

НАЗАРИЙ ФИЗИКА ҚИСҚА КУРСИ

2- китоб

Л. Д. ЛАНДАУ, Е. М. ЛИФШИЦ

КВАНТ МЕХАНИКАСИ

*СССР Олий ва махсус ўрта таълим
министрлиги олий ўқув юр்தларининг
физика мутахассислиги бўйича
ўқувчи студентлари учун
ўқув қўлланмаси сифатида
рухсат этган*

„ЎҚИТУВЧИ“ НАШРИЁТИ
ТОШКЕНТ—1977

530.1
Н 18

Назарий физика қисқа курси.
Олий ўқув юртларининг физика му-
тахассислиги бўйича ўқувчи студент-
лари учун ўқув қўлланмаси.
Т., „Ўқитувчи“, 1977. (С)
2-китоб. Ландау Л. Д. ва Лифшиц Е. М.
Квант механикаси. 1977.
288 б.

Краткий курс теоретической физики.
Кн. 2. Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М.
Квантовая механика.

530.1

© „Ўқитувчи“ нашриёти, ўзбек
тилига таржима, Т., 1977

Л $\frac{20402 - 239}{353 (06) - 77}$ 139 — 77

СЎЗ БОШИ

Бу китоб Лев Давидович Ландау белгилаган программани давом эттиради. Программанинг мақсади биринчи китобнинг сўз бошисида келтирилган бўлиб, у мутахассислигидан қатъи назар, ҳар қандай замонавий физикка назарий физикадан минимал ҳажмда маълумот беришни кўзда тутди.

Китобнинг биринчи қисми — норелятивистик квант назарияси — Л. Д. Ландау билан мен биргаликда ёзган „Квантовая механика“ (тўла курснинг III томи) доирасидан ташқарига чиқмайди. Қисқартириш мақсадида бу томдан фақат махсус аҳамиятга эга бўлган бутун қисмлар ҳамда профессионал физик-назариётчиларга мўлжалланган кўпгина методик деталлар олиб ташланди. Табиийки, бундай кескин қисқартиришда текстнинг анчагина қисми қайтадан ёзилиши керак эди. Лекин мен баён қилиш стили ва характерини тўла сақлашга ва соддалаштиришда ҳеч қаерда вульгарлаштирилган тушунчаларни ишлатмасликка ҳаракат қилдим. Соддалаштиришга фақат тафсилотни қисқартириш йўли билан эришилди. Китобнинг биринчи қисмида „кўрсатиш мумкин“ деган ибора қарийб учрамайди ва баён қилинган натижалар шу жойнинг ўзида келтириб чиқарилади.

Бу нарса китобнинг иккинчи қисмига камроқ алоқадор. Бу қисм баён қилиниш характери жиҳатидан

В. Б. Берестецкий, Л. П. Питаевский ва мен биргаликда ёзган „Релятивистская квантовая теория“ (тўла курснинг IV томи) га ўхшайди. Лекин бунда фақат квант электродинамикасининг асосларигина берилади. Бу ерда ҳам мен назарияни имкон борича унинг физикавий асослари ва мантикий структураси очиқ-ойдин кўринадиган қилиб баён қилишга интилдим. Аммо, бу соҳага тегишли конкрет масалаларни ечиш одатда анча мураккаб ҳисоблашлар билан боғлиқ бўлганидан, назариянинг бир қатор татбиқларининг фақат натижаларигина келтирилади. Китобнинг бу қисми учун материал танлашда мен 1959/60 ўқув йилида МГУда Л. Д. Ландау томонидан квант электродинамикаси бўйича ўқилган лекциялар курсидан ҳам маълум даражада фойдаландим. Ушбу лекциялар бўйича ёзилган ўз қўл ёзмаларини менга тақдим этган А. С. Компанейц, Н. И. Будько ва П. С. Кондратенкога ўз миннатдорчилигимни билдираман.

Китобнинг охириги боби („Фейнман диаграммалари“) ўзининг анчагина мураккаблиги ва кўпроқ физикавий хулосаларга эмас, балки методик масалаларга бағишланганлиги билан баён қилишнинг умумий стилидан бир оз четга чиқади. Лекин мен китобхонда назарий физиканинг замонавий аппаратига чуқур кирган ва „диаграмма техникаси“ деб аталадиган тушунчанинг ҳеч бўлмаса келиб чиқиши ҳамда маъноси ҳақида тасаввур ҳосил қилишни зарур деб топдим (бунда конкрет масалаларни ечиш учун бу техникани қандай қўллаш кераклигини тушунтириш мақсад қилиб қўйилган эмас). Зарурият бўлмаса, бу бобни китобнинг бирлигини бузмаган ҳолда тушириб қолдириш мумкин.

Бу китобнинг чиқиш моменти Лев Давидовичнинг илмий ва педагогик фаолиятини тўхтатиб қўйган фожиаги автомобиль ҳалокати рўй берган кун (1962 йил 7 январь) нинг ўн йиллиги кунига тўғри келди. Назарий физиканинг бу қисқа курси мўлжалланган китобхонларнинг ҳеч қайсиси Л. Д. Ландаунинг лекциясини

бевосита эшитиш шарафига муяссар бўлган эмас. Мен бу китоблар ёрдамида унинг педагогик ғоялари руҳини, унинг равшанликка интилишини ва мураккаб нарсаларни соддалаштиришга интилиб, шунинг билан табиат қонунларининг гўзаллиги ана шу ҳақиқий соддаликда эканини тушунтиришини ўқувчиларга маълум даражада етказиш умидидаман.

Май, 1971_йил.

Е. М. Лифшиц.

БАЪЗИ БЕЛГИЛАР

Вақтга боғлиқ бўлган тўлқин функция, Ψ

Вақтга боғлиқ кўпайтувчиси бўлмаган тўлқин функция ψ

Операторлар қалпоқчали $(\hat{X})$ ҳарфлар билан белгиланади.

Транспонирланган операторлар устида $\sim$ белгиси бўлган ҳарфлар орқали белгиланади

Эрмит қўшма операторлари $+$ индекс билан белгиланади.

Бирор f катталиқнинг матрица элементи $f_{mn} = \langle m | f | n \rangle$ кўринишда ёзилади

Гамильтониан $\hat{H}$

Норелятивистик энергия E

Ўтиш частотаси $\omega_{nm} = (E_n - E_m) / \hbar$

Таркибида тинч ҳолат энергияси бўлган релятивистик зарра энергияси ϵ

Конфигурацион фазодаги ҳажм элементи dq

Уч ўлчовли фазодаги ҳажм элементи $dV = dx dy dz$

Нормалаштирувчи ҳажм Ω

Тўрт ўлчовли вектор индекслари (II қисмда) грек ҳарфлари λ, μ, ν (уларнинг ҳар бири кетма-кет 0, 1, 2, 3 сонларни қабул қилади) орқали белгиланади

II қисмда 278 -бетда кўрсатилган релятивистик бирликлар ишлатилади.

Бу курсда унинг биринчи китобига қаратилган изоҳлар I рақами билан берилган

НОРЕЛЯТИВИСТИК НАЗАРИЯ

1606

КВАНТ МЕХАНИКАСИНING АСОСИЙ ТУШУНЧАЛАРИ

1- §. Ноаниқлик принципи

Классик механика ва электродинамикани атом ҳодисаларини тушунтиришга қўлланилганда олинadиган натижалар тажриба натижаларига бутунлай зид бўлиб чиқади. Айниқса бу зиддият одатдаги электродинамикани электронлар ядро атрофида классик орбиталар бўйлаб ҳаракатланувчи атом моделига татбиқ қилинганда яққол кўринади. Зарядларнинг ҳар қандай тезланувчан ҳаракатидаги каби, бу ҳаракатда ҳам электронлар узлуксиз тарзда электромагнитик тўлқинлар сочиб, ўз энергиясини йўқотар ва оқибатда ядро устига келиб тушган бўлур эди. Шундай қилиб, классик электродинамикага биноан атом барқарор система эмас экан. Бу хулоса эса ҳақиқатга батамом зиддир.

Назария билан тажриба ўртасидаги бу қадар кескин зиддият атом ҳодисаларига, яъни фазонинг жуда кичик қисмида жуда кичик массали зарралар билан юз берувчи ҳодисаларга қўлланиладиган назарияни яратишда классик қонун ва тасаввурларга фундаментал ўзгартириш киритиш лозимлигидан далолат беради.

Бу ўзгартиришларни тушунтиришни тажрибада кузатиладиган ва электронлар дифракцияси¹ деб аталадиган ҳодиса баёнидан бошлаймиз. Кристалл орқали бир жинсли электронлар дастаси ўтказилганда ўтган дас-

¹ Электронлар дифракцияси ҳодисаси аслида квант механикаси яратилгандан кейин кашф қилинди. Лекин биз ўз баёнимизни назария тараққиётининг тарихий кетма-кетлигига риоя қилган ҳолда эмас, балки квант механикасининг асосий принциплари тажрибада кузатиладиган ҳодисаларга қандай боғланганини янада яққолроқ кўрсатадиган қилиб тузамиз.

тада электромагнитик тўлқинлар дифракциясидаги каби, интенсивликнинг максимум ва минимумлари алмашилиб келадиган дифракцион манзара кузатилади экан. Шундай қилиб, баъзи бир шароитларда моддий зарраларда (электронларда) тўлқин процессига хос хусусиятлар намоён бўлади.

Бу ҳодисанинг ҳаракат ҳақидаги оддий тасаввурларга нақадар зид эканини кристаллдаги электронлар дифракцияси устида ўтказиладиган фикрий экспериментда (амалда бажарилиши талаб қилинмайдиган идеаллаштирилган тажрибада) жуда аниқ кўриш мумкин. Фараз қилайлик, электронлар ўта олмайдиган экранда иккита тирқиш очилган бўлсин. Электронларнинг битта тирқишдан ўтишини (бу вақтда иккинчи тирқиш ёпиқ бўлади) кузатиб, тирқишлар орқасига қўйилган туташ экранда интенсивлик тақсимотини маълум манзарасини кўрамиз. Биринчи тирқишни ёпиб ва иккинчисини очиб, экранда бошқа манзара ҳосил қиламиз. Иккала тирқиш очик бўлганда ҳосил бўладиган манзара, одатдаги тасаввурларга биноан, айрим тирқиш берадиган манзараларнинг оддий қўшилишидан иборат бўлиши лозим. Чунки бу тасаввурларга кўра ҳар бир электрон ўз траекторияси бўйича ҳаракатланиб, тирқишларнинг бирортаси орқали ўтади ва бу вақтда иккинчи тирқишдан ўтаётган электронларга ҳеч қандай таъсир кўрсатмайди. Лекин электрон дифракция ҳодисаси биз олган дифракцион манзара ҳақиқатда интерференция туфайли айрим тирқишлар берадиган манзаралар йиғиндисидан иборат бўлмаслигини кўрсатади. Турган гап, бу натижани электронларнинг траектория бўйича ҳаракати ҳақидаги тасаввурлар билан келиштириб бўлмайди.

Шундай қилиб, атом ҳодисалари бўйсунмайдиган механика, яъни *квант ёки тўлқин механикаси* ҳаракат ҳақидаги классик механика тасаввурларидан принципиал фарқ қилувчи тасаввурларга асосланиши керак. Квант механикасида зарра траекторияси деган тушунча йўқ. Бу ҳол 1927 йилда *Вернер Гейзенберг* томонидан очилган ва квант механикасининг асосий принципларидан бири бўлган *ноаниқлик принципининг* мазмунидан иборатдир¹.

¹ Шу нарса қизиқки, квант механикасининг тўла математикавий аппарати, пировардида бу аппарат мазмунини очиб берган *ноаниқлик принциpidан* олдин (1925—1926) *Гейзенберг* ва *Шредингер* томонидан яратилган.

Ноаниқлик принципи классик механиканинг асосий тасаввурларини инкор қилгани ҳолда, салбий мазмунга эга. Табиийки, бу принцип зарраларнинг янги механикасини яратишга етарли асос бўла олмайди. Бундай назария асосида албатта, қандайдир ижобий даъво ётмоғи лозим (уни қуйида 2- § да кўрамиз). Лекин бу фикрни ифодалашдан олдин, квант механикаси олдида турган масалаларнинг қўйилиш характерини аниқлаб олиш зарур. Бунинг учун аввало квант ва классик механика ўртасидаги ўзаро муносабатнинг алоҳида характерга эга эканлиги устида тўхталиб ўтамиз.

Одатда умумий назария унинг чегаравий ҳоли бўлган умумийлиги камроқ назариядан мустақил равишда мантиқий берк йўсинда ифодаланиши лозим. Масалан, релятивистик механика Ньютон механикасига таянмасдан ўз принциплари асосида яратилиши мумкин. Квант механикасининг асосий принципларини шакллантиришда эса классик механикага мурожаат қилмасликнинг ҳеч иложи йўқ.

Электронда¹ аниқ траекториянинг йўқлиги уни ўз-ўзидан ҳар қандай бошқа динамик характеристикалардан² маҳрум қилади. Шу сабабли, равшанки, фақат квант объектларидан ташкил топган система учун умуман ҳеч қандай мантиқий берк механика яратиб бўлмайди. Электроннинг ҳаракатини миқдорий тавсифлаш классик механикага етарли даражада бўйсунувчи физикавий объектлар бўлишини ҳам талаб қилади. Агар электрон шундай „классик объект“ билан таъсирлашса, умуман айтганда, бу объектнинг ҳолати ўзгаради. Бу ўзгаришнинг катталиги ва характери электроннинг ҳолатига боғлиқ бўлганидан, у электроннинг миқдорий характеристикасини беради.

Шу муносабат билан „классик объект“ни одатда „асбоб“ деб, унинг электрон билан таъсирлашиш процессини эса „ўлчаш“ деб аталади. Лекин шунини таъкидлаш лозимки, бунда физик-кузатувчининг қатнашиши

¹ Ушбу ва кейинги параграфларнинг ҳаммасида қисқалик мақсадида электрон сўзини ишлатганда умуман исталган квант объекти (классик механикани қўллаб бўлмайдиган зарра ёки зарралар системаси) ни назарда тутамиз.

² Бу ерда гап электронни зарра сифатида характерловчи параметрлар ҳисобланган катталиклар (заряд, масса) ҳақида эмас, балки электроннинг ҳаракатини характерловчи катталиклар ҳақида боради.

зарур бўлган „ўлчаш“ процесси кўзда тутилаётгани йўқ. Квант механикасида ўлчаш деганда классик ва квант объекtlари ўртасида кузатувчи хоҳишидан қатъи назар, ундан мустақил равишда рўй берадиган ҳар қандай ўзаро таъсир процесси тушунилади. Ўлчаш тушунчасининг квант механикасидаги катта ролни *Нильс Бор* аниқлаб берди.

Биз асбобни классик физика қонунларига етарли даражада бўйсунувчи физикавий объект деб таърифладик. Бундай асбоб, масалан, етарлича катта массали жисм бўлиши мумкин. Лекин макроскопикликни асбоб учун зарурий шарт деб бўлмайди. Маълум шароитларда асбоб ролини бевосита микроскопик объект бажариши ҳам мумкин, чунки „етарли даражада бўйсунуш“ талаби конкрет қўйилган масалага боғлиқдир. Масалан, Вильсон камерасида электроннинг ҳаракати у қолдирган туман из орқали кузатилади, бу изнинг қалинлиги атомнинг ўлчамларига нисбатан жуда катта. Демак, траектория бундай аниқлик билан топилганда, электронни бемалол классик объект дейиш мумкин.

Шундай қилиб, квант механикаси физикавий назариялар орасида ўзига хос ўрин тутати. Классик механика унинг учун чегаравий хусусий ҳол бўлиб, лекин аynи пайтда у ушбу чегаравий ҳолга ўзини асословчи нарсa сифатида муҳтождир.

Энди биз квант механикаси масаласининг қўйилишини баён қилишимиз мумкин. Масаланинг типик қўйилиши ўтказиладиган такрорий ўлчашлар натижасини аввал ўтказилган ўлчашларнинг маълум натижаси бўйича олдиндан айтиб беришдан иборат. Бундан ташқари, биз кейин кўрамизки, квант механикаси қонунлари ҳар хил физикавий катталиклар қабул қилиши мумкин бўлган қийматлар (яъни берилган катталики, масалан, энергияни ўлчаш натижасида аниқланиши мумкин бўлган қийматлар) тўламини, умуман айтганда, классик механикадагига нисбаган чегаралаб қўйди. Квант механикаси аппарати ана шу йўл қўйилган қийматларни аниқлашга имкон бериоғи лозим.

Квант механикасида ўлчаш процесси жуда муҳим хусусиятга эга, яъни у ўлчанаётган электронга албатта таъсир кўрсатади ва бу таъсир (берилган ўлчаш аниқлигида) принцип жиҳатдан исталганча заифлаштирилиши мумкин эмас. Ўлчаш қанча аниқ бўлса, кўрсатиладиган таъсир ҳам шунчалик кучли бўлади, фақат

Ўлчаш аниқлиги жуда кам бўлгандагина ўлчанаётган объектга кўрсатиладиган таъсир заифлашади. Ўлчашларнинг бу хоссаси электрон динамик характеристикаларининг фақат ўлчаш жараёнидагина вужудга келиши билан мантиқан боғлиқдир; равшанки, агар ўлчаш процессининг объектга таъсирини исталганча заифлаштириш мумкин бўлганда эди, ўлчанаётган катталиқ унинг ўлчанишидан қатъи назар, ўз-ўзидан аниқ қийматга эга бўлган бўлур эди.

Хилма-хил ўлчашлар орасида электроннинг координатасини ўлчаш муҳим роль ўйнайди. Электроннинг координатасини квант механикаси ўринли бўлган чегара ичида исталган аниқлик билан ўлчаш мумкин¹.

Электроннинг координатаси маълум тенг вақт интервалларидан сўнг кетма-кет ўлчанаётган бўлсин. Бу ўлчаш натижалари, умуман айтганда, бирор силлиқ эгри чизик ҳосил қилмайди. Аксинча, ўлчаш қанча аниқ бажарилса, электрон учун траектория тушунчаси ўринли бўлмаганидан, ўлчаш натижалари шунча бепартиб ва сакраб ўзгаради. Анчагина силлиқ траектория электрон координатасини фақат кам аниқлик билан ўлчагандагина ҳосил бўлади (масалан, Вильсон камерасидаги буғнинг конденсация йўли).

Агар ўлчаш аниқлигини бир хил сақлаб, ўлчашлар орасидаги вақт интервали Δt камайтирилса, у ҳолда қўшни вақт моментларидаги ўлчашларда олинган координата қийматлари албатта бир-бирига яқин чиқади. Лекин қатор кетма-кет ўлчаш натижалари, гарчи фазонинг кичик бўлагида ётса-да, бу бўлак ичида мутлақо тартибсиз жойлашади ва ҳеч қандай силлиқ эгри чизик бермайди.

Бу ҳол квант механикасида зарра учун классик маънодаги тезлик (вақтнинг икки моментидаги координаталар айирмасининг шу моментлар орасидаги вақтга нисбати интиладиган лимит) нинг мавжуд эмаслигини кўрсатади. Лекин шунга қарамай, кейинчалик квант механикасида берилган вақт моментидаги тезликка оқилона таъриф бериш мумкинлигини кўрамиз, бу тез-

¹ Такроран таъкидлаб ўтамизки, электрон устида „бажарилган ўлчаш“ деганда, ташқи кузатувчининг қатнашишидан қатъи назар, электроннинг классик „асбоб“ билан ўзаро таъсирини кўзда тутамиз.

лик классик механикага ўтишда классик тезликка айланади.

