-z^2} + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) u(z) = 0, \\ (1-z^2)u''(z) - \nu zu'(z) - \nu u(z) + 2\nu z^2 \left(\frac{\nu}{2} - 1 \right) \frac{u(z)}{1-z^2} - \nu zu'(z) - \\ - 2zu'(z) + 2\nu z^2 \frac{u(z)}{1-z^2} + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) u(z) = 0,$$

və ya

$$(1-z^2)u''(z) - 2z(1+\nu)u'(z) + \\ + \left[\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} - \nu + \frac{2\nu z^2 + \nu^2 z^2 - 2\nu z^2}{1-z^2} \right] u(z) = 0,$$

yaxud

$$(1-z^2)u''(z) - 2z(1+\nu)u'(z) + \left[\frac{L^2}{\hbar^2} - \nu + \frac{\nu^2 z^2 - m^2}{1-z^2} \right] u(z) = 0. \quad (\text{B21})$$

$\nu \geq m$ olduqda, bu tənliyin həllini aşağıdakı şəkildə axtaraq:

$$u(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k . \quad (\text{B22})$$

Aşağıdakı törəmələri müəyyən edək:

$$u'(z) = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k z^{k-1} ,$$

$$u''(z) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k z^{k-2} .$$

Onda (B21) tənliyi aşağıdakı şəkllə düşər:

$$\begin{aligned} & (1-z^2) \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k z^{k-2} - 2z(1+m) \sum_{k=0}^{\infty} k a_k z^{k-1} + \\ & + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - (1-z)m + \frac{m^2 z^2 - m^2}{1-z^2} \right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k = 0 , \\ & \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k z^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} k a_k z^{k-1} - 2 \sum_{k=0}^{\infty} k a_k z^k - 2m \sum_{k=0}^{\infty} k a_k z^{k-1} + \\ & + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{(1-z^2)(m+m^2)}{1-z^2} \right) \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k = 0 , \end{aligned}$$

$k=0,1$ qiymətlərində ifadə sıfıra çevrilir. Buna görə yeni vuruq, $k-2=k'$ daxil edək :

$$\begin{aligned} & \sum_{k=2}^{\infty} (k'+1)(k'+2) a_{k'+2} z^{k'} + \\ & + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - k(k-1) - 2k(m+1) - m(m+1) \right) a_k z^k = 0 , \end{aligned}$$

daha sonra, yernidən işarələməni dəyişək, $k' \rightarrow k$,

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)(k+2) z^k a_{k+2} + \\ & + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - m(m+1) - k^2 + k - 2km - 2k \right) a_k z^k = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -m(m+1) - k^2 - k - km - km = -m(m+1) - k(k+m) - k(1+m) = \\ & = -(m+1)(k+m) - k(k+m) = -(k+m)(k+m+1) \end{aligned}$$

Nəhayət alarıq,

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ (k+2)(k+1)a_{k+2} + \left[\frac{L^2}{\hbar^2 - (k+m)(k+m+1)} \right] a_k \right\} z^k = 0.$$

Beləliklə, a_k vuruqları üçün rekurent münasibət alırıq:

$$a_{k+2} = \frac{\frac{L^2}{\hbar^2} - (k+m)(k+m+1)}{(k+1)(k+2)} a_k. \quad (B23)$$

Dalğa funksiyasının sonluluq şərtinin ödənilməsi üçün, aşağıdakı sıranı

$$u(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k \quad (B24)$$

çoxhədli ilə əvəz edək. Bu məqsədlə sıranı $k = \rho$ həddi ilə məhdudlaşdıraraq, yəni sıranın vuruqlarını elə seçək ki, $k \leq \rho$, $a_k \neq 0$ və $k > \rho$, $a_k = 0$ ödənilsinlər. Bu şərtlərin ödənilməsi üçün (B23)-də surət $k = \rho$ olduqda sıfıra çevrilməlidir

$$\frac{L^2}{\hbar^2} - (\rho+m)(\rho+m+1) = 0, \quad (B25)$$

$$\rho = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$\rho + m = l$ əvəzləməsini aparmaqla, hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorunun məxsusi qiymətləri üçün alırıq,

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad (B26)$$

ρ və m müsbət tam ədədlər olduqlarından, l yalnız müsbət tam qiymətlər ala bilər $l = 0, 1, 2, \dots$. $\rho + m = l$ münasibətindən çıxır ki, l və m -n verilmiş qiymətlərində, hərəkət miqdarı momentinin kvadratı $2l+1$ sayda, $-l$ -dan $+l$ -ə qədər qiymət alır. Məlum olduğu kimi, m - maqnit kvant ədədi, l isə orbital, yaxud azimutal kvant ədədi adlanır.