Аммо зарра классик механикада ҳар бир муайян моментда аниқ координаталар ва тезликка эга дейилса, квант механикасида аҳвол тамомилан бошқача. Агар ўлчаш натижасида электрон маълум координаталарни қабул қилган бўлса, у ҳолда у умуман ҳеч қандай аниқ тезликка эга бўла олмайди. Аксинча, аниқ тезликка эга бўлган электрон фазода муайян жойга эга бўла олмайди. Ҳақиқатан ҳам, электроннинг исталган вақт моментидан аниқ координата ва тезликка эга бўлиши унинг траекторияга эга эканлигини билдирган бўлур эди. Электрон эса траекторияга эга эмас.

Шундай қилиб, квант механикасида электроннинг координата ва тезлиги бир вақтда аниқ ўлчана олмайдиган, яъни бир вақтда аниқ қийматлар қабул қила олмайдиган катталиклар ҳисобланади. Шу сабабли, электроннинг координата ва тезлигини бир вақтда мавжуд бўлмаган катталиклар деб аташимиз мумкин. Келгусида биз электроннинг айтиб берилган вақтдаги координаталари ва тезлигини ўлчашда юз берадиган ноаниқликни кўрсатувчи миқдорий муносабатларни келтириб чиқарамиз.

Классик механикада физикавий система ҳолатини тўла тавсифлаш учун унинг муайян вақт моментиданги ҳамма координата ва тезликларини бериш лозим. Ҳаракат тенгламалари ана шу бошланғич шартларга асосан, системанинг келгуси моментлардаги ҳолатларини тўла аниқлаб беради. Квант механикасида эса бундай аниқлаш принципиал мумкин эмас, чунки координаталар ва уларга мос тезликлар бир вақтда мавжуд бўлмайди. Шундай қилиб, квант системаси ҳолатларини тавсифловчи катталиклар сони классик механикадагидан кам ва шу маънода квант механикаси классик механикадек батафсил эмасдир.

Бу айтилганлардан квант механикасининг олдиндан айтиб бериш характери ҳақида жуда муҳим хулоса келиб чиқади. Классик тавсиф механикавий системанинг келгусидаги ҳаракатини олдиндан тўла-тўқис айтиб берса, равшанки, унча батафсил бўлмаган квант механикаси бунга қодир эмас. Бу эса электрон квант механикаси бўйича тўла тавсифланган ҳолатда бўлганида ҳам, унинг кейинги вақт моментларидаги ҳолатлари асосан бир қийматли бўлмайди деган сўздир. Шу

сабабли, квант механикаси электроннинг келажакдаги хатти-ҳаракатини олдиндан аниқ айтиб бера олмайди. Бошланғич ҳолати маълум бўлган электрон устида ўтказилган кейинги ўлчашлар ҳар хил натижаларга олиб келиши мумкин. Квант механикасининг вазифаси ана шу ўлчашларда у ёки бу натижанинг қандай эҳтимол билан олинишини аниқлашдан иборатдир. Маълумки, баъзан бир-ёр аниқ ўлчаш натижасининг эҳтимоли бирга тенг бўлиб чиқиши, яъни бу натижа муқаррар бўлиб қолиши мумкин. Демак, бу ҳолда такрор ўлчашлар битта натижага олиб келади.

Кейинчалик биз квант механикасида физикавий катталикларнинг ҳар қандай тўплами ҳам бир вақтда аниқ ўлчана бермаслигига, яъни бир вақтда аниқ қийматларга эга бўлмаслигига ишонч ҳосил қиламиз (бундай катталиклардан бир жуфти—электроннинг тезлик ва координатаси ҳақида биз гапириб ўтганмиз).

Квант механикасида қуйидаги хоссага эга бўлган физикавий катталиклар тўплами катта роль ўйнайди. Бу катталиклар бир вақтда ўлчанадиган бўлишлари шарғ, бунда агар улар бир вақтда аниқ қийматга эга бўлса, у ҳолда бошқа ҳеч қандай физикавий катталик (юқоридаги катталикларнинг функцияси бўлмаган) шу ҳолатда аниқ қийматга эга бўла олмайди.

Бундай физикавий катталиклар тўпламини *тўла тўплам* деб аталади.

Электрон ҳолатининг ҳар қандай тавсифи маълум бир ўлчаш туфайли вужудга келади. Энди биз квант механикасида ҳолатни тўла тавсифлаш нимадан иборатлигини кўрсатамиз. Тўла тавсифланган ҳолатлар физикавий катталикларнинг тўла тўпламини бир вақтда ўлчаш натижасида вужудга келади. Бундай ўлчаш натижаларига қараб, хусусий ҳолда, биринчи ўлчашгача электрон устида қандай ҳодиса юз берганидан қатъи назар, исталган кейинги ўлчаш натижаларининг эҳтимолини аниқлаш мумкин.

Бундан кейин ҳамма жойда (фақат 7- ва 42- § лардан ташқари) квант системасининг ҳолатлари деганда фақат шу тариқа тўла тавсифланган ҳолатларни тушунамиз.

2- §. Суперпозиция принципи

Ҳаракат ҳақидаги классик механика физикавий тасаввурларининг квант механикасида тубдан ўзгариши,

табийки, бу назария математикавий аппаратининг ҳам тубдан ўзгаришини талаб қилади. Шу муносабат билан энг аввало квант системаси ҳолатини қандай усулда тавсифлаш ҳақидаги масала туғилади.

Система координаталари q орқали, бу координаталар дифференциалларининг кўпайтмасини dq орқали (уни система *конфигурацион фазосининг* ҳажм элементи дейилади) белгилашга шартлашиб оламиз. Битта зарра учун dq одатдаги фазо (уч ўлчовли фазо) ҳажм элементи dV ни беради.

Классик механикада система ҳолати муайян вақт моментидagi унинг ҳамма q координаталари ва $\dot{q}$ тезликлари орқали тўла тавсифланади. Юқорида кўрганимиздек, квант механикасида бундай тавсифлаш мумкин эмас. Бу ерда система ҳолатини тўла тавсифлаш система координаталари (ёки бошқа катталиклар) ни ўлчашдаги у ёки бу натижалар эҳтимолларини олдиндан айтиб беришигига билдиради.

Квант механикасининг математикавий аппарати асосида ҳар қандай системанинг ҳолати маълум (умуман айтганда, комплекс) $\Psi(q)$ координата функцияси орқали тўла тавсифланади деган даъво ётади. Бунда бу функция модулининг квадрати координата қийматлари эҳтимолларининг тақсимотини беради. $|\Psi|^2 dq$ эса система устида ўтказилган ўлчашларда аниқланган координата қийматлари қандай эҳтимол билан dq конфигурацион фазо элементи ичида бўлишини билдиради. Ψ функция системанинг *тўлқин функцияси* дейилади¹.

Тўлқин функция маълум бўлса, принцип жиҳатдан фақат координата ўлчашдаги натижалар эҳтимолларинигина эмас, умуман ҳар қандай ўлчашдаги хилма-хил натижалар эҳтимолларини ҳисоблаш мумкин. Бунда ана шу хил эҳтимолларнинг ҳаммаси Ψ ва Ψ^* бўйича бичизиқли ифодалар билан аниқланади. Шундай ифоданинг энг умумий кўриниши

$$\iint \Psi(q) \Psi^*(q') \varphi(q, q') dq dq' \quad (2.1)$$

бўлиб, бунда $\varphi(q, q')$ функция ўлчашнинг хили ва натижасига боғлиқ, интеграл эса бутун конфигурацион фазо бўйича олинади. Ҳар хил координата қийматла-

¹ Бу тушунча квант механикасига биринчи бўлиб *Шредингер* томонидан киритилган (1926).

рининг $\Psi^*\Psi$ эҳтимоли ҳам шу тилдаги ифода ҳисобланади.

Вақт ўтиши билан система ҳолати ва шу билан бирга тўлқин функция умуман айтганда ўзгаради. Шу маънода тўлқин функцияни вақтнинг ҳам функцияси деб қараш мумкин. Тўлқин функция бирор дастлабки вақт моментида маълум бўлса, ҳолатнинг тўла тавсифланиши тушунчасига кўра, у принцип жиҳатдан ҳар қандай келгуси вақт моментлари учун ҳам аниқланган бўлади. Тўлқин функциянинг вақтга қандай боғланганини аниқловчи тенгламалар кейинроқ келтириб чиқарилади.

Система координатларининг мумкин бўлган ҳамма қийматлари эҳтимолларининг йиғиндиси таъриф бўйича бирга тенг бўлиши керак. Шу сабабли, $|\Psi|^2$ ни бутун конфигурацион фазо бўйича интеграллаганда натижа бирга тенг бўлиши лозим:

$$\int |\Psi|^2 dq = 1. \quad (2.2)$$

Бу тенглик тўлқин функцияларни *нормалаштириш шарт*и деб ном олган. Агар $|\Psi|^2$ нинг интеграли яқинлашса, у ҳолда ўзгармас коэффициентни мос ҳолда танлаб, Ψ функцияни ҳар доим *нормалаштириш* мумкин. Аммо кейинроқ биз $|\Psi|^2$ нинг интеграли узоқлашиши ҳам мумкинлигини кўрамиз, бунда Ψ функцияни (2.2) шарт ёрдамида нормалаштириб бўлмайди. Бундай ҳолларда $|\Psi|^2$ албатта, координаталар эҳтимолининг абсолют қийматини кўрсатмайди, лекин конфигурацион фазонинг иккита ҳар хил нуқтасидаги $|\Psi|^2$ лар нисбати координаталар мос қийматларининг нисбий эҳтимолини аниқлайди.

Тўлқин функция ёрдамида ҳисобланувчи ва бевосита физикавий маънога эга ҳар қандай катталиқ Ψ билан Ψ^* нинг кўпайтмасини ўз ичига олган (2.1) ифода билан берилганидан, нормалаштирилган тўлқин функция $e^{i\alpha}$ кўринишдаги (бунда α — ихтиёрий ҳақиқий сон) ўзгармас *фазовий кўпайтмагача* аниқликка эга бўлиши равшандир. Бундай кўп қийматлиликини принцип жиҳатдан бартараф қилиш мумкин эмас. Лекин у ҳеч қандай физикавий натижаларда акс этмаганидан, муҳим аҳамиятга эга ҳам эмас.

Квант механикасининг ижобий мазмуни асосида тўл-

қин функцияларнинг хоссалари ҳақидаги қуйидаги даъво ётади.

Айтайлик, $\Psi_1(q)$ тўлқин функция билан тавсифланган ҳолатда ўтказилган бирор ўлчаш муқаррар равишда маълум 1 натижага, $\Psi_2(q)$ ҳолатда эса 2 натижага олиб келсин. У ҳолда Ψ_1 ва Ψ_2 нинг ҳар қандай чизиқли комбинацияси, яъни $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ кўринишдаги (c_1 ва c_2 — ўзгармас сонлар) ҳар қандай функция ҳолатни тавсифлайди, бу ҳолатда олиб борилган ўлчаш ҳам ё 1-натижага, ё 2-натижага олиб келади. Бундан ташқари, агар ҳолатларнинг вақтга қандай боғлангани маълум бўлиб, улар биринчи ҳолда $\Psi_1(q, t)$ ва иккинчисида $\Psi_2(q, t)$ билан берилса, у ҳолда уларнинг ҳар қандай чизиқли комбинацияси ҳам ҳолатнинг вақтга мумкин бўлган боғланишини беради.

Бу даъво *ҳолатлар суперпозицияси* деб аталган принципнинг асосий мазмунини ташкил қилади. Бу даъводан, хусусан, тўлқин функцияларни қаноатлантирувчи тенгламаларнинг чизиқли бўлиши кераклиги келиб чиқади.

Иккита қисмдан иборат система оламиз. Системанинг ҳолати шундай берилганки, унинг ҳар бир қисми тўла тавсифланган деб фараз қилайлик¹. У ҳолда биринчи қисм координатаси q_1 нинг эҳтимоли иккинчи қисм координатаси q_2 нинг эҳтимолига боғлиқ бўлмайди деб тасдиқлаш мумкин ва шу сабабли, бутун система учун эҳтимоллар тақсимооти, айрим қисмлар эҳтимолларининг кўпайтмасига тенг бўлиши керак. Бу эса системанинг $\Psi_{12}(q_1, q_2)$ тўлқин функцияси унинг айрим қисмлари тўлқин функциялари $\Psi_1(q_1)$ ва $\Psi_2(q_2)$ нинг кўпайтмасига тенг демакдир:

$$\Psi_{12}(q_1, q_2) = \Psi_1(q_1) \Psi_2(q_2). \quad (2.3)$$

Агар системанинг иккала қисми ўзаро таъсирлашмаса, система тўлқин функциялари орасидаги бу муносабат кейинги вақт моментлари учун ҳам ўринли бўлади:

$$\Psi_{12}(q_1, q_2, t) = \Psi_1(q_1, t) \Psi_2(q_2, t). \quad (2.4)$$

¹ Шу билан бирга система ҳолати, албатта, бутунлигича тўла тавсифланган бўлиб чиқади. Лекин таъкидлаб ўтамизки, тескари даъво ўринли эмас, яъни система ҳолатининг бутунлигича тўла тавсифи умуман айтганда, ҳали айрим қисмлар ҳолатларининг тўла тавсифини беролмайди (бу масалага биз 7- § да яна қайтамиз).

3- §. Операторлар

Квант системасини характерлэвчи бирор f физикавий катталикини кўриб ўтамиз. Қуйидаги мулоҳазаларимизда, аслида, битта катталик эмас, бирданига уларнинг тўла тўплами ҳақида гапиришимиз лозим эди. Лекин бу билан масаланинг моҳияти ўзгармайди, шунинг учун биз содда ва ихчамлик мақсадида қуйида фақат битта физикавий катталик ҳақидагина гап юритамиз.

Берилган физикавий катталик қабул қилиши мумкин бўлган қийматлар квант механикасида бу катталикнинг *хос қийматлари*, уларнинг тўплами эса берилган катталик хос қийматларининг *спектри* деб аталади. Классик механикада, умуман айтганда, катталик узлуксиз қийматлар қаторини қабул қилади. Квант механикасида ҳам хос қийматлари узлуксиз қаторни тўлдирувчи физикавий катталиклар (масалан, координата) мавжуд. Бундай ҳолларда гап хос қийматларнинг *узлуксиз спектри* устида кетади. Лекин квант механикасида бундай катталиклар билан бир қаторда хос қийматлари бирор дискрет тўпламни ташкил қилувчи катталиклар ҳам мавжуд. Бу ҳолда *дискрет спектр* ҳақида гапириш мумкин.

Даставвал соддалик учун қаралаётган f катталик дискрет спектрга эга деб оламиз. Ушбу катталик узлуксиз спектр қабул қиладиган ҳол 5- § да кўрилади. f катталикнинг хос қийматларини f_n билан белгилаймиз, бу ерда n индекс 0, 1, 2, 3... қийматлар қабул қилади. f катталик f_n қийматга эга бўлган ҳолат учун системанинг тўлқин функциясини Ψ_n орқали белгилаймиз. Ψ_n тўлқин функциялар f физикавий катталикнинг *хос функциялари* деб аталади. Бу функцияларнинг ҳар бири нормалаштирилган деб қаралади, шу сабабли

$$\int |\Psi_n|^2 dq = 1. \quad (3.1)$$

Агар система Ψ тўлқин функция билан аниқланган бирор ихтиёрий ҳолатда бўлса, у ҳолда f катталик система устида ўтказилган ўлчашларда f_n хос қийматларнинг биттасини беради. Суперпозиция принципага асосан, Ψ тўлқин функция қаралаётган ҳолатдаги система устида ўлчаш олиб борилганда нолдан фарқли эҳтимол билан аниқланган f_n қийматларга мос келган

Ψ_n функцияларнинг чизиқли комбинациясидан иборат бўлиши керак. Шу сабабли, умумий ҳолда ихтиёрий ҳолат функцияси

$$\Psi = \sum a_n \Psi_n \quad (3.2)$$

қатор шаклида ифодаланиши мумкин. Бунда йиғинди ҳамма n лар бўйича олинади, a_n — ўзгармас коэффициентлар.

Шундай қилиб, ҳар қандай тўлқин функцияни ис-
талган физикавий катталикнинг хос функциялари бў-
йича қаторга ёйиш мумкин деган хулосага келамиз.
Қаторга шундай ёйиш мумкин бўлган функциялар
системаси *функцияларнинг тўла системаси* дейилади.

(3.2) ёйилма ҳолати Ψ тўлқин функция билан тав-
сифланган системада f катталикнинг у ёки бу f_n қий-
матини топиш (ўлчаш йўли билан) эҳтимолини аниқ-
лаб беради. Ҳақиқатан ҳам, олдинги параграфда ай-
тилганларга биноан, бу эҳтимоллар Ψ ва Ψ^* бўйича
бичизиқли ифодалар билан аниқланиши, демак, a_n ва
 a_n^* лар бўйича бичизиқли бўлиши лозим. Ундан таш-
қари, ўз-ўзидан маълумки, бу ифодалар мусбат бўли-
ши керак. Ниҳоят, агар система тўлқин функцияси
 $\Psi = \Psi_n$ бўлган ҳолатда бўлса, f_n қийматнинг эҳтимоли
бирга айланиши керак ва агар (3.2) қаторда берилган
 Ψ_n ли ҳад бўлмаса, бу қиймат эҳтимоли нолга айла-
ниши керак. Бу шартни қаноатлантирувчи ягона мусбат
катталик a_n коэффициент модулининг квадратиدير.
Шундай қилиб, (3.2) қатордаги ҳар бир коэффициент
модулининг квадрати $|a_n|^2$ тўлқин функцияси Ψ бўлган
ҳолатда f катталикнинг мос f_n қиймати эҳтимолини
аниқлайди. Мумкин бўлган ҳамма f_n қийматлар эҳти-
молларининг йиғиндиси бирга тенг бўлиши керак, бош-
қача айтганда,

$$\sum_a |a_n|^2 = 1 \quad (3.3)$$

бўлиши керак.

f катталикнинг берилган ҳолатдаги *ўртача қийма-
ти* ($\bar{f}$) тушунчасини киритамиз. Ўртача қийматнинг
одатдаги таърифига биноан, $\bar{f}$ ни берилган катталик-
нинг f_n хос қийматларининг мос $|a_n|^2$ эҳтимолларга
кўпайтмалари йиғиндиси каби аниқлаймиз:

$$\bar{f} = \sum_n f_n |a_n|^2. \quad (3.4)$$

$\bar{f}$ ни Ψ функция ёйилмасининг коэффициентлари орқали эмас, Ψ нинг ўзи орқали ифодалайлик. (3. 4) га $a_n a_n^*$ кўпайтма кирганидан, қидирилайётган ифода Ψ^* ва Ψ лар бўйича бичизиқли бўлиши аёндир. Бирор математикавий оператор киритиб, уни $\hat{f}^1$ орқали белгилаймиз ва унга қуйидагича таъриф берамиз. Айтайлик, $(\hat{f} \Psi)$ ифода Ψ функцияга $\hat{f}$ оператор таъсирининг натижасини билдирсин. Бу ҳолда $\hat{f}$ операторнинг таърифи шундан иборатки, $(\hat{f} \Psi)$ ва Ψ^* комплекс қўшма функция кўпайтмасидан олинган интеграл $\bar{f}$ ўртача қийматни беради:

$$\bar{f} = \int \Psi^* (\hat{f} \Psi) dq. \quad (3. 5)$$

(3. 5) нинг Ψ^* ва Ψ лар бўйича бичизиқли бўлиши $\hat{f}$ операторнинг *чизиқли* бўлишини билдиради. Бундай операторлар қуйидаги хоссаларга эга бўлади²:

$$\hat{f}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{f}\Psi_1 + \hat{f}\Psi_2, \quad \hat{f}(a\Psi) = a\hat{f}\Psi,$$

бунда Ψ ва Ψ^* — ихтиёрий функциялар, a эса ихтиёрий доимий.

Шундай қилиб, квант механикасида ҳар бир физикавий катталikka маълум чизиқли оператор мос қилиб кўйилади.

Агар Ψ функция Ψ_n хос функциялардан бири бўлса, у ҳолда $\bar{f}$ ўртача қиймат шу ҳолатда f катталик қабул қиладиган f_n қийматга тенг бўлиши керак:

$$\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n dq = f_n.$$

Равшанки, бунинг учун

$$\hat{f} \Psi_n = f_n \Psi_n \quad (3. 6)$$

бўлиши, яъни $\hat{f}$ операторнинг таъсири натижасида Ψ_n хос функция тегишли f_n хос қийматга кўпайиши лозим.

¹ Ҳамма жойда операторни қалпсқли ҳарф билан белгилашни шартлашиб оламиз.

² Биз кейин, тушунмовчиликка олиб келмайдиган ҳолларнинг ҳаммасида $(\hat{f} \Psi)$ ифодани қавсиз ёзамиз. Бунда оператор ўзидан кейин турган ифодага таъсир қилади деб қаралади.

Демак, берилган физикавий катталиқнинг хос функцияси

$$\hat{f}\Psi = f\Psi \quad (3.7)$$

тенгламанинг ечими бўлади, бунда f — ўзгармас сон, хос қийматлар эса ана шу ўзгармаснинг шундай қийматларики, бу қийматларда тенглама олдиндан қўйилган шартларни қаноатлантирувчи ечимлар беради. Биз қуйида кўрамизки, ҳар хил физикавий катталиқларга мос операторларнинг кўриниши бевосита физикавий мулоҳазалардан топилиши мумкин ва бу ҳолда операторларнинг юқорида кўрсатилган хоссалари хос функция ва хос қийматларни (3. 7) тенгламаларни ечиш йўли билан топишга имкон беради.

Ҳар қандай ҳолатда ҳақиқий физикавий катталиқнинг хос қийматлари каби унинг ўртача қиймати ҳам ҳақиқийдир. Бу ҳол тегишли операторлар хоссаларига маълум даражада чек қўяди. (3. 6) ифодани унинг комплекс қўшмасига тенглаштириб, қуйидаги муносабатни оламиз:

$$\int \Psi^* (\hat{f}\Psi) dq = \int \Psi (\hat{f}^*\Psi^*) dq. \quad (3.8)$$

бу ерда f^* оператор $\hat{f}$ га комплекс қўшма операторни билдиради. Ихтиёрий чизиқли оператор учун бундай муносабат ўринли бўлмаганидан, бу муносабат операторнинг мумкин бўлган ҳамма кўринишларига қўйилган чегара ҳисобланади.

Ихтиёрий $\hat{f}$ оператор учун *транспонирланган* $\widetilde{\hat{f}}$ оператор мавжуд. У қуйидагича аниқланади:

$$\int \Phi (\hat{f}\Psi) dq = \int \Psi (\widetilde{\hat{f}}(\Phi)) dq, \quad (3.9)$$

бу ерда Ψ ва Φ — иккита ҳар хил функция. Агар Φ функция сифатида Ψ функцияга қўшма бўлган Ψ^* олинса, у ҳолда (3. 9) ни (3. 8) билан солиштириш

$$\widetilde{\hat{f}} = \hat{f}^* \quad (3.10)$$

бўлиши кераклигини кўрсатади. Бу шартни қаноатлантирувчи операторлар *Эрмит операторлари* деб аталади. Шундай қилиб, квант механикасининг математикавий аппаратида ҳақиқий физикавий катталиқ-

ларга мос келган операторлар Эрмит операторлари бўлиши лозим.

Шунингдек, комплекс физикавий катталиклар, яъни хос қийматлари комплекс бўлган катталикларни расман кўриб чиқиш мумкин. Айтайлик, f ана шундай катталик бўлсин. У ҳолда хос қийматлари f нинг хос қийматларига комплекс қўшма бўлган f^* катталикни киритиш мумкин. f^* га мос операторни $\hat{f}^+$ деб белгилаймиз. Бу операторни $\hat{f}$ га қўшма оператор дейилади. Умуман айтганда, бу операторни $\hat{f}^*$ комплекс қўшма оператордан фарқлаш лозим. Дарҳақиқат, $\hat{f}^+$ нинг таърифига биноан, бирор Ψ ҳолатда f^* катталикнинг ўртача қиймати

$$\bar{f}^* = \int \Psi^* \hat{f}^+ \Psi dq$$

бўлади. Иккинчи томондан,

$$(\bar{f})^* = \left[\int \Psi^* \hat{f} \Psi dq \right]^* = \int \Psi \hat{f}^* \Psi^* dq = \int \Psi^* \hat{f} \Psi dq$$

га эга бўламиз. Иккала ифодани тенглаштириб,

$$\hat{f}^+ = \hat{f}^* \quad (3.11)$$

ни топамиз. Бундан кўринадики, умуман айтганда $\hat{f}^+$ билан $\hat{f}^*$ бир хил нарса эмас. (3. 10) шартни энди қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\hat{f} = \hat{f}^+, \quad (3.12)$$

яъни ҳақиқий физикавий катталик оператори ўз қўшмасига тенг (шу сабабли, Эрмит операторларини ўз ўзига қўшма операторлар ҳам дейилади).

Айтайлик, f_n ва f_m ҳақиқий физикавий катталик f нинг иккита ҳар хил хос қийматлари, Ψ_n ва Ψ_m эса уларга тегишли хос функциялар бўлсин, яъни:

$$\hat{f} \Psi_n = f_n \Psi_n, \quad \hat{f} \Psi_m = f_m \Psi_m.$$

Биринчи тенгликнинг иккала томонини Ψ_n^* га, иккинчи тенгликка комплекс қўшма бўлган тенгликни эса Ψ_n^* га кўпайтириб, сўнгра уларни ҳадлаб айирсак,

$$\Psi_m^* \hat{f} \Psi_n - \Psi_n^* \hat{f}^* \Psi_m = (f_n - f_m) \Psi_n^* \Psi_m$$

ни ҳосил қиламиз. Бу тенгликнинг иккала томонини dq бўйича интеграллаймиз. $\hat{f}^* = \widehat{\hat{f}}$ бўлганидан, тенгликнинг чап томонидан олинган интеграл (3. 9) га асосан нолга тенг бўлади ва натижада

$$(f_n - f_m) \int \Psi_n \Psi_m^* dq = 0$$

ни ҳосил қиламиз. $f_n \neq f_m$ бўлганда бу ифодадан

$$\int \Psi_n \Psi_m^* dq = 0$$

ни оламиз, яъни ҳар хил хос функциялар ўзаро *ортогонал* бўлади. Бу натижани ушбу функцияларнинг нормалаштириш шарти билан биргаликда қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\int \Psi_n \Psi_m^* dq = \delta_{nm}, \quad (3. 13)$$

бу ерда $m = n$ да $\delta_{nn} = 1$ ва $n \neq m$ да $\delta_{mn} = 0$.

Шундай қилиб, Ψ_n хос функциялар тўплами нормаланган ва ортогонал (ёки қисқа қилиб, *ортонормаланган*) функцияларнинг тўла системасини ташкил қилади.

Энди (3. 2) ёйилманинг a_n коэффицентларини аниқлаш қийин эмас. Бунинг учун (3. 2) нинг иккала томонини Ψ_m^* га кўпайтириб, сўнгра dq бўйича интеграллаш kifоя. (3. 13) га асосан, йиғиндидаги $n = m$ ли ҳаддан бошқа ҳамма ҳадлар нолга айланади ва биз қуйидагига эга бўламиз:

$$a_m = \int \Psi \Psi_m^* dq. \quad (3. 14)$$

Биз бу ерда ҳамма вақт фақат битта f физикавий катталиқ ҳақида гапирмоқдамиз, аслида эса параграф бошида таъкидлаганимиздек, бир вақтда ўлчанадиган физикавий катталиклар тўплами ҳақида мулоҳаза юртишимиз керак эди. У ҳолда биз шундай ҳар бир $f, g \dots$ катталикларга ўзларининг $\hat{f}, \hat{g}, \dots$ операторлари мос келишини топган бўлур эдик. Ψ_n хос функциялар қаралаётган ҳамма катталиклар аниқ қийматга эга бўлган ҳолатларга, яъни $f_n, g_n, \dots$, хос қийматларнинг маълум тўпламига мос келади ва

$$\hat{f}\Psi = f\Psi, \quad \hat{g}\Psi = g\Psi$$

тенгламалар системасининг умумий ечими бўлади.

4- §. Операторларни қўшиш ва кўпайтириш

Агар иккита f ва g физикавий катталиikka мос келган операторлар $\hat{f}$ ва $\hat{g}$ бўлса, у ҳолда $f + g$ йиғиндига мос оператор $\hat{f} + \hat{g}$ бўлади. Квант механикасида ҳар хил физикавий катталикларни қўшиш бу катталикларнинг бир вақтда ўлчаниш ёки ўлчанмаслигига қараб, ҳар хил маънога эга. Агар f ва g бир вақтда ўлчанадиган катталик бўлса, у ҳолда $\hat{f}$ ва $\hat{g}$ операторлар умумий хос функцияларга эга бўлади ва айни пайтда бу функциялар $\hat{f} + \hat{g}$ оператор учун ҳам хос функциялар ҳисобланади. $\hat{f} + \hat{g}$ нинг хос қийматлари эса $f_n + g_n$ йиғиндидан иборат.

Агар f ва g бир вақтда аниқ қийматга эга бўлмаса, у ҳолда $f + g$ йиғинди анча тор маънода бўлади. Фақат бу $(f + g)$ катталикнинг ихтиёрий ҳолатдаги ўртача қиймати ҳар бир қўшилувчи ўргача қийматларининг йиғиндисига тенг деб айтиш мумкин:

$$\overline{f + g} = \overline{f} + \overline{g}. \quad (4.1)$$

Ушбу ҳолда $\hat{f} + \hat{g}$ оператор хос қиймат ва функцияларининг f ва g катталикларнинг хос қиймат ва функцияларига умуман ҳеч қандай алоқаси йўқ. Равшанки, агар $\hat{f}$ ва $\hat{g}$ Эрмит операторлари бўлса, $\hat{f} + \hat{g}$ ҳам Эрмит оператори бўлади. Шу сабабли, унинг хос қийматлари ҳақиқий бўлиб, шу хилда аниқланган янги $f + g$ катталикнинг хос қийматларини беради.

Энди f ва g бир вақтда ўлчанадиган катталиклар деб фараз қиламиз. Йиғинди билан бир қаторда уларнинг кўпайтмаси ҳақидаги тушунчани ҳам киритамиз. Бу кўпайтма тўғрисида гап кетганда хос қийматлари f ва g катталикларнинг хос қийматлари кўпайтмасига тенг бўлган катталик тушунилади. Бундай катталikka мос келган операторнинг функцияга таъсири биринчи ва сўнгра иккинчи операторнинг кетма-кет таъсиридан иборат эканлигини кўриш қийин эмас. Бу оператор математикавий жиҳатдан $\hat{f}$ ва $\hat{g}$ операторнинг кўпайтмаси шаклида ёзилади. Ҳақиқатан ҳам, агар Ψ_n функ-

циялар $\hat{f}$ ва $\hat{g}$ операторларнинг умумий хос функциялари бўлса, у ҳолда

$$\hat{f}\hat{g}\Psi_n = \hat{f}(\hat{g}\Psi_n) = \hat{f}g_n\Psi_n = g_n\hat{f}\Psi_n = g_nf_n\Psi_n \quad (4.2)$$

га эга бўламиз ($\hat{f}\hat{g}$ символ шундай операторни билдирадики, унинг Ψ га таъсири кетма-кет равишда аввало $\hat{g}$ нинг Ψ га ва сўнгра $\hat{f}$ нинг $\hat{g}\Psi$ га таъсиридан иборатдир).

Худди шу ҳилда $\hat{\hat{f}}\hat{g}$ оператор ўрнига кўпайтириш тартиби билан фарқ қилувчи $\hat{\hat{g}}\hat{f}$ операторни ҳам олиш мумкин эди. Равшанки, иккала операторнинг ҳам Ψ_n га таъсир натижаси бир хил бўлади. Лекин ҳар қандай Ψ тўлқин функцияни Ψ_n ларнинг чизиқли комбинацияси шаклида ёзиш мумкин бўлганидан, $\hat{\hat{f}}\hat{g}$ ва $\hat{\hat{g}}\hat{f}$ операторларнинг ихтиёрий функцияга таъсири ҳам бир хил бўлади. Бу факт $\hat{\hat{f}}\hat{g} = \hat{\hat{g}}\hat{f}$ символик ёки

$$\hat{\hat{f}}\hat{g} - \hat{\hat{g}}\hat{f} = 0 \quad (4.3)$$

кўринишда ёзилиши мумкин. Бу символик тенгликни қаноатлантирувчи иккита $\hat{f}$ ва $\hat{g}$ оператор ўзаро *коммутатив* операторлар дейилади¹.

Шундай қилиб, биз қуйидаги муҳим хулосага келамиз: агар иккита f ва g катталики бир вақтда аниқ қийматларга эга бўлса, у ҳолда уларнинг операторлари ўзаро коммутатив бўлади.

Тескари теоремани ҳам исбот қилиш мумкин: агар f ва g операторлар коммутатив бўлса, у ҳолда уларнинг ҳамма хос функцияларини умумий қилиб танлаш мумкин бўлади. Бу эса физикавий жиҳатдан мос физикавий катталикларнинг бир вақтда ўлчаниши мумкинлигини кўрсатади. Шундай қилиб, операторларнинг коммутативлиги физикавий катталикларнинг бир вақтда ўлчанишининг зарурий ва етарли шарти бўлиб ҳисобланади.

Агар f ва g лар бир вақтда ўлчанадиган катталиклар бўлмаса, у ҳолда уларни кўпайтириш тушунчаси

¹ $\hat{\hat{f}}\hat{g} - \hat{\hat{g}}\hat{f}$ айирманинг ўзи эса иккита операторнинг *коммутатори* деб аталади.

юқорида келтирилган тўғри маънога эга бўлмайди. Бу нарсани $\hat{f}\hat{g}$ нинг Эрмит оператори эмаслигидан ва шунинг учун у ҳеч қандай физикавий катталиққа мос кела олмаслигидан кўриниб турибди. Ҳақиқатан ҳам, транспонирланган оператор таърифига биноан

$$\int \Psi \hat{f}\hat{g}\Phi dq = \int (\hat{g}\Phi) (\hat{f}\Psi) dq$$

ифодани ёзамиз, бунда $\hat{f}$ оператор фақат Ψ функцияга, $\hat{g}$ оператор эса Φ функцияга таъсир қилади. Транспонирланган оператор таърифини яна бир марта қўллаб, қуйидагини ёзамиз:

$$\int \Psi \hat{f}\hat{g}\Phi dq = \int (\hat{f}\Psi) (\hat{g}\Phi) dq = \int \Phi \hat{g}\hat{f}\Psi dq.$$

Шундай қилиб, биз топган интегралда Ψ ва Φ нинг ўринлари олдингига нисбатан алмашиниб қолди. Бошқача айтганда, $\hat{g}\hat{f}$ оператор $\hat{f}\hat{g}$ операторнинг транспонирлангани бўлади ва шу сабабли,

$$\hat{g}\hat{f} = \hat{f}\hat{g} \quad (4.4)$$

деб ёзиш мумкин, яъни $\hat{f}\hat{g}$ га нисбатан транспонирланган оператор транспонирланган кўпайтувчиларнинг тескари тартибдаги кўпайтмасига тенгдир. (4.4) ифодани иккала томоннинг комплекс қўшмасини олиб,

$$(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}^+ \hat{f}^+ \quad (4.5)$$

ни топамиз. Агар $\hat{f}$ ва $\hat{g}$ операторларнинг ҳар бири Эрмит оператори бўлса, у ҳолда $(\hat{f}\hat{g})^+ = \hat{g}\hat{f}$ бўлади. Бундан фақат $\hat{f}$ ва $\hat{g}$ кўпайтувчилар ўзаро коммутатив бўлгандагина $\hat{f}\hat{g}$ нинг Эрмит оператори бўлиши келиб чиқади.

5- §. Узлуксиз спектр

Дискрет спектр хос функцияларининг хусусиятларини тавсифловчи 3- ва 4- § да келтирилган муносабатлар узлуксиз спектр хос функциялари учун ҳам осонгина умумлаштирилиши мумкин. Биз бу ерда ҳам-

ма мулоҳазаларни такрорлаб ўтирмай, тегишли ифодаларнинг ўзинигина келтирамиз.

Айтайлик, f узлуксиз спектрга эга бўлган физикавий катталиқ бўлсин. Унинг хос қийматларини индексиз шу f ҳарфи билан, тегишли хос функцияларини эса Ψ_f билан белгилаймиз. Ихтиёрий Ψ тўлқин функция дискрет спектрли катталиқнинг хос функциялари бўйича (3. 2) қаторга ёйилгани каби, энди у узлуксиз спектрли катталиқнинг хос функциялари бўйича интегралга ёйилиши мумкин. Бу хил ёйилиш қуйидагича кўринишда бўлади:

$$\Psi(q) = \int a_f \Psi_f(q) df. \quad (5. 1)$$

Ёйиш коэффициентлари эса

$$a_f = \int \Psi(q) \Psi_f^*(q) dq \quad (5. 2)$$

бўлади.

f катталиқ узлуксиз қийматлар қаторини қабул қилганидан, у ёки бу ягона қиймат эҳтимоли ҳақида эмас, балки катталиқ қийматининг f ва $f + df$ чексиз кичик интервал ичида топилиш эҳтимоли ҳақидагина гапириш мумкин. Дискрет спектр учун f_n хос қийматнинг эҳтимоли $|a_n|^2$ бўлгани каби, узлуксиз спектр учун бу эҳтимол $|a_f|^2 df$ ифода орқали берилади. Мумкин бўлган ҳамма f қийматлари эҳтимолларининг йиғиндиси 1 га тенг бўлганидан, дискрет спектр учун келтирилган (3. 3) муносабатга ўхшаш

$$\int |a_f|^2 df = 1 \quad (5. 3)$$

ифода ҳосил қиламиз.

Ёзилган формулалар Ψ_f хос функциялар учун маълум бир нормалаштиришни кўзда тутди. Улар айнан қуйидаги қоида бўйича нормалаштирилиши керак:

$$\int \Psi_{f'}^* \Psi_f dq = \delta(f' - f), \quad (5. 4)$$

бу ерда ўнг томонда δ -функция турибди (унинг таърифи ва хоссалари 1- китобнинг 54- § да берилган эди¹⁾). Ҳақиқатан ҳам, (5. 1) ни (5. 2) га қўйиб, айнан бажарилиши лозим бўлган

$$a_f = \int a_{f'} \left(\int \Psi_{f'}^* \Psi_f dq \right) df'$$

¹⁾ Назарий физикага дельта-функция Дирак томонидан киритилган.

тенгликка келамиз. (5. 4) шартга асосан бу талаб ҳақиқатан ҳам бажарилади, чунки δ - функциянинг хос-саси бўйича

$$\int a_f \cdot \delta(f' - f) df' = a_f.$$

(5. 4) нормалаштириш қоида-си дискрет спектр учун ёзилган (3. 13) шартнинг ўрнига ёзилди. Кўриб туриб-мизки, Ψ_f ва $\Psi_{f'}$ функциялар $f \neq f'$ бўлганда аввалги-дек, ўзаро ортогоналдир. Узлуксиз спектр хос функ-цияларининг $|\Psi_f|^2$ квадратларидан олинган интеграл-лар эса чексизга айланади. Бу хил узоқлашишнинг келиб чиқиши ва маъноси масаласига биз 10- § охи-рида қайтамиз.