$\hat{L}^2$ operatorunun məxsusi funksiyası

$$\theta(z) = (1 - z^2)^{\nu/2} u(z)$$

funksiyasını daxil edək.

$$\nu = m > 0 \quad \text{və} \quad \left(\lambda = \frac{L^2}{\hbar^2} \right) \text{ şərtləri daxilində } \nu = m \text{ əvəzləməsi}$$

aparmaqla (B21)-ə əsasən alarıq

$$(1 - z^2)u''(z) - 2z(m+1)u'(z) + \left(\lambda - m - m^2 + \frac{\nu^2 - m^2}{1 - z^2} \right)u(z) = 0.$$

Verilmiş tənliyə m -in kvadratının daxil olması səbəbindən, ν -nün verilmiş qiyməti üçün, $+m$ və $-m$ -ə eyni bir tənlik uyğun gəlir. Onda sonuncu həddi nəzərə almamaq olar,

$$(1 - z^2)u''(z) - 2z(m+1)u'(z) + (\lambda - m(m+1))u(z) = 0.$$

$\nu(z) = (z^2 - 1)^l$ funksiyasını daxil edərək, aşağıdakı birinci tərtib törəməni tərtib edərək,

$$\nu'(z) = 2zl(z^2 - 1)^{l-1},$$

yuxarıdakı tənliyin hər iki tərəfini $(1 - z^2)$ -ə vuraraq alarıq,

$$(1 - z^2)\nu'(z) + 2l z\nu(z) = 0.$$

Bu əməliyyatı $(l + m + 1)$ dəfə aparmaqla alarıq,

$$\left[(1 - z^2)\nu'(z) \right]^{l+m+1} + 2l [z\nu(z)]^{l+m+1} = 0. \quad (\text{B27})$$

Sonuncu ifadədəki törəmələri hesablamaq üçün Leybnis qaydasından istifadə edək. Bu qaydaya görə, y^z -ə görə n -ci tərtib törəmə aşağıdakı şəkildə hesablanır:

$$(y x)^n = y^{(n)} x + n y^{(n-1)} x' + \frac{n(n-1)}{2!} y^{(n-2)} x'' + \dots, \quad (\text{B28})$$

Burada $y = \nu'$, $x = (1 - z)^2$.

Bu formula görə (B28) tənliyindəki törəmələr aşağıdakı şəkildə olar,

$$\begin{aligned} (u\nu)' &= u'\nu + \nu'u, \\ (u\nu)'' &= (u'\nu + \nu'u)' = u''\nu + u'\nu' + u'\nu' + \nu''u = u''\nu + 2u'\nu' + \nu''u, \\ (u\nu)''' &= (u''\nu + 2u'\nu' + \nu''u)' = \\ &= u'''\nu + 2u''\nu' + u'\nu'' + u''\nu' + 2u'\nu'' + \nu'''u = \end{aligned}$$

$$= u'''v + 3u''v' + 3u'v'' + uv''' . \quad (B29)$$

Növbəti dəfə diferensiallıyaraq (diferensiallama $(a+b)^2$, $(a+b)^3$ -in diferensiallanması analoji qaydada aparılır, və i.a.:

$$(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2 ,$$

$$(a+b)^3 = a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3 ,$$

və i.a.

Görürük ki, (B29) ifadəsində, yuxarıdakı ifadədəki kimi vuruqlar yaranır. Beləliklə, ümumi halda, Leybnis vuruqları üçün düstur alınır

$$(uv)^n = \binom{n}{0} u^{(n)} v + \binom{n}{1} u^{(n-1)} v' + \binom{n}{2} u^{(n-2)} v'' + \dots + u v^{(n)} .$$