Агар (5. 2) ни (5. 1) га қўй-сак,

$$\Psi(q) = \int \Psi(q') \left(\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q) df \right) dq'$$

бўлади. Бундан

$$\int \Psi_f^*(q') \Psi_f(q) df = \delta(q - q') \quad (5. 5)$$

бўлиши кераклигини топамиз¹.

(5. 1), (5. 4) формулалар жуфтини (5. 2), (5. 5) жуфт билан солиштириб, биринчидан, $\Psi_f(q)$ функция-лар $\Psi(q)$ ихтиёрий функцияни a_f ёйиш коэффициент-лари ёрдамида ёйишини, иккинчидан, (5. 2) формулани $a_f = a(f)$ функцияларнинг $\Psi_f^*(q)$ функциялар бўйича ёйилмаси деб қараш мумкинлигини кўрамиз. (5. 1) даги a_f ёйиш коэффициентлари ролини (5. 2) да $\Psi(q)$ бажаради. $a(f)$ функция ҳам $\Psi(q)$ каби система ҳола-тини тўла аниқлайди. Шу сабабли, a_f ни f - тасаввур-даги тўлқин функция деб аталади ($\Psi(q)$ функция эса координата ёки q - тасаввурдаги тўлқин функция дейи-лади). $|\Psi(q)|^2$ ифода системанинг dq интервалдаги координатага эга бўлиш эҳтимолини аниқлаганидек, $|a(f)|^2$ ифода f катталик қийматларининг берилган df интервалдаги эҳтимолини аниқлайди. $\Psi_f(q)$ функция-лар бир томондан, f катталикнинг q - тасаввурдаги

¹ Шунга ўхшаш муносабат. албатта, 'дискрет спектр учун ҳам чиқарилган, унинг кўраниши қуйидагича:

$$\sum_n \Psi_n^*(q') \Psi_n(q) = \delta(q - q'). \quad (5. 5a)$$

хос функциялари бўлса, иккинчи томондан, унинг $\Psi_f(q)$ комплекс қўшмаси q координатанинг f -тасаввурдаги хос функцияларини беради.

Шундай физикавий катталиклар ҳам мавжудки, улар ўз қийматларининг маълум соҳасида дискрет спектрга, қолган соҳада эса узлуксиз спектрга эга бўлади. Бундай катталикларнинг хос функциялари учун албатта, ушбу ва бундан олдинги параграфларда чиқарилган муносабатларнинг ҳаммаси ўринлидир. Фақат шуни таъкидлаш лозимки, бунда функцияларнинг тўла системаси иккала спектр хос функцияларининг тўпламидан ташкил топади. Шунинг учун, ихтиёрий функцияни шундай катталиқнинг хос функциялари бўйича ёйиш қуйидаги кўринишни олади:

$$\Psi(q) = \sum_n a_n \Psi_n(q) + \int a_f \Psi_f(q) df, \quad (5.6)$$

бунда йиғинди дискрет спектр бўйича, интеграл эса ҳамма узлуксиз спектр бўйича олинади.

Узлуксиз спектрли катталиқка q координатанинг ўзи мисол бўлади. Координатага мос операторнинг q га оддий кўпайтириш амали экани аён. Ҳақиқатан ҳам, координата ҳар хил қийматларининг эҳтимоли $|\Psi(q)|^2$ орқали аниқланганидан, унинг ўртача қиймати:

$$\bar{q} = \int q |\Psi|^2 dq \equiv \int \Psi^* q \Psi dq$$

бўлади. Бу ифодани операторлар таърифи (3. 5) билан солиштирсак, кўрамизки,

$$\hat{q} = q \quad (5.7)$$

ҳосил бўлади¹. Бу операторнинг хос функциялари ҳам умумий қоидага кўра, $q\Psi_{q_0} = q_0\Psi_{q_0}$ тенгламадан топилиши лозим. Биз бу ерда q_0 орқали вақтинча, q ўзгарувчидан фарқли равишда, координатанинг конкрет қийматларини белгиладик. Бу тенглик ё $\Psi_{q_0} = 0$ да, ё

¹ Кейинчалик биз белгилашларни соддалаштириш мақсадида, маълум катталиқка кўпайтириш амалидан иборат бўлган операторларни қалпоқсиз, яъни шу катталиқнинг ўзи кўринишида ёзамиз.

$$q = q_0 \text{ да қаноатлангани сабабли } (q \neq q_0 \text{ да } \Psi_{q_0} = 0, q = q_0 \text{ да } \Psi_{q_0} \text{ ихтиёрий — тарж) равшанки,}$$

$$\Psi_{q_0} = \delta(q - q_0) \quad (5.8)$$

нормалаштириш шартини қаноатлантирувчи тўлқин функция бўлади.

6- §. Чегаравий ўтиш

Классик механика квант механиканинг чегаравий бир ҳолидир. Шундай экан, бу чегаравий ҳолга ўтиш қандай амалга ошади деган савол туғилади.

Квант механикасида электрон унинг ҳар хил координата қийматларини аниқловчи тўлқин функция ёрдамида тавсифланади. Бу функция ҳақида бизга фақат унинг бирор хусусий ҳосилали чизиқли дифференциал тенгламанинг ечими эканлиги маълум. Классик механикада эса электрон ҳаракат тенгламаларидан тўла аниқланадиган траектория бўйлаб ҳаракатланувчи моддий зарра деб қаралади.

Квант ва классик механика орасидаги ўзаро муносабатга маълум маънода ўхшаш бўлган муносабат электродинамикада тўлқин ва геометрик оптика орасида ҳам ўринлидир. Тўлқин оптикада электромагнит тўлқинлар маълум чизиқли дифференциал тенгламалар системасини (Максвелл тенгламаларини) қаноатлантирувчи электр ва магнит майдон векторлари орқали тавсифланади. Геометрик оптикада эса ёруғлик аниқ траекториялар — нурлар бўйлаб тарқалади деб қаралади. Бундай ўхшашлик, квант механикасида классик механикага ўтиш тўлқин оптикадан геометрик оптикага ўтишга ўхшайди деган хулосага олиб келади.

Тўлқин оптикадан геометрик оптикага ўтиш математикавий нуқтаи назардан, қандай бажарилишини эслатиб ўтамиз (I, 74- § га қаранг). Айтайлик, u электромагнит тўлқинидаги бирор майдон компонентаси бўлсин. Уни ҳақиқий a амплитуда ва φ фаза (бу геометрик оптикада эйконал деб аталади) орқали қуйидагича ёзиш мумкин: $u = ae^{i\varphi}$. Геометрик оптиканинг чегаравий ҳоли қисқа тўлқин узунликларига мос келади. Бу математикавий жиҳатдан кичик масофаларда φ нинг ўзгариши катта бўлишини ифодалайди, яъни хусусий ҳолда, фазани абсолют қиймати бўйича катта деб ҳисоблаш мумкинлигини билдиради.

Айтилганларга биноан классик механиканинг чегаравий ҳолига квант механикасида $\Psi = ae^{i\varphi}$ кўриниш-

даги тўлқин функция (бунда a — секин ўзгарувчи функция, φ эса катта қийматлар қабул қилади) мос келади деган фаразга асосланамиз. Маълумки, механикада зарра траекторияси вариацион принцип ёрдамида аниқланади. Бу принципга биноан механикавий системанинг S таъсир функцияси минимал бўлиши керак (энг кичик таъсир принципи). Геометрик оптикада эса нурлар йўли Ферма принциpidан топилади. Бу принципга кўра нурнинг „оптикавий йўл узунлиги“, яъни унинг йўлнинг боши ва охиридаги фазалари фарқи минимал бўлиши керак.

Мана шу ўхшашликка асосланиб, классик чегаравий ҳолда тўлқин функциянинг фазаси қаралаётган физикавий системанинг S механикавий таъсир функциясига пропорционал, яъни $S = \text{const} \cdot \varphi$ бўлиши керак деб айтишимиз мумкин. Пропорционаллик коэффициентини *Планк доимийси* деб аталади ва $\hbar$ ҳарфи билан белгиланади¹. φ ўлчамсиз катталиқ бўлганидан, $\hbar$ доимий таъсир ўлчамлигига эга ва

$$\hbar = 1,054 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек}$$

га тенг.

Шундай қилиб, „қарийб классик бўлган“ (ёки *квазиклассик*) физикавий системанинг тўлқин функцияси

$$\Psi = ae^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (6.1)$$

кўринишга эга бўлади. Планк доимийси ҳамма квант ҳодисаларида фундаментал роль ўйнайди. Унинг нисбий катталиги (худди шундай ўлчамли бошқа катталикларга нисбатан) у ёки бу физикавий системанинг „квантланганлик даражасини“ аниқлайди.

Квант механикасидан классик механикага ўтиш катта фазага мос равишда расман $\hbar \rightarrow 0$ лимитга ўтиш каби (тўлқин оптикадан геометрик оптикага ўтиш $\lambda \rightarrow 0$ лимитга ўтиш каби бўлганидек) тавсифланиши мумкин.

Биз тўлқин функциянинг чегаравий ҳолдаги кўринишини аниқладик, лекин унинг траектория бўйлаб юз берадиган классик ҳаракат билан қандай боғланганлиги масаласи ҳали кўрилгани йўқ. Умумий ҳолда, тўлқин

¹ Бу коэффициент физикага 1900 йилда *Макс Планк* томонидан киритилган. Ушбу китобнинг ҳамма жойида, $\hbar$ доимий деб, аслида Планк доимийси h нинг 2π га нисбати олинган (*Дирак* киритган белгилаш).

функция билан тавсифланувчи ҳаракат маълум траектория бўйлаб бўладиган ҳаракатга ўта олмайди. Унинг классик ҳаракат билан боғланиши шундан иборатки, агар бирор бошланғич вақт моментиди тўлқин функция ва u билан биргаликда координата эҳтимолларининг тақсимооти берилган бўлса, u ҳолда кейинги вақт моментларида бу тақсимоот классик механика қонунларига биноан „силжийди“ (бу масала 26- § да батафсилроқ кўрилган).

Маълум траектория бўйлаб юз берадиган ҳаракатни ҳосил қилиш учун, алоҳида кўринишга эга ва фазанинг жуда кичик қисмидагина нолдан фарқли бўлган тўлқин функцияга (*тўлқин пакети* деб аталувчи) асосланиш лозим; бу қисмининг ўлчамларини $\hbar$ билан биргаликда нолга интиштириш мумкин. Ана шундагина квазиклассик ҳолда тўлқин пакети фазода зарранинг классик траекторияси бўйлаб силжийди деб айтиш мумкин.

Ниҳоят, квантомеханикавий операторлар бу чегаравий ўтишда тегишли физикавий катталикларга кўпайтириш амалига айланиб қолишлари керак.

7- §. Зичлик матрицаси

Системани тўлқин функция ёрдамида тавсифлаш, квант механикасида мумкин бўлган энг тўла тавсифлашдир (1- § охирида кўрсатилган маънода).

Бу ҳилда тавсифлаб бўлмайдиган ҳолатларни ҳам учратиш мумкин. Бирор катта ёпиқ системанинг бир қисмидан иборат система ҳолати бунга мисол бўлади. Фараз қилайлик, ёпиқ система бир бутунлигича $\Psi(q, x)$ тўлқин функция билан тавсифланувчи маълум ҳолатда бўлсин. Бунда x қаралаётган системанинг координаталар тўпламини билдиради, q эса ёпиқ системанинг бошқа координаталарини билдиради. Бу функция умуман айтганда, фақат x ва фақат q нинг функциялари кўпайтмасига мутлақо ажралмайди, демак, қаралаётган система ўз тўлқин функциясига эга бўлмайди.

Айтайлик, бирор f физикавий катталик ана шу системага қарашли катталик бўлсин. Шунинг учун унинг оператори q га эмас, фақат x координатага таъсир қилади. Қаралаётган ҳолда бу катталикнинг ўртача қиймати

$$\bar{f} = \iint \Psi^*(q, x) \hat{f} \Psi(q, x) dq dx \quad (7.1)$$

бўлади. Қуйидаги

$$\rho(x', x) = \int \Psi^*(q, x') \Psi(q, x) dq \quad (7.2)$$

формула орқали аниқланувчи $\rho(x', x)$ функция кири-тамиз, бу ерда интеграл фақат q координата бўйича олинади. Бу интегрални системанинг *зичлик матрицаси* деб аталади. $x = x'$ деб, равшанки, система координаталари учун эҳтимоллар тақсимотини берувчи

$$\rho(x, x) = \int |\Psi^*(q, x)|^2 dq \quad (7.3)$$

функцияни оламир.

Зичлик матрицаси ёрдамида $\bar{f}$ ўртача қийматни қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин:

$$\bar{f} = \int [\hat{f} \rho(x', x)]_{x'=x} dx. \quad (7.4)$$

Бу ерда $\hat{f}$ оператор $\rho(x', x)$ функциядаги x ўзгартурувчиларгагина таъсир қилади. Таъсир натижаси ҳисоблангандан сўнг $x = x'$ дейиш лозим. Шундай қилиб, зичлик матрицасини билган ҳолда системани характерловчи ҳар қандай катталиқнинг ўртача қийматини ҳисоблаш мумкин экан. Бу айтилганлардан $\rho(x', x)$ ёрдамида шунингдек система физикавий катталиқларининг ҳар қандай қийматлари эҳтимолини ҳам аниқлаш мумкин деган хулоса чиқади.

Шундай қилиб, биз тўлқин функцияга эга бўлмаган системанинг ҳолати зичлик матрицаси орқали тавсифланиши мумкин деган хулосага келамиз¹. Зичлик матрицаси гарчи моҳият жиҳатидан бир бутун ёпиқ система ҳолатига боғлиқ бўлса-да, лекин унга ушбу системага алоқадор бўлмаган q координаталар кирмайди.

Зичлик матрицаси ёрдамида тавсифлаш системани квант механикасида тавсифлашнинг энг умумий шаклидир. Тўлқин функция ёрдамида тавсифлаш эса $\rho(x', x) = \Psi^*(x') \Psi(x)$ кўринишдаги зичлик матрицасига мос келувчи хусусий ҳолдир. Бу хусусий ҳол билан умумий ҳол орасида муҳим фарқ бор. Тўлқин функцияга эга бўлган ҳолатлар (бундай ҳолатлар *соф*

¹ Бундай ҳолатларни квант механикасида тавсифлаш усули бир-биридан мустақил ҳолда Л. Д. Ландау ва Ф. Блох томонидан яратилган (1927).

ҳолатлар дейилади) учун ўлчаш процессларининг шундай тўла системаси мавжудки, у муқаррар аниқ натижаларга олиб келади. Лекин зичлик матрицасигагина эга бўлган ҳолатлар (улар *аралаш ҳолатлар* дейилади) учун эса олдиндан аниқ айтилган натижаларга олиб келувчи ўлчашлар тўла системаси мавжуд эмас.

II боб

КВАНТ МЕХАНИКАСИДА САҚЛАНИШ ҚОНУНЛАРИ

8- §. Гамильтониан

Квант механикасида Ψ тўлқин функция физикавий система ҳолатини тўла аниқлайди. Бунинг маъноси шуки, муайян бир моментда берилган тўлқин функция системанинг шу моментдаги хоссаларинигина тавсифлаб қолмай, балки унинг келгуси вақт моментларидаги хатти-ҳаракатини ҳам аниқлаб беради (квант механикаси умуман қодир бўлган тўлалик билан, албатта). Бу ҳолат математикавий жиҳатдан тўлқин функциядан вақт бўйича олинган $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ хусусий ҳосиланинг берилган моментдаги қиймати Ψ функциянинг шу моментдаги қиймати орқали аниқланади деб ифодаланади. Бунда бу боғланиш суперпозиция принципига биноан чизиқли бўлиши керак. Энг умумий кўринишда бу боғланишни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad (8.1)$$

бу ерда $\hat{H}$ — бирор чизиқли оператор; $i\hbar$ кўпайтма қандай мақсадда киритилгани кейинроқ тушунтирилади.

$\int \Psi^* \Psi dq$ интеграл вақтга боғланмаган доимий катталиқ бўлганидан

$$\frac{d}{dt} \int \Psi^* \Psi dq = \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} dq + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi dq = 0$$

ифодани ҳосил қиламиз.

Бу ифодага (8. 1) ни қўйиб ва иккинчи интегралга транспонирланган оператор таърифни қўллаб ($\frac{1}{i\hbar}$ умумий кўпайтувчига қисқартириб)

$$\int \Psi^* \hat{H} \Psi dq - \int \Psi \hat{H}^* \Psi^* dq = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq - \\ - \int \Psi^* \hat{H}^* \Psi dq = \int \Psi^* (\hat{H} - \hat{H}^*) \Psi dq = 0$$

ифодани ёзамиз. Бу тенглик ихтиёрий Ψ функция учун бажарилиши керак бўлгани сабабли, бу ердан айнан $\hat{H} = \hat{H}^+$ бўлиши, яъни $\hat{H}$ нинг Эрмит оператори бўлиши лозимлиги келиб чиқади.

$\hat{H}$ нинг қайси физикавий катталиikka мос келишини аниқлайлик. Шу мақсадда тўлқин функциянинг (6. 1) чегаравий ифодасидан фойдаланиб, қуйидагини ёзамиз:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi$$

(секин ўзгарадиган a амплитудадан ҳосила олмаса ҳам бўлади). Бу тенгликни (8. 1) ифода билан солиштириб, чегаравий ҳолда $\hat{H}$ операторнинг $-\frac{\partial S}{\partial t}$ катталиikka кўпайтириш амали эканини топамиз. Бу эса $-\frac{\partial S}{\partial t}$ катталик чегаравий ҳолда $\hat{H}$ Эрмит оператори ўтадиган физикавий катталик эканини билдиради.

Лекин $-\frac{\partial S}{\partial t}$ ҳосила механикавий системанинг H Гамильтон функциясининг ўзидир (Гамильтон — Якоби тенгламаси — *тарж.*). Шундай қилиб, $\hat{H}$ квант механикасида Гамильтон функциясига мос келувчи оператор экан; уни системанинг *Гамильтон оператори* ёки қисқача *гамильтониани* деб аталади. Агар гамильтонианининг кўриниши аниқ бўлса, у ҳолда (8. 1) тенглама берилган физикавий системанинг тўлқин функциясини аниқлайди. Квант механикасининг бу асосий тенгламасини *тўлқин тенглама* дейилади.

9- §. Операторларни вақт бўйича дифференциаллаш

Квант механикасида физикавий катталикдан вақт бўйича ҳосила олиш тушунчаси классик физикадаги каби маънода аниқланмайди. Ҳақиқатан ҳам, классик

физикадаги ҳосила катталикининг бир-бирига яқин, лекин ҳар хил вақт моментларидаги қийматлари орқали аниқланади. Аммо квант механикасида муайян вақт моментидан ўлчанган (аниқ қийматга эга бўлган) катталик кейинги моментларда умуман ҳеч қандай аниқ қийматга эга бўлмайди. Бу масала 1- § да батафсил кўрилган эди.

Шу сабабли, ҳосила тушунчаси квант механикасида бошқача тарзда аниқланиши лозим. f катталикдан олинган $\dot{f}$ ҳосилани ўрғача қиймати $\overline{\dot{f}}$ ўрғача қийматдан вақт бўйича олинган $\hat{f}$ ҳосилага тенг катталик деб таърифлаш табиий. Шундай қилиб, таърифга асосан:

$$\overline{\dot{f}} = \hat{f}. \quad (9.1)$$

Бу таърифга асосланиб, $\dot{f}$ катталикка мос келган $\hat{f}$ квантомеханикавий оператор учун ифода топиш қийин эмас:

$$\begin{aligned} \overline{\dot{f}} = \hat{f} &= \frac{d}{dt} \int \Psi^* \hat{f} \Psi dq = \\ &= \int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \Psi dq + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{f} \Psi dq + \int \Psi^* \hat{f} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dq. \end{aligned}$$

Бу ерда $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}$ вақтни ўзида параметр сифатида тутувчи $\hat{f}$ оператордан шу параметр (вақт) бўйича олинган хусусий ҳосиладир. $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ ва $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$ ўрнига уларнинг (8.1) даги ифодаларини қўйиб,

$$\begin{aligned} \overline{\dot{f}} &= \int \Psi^* \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \Psi dq + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^* \Psi^*) \hat{f} \Psi dq - \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \hat{f} (\hat{H} \Psi) dq \end{aligned}$$

ифодани оламиз.