Burada, $\binom{n}{1}$, $\binom{n}{2}$ və i.a. - $(a+b)^n$ -nin sıraya ayrılması ilə müəyyən olunan,

$$\binom{a}{k} = (-1)^k \frac{(-a)_k}{k!} = \frac{a(a-1)\dots(a-k+1)}{k!} ,$$

binomial vuruqlardır. Buradan, həmçinin, (B28) ifadəsi də alınır. Doğrudan da, növbəti həddən sonra $(1-z^2)$ törəməsi sıfıra çevrildiyindən, bütün sıfırdan fərqli həddlər aşağıdakı kimi olur,

$$\begin{aligned} \left[v'(1-z^2) \right]^{(l+m+1)} &= (v')^{(l+m+1)} (1-z^2) + (l+m+1)(v')^{(l+m)} (-2z) + \\ &+ \frac{(l+m+1)(l+m)}{2!} (v')^{l+m-1} (-2) . \end{aligned} \quad (B30)$$

Analoji olaraq,

$$[vz]^{(l+m+1)} = v^{(l+m+1)} z + (l+m+1)v^{(l+m)} + \dots \quad (B31)$$

olur, və digər həddlər sıfıra çevrilirlər. (B30) , (B31) formullarını (B27)-də nəzərə alaq:

$$\begin{aligned} &(v')^{(l+m+1)} (1-z^2) - 2z(l+m+1)(v')^{(l+m+1)} - \\ &- (l+m+1)(l+m)(v')^{(l+m-1)} + \\ &+ 2l \left[v^{(l+m+1)} z + (l+m+1)v^{(l+m)} \right] = 0 . \end{aligned} \quad (B32)$$

Növbəti əvəzləməni aparmaqla,

$$u_l(z) = \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} v(z) = \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l,$$

alırıq:

$$\begin{aligned} & (1-z^2) \left(\frac{dv}{dz} \right)^{(l+m+1)} - 2z(l+m+1) \left(\frac{dv}{dz} \right)^{(l+m)} - \\ & - (l+m+1)(l+m) \left(\frac{dv}{dz} \right)^{(l+m-1)} + \\ & + 2l \left[\left(\frac{dv}{dz} \right)^{(l+m)} z + (l+m+1) \left(\frac{dv}{dz} \right)^{(l+m-1)} \right] = 0, \\ & (1-z^2) \left(\frac{d^2 v}{dz^2} \right)^{(l+m)} - 2z(l+m+1) \left(\frac{dv}{dz} \right)^{(l+m)} - (l+m+1)(l+m) v^{(l+m)} + \\ & + 2l \left[v^{(l+m)} z + (l+m+1) v^{(l+m)} \right] = 0, \end{aligned}$$

və ya,

$$\begin{aligned} & (1-z^2) \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} v'' - 2z(l+m+1) \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} v' - (l+m+1)(l+m) \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} v + \\ & + 2l z \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} v' + 2l(l+m+1) \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} v = 0, \\ & (1-z^2) u_l'' - 2l z u_l' - 2z(m+1) u_l' - (l+m+1) l u_l - (l+m+1) m u_l + \\ & + 2l z u_l' + 2l(l+m+1) u_l = 0, \end{aligned}$$

yaxud da,

$$(1-z^2) u_l'' - 2z(m+1) u_l' + (l+m+1)(l-m) u_l = 0. \quad (\text{B33})$$

$$\hat{L}^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad \lambda = \frac{L^2}{\hbar^2} = l(l+1) \text{ olduğundan}$$

$$\begin{aligned} & (l+m+1)(l-m) = \\ & = l(l+1) + ml - m(m+1) - m(m+1) - ml = l(l+1) - m(m+1), \end{aligned}$$

$u(z)$ üçün (B21) tənliyi $u_l(z)$ üçün (B33) tənliyi ilə üst-üstə düşür. Doğrudan da $u(z)$ və $u_l(z)$ funksiyaları yalnız sabit ilə fərqlənirlər:

$$u(z) = c' u_l(z) = c' \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l. \quad (\text{B34})$$

Əgər (B33)-də $m=0$ olduğunu qəbul etsək, onda alınmış tənlik, Lejandr polinomu üçün olan tənlik ilə üst-üstə düşər:

$$p_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l. \quad (\text{B35})$$

Həqiqətən, əgər, (B33)-də $m=0$ və $u_l(z) = p_l(z)$ olduğunu qəbul etsək, yuxarıdakı tənliyi alırıq:

$$(1 - z^2) p_l''(z) - 2z p_l'(z) + l(l+1) p_l(z) = 0.$$

(B34) və (B35)-i müqayisə etsək, alırıq,

$$u(z) = c \frac{d^m}{dz^m} p_l(z). \quad (\text{B36})$$

Burada, $c = c' 2^l l!$, $c' = \frac{c}{2^l l!}$.