$\hat{H}$ Эрмит оператори бўлганидан

$$\int (\hat{H}^* \Psi^*) (\hat{f} \Psi) dq = \int \Psi^* \hat{H} \hat{f} \Psi dq;$$

шундай қилиб

$$\bar{f} = \int \Psi^* \left(\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{f} - \frac{i}{\hbar} \hat{f} \hat{H} \right) \Psi dq$$

ифодага эга бўламиз.

Иккинчи томондан, ўртача қиймат таърифига асосан $\bar{f} = \int \Psi^* \hat{f} \Psi dq$ бўлганидан, интеграл остидаги қавслар ичида турган ифода биз излаётган оператор

$$\hat{f} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{f} - \hat{f} \hat{H}) \quad (9.2)$$

ни беради. Агар $\hat{f}$ оператор вақтга ошкор боғлиқ бўлмаса, у ҳолда $\hat{f}$ оператор $\hat{f}$ оператор билан гамильтониан орасидаги коммутаторга айланиб қолади (кўпайтувчи аниқлигида).

Операторлари вақтга ошкор боғлиқ бўлмаган ва шу билан бирга гамильтониан билан коммутатив, яъни $\hat{f} = 0$ бўлган физикавий катталиклар жуда муҳим категорияни ташкил қилади. Бундай катталиклар *сақланувчи катталиклар* дейилади. Улар учун $\dot{\bar{f}} = \dot{\hat{f}} = 0$, яъни $\bar{f} = \text{const}$. Бошқача айтганда, бундай катталикларнинг ўртача қийматлари вақт ўтиши билан ўзгармайди. Демак, берилган ҳолатда f катталик аниқ қийматга эга бўлса (яъни тўлқин функция $\hat{f}$ операторнинг хос функцияси бўлса), у ҳолда кейинги вақт моментларида ҳам у худди шу аниқ қийматга (худди шу қийматнинг ўзига) эга бўлаверади деб таъкидлаш мумкин.

10- §. Стационар ҳолатлар

Ёпиқ система (ва шунингдек, ўзгармас ташқи майдонда жойлашган система) нинг гамильтониани вақтга ошкор боғлиқ бўла олмайди. Бу натижа бундай физикавий система учун вақтнинг ҳамма моментлари эквивалент бўлишидан келиб чиқади. Иккинчи томондан, ҳар қандай оператор ўзи билан ўзи коммутатив бўлганидан, ўзгарувчан ташқи майдонда жойлашмаган системанинг Гамильтон функцияси сақланади деган хулосага келамиз. Маълумки, сақланувчи Гамильтон функция-

си энергия деб аталар эди (I, 6- § га қаранг). Квант механикасида энергиянинг сақланиш қонуни қуйидаги маънога эга: агар бирор квант ҳолатида энергия аниқ қийматга эга бўлса, бу қиймат вақт ўтиши билан ўзгармай қолади.

Энергия аниқ қийматга эга бўладиган ҳолатлар *системанинг стационар ҳолатлари* деб аталади. Бу ҳолатлар Гамильтон операторининг хос функциялари ҳисобланган Ψ_n тўлқин функциялар, яъни $\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n$ тенгламани қаноатлантирувчи тўлқин функциялар орқали тавсифланади. Бу ерда E_n — энергиянинг хос қийматлари. Шунга кўра, Ψ_n учун ёзилган (8. 1) тўлқин тенглама

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

вақт бўйича бевосита интегралланиши ва қуйидаги ифодани бериши мумкин:

$$\Psi_n = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q), \quad (10. 1)$$

бу ерда ψ_n — фақат координатага боғлиқ функция. Стационар ҳолатлар тўлқин функцияларининг вақтга боғланиши мана шу формула билан аниқланади.

Кичик ψ ҳарфи орқали биз стационар ҳолатлар тўлқин функцияларининг вақтга боғлиқ бўлмаган қисмини белгилаймиз. Бу функциялар ва шунингдек, энергиянинг хос қийматлари

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (10. 2)$$

тенгламадан аниқланади. Энергияси мумкин бўлган энергия қийматларидан энг кичигига тенг бўлган стационар ҳолат системанинг нормал ёки *асосий ҳолати* дейилади.

Ихтиёрий Ψ тўлқин функцияни стационар ҳолатлар тўлқин функциялари бўйича қаторга ёйилса, у қуйидаги

$$\Psi = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(q) \quad (10. 3)$$

кўринишга эга бўлади. Ушбу ёйилмадаги коэффициентлар квадрати $|a_n|^2$ одатдагидек, энергиянинг ҳар хил қийматлари эҳтимолини беради.

Стационар ҳолатда координата учун эҳтимоллар тақсимооти $|\Psi_n|^2 = |\psi_n|^2$ орқали аниқланади; бу тақсимоот

вақтга боғлиқ эмас. Худди шу нарса оператори вақтга ошкор боғлиқ бўлмаган ҳар қандай f физикавий катталикнинг ўртача қиймати

$$\bar{f} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_n dq = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_n dq$$

учун ҳам тааллуқлидир.

Сақланувчи ҳар қандай катталик операторининг гамильтониан билан коммутатив бўлиши юқорида кўрсатилган эди. Бу деган сўз, сақланувчи ҳар қандай физикавий катталик энергия билан бир вақтда ўлчаниши мумкин демакдир.

Ҳар хил стационар ҳолатлар орасида шундайлари ҳам мавжудки, улар бошқа бирор физикавий катталик қийматларидан фарқ қилгани ҳолда энергиянинг айни бир хос қийматига ёки бошқача айтганда, системанинг битта *энергетик сатҳига* тегишли бўлади. Шу хилдаги ўзига бир қанча стационар ҳолатлар мос келадиган сатҳлар *айниган* сатҳлар деб аталади. Айниган сатҳлар ҳосил бўлишининг сабаби, физикавий нуқтаи назардан энергиянинг, умуман айтганда, ўзича физикавий катталикларнинг тўла системасини туза олмаслигидадир.

Хусусан, агар иккита сақланувчи f ва g физик вий катталикнинг операторлари ўзаро коммутатив бўлмаса, системанинг энергетик сатҳлари, умуман айтганда, айниган бўлади. Ҳақиқатан ҳам, энергия билан бир вақтда f катталик ҳам аниқ қийматга эга бўладиган стационар ҳолат функциясини ψ билан белгилайлик. У ҳолда $\hat{g}\psi$ функция ψ функцияга тенг бўлмайди деб айтиш мумкин (ўзгармас кўпайтувчигача аниқлик билан). Акс ҳолда, берилган стационар ҳолатда g ҳам аниқ қийматга эга бўлар эди, бундай бўлиши мумкин эмас, чунки f ҳамда g ни бир вақтда ўлчаб бўлмайди. Иккинчи томондан, $\hat{g}\psi$ функция гамильтонианининг хос функцияси бўлиб, у ҳам E энергиянинг ψ функцияга мос қийматига тегишлидир, яъни

$$\hat{H}(\hat{g}\psi) = \hat{g}\hat{H}\psi = E(\hat{g}\psi).$$

Демак, E энергиянинг битта қийматига биттадан ортиқ (ψ ва $\hat{g}\psi$ — *тарж.*) функция мос келади. Бу эса сатҳнинг айниганлигини билдиради,

Равшанки, энергиянинг битта айниган қийматига

тегишли ҳар хил функцияларнинг исталган чизиқли комбинацияси ҳам энергиянинг шу қийматининг хос функциясидир. Бошқача қилиб айтганда, энергиянинг айниган қийматига мос келувчи хос функцияларни бир қийматли танлаб бўлмайди. Айниган сатҳларнинг ихтиёрий танланган хос функциялари, умуман айтганда, ўзаро ортогонал эмас. Лекин шунга қарамай, уларнинг чизиқли комбинацияларини тегишлича танлаш йўли билан ўзаро ортогонал ва нормалаштирилган хос функциялар тўпламини ҳосил қилиш мумкин.

Энергия хос қийматларининг спектри дискрет ҳам, узлуксиз ҳам бўлиши мумкин. Дискрет спектрнинг стационар ҳолати ҳамма вақт системанинг *финит* ҳаракатига, яъни система ёки унинг бирор қисми чексизликка кетмайдиган ҳаракатга мос келади. Ҳақиқатан ҳам, дискрет спектр хос функциялари учун бутун фазо бўйича

олинган $\int |\Psi|^2 dq$ интеграл чеклидир. Интегралнинг чеклилиги, ҳар ҳолда $|\Psi|^2$ нинг етарли даражада тез камайиб чексизда нолга айланишини билдиради. Бошқача қилиб айтганда, координаталар чексиз катта қийматларининг эҳтимоли нолга тенг, яъни система финит ҳаракат қилади ёки *боғланган* ҳолатда бўлади.

Узлуксиз спектр тўлқин функциялари учун $\int |\Psi|^2 dq$ узоқлашувчи интеграл бўлади. Бу ерда $|\Psi|^2$ бевосита координаталарнинг ҳар хил қийматлари эҳтимолларини аниқламайди ва фақат шу эҳтимолларга пропорционал катталик деб қаралиши лозим. $\int |\Psi|^2 dq$ кўринишида-

ги интегралнинг узоқлашиши ҳар доим $|\Psi|^2$ нинг чексизликда нолга айланмаслиги (ёки етарли даражада тез нолга айланмаслиги) билан боғлиқдир. Шу сабабли фазонинг исталганча катта, лекин чекли ёпиқ сиртдан ташқаридаги соҳаси бўйича олинган $\int |\Psi|^2 dq$ интеграл ҳар ҳолда узоқлашувчи интеграл бўлади деб айтиш мумкин. Бу деган сўз, кўрилатган ҳолатда система (ёки унинг бирор қисми) чексизликда жойлашади демакдир. Шундай қилиб, узлуксиз спектрнинг стационар ҳолатлари системанинг *инфинит* ҳаракатига мос келади.

11- §. Физикавий катталикларнинг матрицалари

Қулайлик учун қаралаётган система дискрет энергетик спектрга эга деб фараз қиламиз (қуйида олина-

диган ҳамма ифодалар узлуксиз спектр учун ҳам бевосита умумлаштирилади). Айтайлик, $\Psi = \sum a_n \Psi_n$ ихтиёрий тўлқин функциянинг стационар ҳолатлар тўлқин функциялари бўйича ёйилмаси бўлсин. Агар бу ёйилмани бирор f катталикининг ўртача қиймати (3. 5) га қўйсак,

$$f = \sum_n \sum_m a_n^* a_m f_{nm}(t) \quad (11. 1)$$

ҳосил бўлади, бу ерда $f_{nm}(t)$

$$f_{nm} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_m dq \quad (11. 2)$$

интегрални билдиради. Мумкин бўлган ҳамма n , m лар бўйича $f_{nm}(t)$ катталиклар тўплами f катталикининг *матрицаси* деб, ҳар битта $f_{nm}(t)$ катталик эса m ҳолатдан n ҳолатга ўтишга мос келган *матрица элементи* деб аталади¹.

Матрица элементлари учун шунингдек,

$$\langle n | f | m \rangle \quad (11. 3)$$

белги ҳам қўлланилади. Матрица элементини бундай белгилаш ҳар бир индексни бир қанча ҳарфлар тўплами кўринишида ёзишда айниқса қулайдир. (11. 3) символни баъзан f катталик белгиси ҳамда бошланғич ва охири ҳолатларни билдирувчи $|m\rangle$ ва $\langle n|$ белгилардан (*Дирак* белгилари) „тузилган“ деб қаралади.

Матрица элементларининг вақтга боғланиши (агар $\hat{f}$ оператор t вақтга ошкор боғлиқ бўлмаса) Ψ_n функциянинг вақтга боғланиши орқали аниқланади. Бу функциялар учун олинган (10. 1) ифодадан фойдаланиб,

$$f_{nm}(t) = f_{nm} e^{i\omega_{nm}t} \quad (11. 4)$$

ни топамиз, бунда

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (11. 5)$$

m ва n ҳолатлар ўртасидаги ўтиш частотаси деб ном олган,

$$f_{nm} = \int \psi_n^* \hat{f} \psi_m dq \quad (11. 6)$$

¹ Физикавий катталикларнинг матрица тасавури *Шредингер* тўлқин тенгламани қашф қилгунга қадар *Гейзенберг* томонидан киритилган (1925). „Матрица механикаси“ ни кейин *Борн*, *Гейзенберг* ва *Иордан* ривожлантирди.

катталиқ эса f катталыкнинг вақтга боғлиқ бўлмаган матрицаси ир. Одатда ана шу матрица ишлатилади.

$\dot{f}$ ҳосиланинг матрица элементини топиш учун f катталыкнинг матрица элементларини вақт бўйича дифференциаллаш керак; бу хулоса бевосита қуйидаги ифодадан келиб чиқади:

$$\dot{f} = \dot{\bar{f}} = \sum_n \sum_m a_n^* a_m \dot{f}_{nm}(t).$$

Шундай қилиб, (11.4) ни ҳисобга олган ҳолда $\dot{f}$ нинг матрица элементлари учун

$$\dot{f}_{nm}(t) = i\omega_{nm} f_{nm}(t) \quad (11.7)$$

ифодани оламиз ёки иккала томонни вақтга боғлиқ $e^{i\omega_{nm}t}$ кўпайтмага қисқартириб, вақтга боғлиқ бўлмаган матрица элементларини толамиз:

$$(\dot{f})_{nm} = i\omega_{nm} f_{nm} = \frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) f_{nm}. \quad (11.8)$$

Формулалардаги белгиларни соддалаштириш мақсадида, қуйида ҳамма ифодаларни вақтга боғлиқ бўлмаган матрица элементлари учунгина чиқарамиз; вақтга боғлиқ матрица элементлари учун ҳам худди шу хилдаги ифодалар ўринли бўлади.

f катталиқ билан комплекс қўшма бўлган f^* катталыкнинг матрица элементлари қўшма оператор таърифини ҳисобга олган ҳолда чиқарилди:

$$(f^*)_{nm} = \int \psi_n^* \hat{f}^+ \psi_m dq = \int \psi_n^* \hat{f}^* \psi_m dq = \int \psi_m \hat{f}^* \psi_n^* dq,$$

яъни

$$(f^*)_{nm} = (f_{mn})^*. \quad (11.9)$$

Биз одатда кўрадиган ҳақиқий физикавий катталыклар учун:

$$f_{nm} = f_{mn}^* \quad (11.10)$$

$(f_{mn})^*$ нинг ўрнида f_{mn}^* турибди). Бундай матрицалар уларга мос Эрмит операгорлари каби *Эрмит матрицалари* деб аталади.

Матрицанинг $n = m$ бўлган элементлари *диагонал элементлар* дейилади. Бу элементлар вақтга умуман боғлиқ бўлмайди, (11.10) дан эса уларнинг ҳақиқий

сонлар экани кўриниб турибди. f_{nn} элемент f нинг ψ_n ҳолатдаги ўртача қийматини ифодалайди.

Матрицаларни кўпайтириш қондаси осонгина ҳосил қилинади. Бунинг учун аввало қуйидаги формула ўринли эканини таъкидлаш зарур:

$$\hat{f}\Psi_n = \sum_m f_{mn} \Psi_m. \quad (11. 11)$$

Бу ифода $\hat{f}\psi_n$ функциянинг коэффицентлари умумий (3. 14) қоидага биноан аниқланадиган ψ_m функциялар бўйича ёйилмасидир.

Ушбу формулани назарда тутган ҳолда, ψ_n функцияга иккита оператор кўпайтмасининг таъсири қандай натижага олиб келишини кўрсатамиз:

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n = \hat{f}\sum_k g_{kn}\Psi_k = \sum_k g_{kn}\hat{f}\psi_k = \sum_{k,m} g_{kn}f_{mk}\psi_m.$$

Иккинчи томондан,

$$\hat{f}\hat{g}\psi_n = \sum_m (fg)_{mn}\psi_m$$

бўлиши кераклигида, fg кўпайтманинг матрица элементлари

$$(fg)_{mn} = \sum_k f_{mk}g_{kn} \quad (11. 12)$$

формула билан аниқланади деган хулосага келамиз. Бу қоида математикада қабул қилинган матрицаларни кўпайтириш қондасига мос келади: кўпайтиришда биринчи матрица сатрлари иккинчи матрица устунларига кўпайтирилади.

Матрицанинг берилиши операторни ўзининг берилишига эквивалентдир. Хусусан, матрицанинг берилиши, принцип жиҳатдан, берилган физикавий катталиكنинг хос қиймаг ва унга тегишли хос функцияларини аниқлаш имконини беради.

Барча физикавий катталикларнинг муайян вақт momentiдаги қийматлари билан иш кўрамыз. Шу вақт momentiда ихтиёрий Ψ тўлқин функцияни гамильтонианнинг хос функциялари, яъни стационар ҳолатларнинг вақтга боғлиқ бўлмаган ψ_m тўлқин функциялари бўйича қаторга ёямиз:

$$\Psi = \sum_m c_m \psi_m \quad (11. 13)$$

бу ерда қатор коэффицентлари c_m орқали белгиланган. Бу ёйилмани f катталикининг хос қиймат ва хос функцияларини аниқловчи $\hat{f}\psi = f\psi$ тенгламага қўямиз:

$$\sum_m c_m (\hat{f}\Psi_m) = f \sum_m c_m \Psi_m.$$

Бу тенгламани иккала томондан ψ_n^* га кўпайтирамиз ва dq бўйича интеграллаймиз. Тенгликнинг чап томонидаги ҳар бир $\int \psi_n^* \hat{f}\psi_m dq$ интеграл мос f_{nm} матрица элементини беради.

Тенгликнинг ўнг томонидаги $\int \psi_n^* \psi_m dq$ интеграллар $m \neq n$ да ψ_m функцияларнинг ортогоналлиги туфайли йўқолиб кетади, $m = n$ да эса функцияларнинг нормалашгани сабабли 1 га тенг бўлади; натижада

$$\sum_m f_{nm} c_m = f c_n$$

ёки

$$\sum_m (f_{nm} - f \delta_{nm}) c_m = 0 \quad (11. 14)$$

га эга бўламиз.

Шундай қилиб, биз биринчи даражали бир жинсли алгебраик (c_m номаълумли) тенгламалар системасини олдик.

Маълумки, бундай система нолдан фарқли ечимга эга бўлиши учун унинг коэффицентларидан тузилган детерминант нолга айланиши, яъни қуйидаги шарт бажарилиши керак:

$$|f_{nm} - f \delta_{nm}| = 0.$$

Бу тенгламанинг илдизлари (тенгламадаги f катталиклар номаълум деб қаралади) f катталикининг мумкин бўлган қийматларини беради. Бу қийматларнинг бирортасида (11. 4) тенгламаларни қаноатлантирувчи c_m катталиклар тўплами f нинг шу қийматиға мос бўлган хос функцияларни аниқлаб беради.

Агар f катталик матрица элементларининг (11. 6) таърифидаги ψ_n функциялар ўрниға шу катталикининг хос функциялари олинса, у ҳолда $f\psi_n = f_n \psi_n$ тенгламага биноан,

$$f_{nm} = \int \Psi_n^* \hat{f} \Psi_m dq = f_n \int \Psi_n^* \Psi_m dq$$

ҳосил бўлади. ψ_m функцияларнинг орто-нормалашгани туфайли $n \neq m$ да $f_{nm} = 0$, $n = m$ да эса $f_{mm} = f_m$ ни олаемиз.

Шундай қилиб, матрицанинг фақат диагонал элементларигина нолдан фарқли бўлиб, ҳар бир бундай элемент f катталикининг тегишли хос қийматига тенг экан, фақат шу элементларигина нолдан фарқли бўлган матрицани *диагонал кўринишга* келтирилган матрица деб аталади. Хусусан, одатдаги тасаввурда (ψ_m функциялар сифатида стационар ҳолатлар функциялари олинган) энергия матрицаси (ва шу каби стационар ҳолатда аниқ қийматга эга бўлган бошқа барча физикавий катталиклар матрицалари) диагонал кўринишга эга. Умуман, бирор $\hat{g}$ операторнинг хос функциялари ёрдамида аниқланган f катталик матрицасини g диагонал кўринишга эга бўлган тасаввурдаги f матрица дейилади. Махсус изоҳ берилмаган барча ҳолларда физикавий катталик матрицаси деганда энергия диагонал кўринишга эга бўлган одатдаги тасаввурдаги матрицани тушунамиз. Матрицанинг вақтга боғлиқлиги ҳақида юқорида келтирилган барча мулоҳазалар шубҳасиз фақат мана шу одатдаги тасаввурга алоқадордир¹.

12- §. Импульс

Зарраларнинг ёпиқ системасини қараб чиқамиз. Бир бутунлигича бундай системанинг фазодаги ҳамма ҳолатлари бир-бирига эквивалент бўлганидан, системани ихтиёрий масофага параллел кўчирганда системанинг гамильтониани ўзгармайди деб тасдиқлаш мумкин. Исталганча чексиз кичик силжиш учун ушбу шартнинг бажарилиши кифоя; у ҳолда бу шарг ҳар қандай чекли силжиш учун ҳам ўринли бўлади.

Чексиз кичик δg масофага параллел силжитиш ҳамма зарраларнинг $\mathbf{r}_a$ радиус-векторларига (a — зарранинг тартиб номери) бир хил δg орттирма берадиган алмаштириш ўтказиш деган гапдир: $\mathbf{r}_a \rightarrow \mathbf{r}_a + \delta g$. Зарра координаталарининг $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ ихтиёрий функцияси бундай алмаштириш натижасида қуйидаги функцияга айланади:

¹ Энергия матрицасининг диагоналлигини назарда тутиб, матрица кўринишидаги (11. 8) тенгламанинг оператор кўринишидаги (9. 2) ифода эканлигига ишонч ҳосил қилиш қийин эмас.

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}, \dots) &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \delta\mathbf{r} \sum_a \nabla_a \psi = \\ &= \left(1 + \delta\mathbf{r} \sum_a \nabla_a\right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)\end{aligned}$$

(∇_a — радиус-вектор $\mathbf{r}_a$ бўйича дифференциаллаш оператори).

$$1 + \delta\mathbf{r} \sum_a \nabla_a \quad (12.1)$$

ифодани $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ функцияни $\psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}, \dots)$ функцияга ўтказадиган чексиз кичик кўчириш оператори деб қараш мумкин.

Бирор алмаштириш гамильтониани ўзгартирмайди деган фикрни шу алмаштириш $\hat{H}\psi$ устида бажарилганда олинган натижа уни аввало ψ га қўллаб, кейин $\hat{H}$ операторни таъсир қилдирганда олинган натижа билан бир хил бўлади деган маънода тушуниш керак. Буни математикавий тарзда қуйидагича ёзиш мумкин. Айтайлик, $\hat{O}$ кўрилатган алмаштиришни бажарувчи оператор бўлсин. У ҳолда $\hat{O}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(\hat{O}\psi)$ бўлади, бундан

$$\hat{O}\hat{H} - \hat{H}\hat{O} = 0, \quad (12.2)$$

яъни гамильтониан $\hat{O}$ оператор билан коммутатив бўлиши кераклиги келиб чиқади.

Ушбу ҳолда $\hat{O}$ оператор (12.1) кўринишдаги чексиз кичик кўчириш операторидир. Бирлик оператор (1 га кўпайтириш оператори) ҳар қандай бошқа оператор билан коммутатив бўлганидан ва ўзгармас $\delta\mathbf{r}$ кўпайтма $\hat{H}$ гамильтониан белгисидан ташқарига чиқиши мумкинлигидан (12.2) шарт

$$\left(\sum_a \nabla_a\right)\hat{H} - \hat{H}\left(\sum_a \nabla_a\right) = 0 \quad (12.3)$$

шартга айланади.

Юқоридан маълумки, вақтга ошкор боғлиқ бўлмаган операторнинг $\hat{H}$ билан коммутативлиги бу операторга тегишли физикавий катталиكنинг сақланишини

билдиради. Лекин ёпиқ системада фазонинг бир жинслик хоссаси туфайли сақланадиган катталик системанинг *импульсидир* (I, 7- § га қаранг).

Демак, (12. 3) муносабат квант механикасида импульсинг сақланиш қонунини ифодалайди. $\sum \nabla_a$ оператор системанинг тўла импульсига (ўзгармас кўпайтувчига аниқлик билан), йиғиндидаги ҳар бир ∇_a ҳад эса айрим зарра импульсига мос келиши керак.

Зарранинг $\hat{p}$ импульс оператори билан ∇ оператор ўртасидаги пропорционаллик коэффициенти классик механикага чегаравий ўтиш ёрдамида аниқланиши мумкин. $\hat{p} = c\nabla$ деб ёзиб ва чегаравий ўтишдаги (6. 1) тўлқин функциясидан фойдаланиб,

$$\hat{p}\Psi = \frac{i}{\hbar} c \hbar e^{\frac{i}{\hbar} S} \nabla S = c \frac{i}{\hbar} \Psi \nabla S.$$

ифодани ҳосил қиламиз. Яъни классик яқинлашишда $\hat{p}$ операторнинг таъсири $i\hbar \frac{\nabla S}{\hbar}$ га кўпайтиришдан иборат экан. Классик механикадан маълумки, ∇S градиент зарранинг p импульсидир (I, 31- § га қаранг), шу сабабли $c = -i\hbar$ бўлиши керак.

Шундай қилиб, зарранинг *импульс оператори* $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ бўлиб, унинг компонентлари эса

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (12. 4)$$

бўлади.

Бу операторларнинг Эрмит операторлари эканига ишонч ҳосил қилиш қийин эмас. Ҳақиқатан ҳам, чексизликда нолга айланадиган ихтиёрий $\psi(x)$ ва $\varphi(x)$ функциялар учун

$$\int \varphi \hat{p}_x \psi dx = -i\hbar \int \varphi \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = i\hbar \int \psi \frac{\partial \varphi}{\partial x} dx = \int \psi \hat{p}_x^* \varphi dx$$

ифодага эга бўламиз. Бу эса операторнинг эрмитлик шарғидир.

Функцияларни иккита ҳар хил мустақил ўзгарувчилар бўйича дифференциаллаш натижаси дифференциаллаш тартибига боғлиқ бўлмаганидан, равшанки,

импульсининг учала компоненти операторлари ўзаро коммутатив бўлади:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x &= 0, \quad \hat{p}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{p}_x = 0, \\ \hat{p}_y \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{p}_y &= 0. \end{aligned} \quad (12. 5)$$

Бу, зарра импульсининг учала компонентаси бир вақтда аниқ қийматга эга бўлади демакдир.

Импульс операторларининг хос функциялари ва хос қийматларини топайлик. Улар қуйидаги вектор тенгламадан аниқланади:

$$-i\hbar \nabla \psi = p \psi. \quad (12. 6)$$

Бу тенгламанинг ечими

$$\psi = C e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad (12. 7)$$

кўринишга эга (C — ўзгармас сон).

Кўрдикки, импульсининг учала компонентасининг бир вақтда берилиши зарранинг тўлқин функциясини тўла аниқлаб берар экан. Бошқача қилиб айтганда, p_x , p_y , p_z катталиклар физикавий катталикларнинг мумкин бўлган тўла тўпламларидан бирини ташкил қилади. Импульсининг хос қийматлари эса $-\infty$ дан $+\infty$ гача оралиқдаги узлуксиз спектрни беради.

Узлуксиз спектр хос функцияларининг нормалаштириш қоидаси (5. 4) га биноан

$$\int \psi_{\mathbf{p}'} \psi_{\mathbf{p}}^* dV = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \quad (12. 8)$$

бўлиши лозим, бу ерда интеграл бутун фазо ($dV = dxdydz$) бўйича олинади, $\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$ — уч ўлчовли δ -функция¹. Интеграллаш қуйидаги формула ёрдамида бажарилади²:

¹ Вектор аргументнинг δ -функцияси шу аргумент ҳар бир компонентаси бўйича δ -функцияларнинг кўпайтмаси шаклида аниқланади.

² Бу тенгликнинг шартли маъноси шундан иборатки, чап томонда турган интеграл δ -функцияга хос бўлган ҳамма хусусиятларга эга. Бу интеграл $\alpha = 0$ да узоқлашади, $\alpha \neq 0$ да эса ишораси алмашинувчи даврий функциядан олинган интеграл каби полга айланади. Бу интегрални $d\alpha$ бўйича $-L$ дан $+L$ гача интервалда ($\alpha = 0$ нуқтани ўз ичига олган) яна бир марта интеграллаб, қуйидагини оламиз:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \int_{-L}^L e^{i\alpha x} d\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin Lx}{x} dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \xi}{\xi} d\xi = 1.$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix} dx = \delta(x). \quad (12.9)$$

Бундан

$$\int \psi_{\mathbf{p}'} \psi_{\mathbf{p}}^* dV = C^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}} dV = C^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}).$$

Бу нфодадан $C^2 (2\pi\hbar)^3 = 1$ бўлиши лозимлиги кўриниб турибди. Шундай қилиб, нормалашган функция

$$\psi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad (12.10)$$

кўринишга эга бўлади.

Зарранинг $\psi(\mathbf{r})$ ихтиёрий тўлқин функциясини зарра импульси операторининг $\psi_{\mathbf{p}}$ хос функциялари бўйича ёйиш Фурье интегралига ёйишнинг ўзидир:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int a(\mathbf{p}) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int a(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3p, \quad (12.11)$$

$$d^3p = dp_x dp_y dp_z.$$

(5.2) формулага биноан $a(\mathbf{p})$ ёйиш коэффициентлари қуйидагига тенг:

$$a(\mathbf{p}) = \int \psi(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) dV = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} dV. \quad (12.12)$$

$a(\mathbf{p})$ функцияни зарранинг *импульс тасаввурдаги* тўлқин функцияси деб қараш мумкин (5- § га қarang); $|a(\mathbf{p})|^2 d^3p$ импульсининг d^3p интервалда қийматларга эга бўлиш эҳтимоли. (12.11—12) формулалар иккала тасаввурдаги тўлқин функцияларни ўзаро боғлайди.

13- §. Ноаниқлик муносабати

Импульс ва координата операторлари ўртасидаги коммутация қоидаларини келтириб чиқарамиз. x , y , z ўзгарувчиларнинг биттаси бўйича кетма-кет дифференциаллаш ва кейин уларнинг иккинчисига кўлайтириш натижаси бу амалларнинг бажарилиш тартибига боғлиқ бўлмаганидан

$$\hat{p}_x y - y \hat{p}_x = 0, \quad \hat{p}_x z - z \hat{p}_x = 0. \quad (13.1)$$

Бу ифодалар $\hat{p}_y, \hat{p}_z$ лар учун ҳам худди шундай чиқарилади.

$\hat{p}_x$ билан x ўртасидаги коммутация қондасини чиқариш учун қуйидагини ёзамиз:

$$(\hat{p}_x x - x \hat{p}_x) \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} = -i\hbar \psi.$$

Кўришиб турибдики, $\hat{p}_x x - x \hat{p}_x$ операторнинг функцияга таъсири натижаси функцияни $-i\hbar$ га кўпайтиришдан иборат экан. Бундай муносабатлар $\hat{p}_y$ билан y ва $\hat{p}_z$ билан z ўртасидаги коммутативликка ҳам тааллуқлидир. Шундай қилиб,

$$\begin{aligned} \hat{p}_x x - x \hat{p}_x &= -i\hbar, & \hat{p}_y y - y \hat{p}_y &= -i\hbar, \\ \hat{p}_z z - z \hat{p}_z &= -i\hbar \end{aligned} \quad (13. 2)$$

муносабатларга эга бўламиз¹.

(13. 1–2) муносабатлар зарранинг бирор ўқдаги координатаси импульсининг бошқа икки ўқдаги компоненталари билан бир вақтда аниқ қийматга эга бўлишини кўрсатади. Координата ва импульс компонентаси айти бир ўқда бир вақтда мавжуд бўлмайди. Хусусан, зарра фазонинг аниқ бир нуқтасида жойлашиши ва шу вақтнинг ўзида аниқ p импульсга эга бўлиши мумкин эмас.

Фараз қилайлик, зарра фазонинг учта ўқдаги ўлчамлари мос равишда $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ бўлган чекли соҳасида ётсин. Зарра импульсининг ўртача қиймати p , бўлсин. Бу математикавий нуқтаи назардан, зарра тўт.

қин функциясининг $\psi = u(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{p}_0 \cdot \frac{\mathbf{r}}{\hbar}}$ кўринишга эга эканлигини билдиради. Бунда $u(\mathbf{r})$ — функция, у фазонинг фақат кўрсатилган соҳасидагина нолдан сезиларли даражада фарқ қилади.

ψ функцияни импульс операторининг хос функциялари бўйича қаторга (яъни Фурье интегралига) ёямиз.

Бу ёйилманинг $a(\mathbf{p})$ коэффициентлари $u(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}) \cdot \frac{\mathbf{r}}{\hbar}}$ кўринишдаги функциялардан олинган (12. 12) инте-

¹ 1925 йилда Гейзенберг матрица шаклида кашф этган бу муносабатлар, замонавий квант механикасини яратишда асос бўлиб хизмат қилди.

граллар ёрдамида аниқланади. Бу интеграл нолдан сезиларли фарқланиши учун $e^{i(p_0 - p) \frac{r}{\hbar}}$ тебранувчи кў-пайтманинг даври $u(r)$ функция нолдан фарқли бўлган соҳанинг Δx , Δy ва Δz ўлчамларидан кичик бўлмаслиги лозим. Демак, $a(p)$ фақат p нинг $(p_{0x} - p_x) \cdot \frac{\Delta x}{\hbar} \leq 1, \dots$ тенгсизликни қаноатлантирадиган қийматларидагина нолдан сезиларли фарқ қилар экан. $|a(p)|^2$ импульс-нинг ҳар хил қийматлари эҳтимолларини аниқлагани-дан, p_x , p_y , p_z қийматларнинг $a(p)$ нолдан фарқли бў-ладиган интерваллари қаралаётган ҳолатда зарра им-пульси компонентларининг қийматлари бўлиши мумкин бўлган интервалларни беради. Бу интервалларни Δp_x , Δp_y , Δp_z орқали белгилаб,

$$\Delta p_x \Delta x \sim \hbar, \quad \Delta p_y \Delta y \sim \hbar, \quad \Delta p_z \Delta z \sim \hbar \quad (13.3)$$

ни оламиз. Ноаниқлик муносабати деб аталувчи бу муносабатлар Гейзенберг томонидан яратилган (1927 й).

Шундай қилиб, зарра координатаси қанча катта аниқликка эга бўлса (яъни Δx қанча кичик бўлса), шу ўқ йўналишидаги импульс компонентининг Δp_x ноаниқ-лиги шунча катта бўлади ва аксинча. Хусусан, агар зарра фазонинг аниқ бир нуқтасида ($\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0$) жойлашса, у ҳолда $\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = \infty$ бўлади. Бу импульснинг ҳамма қийматлари бир хил эҳтимолга эга демакдир. Аксинча, агар зарра аниқ p импульсга эга бўлса, у ҳолда унинг фазодаги ҳамма вазиятлари бир хил эҳтимолга эга бўлади (бу (12.7) тўлқин функция-дан бевосита кўриниб турибди, чунки бу функция модулининг квадрати координатага умуман боғлиқ эмас).

14- §. Импульс моменти

12- § да импульснинг сақланиш қонунини чиқа-ришда биз зарраларнинг ёпиқ системаси учун фазонинг бир жинслилигидан фойдаланган эдик. Фазо бир жинс-лилик билан бир қаторда изотропик хоссасига (бунда ҳамма йўналишлар ўзаро тенг кучли бўлади) ҳам эга. Шу сабабли, ёпиқ системани бир бутунлигича ихтиёрий ўқ атрофида ихтиёрий бурчакка бурганда унинг га-милтониани ўзгармаслиги керак. Ушбу шартнинг их-тиёрий чексиз кичик бурилиш учун бажарилиши кифоядир.

Катталиги $\delta\varphi$ бурилиш бурчагига тенг ва йўналиши бурилиш ўқи бўйлаб йўналган $\delta\varphi$ чексиз кичик бурилиш векторини олайлик. Бундай буришда $\mathbf{r}_a$ радиус-векторнинг $\delta\mathbf{r}_a$ ўзгариши қуйидагига тенг бўлади (I, 9- § га қаранг):

$$\delta\mathbf{r}_a = [\delta\varphi \cdot \mathbf{r}_a].$$

Бундай алмаштиришда $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ ихтиёрий функция қуйидаги шаклга келади:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}_2, \dots) &= \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) + \sum_a \delta\mathbf{r}_a \nabla_a \psi = \\ &= \left(1 + \delta\varphi \sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a]\right) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots). \end{aligned}$$

Бунда

$$1 + \delta\varphi \sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a] \quad (14. 1)$$

ифодани „чексиз кичик бурилиш оператори“ деб қараш мумкин. Чексиз кичик буришда система гамилътоннанинг ўзгармаслиги бурилиш операторининг $\hat{H}$ билан коммутативлиги шаклида ифодаланади. $\delta\varphi$ ўзгармас вектор бўлганидан, бу коммутативлик шarti бирор сақланиш қонунини ифодаловчи қуйидаги муносабатга айланади:

$$\left(\sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a]\right) \hat{H} - \hat{H} \left(\sum_a [\mathbf{r}_a \nabla_a]\right) = 0. \quad (14. 2)$$

Фазонинг изотроплик хоссаси туфайли ёпиқ системада сақланадиган катталик—системанинг *импульс моменти* (I, 9- § га қаранг). Шундай қилиб, $\sum [\mathbf{r}_a \nabla_a]$ оператор ўзгармас кўпайтувчигача аниқлик билан система ҳаракатининг тўла импульс моментиға, йиғиндининг ҳар бир $[\mathbf{r}_a \nabla_a]$ ҳади эса айрим зарра моментиға мос келиши керак.

Пропорционаллик коэффиценти — $i\hbar$ га тенг қилиб олиниши керак, шундай бўлганда зарра моменти операторининг — $i\hbar [\mathbf{r} \nabla] = [\mathbf{r} \mathbf{p}]$ ифодаси айнан одатдаги $[\mathbf{r} \mathbf{p}]$ классик ифодаға мос келади. Бундан кейин биз $\hbar$ нинг бирликларида ўлчанувчи моментлар билан иш кўраимиз. Айрим зарра учун шу хилда аниқланган моментни $\hat{\mathbf{l}}$ орқали, тўла система моментини эса $\hat{\mathbf{L}}$ орқали

белгилаймиз. Шундай қилиб, зарра моментининг оператори

$$\hat{h}\hat{l} = [\hat{r}\hat{p}] = -i\hbar [\mathbf{r}\nabla]$$

кўринишда бўлиб, компоненталари орқали қуйидагича ифодаланади:

$$\begin{aligned}\hat{h}\hat{l}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, & \hat{h}\hat{l}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \\ \hat{h}\hat{l}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x.\end{aligned}\quad (14. 3)$$

Ташқи майдонда жойлашган {системанинг импульс моменти сақланмайди. Лекин маълум симметрияга эга бўлган майдонда момент ҳар ҳолда сақланиши мумкин. Масалан, агар система марказий-симметрик майдонда жойлашган бўлса, у ҳолда фазодаги марказдан чиқувчи ҳамма йўналишлар эквивалент бўлади ва шунинг учун бу майдонда жойлашган ёпиқ система ҳаракатининг майдон марказига нисбатан моменти сақланади. Худди шунга ўхшаш аксиал-симметрик (ўққа нисбатан симметрик) майдонда моментнинг симметрия ўқи бўйлаб йўналган ташкил этувчиси сақланади. Классик механикада ўринли бўлган бу сақланиш қонунлари квант механикасида ҳам ўз кучини сақлаб қолади.