Bu iddianın doğruluğunu yoxlayaq:

(B36)-nı (B20)-də nəzərə alsaq,

$$\theta(z) = (1 - z^2)^{v/2} u(z)$$

($v = m > 0$) aşağıdakı ifadələrə gələrik,

$$\theta_{lm}(z) = c_l^m (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dz^m} p_l(z),$$

$$u(z) = c' \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l = \frac{c'}{2^l l!} \left(\frac{d^l}{dz^l} \right)^{(m)} (z^2 - 1)^l.$$

$$p_l^m(z) = (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dz^m} p_l(z) \text{ polinomu ümumiləşmiş Lejandr}$$

polinomu adlanır.

(B36)-da $p_l(z)$ -ni $p_l^m(z)$ ilə əvəz etsək, alırıq,

$$p_l^m(z) = \frac{1}{2^l l!} (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l \quad (\text{B37})$$

($z = \cos\theta$).

Buradan hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorunun məxsusi qiyməti üçün alartıq,

$$\theta_l^m(\cos \theta) = c_l^m (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} \frac{(\cos^2 \theta - 1)}{2^l l!} = c_l^m p_l^m(\cos \theta). \quad (\text{B38})$$

c_l^m sabiti $\theta_l^m(\cos \theta)$ funksiyası üçün normallaşma şərtindən məqəyyən edilir:

$$\int_{-1}^1 \theta_l^{-m}(\cos \theta) \theta_l^m(\cos \theta) \sin \theta dz = 1 = \int_{-1}^1 \theta_l^{-m}(z) \theta_l^m(z) dz = 1. \quad (\text{B39})$$

Burada,

$$\begin{aligned} z &= \cos \theta, \\ z &= \pi, \quad \cos \theta = 1, \\ z &= 0, \quad \cos \theta = -1. \end{aligned}$$

$m < 0$ -ə uyğun məxsusi qiymətlər, aşağıdakı bərabərlikdən tapılır:

$$p_l^{-m}(z) = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} p_l^{+m}(z). \quad (\text{B40})$$

(B37) və (B40) bərabərliklərindən çıxır ki,

$$\begin{aligned} \theta_l^m(z) &= c_l^m p_l^m, \quad \theta_l^{-m} = c_l^{-m} p_l^{-m} \\ \theta_l^m(z) &= \frac{c_l^m}{2^l l!} (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l, \\ \theta_l^{-m} &= c_l^{-m} p_l^{-m} = c_l^{-m} (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} p_l^{+m}(z) = \\ &= c_l^{-m} (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{2^l l!} (1 - z^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{l-m}}{dz^{l-m}} (z^2 - 1)^l. \end{aligned}$$

Bu ifadələri (B39)-da nəzərə alsaq, normallaşma şərti aşağıdakı kimi yazılar:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \Theta_l^{-m} \Theta_l^m dz &= 1 = \int_{-1}^1 c_l^{-m} (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{2^l l!} (1 - z^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^{l-m}}{dz^{l-m}} (z^2 - 1)^l \times \\ &\times \frac{c_l^m}{2^l l!} (1 - z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l dz = 1, \end{aligned}$$

və yaxud,

$$\left| c_\ell^m \right|^2 \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \frac{(-1)^m}{(2^\ell \ell!)^2} \int_{-1}^1 \left[\frac{d^{\ell-m}}{dz^{\ell-m}} (z^2-1)^\ell \right] \left[\frac{d^{\ell+m}}{dz^{\ell+m}} (z^2-1)^\ell \right] dz = 1.$$

Hissə-hissə integrallama formulundan, $\int u dv = uv - \int v du$, istifadə edərək, $(\ell+m)$ dəfə integrallama aparaq (bu formuldakı birinci hədd sıfıra bərabərdir. Çünki, zərrəciyin ∞ -da olma ehtimalı sıfırdır). Aşağıdakı formullardan,

$$\frac{d^{2\ell}}{dz^{2\ell}} (z^2-1)^\ell = (2\ell)!,$$

$$du = 2! z \ell! \frac{d^{\ell-m+\ell+m}}{dz^{\ell-m+\ell+m}} (z^2-1)^{\ell-(\ell+m)},$$

$$\frac{d^{2\ell}}{dz^{2\ell}} (z^2-1)^\ell = (2\ell)!, \quad (\text{B41})$$

$$\int_{-1}^1 (1-z^2)^\ell dz = \frac{(\ell!)^2 2^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!}, \quad (\text{B42})$$