Момент операторлари билан импульс ва координата операторлари орасидаги коммутация қоидалари билан танишиб чиқамиз. Масалан, қуйидаги ифодани ҳосил қиламиз:

$$\begin{aligned}\hat{l}_x y - y \hat{l}_x &= \frac{1}{\hbar} (y \hat{p}_z - z \hat{p}_y) y - \frac{1}{\hbar} y (y \hat{p}_z - z \hat{p}_y) = \\ &= -\frac{1}{\hbar} z (\hat{p}_x y - y \hat{p}_x) = iz.\end{aligned}$$

Худди шу йўсунда бешқа муносабатларни ҳам топамиз:

$$\hat{l}_x x - x \hat{l}_x = 0, \quad \hat{l}_x y - y \hat{l}_x = iz, \quad \hat{l}_x z - z \hat{l}_x = -iy. \quad (14. 4)$$

Бу ифодаларда x, y, z координаталар ва индексларни циклик алмаштириб, яна иккита шундай тенгликлар тўпламини олиш мумкин.

Бундай қоидалар момент ва импульс операторлари орасида ҳам мавжудлигини тушуниш қийин эмас:

$$\begin{aligned}\hat{l}_x \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{l}_x &= 0, & \hat{l}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{l}_x &= i\hat{p}_z, \\ \hat{l}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{l}_x &= -i\hat{p}_y.\end{aligned}\quad (14. 5)$$

Бу формулалар ёрдамида $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ ва $\hat{l}_z$ операторлар учун ўзаро коммутация қоидаларини топиш мумкин:

$$\begin{aligned} \hbar(\hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x) &= \hat{l}_x(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) - (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)\hat{l}_x = \\ &= (\hat{l}_xz - z\hat{l}_x)\hat{p}_x - x(\hat{l}_x\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{l}_x) = -i\hat{p}_x + i\hat{p}_x = i\hbar\hat{l}_z. \end{aligned}$$

Шундай қилиб,

$$\begin{aligned} \hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y &= i\hat{l}_x, \quad \hat{l}_z\hat{l}_x - \hat{l}_x\hat{l}_z = i\hat{l}_y, \\ \hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x &= i\hat{l}_z. \end{aligned} \quad (14. 6)$$

Юқорида келтирилган коммутация қоидаларининг худди ўзи системанинг $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ тўла моменти операторлари учун ҳам ўринлидир. Ҳақиқатан ҳам, ҳар хил зарралар моментлари операторлари ўзаро коммутатив бўлганидан, масалан,

$$\begin{aligned} \sum_a \hat{l}_{ay} \sum_a \hat{l}_{az} - \sum_a \hat{l}_{az} \sum_a \hat{l}_{ay} &= \sum_a (\hat{l}_{ay}\hat{l}_{az} - \hat{l}_{az}\hat{l}_{ay}) = \\ &= i \sum_a \hat{l}_{ax} \end{aligned}$$

ни чиқариш мумкин. Шундай қилиб,

$$\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = i\hat{L}_x, \quad \hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hat{L}_z. \quad (14. 7)$$

(14. 7) ифодадар кўрсатиб турибдики, моментнинг учта компоненти бир вақтда аниқ қийматга эга бўла олмайди (учала компонентнинг бир вақтга нолга тенг бўлиши бундан мустасно—қуйидаги формулаларга қаранг). Мана шу маънода момент учала компонентини бир вақтда ўлчаш мумкин бўлган импульсдан батамом фарқ қилади.

$\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ ва $\hat{L}_z$ операторлардан момент вектори абсолют қийматининг квадрати операторини тузамиз:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (14. 8)$$

Бу оператор $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ операторларнинг ҳар бири билан коммутативдир:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}^2 &= 0, \quad \hat{L}^2 \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}^2 = 0, \\ \hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 &= 0.\end{aligned}\quad (14. 9)$$

Ҳақиқатан ҳам, (14. 7) дан фойдаланиб, масалан, қуйидаги ифодаларни ҳосил қиламиз:

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

Бу тенгликларни ўзаро қўшсак, (14. 9) даги охириги ифода ҳосил бўлади.

(14. 9) ифодалар физикавий жиҳатдан момент (яъни унинг абсолют қиймаги) квадратининг шу момент ташкил қилувчилардан бирортаси билан бир вақтда аниқ қийматга эга бўла олишини кўрсатади.

$\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ операторлар ўрнига уларнинг комплекс комбинациялари

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y \quad (14. 10)$$

дан фойдаланиш қулайроқ. (14. 7) ёрдамида бажарилувчи бевосита ҳисоблашлар бу комбинациялар учун қуйидаги коммутатив қоидаларнинг тўғрилигини кўрсатади:

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ \hat{L}_- - \hat{L}_- \hat{L}_+ &= 2\hat{L}_z, \\ \hat{L}_z \hat{L}_+ - \hat{L}_+ \hat{L}_z &= \hat{L}_+, \quad \hat{L}_z \hat{L}_- - \hat{L}_- \hat{L}_z = -\hat{L}_-.\end{aligned}\quad (14. 11)$$

Шунингдек,

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z \quad (14. 12)$$

эканини текшириб кўриш ҳам қийин эмас.

Ва ниҳоят, айрим зарра momenti оператори учун кўп қўлланиладиган ифодани сферик системада келти-

рамиз. Бунинг учун сферик координаталарнинг одатдаги

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta$$

муносабатларидан фойдаланиб, мураккаб бўлмаган ҳисоблашлардан сўнг қуйидаги ифодаларни ҳосил қиламиз:

$$\hat{L}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (14. 13)$$

$$\hat{L}_{\pm} = e^{\pm i \varphi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (14. 14)$$

Бу ифодаларни (14. 12) га қўйиб, зарра моменти квадрати оператори учун

$$\hat{L}^2 = - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \quad (14. 15)$$

кўринишдаги ифодани оламиз. Бу ифода Лаплас операторининг бурчакли қисми эканлигига (ўзгармас кўнайтувчигача аниқлик билан) эътибор бериш керак.

15- §. Моментнинг хос қийматлари

Зарра импульси моментининг бирор йўналишдаги проекциясининг хос қийматларини топиш учун қутб ўқини шу йўналишда танлаб, момент операторининг сферик системадаги ифодасидан фойдаланиш қулайдир.

(14. 13) формулага биноан $\hat{L}_z \psi = L_z \psi$ тенглама қуйидаги кўринишга келади:

$$-i \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi. \quad (15. 1)$$

Унинг ечими эса

$$\psi = f(r, \theta) e^{i L_z \varphi}$$

бўлади, бу ерда $f(r, \theta)$ — r ва θ нинг ихтиёрий функцияси. ψ функция бир қийматли бўлиши учун φ бўйича 2π даврли функция бўлиши зарур. Бундан

$$L_z = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (15. 2)$$

ларни топамиз¹.

¹ Момент проекцияси хос қийматларини зарра массаси белгиланадиган m ҳарфи билан белгилаш ҳеч қандай англашилмовчиликка олиб келмайди.

Шундай қилиб, l_z хос қийматлар ноль, мусбат ва манфий бутун сонлардан иборат. $\hat{l}_z$ операторнинг хос функциялари учун характерли бўлган φ га бѳғлиқ кў-пайтувчини

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (15.3)$$

орқали белгилаймиз.

Бу функциялар қуйндагича нормалаштирилган:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}. \quad (15.4)$$

Равшанки, система тўла моменти z -компонентасининг хос қийматлари ҳам мусбат ва манфий бутун сонларга тенг:

$$L_z = M, \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (15.5)$$

(бу хулоса $\hat{L}_z$ операторнинг ўзаро коммутатив бўлган айрим зарра $\hat{l}_z$ моменти операторларининг йиғиндисига тенг эканлигидан келиб чиқади).

z йўналиш бирор белгиси билан бошқалардан ажралиб турмаганидан, $\hat{L}_x$ ва $\hat{L}_y$ лар учун ва умуман, моментнинг исталган йўналишдаги ташкил этувчиси учун ҳам юқоридаги натижаларни олиш мумкин. Уларнинг ҳаммаси фақат бутун қийматлар қабул қилади. Биринчи қарашда бу хулоса, айниқса, у бир-бирига чексиз яқин йўналишларга қўлланилганда парадоксал бўлиб кўриниши мумкин. Лекин ҳақиқатда эса $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ операторлар бир вақтда қабул қилган бирдан-бир

$$L_x = L_y = L_z = 0$$

хос қийматларидагина ягона умумий хос функцияга эга бўлади. Бу ҳолда момент вектори ва демак, унинг ҳар қандай йўналишдаги проекцияси ҳам нолга тенг. Агар L_x , L_y , L_z хос қийматлардан ҳеч бўлмаганда биттаси нолдан фарқли бўлса, у ҳолда мос операторлар учун умумий хос функциялар мавжуд бўлмайди. Бошқача қилиб айтганда, моментнинг иккита ёки учта ҳар хил йўналишдаги проекциялари бир вақтда аниқ қийматга (нолдан фарқли) эга бўладиган ҳолат мавжуд

эмас. Шу сабабли, фақат битта проекциянинггина бутун қийматли бўлиши ҳақида гапириш мумкин.

Системанинг фақат M нинг қийматлари билан фарқланувчи стационар ҳолатлари бир хил энергияга эга бўлади. Бу ҳулоса z ўқнинг бошқа ўқлардан ҳеч нарса билан фарқ қилмаслигига асосланган умумий мулоҳазалардан келиб чиқади. Шундай қилиб, моменти (нолдан фарқли бўлган) сақланувчи системанинг энергетик сатҳлари ҳар ҳолда айниган бўлади¹.

Энди момент квадратининг хос қийматларини топишга ўтамиз ва бу хос қийматлар фақат (14. 7) коммутация қоидаларидан фойдаланган ҳолда қандай топилишини кўрсатамиз. L^2 ларининг қийматлари бир хил ва битта айниган энергетик сатҳга тегишли стационар ҳолатлар функцияларини ψ_M билан белгилаймиз.

Аввало шуни таъкидлаб ўтамизки, z нинг иккала йўналиши физикавий нуқтаи назардан эквивалент бўлганидан, M нинг мумкин бўлган ҳар бир $M = +|M|$ мусбат қийматига, худди шундай $M = -|M|$ манфий қиймат мос келади. Мумкин бўлган энг катта $|M|$ қийматни L (мусбат бутун сон) орқали белгилаймиз.

$\hat{L}_z$ $\hat{L}_\pm$ операторни $\hat{L}_z$ операторнинг ψ_M хос функциясига таъсир қилдириб ва (14. 11) коммутация қоидаларидан фойдаланиб

$$\hat{L}_z \hat{L}_\pm \psi_M = \hat{L}_\pm \hat{L}_z \psi_M \pm \hat{L}_\pm \psi_M = (M \pm 1) \hat{L}_\pm \psi_M$$

ни оламиз. Бундан кўриниб турибдики, $\hat{L}_\pm \psi_M$ функция $\hat{L}_z$ катталикининг $M \pm 1$ қийматига мос келган (нормалаштирувчи кўпайтувчига аниқлик билан) хос функцияси экан. Демак,

$$\psi_{M+1} = \text{const} \cdot \hat{L}_+ \psi_M, \quad \psi_{M-1} = \text{const} \cdot \hat{L}_- \psi_M \quad (15. 6)$$

деб ёзиш мумкин.

¹ Бу ҳол 10- § да келтирилган умумий теорема (операторлари ўзаро коммутатив бўлмаган сақланувчи катталиқдан камида иккита бўлганда энергия сатҳлари айниган бўлади) нинг хусусий ҳолидир. Бу ерда момент компоненталари шундай катталиқ ҳисобланади.

Агар бу тенгликларнинг биринчисида $M = L$ деб олсак, у ҳолда айнан

$$\hat{L}_+ \psi_L = 0 \quad (15. 7)$$

бўлиши керак. Чунки таъриф бўйича, $M > L$ бўлган ҳолат йўқ (ψ_M даги M нинг энг каттаси L га тенг — тарж). Бу тенгликка $\hat{L}_-$ операторни қўллаб ва (14. 12) тенгликдан фойдаланиб

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ \psi_L = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hat{L}_z) \psi_L = 0$$

ифодани ҳосил қиламиз. ψ_M функция $\hat{L}^2$ ва L_z операторларнинг умумий хос функцияси бўлганидан

$$\hat{L}^2 \psi_L = L^2 \psi_L, \quad \hat{L}_z^2 \psi_L = L^2 \psi_L, \quad \hat{L}_z \psi_L = L \psi_L.$$

Бу тўртта тенглик бириктирилса,

$$L^2 = L(L + 1) \quad (15. 8)$$

ҳосил бўлади.

Момент квадратининг хос қийматлари мана шу формуладан аниқланади. Бунда L ноли ва ҳамма мусбат бутун сонларни қабул қилади. L нинг берилган қийматида моментнинг $L_z = M$ компоненти

$$M = L, L - 1, \dots, -L \quad (15. 9)$$

қийматларга, яъни ҳаммаси бўлиб $2L + 1$ та ҳар хил қийматга эга бўлади. Шундай қилиб, L моментга мос келган энергия сатҳи $2L + 1$ каррали айниган бўлиб, бу айнишни одатда *момент йўналишлари бўйича айниш* деб аталади. Моменти нолга тенг бўлган $L = 0$ ҳолат (бунда унинг ҳамма учта компоненти нолга тенг) айнинаган бўлади. Бундай ҳолатнинг тўлқин функцияси сферик симметрияга эга. Бу ушбу ҳолатда унинг ҳар қандай чексиз кичик бурилишдаги $\hat{L}\psi$ ифода билан бериладиган ўзгариши ((14. 1) га қаранг) нолга тенг бўлишидан равшандир.

Биз соддалик учун аввал қабул қилинганидек, $L(L + 1)$ га тенг бўлган момент квадратини системанинг „ L momenti“ деб юритамиз; битта зарра моментини l ҳарфи билан белгилаймиз. Моментнинг z -ком-

понентасини эса соддагина қилиб „момент проекцияси“ деймиз.

L_x , L_y катталикларнинг энергияси ва L моменти бир хил бўлиб, фақат M момент проекцияларининг қийматлари билан фарқланувчи ҳолатлар орасидаги ўтишлар учун матрицавий элементларини ҳисоблаймиз.

(15. 6) формуладан кўриниб турибдики, $\hat{L}_+$ операторнинг матрицасида фақат $M \rightarrow M+1$ ўтишларга мос элементлар, $\hat{L}_-$ операторнинг матрицасида эса $M \rightarrow M-1$ га мос элементларгина нолдан фарқлидир. Бунини ҳисобга олган ҳолда (14. 12) тенгликнинг иккала томонидаги диагональ элементларни (L , $M-1 \rightarrow L$, $M-1$ ўтишлар учун) топамиз:

$$L(L+1) = (L_-)_{M-1,M} (L_+)_{M,M-1} + M^2 - M.$$

$\hat{L}_x$ ва $\hat{L}_y$ Эрмит операторлари бўлганидан

$$(L_-)_{M-1,M} = (L_+)^*_{M,M-1}.$$

Бу тенгликни қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$\begin{aligned} |(L_+)_{M,M-1}|^2 &= L(L+1) - M(M-1) = \\ &= (L-M+1)(L+M), \end{aligned}$$

бундан

$$\begin{aligned} \langle M | L_+ | M-1 \rangle &= \langle M-1 | L_- | M \rangle = \\ &= \sqrt{(L+M)(L-M+1)} \end{aligned} \quad (15. 10)$$

((11. 3) даги белгилаш ишлатилган). Шуларга биноан, L_x ва L_y катталикларнинг ўзлари учун қуйидаги нолдан фарқли матрицавий элементлар

$$\begin{aligned} \langle M | L_x | M-1 \rangle &= \langle M-1 | L_x | M \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{(L+M)(L-M+1)}, \\ \langle M | L_y | M-1 \rangle &= -\langle M-1 | L_y | M \rangle = \\ &= -\frac{i}{2} \sqrt{(L+M)(L-M+1)} \end{aligned} \quad (15. 11)$$

ни ҳосил қиламиз.

L_x , L_y катталикларнинг матрицаларида диагональ элементларнинг йўқлигига эътиборни жалб қиламиз. Диагональ матрицавий элементларнинг катталикларнинг тегишли ҳолатдаги ўртача қийматини бериши, L_z кат-

талиқ аниқ бўлган ҳолатларда L_x, L_y ларнинг ўртача қийматлари ноль бўлишини кўрсатади, яъни $\overline{L_x} = \overline{L_y} = 0$. Шундай қилиб, агар моментнинг фазодаги бирор проекцияси аниқ қийматга эга бўлса, у ҳолда $\vec{L}$ вектор ҳам шу йўналишда ётади.

16- §. Моментнинг хос функциялари

Зарранинг тўлқин функцияси l ва m нинг қийматлари билан тўла аниқланмайди. Бу ушбу катталиклар операторларининг сферик координаталардаги ифодасида фақат θ ва φ бурчаклар қатнашиши ва шу сабабли, уларнинг хос функцияларида r га боғлиқ бўлган ихтиёрий кўпайтувчи қатнашишидан кўриниб турибди. Биз бу ерда фақат тўлқин функциянинг моментнинг хос функциялари учун характерли бўлган бурчакли қисмини кўриб ўтамиз. Бу қисмни $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ орқали белгилаб,

$$\int |Y_{lm}|^2 d\Omega = 1$$

шарт ёрдамида нормалаштирамиз. Бунда $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ — фазовий бурчак элементи.

Ҳар хил l ва m га эга $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ функциялар момент операторларининг ҳар хил хос қийматларига қарашли хос функциялар каби, автоматик йўсунда ўзаро ортогонал бўлиб қолади. Бу нормалаштириш шарти билан биргаликда

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (16. 1)$$

ни беради.

Изланаётган функцияни топишнинг энг қисқа йўли, сферик координаталарда ёзилган $\hat{L}^2$ операторнинг хос функцияларини топиш ҳақидаги масалани, яъни тенгламани бевосита ечишдан иборатдир. У ҳолда

$$\hat{L}^2 \psi = l(l+1) \psi$$

тенглама қуйидаги кўринишга келади:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \psi = 0. \quad (16. 2)$$

Бу тенгламада ўзгарувчиларни ажратиш мумкин, яъни унинг ечимини

$$Y_{lm} = \Phi_m(\varphi) \Theta_{lm}(\theta) \quad (16.3)$$

кўринишда қидириш мумкин, бунда Φ_m — (15.3) функция.

(16.3) ни (16.2) га қўйиб Θ_{lm} функция учун

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_{lm}}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{lm} + l(l+1) \Theta_{lm} = 0 \quad (16.4)$$

тенгламани топамиз.

Бу тенглама бизга шарга оид функциялар назариясидан маълум. Унинг бир қийматли ва чекли ечимлари момент учун юқорида матрица усули билан топилган хос қийматларга биноан, фақат мусбат бутун $l \geq |m|$ лардагина мавжуддир. Бу ечимлар умумлашган Лежандр полиномлари $P_l^m(\cos \theta)$ ни беради.