$$\left| c_l^m \right|^2 \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{(2l+1)} \frac{(2l)!(l!)^2 2^{2l+1}}{2^{2l} (l!)^2} = 1,$$

yaxud

$$\left| c_l^m \right|^2 \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{(2l)!}{(2l+1)!} 2 = 1,$$

istifadə etsək, $\left| c_l^m \right|^2 \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{(2^\ell \ell!)^2} \int_{-1}^1 (1-z^2)^l \frac{d^{2l}}{dz^{2l}} (z^2-1)^l dz = 1$ -dən

alırıq:

$$c_l^m = (-1)^k \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}. \quad (\text{B43})$$

Nəhayət ki, $k = m$; $m \geq 0$ və $k = 0$; $m < 0$ olduqda alırıq:

$$\theta_l^m(z) = c_l^m p_l^m = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} p_k^m(z).$$

Bu formulları istifadə edərək, hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorunun məxsusi funksiyası üçün alırıq:

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta) \phi(\varphi) .$$

Burada,

$$\phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} ,$$

$$\theta_l^m(\cos \theta) = c_l^m (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^l}{2^l l!} = c_l^m p_l^m(\cos \theta),$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} p_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} .$$

Məsələlər

1. Aşağıdakı mötərizələri açın:

1.1. $\left(\frac{d}{dx} + 1\right)^2$;

1.2. $\left(\frac{d}{dx} + x\right)^2$;

1.3. $\left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x}\right)^2$;

1.4. $\left(x \frac{d}{dx}\right)^2$;

1.5. $\left(\frac{d}{dx} x\right)^2$;

1.6. $[i\hbar\vec{\nabla} + A(\vec{r})]^2$;

1.7. $(\hat{L} - \hat{M})(\hat{L} + \hat{M})$;

2. Aşağıdakı operatorların kvadratını hesablayın:

2.1. $\hat{F} = \sin x + \frac{d}{dx}$: $\hat{F}^2 = ?$;

2.2. $\hat{F} = x^2 + \frac{d}{dx}$: $\hat{F}^2 = ?$

3. Aşağıdakı operatorların kommutatorunu hesablayın:

3.1. x və $\frac{d}{dx}$;

3.2. $i\hbar\vec{\nabla}$ və $A(\vec{r})$;

3.3. $\frac{\partial}{\partial \varphi}$ və $f(r, \vartheta, \varphi)$.

4. Aşağıdakı münasibətləri isbat edin:

4.1. $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$;

4.2. $[\hat{p}_x, x] = -i\hbar$;

4.3. $[x_i, x_k] = 0$, $(i, k = 1, 2, 3)$;

4.4. $[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0$, $(i, k = x, y, z)$

4.5. $[\hat{p}_i, x_k] = -i\hbar\delta_{ik}$, $(i, k = x, y, z)$.

5. Aşağıdakı funksiyaları bir-birinə çevirən translyasiya operatorlarını müəyyən edin:

- 5.1. $\psi(x)$ –i $\psi(x + a)$ -ya çevirən;
- 5.2. $\psi(x)$ –i $\psi(x + a)$ -ya çevirən.
6. Fəzanın α . bucağı qədər dönmə operatorunu hesablayın.
7. Aşağıdakı operatorlara ermit qoşma olan operatorları hesablayın:
- 7.1. $i \frac{\partial}{\partial y}$;;
- 7.2. Оператора Лапласа.
8. Aşağıdakı operatorlar üçün ermitlik şərtini yoxlayın:
- 8.1. $\frac{\partial}{\partial x}$;
- 8.2. $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$.
9. $e^{i\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}}$ operatoruna ermit qoşma olan operatoru hesablayın.
10. $\hat{A}$ və $\hat{B}$ operatorların hasili operatoruna ermit qoşma olan operatoru tapmalı.
11. Əgər $\hat{L}$ and $\hat{M}$ operatorları ermit operatorlardırlarsa, onda
- 11.1. $\hat{F} = \frac{1}{2} (\hat{L}\hat{M} + \hat{M}\hat{L})$
- və
- 11.2. $\hat{F} = \frac{i}{2} (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})$
- operatorlarının da ermit operatorlar olmasını isbat etməli.
12. Fiziki kəmiyyətin kvadratinin orta qiymətinin müsbət kəmiyyət olmasını isbat etməli.
13. $\hat{L}\hat{M}^2 - \hat{M}^2\hat{L}$, şərtini ödəyən $\hat{L}$ və $\hat{M}$ operatorları üçün $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 1$ -i müəyyən etməli.
14. $\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 1$ şərtini ödəyən $\hat{L}$ və $\hat{M}$ operatorları üçün $f(\hat{L})\hat{M} - \hat{M}f(\hat{L})$ -i müəyyən etməli.
15. $\hat{A}^{-1}$ operatorunun mövcud olması şərtilə, ixtiyari kommutasiya etməyən $\hat{A}$ və $\hat{B}$ operatorları üçün aşağıdakı bərabərliklərin doğruluğunu isbat etməli:
- 15.1. $\hat{A}^{-1}\hat{B}^2\hat{A} = (\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^2$;
- 15.2. $\hat{A}^{-1}\hat{B}^n\hat{A} = (\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^n$ tam n-lər üçün;
- 15.3. $\hat{A}^{-1}f(\hat{B})\hat{A} = f(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})$.

16. Aşağıdakı bərabərliyin doğruluğunu isbat etməli:
 $e^{\xi\hat{A}}\hat{B}e^{-\xi\hat{A}} = \hat{B} + C\xi$. Burada C ədəd, ξ isə parametrdir.
17. Aşağıdakı bərabərliyin doğruluğunu isbat etməli:
 $e^{i\xi\hat{p}}F(\hat{q})e^{-i\xi\hat{p}} = F(\hat{q} + \xi)$, . Burada $\hat{p}$ və $\hat{q}$ impuls və koordinat operatorlarıdır.
18. $\frac{d}{d\varphi}$ operatorunun məxsusi funksiya və qiymətlərini tapmalı.
19. $\sin \frac{d}{d\varphi}$ operatorunun məxsusi funksiya və qiymətlərini tapmalı.
20. $i \frac{d}{d\varphi}$ operatorunun məxsusi funksiya və qiymətlərini tapmalı.
21. $e^{ia\frac{d}{d\varphi}}$ operatorunun məxsusi funksiya və qiymətlərini tapmalı.
22. $\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d}{dx}$ operatorunun məxsusi funksiya və qiymətlərini tapmalı.
23. Hərəkət miqdarı momenti operatoru üçün $\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar \hat{L}$ münasibətinin doğruluğunu isbat etməli.
24. 23-cü misalın nəticəsindən istifadə etməklə hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorunun ($\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$), onun ixtiyari ox üzrə proyeksiyası operatoru ilə kommutasiya etməsini isbat etməli.
25. Aşağıdakı kommutasiya şərtlərini yoxlamalı:
- 25.1. $[\hat{L}_x, \hat{d}_x] = 0$;
- 25.2. $[\hat{L}_x, \hat{d}_y] = i\hbar \hat{d}_z$;
- 25.3. $[\hat{L}_x, \hat{d}_z] = -i\hbar \hat{d}_y$.
26. x, y, z -in dövrü yerdəyişməsi ilə aşağıdakı kommutasiya şərtlərini yoxlamalı:
- 26.1. $[\hat{L}_x, \hat{c}_x] = 0$;
- 26.2. $[\hat{L}_x, \hat{c}_y] = i\hbar \hat{c}_z$;
- 26.3. $[\hat{L}_x, \hat{c}_z] = -i\hbar \hat{c}_y$.
27. Əgər $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ və $\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$ verilibsə, aşağıdakı münasibətləri isbat etməli:

$$27.1. \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hat{L}_- \hat{L}_+ = 2\hat{L}_z ;$$

$$27.2. \hat{L}_z \hat{L}_\pm - \hat{L}_\pm \hat{L}_z = \pm \hat{L}_\pm ;$$

$$27.3. \hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar \hat{L}_z + \hat{L}_z^2$$

28. Sərbəst zərrəcik üçün bir ölçülü, zamana görə Şrödinger tənliyinin ümumi həllini tapmalı.

29. $t = 0$ zaman anında zərrəciyin halı $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x}$ dalğa funksiyası ilə ifadə olunur. x operatorunun orta qiymətini tapmalı : $\bar{x} = ?$

30. $t = 0$ zaman anında zərrəciyin halı $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x}$ dalğa funksiyası ilə ifadə olunur. x^2 operatorunun orta qiymətini tapmalı : $\overline{x^2} = ?$

31. x operatorunun kvadratik xətasının orta qiymətini tapmalı:
 $\overline{\Delta x^2} = ?$

32. $t = 0$ zaman anında zərrəciyin halı $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x}$ dalğa funksiyası ilə ifadə olunur. $\hat{p}_x$ operatorunun orta qiymətini tapmalı : $\bar{p}_x = ?$

33. $t = 0$ zaman anında zərrəciyin halı $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x}$ dalğa funksiyası ilə ifadə olunur. $\hat{p}_x^2$ operatorunun orta qiymətini tapmalı : $\overline{p_x^2} = ?$

34. $\hat{p}_x^2$ operatorunun kvadratik xətasının orta qiymətini tapmalı:

35. 29-34 misallarının nəticələri əsasında koordinat və impuls üçün Heyzenberq qeyri-müəyyənlik münasibətlərini almalı.

36. $t = 0$ zaman anında zərrəciyin halı $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x}$ dalğa funksiyası ilə ifadə olunur. A normallaşma vuruğunu tapmalı:
 $A = ?$

37. $t = 0$ zaman anında zərrəciyin halı $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x}$ dalğa funksiyası ilə ifadə olunur. Ehtimal sıxlığını tapmalı: $\rho = ?$
38. $t = 0$ zaman anında zərrəciyin halı $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x}$ dalğa funksiyası ilə ifadə olunur. Cərəyan sıxlığını tapmalı: $\vec{j} = ?$
39. Xarici sahə olmayan halda ($U(x) = 0$) impulsun proyeksiyasının (p_x) saxlanması şərtlərini yoxla.
40. Zərrəciyin xarici sahədə ($U(x) \neq 0$) hərəkəti zamanı, onun impulsunun saxlanmadığını isbat etməli.
41. Xarici sahə olmayan halda ($U(x) = 0$) hərəkət miqdarı momenti proyeksiyasının (L_x) saxlanması şərtlərini yoxla.

ƏDƏBİYYAT

1. A.İ. Mukhtarov. Kvant mexanikası, Bakı, Maarif Nəşriyyatı, 1999.
2. A.V. Cavadov. Kvant mexanikası, Bakı, Maarif Nəşriyyatı, 1975.
3. F.S. Sadıxov. Kvant mexanikası(məsələlərdə), Bakı, “Bakı Universiteti”, 1992.
4. F.S. Sadıxov. Kvant mexanikası kursu, Bakı, Patronat-S Nəşriyyatı, 2002.
5. В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин Курс теоретической физики, т.2, Москва, Наука, 1971.
6. В.А. Фок Основы квантовой механики, Москва, 1974.
7. Л.Г. Гречко, В.И. Сугаков, О.В. Томасевич, А.М. Федорченко, Сборник задач по теоретической физике, Москва, Высшая Школа, 1984.
8. Д.И. Блохинцев Основы квантовой механики, Москва, Наука, 1976.
9. Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Москва,Физ.мат.лит, 2002.
10. А.С. Давыдов Квантовая механика, Москва, Наука, 1972.
11. А. Мессиа Квантовая механика, т.1, Москва, Наука, 1978.
12. Э. Вихман Квантовая физика, Москва, Наука, 1974.
13. D.M. Gitman, I.V. Tyutin. Quantization of Field with Constraints, Berlin:Springer, 1990
14. А.В. Борисов. Основы квантовой механики, Издательство МГУ, 1999.
15. В.Г. Сербо и И.Б. Хрипович. Лекции по квантовой механике, Издательство Новосибирского Госуниверситета, 1999.
16. Д.В. Гальцов, Теоретическая физика для студентов-математиков, Издательство МГУ, 2002.
17. S.A. Gadjiev and R.G. Jafarov, On Quantization of Time-dependent Systems with Constraints, *Journal of Physics A*, **40**, 3665, 2007.

MÜNDƏRİCAT

Elmi redaktordan.....	3
Müəllifdən.....	5
I HİSSƏ. KVANT MEXANİKASININ ƏSASLARI VƏ RİYAZİ APARATI.....	7
1. Mikroaləmdə gedən proseslərin izahında klassik nəzəriyyənin böhranı. Plank sabiti	7
2a. Dalğa funksiyası və ehtimal sıxlığı	14
2b. De Broyl dalğası. Faza və qrup sürətləri	17
3a. Superpozisiya prinsipi.....	20
3b. Qeyri-müəyyənlik münasibətləri	22
4a. Şrödinger tənliyi.....	23
4b. Stasionar və qeyri-stasionar hallar üçün Şrödinger tənliyi ...	25
5a. Xətti operatorlar	26
5b. Diferensial və integral operatorlar və onların kommutasiyaları	28
6. Xətti operatorların məxsusi qiymət və məxsusi funksiyaları..	30
7. Ermit operatorlar və onların xüsusiyyətləri	31
8. Ermit operatorların məxsusi qiymət və məxsusi funksiyaları.	34
9. Ortoqonallıq və ermit operatorların məxsusi funksiyalarının normallaşması	35
10. Məxsusi funksiyalara ayrılış	36
10a. Diskret spektr halı	36
10b. Kəsilməz spektr halı.....	37
11. Koordinat, impuls və kinetik enerji operatorları	38
12a. Tam enerji operatoru – hamiltonian	41
12b. Elektromaqnit sahəsindəki yüklü zərrəciyin hamiltonianı..	43
13. Kvant mexanikasında orta qiymət	44
14. Kommutativlik: məxsusi funksiya və qeyri-müəyyənlik prinsipi arasında əlaqə.....	45
15. $\hat{x}$ operatorunun məxsusi qiymət və məxsusi funksiyası	47
16. İmpuls operatorunun x -təsvirində məxsusi qiymət və məxsusi funksiyası	48
17. Kəsilməz spektr halında $\hat{p}$ operatorunun məxsusi	

funksiyası	49
18. İmpuls təsvirində koordinat və impuls operatorları	50
19. Hərəkət miqdarı momenti və hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorları	52
20. Hərəkət miqdarı momentinin proyeksiyaları və hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorlarının sferik koordinat sistemində ifadələri	55
21. Hərəkət miqdarının proyeksiyası operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası. Maqnit kvant ədədi	56
22. Hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatorunun məxsusi funksiya və məxsusi qiyməti. Orbital kvant ədədi	58
23. Stasionar hallar	60
24a. Operatorların zamana görə diferensiallanması	61
24b. Koordinatın zamana görə törəməsi operatoru	63
25a. İmpulsun zamana görə törəməsi operatoru. Erenfest teoremi	64
25b. Hərəkət integralı kvant tənlilikləri	66
26. Kvant mexanikasında saxlanma qanunları	67
27. İnversiya operatoru və cütlük	69
28. Enerji-zaman qeyri müəyyənliyi	71
29. Spin. Spin operatoru	72
30a. Pauli tənliyi	78
30b. Zərrəciklərin eyniyyəti. Pauli prinsipi	81
31. Kvant mexanikasının matris təsviri	84
32. Kəsilməz spektr halında matris təsvirinin Dirak işarələmələri. Momentlərin matris təsviri	86
II HİSSƏ. ŞRÖDİNGER TƏNLIYININ BƏZİ	
TƏTBİQLƏRİ.	90
33. Birölçülü düzbucaqlı potensial çuxur	90
34. Ehtimal seli sıxlığı. Kəsilməzlik tənliyi	94
35. Potensial çəpər	97
35a. Tam enerjinin potensial çəpərin hündürlüyündən böyük ($E > U_0$) olduğu hal	101
35b. Tam enerjinin potensial çəpərin hündürlüyündən kiçik ($E < U_0$) olduğu hal. Tunel effekti	103

36. Xətti ossilyator	105
37. Kvaziklassik yaxınlaşma və klassik mexanikanın tənliklərinə keçid.....	113
37a. Kvaziklassik yaxınlaşmada zərrəciyin stasionar hallarının dalğa funksiyası	117
38. Stasionar həyacanlaşma nəzəriyyəsi	119
39. Sferik-simmetrik (mərkəzi) sahədə hərəkət	126
39a. Radial Şrödinger tənliyinin $r \rightarrow \infty$ limitində həlli.....	130
39b. Radial tənliyin $r \rightarrow 0$ limitində həlli.....	132
40. Kulon sahəsində elektronun hərəkəti	133
41. Hidrogen atomu	141
41a. Nüvənin hərəkəti nəzərə alınan halda hidrogen atomu və birqat ionlaşmış helium nüvəsinin spektral seriyası.....	144
Əlavə A	147
Əlavə B	151
Məsələlər.....	170
Ədəbiyyat.....	175