Шундай қилиб, тўлқин функцияларнинг бурчакли қисми

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \text{const} \cdot P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (16.5)$$

яъни математикавий нуқтаи назардан, маълум тарзда нормалаштирилган шарга оид функциялардан иборат экан. Биз бу ерда нормалаштирувчи ўзгармаснинг умумий ифодасини ёзиб ўтирмаймиз, балки бир қанча дастлабки ($l = 0, 1, 2$) нормалашган шарга оид функциялар учун уларнинг ошкор формулаларини келтирамиз:

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1, \pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \\ Y_{2, \pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{2, \pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned} \quad (16.6)$$

$m = 0$ да умумлашган Лежандр полиномларини соддагина қилиб, Лежандр полиномлари дейилади ($P_l(\cos \theta)$). Бу ҳолда нормалашган шарга оид функциялар

$$Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (16.7)$$

кўринишга эга.

$l = 0$ да (демак, $m = 0$ да) (16. 7) функция ўзгармас сонга айланади. Бошқача айтганда, моменти $l = 0$ бўлган зарра ҳолатларининг тўлқин функцияси фақат r га боғлиқ бўлиб, 15- § да таъкидланганидек, тўла сферик симметрияга эга. Яна шуни таъкидлаб ўтамизки, агар (16. 1) даги шарга оид функциялардан биттаси Y_{00} бўлса, у ҳолда исталган бошқа шарга оид функция учун

$$\int Y_{lm} d\omega = 0 \quad (l \neq 0) \quad (16. 8)$$

бўлади.

17- §. Моментларни қўшиш

Ўзаро заиф таъсирлашувчи икки қисмдан иборат системани қараб чиқамиз. Қисмлар орасидаги ўзаро таъсир мутлақо ҳисобга олинмаганда уларнинг ҳар бири учун импульс моментининг сақланиш қонуни ўринли ва системанинг L тўла моменти айрим қисмларнинг L_1 ва L_2 моментлари йиғиндисига тенг деб қараш мумкин. Навбатдаги яқинлашишда, яъни заиф ўзаро таъсир ҳисобга олинганда L_1 ва L_2 ларнинг сақланиш қонунлари қатъий бажарилмайди, лекин уларнинг квадратларини аниқловчи L_1 ва L_2 сонлар система ҳолатини тақрибан тавсифлашга яроқли бўлган „яхши“ квант сонлари бўлиб қолади.

Мана шундай системани ўрганишда *моментларни қўшиш қонуни* масаласи юзага келади. L_1 ва L_2 нинг берилган қийматларида L қандай қийматларни қабул қила олади? Момент проекцияси учун қўшиш қонуни равшан: $\hat{L}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z}$ дан

$$M = M_1 + M_2 \quad (17. 1)$$

ҳосил бўлади. Момент квадратлари операторлари учун бундай содда муносабат йўқ. Бу ҳолда биз „қўшиш қонуни“ ни чиқариш учун қуйидагича мулоҳаза юритамиз.

Агар физикавий катталикларнинг тўла системаси сифатида L_1^2 , L_2^2 , L_{1z} , L_{2z} ¹ олинса, у ҳолда ҳар бир ҳо-

¹ Бу кўрсатилган тўртта катталиклдан ташқари, бошқа бир қатор катталиклар ҳам тўла системани ҳосил қилади. Лекин бу бошқа катталиклар бизнинг кейинги мулоҳазаларимизда роль ўйнамайди. Шу сабабли, ифодаларни қисқартириш мақсадида бу катталиклар ҳақида умуман гапирмаймиз, яъни шартли йўсунда тўла система деб, кўрсатилган тўртта катталик тўпламини тушунамиз.

лат L_1, L_2, M_1, M_2 сонларнинг қийматлари билан аниқланади. L_1 ва L_2 нинг берилган қийматларида M_1 ва M_2 сонлар мос ҳолда $2L_1 + 1$ ва $2L_2 + 1$ қийматлар қабул қилади, демак, бир хил L_1 ва L_2 га эга бўлган турли ҳолатлар сони $(2L_1 + 1)(2L_2 + 1)$ га тенг бўлади. Бу хил тавсифлашда ҳолатларнинг тўлқин функциялари $\varphi_{L_1 L_2 M_1 M_2}$ каби белгиланади.

Юқоридаги тўртта катталиқ ўрнига тўла система сифатида L_1^2, L_2^2, L^2, L_z катталикларни олиш ҳам мумкин. У ҳолда ҳар бир ҳолат L_1, L_2, L, M сонларнинг қийматлари билан характерланади (мос тўлқин функцияларни $\psi_{L_1 L_2 L M}$ кўринишда белгилаймиз). L_1 ва L_2 нинг берилган қийматларида, албатта, олдингидек $(2L_1 + 1)(2L_2 + 1)$ та ҳар хил ҳолат бўлиши, яъни берилган L_1 ва L_2 ларда L, M сонлар жуфти $(2L_1 + 1)(2L_2 + 1)$ жуфт қиймат қабул қилиши лозим. Бу қийматларнинг ўзини қуйидаги мулоҳазадан топиш мумкин.

M_1 ва M_2 нинг ҳар хил мумкин бўлган қийматларини ўзаро қўшиб, M нинг тегишли қийматларини топамиз. Бу қийматлар қуйидаги жадвалда берилган:

M_1	M_2	M
L_1	L_2	L_1+L_2
L_1	L_2-1	L_1+L_2-1
L_1-1	L_2	
L_1-1	L_2-1	L_1+L_2-2
L_1	L_2-2	
L_1-2	L_2	
.....		

Кўриниб турибдики, M нинг мумкин бўлган энг катта қиймати $M = L_1 + L_2$ бўлиб, бу қийматга битта φ ҳолат (бир жуфт M_1 ва M_2 қиймат) мос келади. Шу сабабли, ψ ҳолатларда M нинг мумкин бўлган энг катта қиймати ва демак, L нинг энг катта қиймати $M_1 + M_2$ га тенгдир. Навбатда $M = L_1 + L_2 - 1$ қийматли иккита φ ҳолат бор. Демак, M нинг худди шундай қийматига эга бўлган иккита ψ ҳолат ҳам бўлиши керак; улардан бири $L = L_1 + L_2$ (ва $M = L - 1$) қийматли, иккинчиси $L = L_1 + L_2 - 1$ қийматли (бунда $M = L$) ҳолатдир. $M = L_1 + L_2 - 2$ қиймат учун уч хил φ ҳолат мавжуд. Бу $L = L_1 + L_2, L_1 + L_2 - 1$ қийматли

ҳолатлар билан бир қаторда $L = L_1 + L_2 - 2$ қийматли ҳолат ҳам бўлиши мумкин демакдир.

Бу мулоҳазани M нинг қийматини ҳар гал 1 га камайтирганда берилган M даги ҳолатлар сонининг 1 га ошиши тўхтагунча шу тарзда давом қилдириш мумкин. Равшанки, бу процесс M нинг қиймати камайиб, $|L_1 - L_2|$ га етгунча давом этади. M нинг бундан кейинги камайишларида ҳолатлар сони ошмай қўяди ва $2L_2 + 1$ га тенглигича қолади (агар $L_2 \leq L_1$ бўлса). Демак, L нинг мумкин бўлган энг кичик қиймати $|L_1 - L_2|$ экан.

Шундай қилиб, биз L_1 ва L_2 нинг берилган қийматларида L сони

$$L = L_1 + L_2, L_1 + L_2 - 1, \dots, |L_1 - L_2| \quad (17. 2)$$

лардан иборат бўлган $2L_2 + 1$ ($L_2 \leq L_1$) та турли қиймат қабул қилади деган хулосага келамиз. Ҳақиқатан ҳам, L , M сонлар жуфтнинг $(2L_1 + 1) \cdot (2L_2 + 1)$ та турли қиймат қабул қилишини текшириш қийин эмас. Бунда шу нарса муҳимки (агар берилган L да M нинг ҳар хил қийматлари $2L + 1$ та бўлишига эътибор берилмаса), (17. 2) даги ҳар бир қийматга биттадан ҳолат мос келади.

Бу натижани *векторли модель* деб аталадиган метод ёрдамида кўргазмали тасвирлаш мумкин. Агар узунликлари L_1 ва L_2 бўлган иккита L_1 ва L_2 вектор олинса, у ҳолда L нинг қийматлари L_1 ва L_2 векторларнинг қўшилиши натижасида ҳосил бўлган L векторнинг бутун сонли узунлиги каби тасвирланади (L_1 ва L_2 векторлар фақат шундай бурчак ташкил қилган ҳолда қўшиладиларки, натижада $L_1 + L_2 = L$ векторнинг узунлиги фақат бутун сонларни беради — *тарж*). L нинг энг катта $(L_1 + L_2)$ қиймати L_1 ва L_2 векторлар ўзаро параллел йўналганда, энг кичик ($|L_1 - L_2|$) қиймати эса бу векторлар антипараллел йўналганда ҳосил бўлади.

L_1 ва L_2 моментлар ҳамда L тўла момент аниқ қийматга эга бўлган ҳолатларда $L_1 L_2$, LL_1 , LL_2 скаляр кўпайтмалар ҳам аниқ қийматга эга бўлади. Бу қийматларни топиш қийин эмас. $L_1 L_2$ ни ҳисоблаш учун $L = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$ деб ёзиб, уни квадратга кўтарамиз ва квадратли ҳадларни бир томонга ўтказиб,

$$2\hat{L}_1 \hat{L}_2 = \hat{L}^2 - \hat{L}_1^2 - \hat{L}_2^2$$

ни топамиз. Ўнг томондаги операторларни уларнинг хос қийматларига алмаштирсак, чап томондаги операторнинг хос қиймати ҳосил бўлади:

$$L_1 L_2 = \frac{1}{2} \{L(L+1) - L_1(L_1+1) - L_2(L_2+1)\}. \quad (17.3)$$

Худди шу йўл билан

$$L L_1 = \frac{1}{2} \{L(L+1) + L_1(L_1+1) - L_2(L_2+1)\} \quad (17.4)$$

га эга бўламиз.

Агар $\psi_{L_1 M_1}^{(1)}$ ва $\psi_{L_2 M_2}^{(2)}$ лар системадаги иккита қисмнинг тўлқин функциялари бўлса, бутун системанинг (яна қисмлар орасидаги ўзаро таъсирни ҳисобга олмаслик шарти билан) тўлқин функцияси

$$\varphi_{L_1 L_2 M_1 M_2} = \psi_{L_1 M_1}^{(1)} \psi_{L_2 M_2}^{(2)} \quad (17.5)$$

кўпайтмадан иборат бўлади. Бу ҳолатлар L_1, L_2 лар билан бир қаторда аниқ M_1 ва M_2 қийматларга эга. Аниқ L, M қийматга эга бўлган ҳолатлар эса M_1, M_2 сонлар жуфтининг $M = M_1 + M_2$ тенгликка бўйсунадиган ҳар хил қийматларига мос келувчи (17.5) ҳолатларнинг суперпозициясидан иборатдир. Бу ҳолатларнинг тўлқин функциялари маълум C коэффициентли

$$\psi_{L_1 L_2 L M} = \sum_{M_1, M_2} C_{L_1 L_2 M_1 M_2}^{L_1 L_2 L M} \varphi_{L_1 L_2 M_1 M_2} \quad (17.6)$$

чизикли комбинациялар бўлиб, бу коэффициентлар ўз индексларида кўрсатилган ҳамма квант сонларига боғлиқ бўлади. Ушбу коэффициентларни *векторли қўшиш коэффициентлари* ёки *Клебш—Гордан коэффициентлари* деб аталади.

18-§. Момент бўйича танлаш қоидалари

Биз кўрдикки, классик механикада ҳам, квант механикасида ҳам моментнинг сақланиш қонуни фазонинг ёпиқ системага нисбатан изотроп бўлишидан келиб чиқади. Шунинг ўзидаёқ момент билан айланишга нисбатан симметрия хоссаси орасидаги боғланиш намоён бўлади. Бу боғланиш квант механикасида айниқса чуқурлашади ва ўз моҳияти билан момент тушунчасининг асосий мазмуни бўлиб қолади. Чунки бу ерда зарра моментининг $[\mathbf{r}\mathbf{p}]$ кўпайтма шаклидаги

классик таърифи момент ва импульс векторларининг бир вақтда ўлчана олмаслиги туфайли ўз маъносини йўқотади.

16- § да кўрганимиздек, l ва m қийматлар орқали зарра тўлқин функциясининг бурчакли қисми ва шу билан бирга унинг айланишга нисбатан ҳамма симметрия хоссалари аниқланади. Бу хоссаларни энг умумий шаклда ифодалаш координаталар системаси бурилишларида тўлқин функцияларнинг алмашилиш қонунларини кўрсатишга келтирилади.

Зарралар системасининг ψ_{LM} тўлқин функцияси (L ва M нинг берилган қийматларида) координаталар системасининг фақат z ўқи атрофида бурилишидагина ўзгармайди¹. z ўқининг йўналишини ўзгартирувчи ҳар қандай бурилишда моментнинг янги z ўқига проекцияси аниқ қийматга эга бўлмайди. Бунинг маъноси шуки, тўлқин функция янги координата ўқларида M нинг мумкин бўлган қийматларига (L берилганда) мос келувчи $2L + 1$ та функциянинг суперпозицияси (чизиқли комбинацияси) га айланади. Координаталар системасини бурганда $2L + 1$ та ψ_{LM} функция бир-бири орқали алмашинади². Бундай алмашилиш қонуни (яъни суперпозиция коэффицентларининг координата ўқлари бурилиш бурчакларига боғлиқлиги) L нинг қиймати орқали тўла аниқланади. Шундай қилиб, L момент система ҳолатларини уларнинг координата системаси айланишларига нисбатан трансформацион хоссалари бўйича классификацияловчи квант сони бўлиб қолади.

Момент тушунчасининг бу аспекти квант механикасида шунинг учун ҳам айниқса муҳимки, у тўлқин функцияларнинг бурчакка қандай ошкор боғланганига боғлиқ эмас; функцияларнинг бир-бири орқали алмашилиш қонунларини бу боғланишга мурожаат қилмасдан, ўз ҳолича ифодалаш мумкин.

Энди биз юқорида баён этилган нуқтаи назардан, ҳар хил катталиклар матрица элементлари учун *тан-*

¹ Унча муҳим бўлмаган фазавий кўпайтувчигача аниқлик билан.

² Математикавий тилда уларни *айланишлар группаларининг келтирилмайдиган тасаввурларини* ҳосил қиладиган функциялар дейилади. Координаталарни бурганда бир-бирлари орқали алмашувчи функциялар сони тасаввурнинг *ўлчамлиги* деб аталади. Бунда бу сони юқорида эслатилган функцияларнинг бошқа бирор чизиқли комбинациялари ёрдамида камайтириб бўлмайди деб таҳмин қилинади.

лаш қоидаларини (момент бўйича), яъни қайси ўтишлар учун матрица элементлари нолдан фарқли бўлишини аниқлаб берувчи қоидаларни қандай топиш мумкинлигини кўрсатамиз.

Математикавий маънодаги соф шартли момент тушунчаси классларга ажратувчи белги сифатида фақат тўлқин функцияларгагина эмас, балки бошқа физикавий катталикларга ҳам қўлланилиши мумкинлигини олдиндан айтиб ўтамиз.

Масалан, ҳар қандай скаляр катталик (яъни координата алмаштиришларда умуман ўзгармайдиган катталик) ка „ $L = 0$ момент мос келади“ дейиш мумкин. Буни шундай тушуниш керак: $L = 0$ да $2L + 1 = 1$ бўлади, яъни „ўз-ўзи орқали алмашинувчи“ фақат биттагина катталик мавжуд¹. Шунга ўхшаш вектор катталикка „момент $L = 1$ “ ($2L + 1 = 3$) ни мос қилиб қўйса бўлади, чунки бу ҳолда координата системасини бурганда векторнинг учта компоненти бир-бири орқали алмашинади. Агар вектор компонентлари, уларнинг йўналишларини аниқлайдиган θ ва φ сферик бурчаклар орқали ифодаланса, қуйидагини оламиз:

$$\begin{aligned} A_+ &\equiv A_x + iA_y = A \sin \theta e^{i\varphi} & (M=1), \\ A_- &\equiv A_x - iA_y = A \sin \theta e^{-i\varphi} & (M=-1) \quad (18.1), \\ A_z &\equiv A \cos \theta & (M=0). \end{aligned}$$

Бу ифодаларни (16.6) функциялар билан солиштириб, A_z компонентга $M=0$ „момент проекцияси“, A_+ ва A_- комплекс компонентларга эса мос ҳолда $M=1$ ва $M=-1$ тўғри келишини кўриш мумкин.

Мулоҳазаларни соддалаштириш ва уларга кўргазмали тус бериш мақсадида битта зарра (эркин ёки ташқи марказий-симметрик майдондаги зарра) ҳолатини характерловчи катталиклар устидагина гапирамиз. Айтайлик, f бирор скаляр физикавий катталик бўлсин. Унинг матрица элементларини f ва m лари аниқ қийматга эга бўлган ҳолатларга нисбатан қараймиз:

$$\langle n'l'm' | f | nlm \rangle = \int \psi_{l'm'}^* f \hat{\psi}_{lm} dV, \quad (18.2)$$

¹ Ноаниқликлардан қутулиш мақсадида шуни таъкидлаш лозимки, қаралаётган аспектда ψ_{LM} тўлқин функциялар ($L \neq 1$ бўлган) „скаляр“ эмас. M лари билан фарқланадиган ҳамма $2L + 1$ та ψ_{LM} функциялар шу нуқтаи назардан, битта кўп компонентли катталикининг „ташқил этувчиси“ деб қаралиши керак.

бунда n, n' — зарра ҳолатини аниқловчи бошқа индекслар (l, m дан бошқа).

Интеграл остидаги учта кўпайтувчи $(\psi_{l'm'}^*, f, \psi_{lm})$ га „момент ва момент проекцияси“ нинг мос равишда $(l', -m')$, $(0, 0)$, (l, m) қийматлар жуфтини таққослаш мумкин (бунда функциянинг комплекс қўшмаси (16.5) даги $e^{im\varphi}$ кўпайтувчининг даражасидаги ишорани ўзгартиради, яъни гўё момент проекциясининг ишорасини ўзгартиради). Бу „моментларни“ мумкин бўлган ҳамма усуллар билан қўшиб, йиғинди „момент“ ва унинг проекциясини ҳосил қиламиз (уларни Λ ва μ орқали белгилаймиз). Шунинг билан биз, чизиқли комбинацияларига принципи жиҳатдан (18.2) даги интегралости ифодани қаторга ёйиши мумкин бўлган функцияларнинг трансформацион хоссалари билан танишган бўламиз:

$$\psi_{l'm'}^* \hat{f} \psi_{lm} = \sum_{\Lambda} a_{\Lambda\mu} \psi_{\Lambda\mu} \quad (\mu = m - m'), \quad (18.3)$$

бунда $a_{\Lambda\mu}$ — ўзгармас сонлар; $\psi_{\Lambda\mu}$ эса ўз трансформацион хоссалари жиҳатидан моментнинг хос функцияларига ўхшайдиган функциялар. Лекин юқорида қўйилган танлаш қоидалари масаласини ечиш учун бундай ёйишни бажариш шарт эмас. Ҳақиқатан ҳам, бурчаклар бўйича интеграллаганда (16.8) хоссага асосан, ёйилмадаги $\Lambda = \mu = 0$ ли ҳаддан бошқа ҳамма ҳадлар нолга айланиб кетади. Шунинг учун (18.2) матрица элементи агар ҳақиқатан ҳам (18.3) ёйилмада $\Lambda = \mu = 0$ ли ҳад қатнашсагина нолдан фарқли бўлиши мумкин. Лекин иккита l ва l' моментни қўшганда Λ фақат $l' = l$ бўлгандагина нолга тенг бўлади ($\Lambda = 0$).

Шундай қилиб, скаляр катталиқнинг матрица элементлари момент ва унинг проекцияси ўзгармай қоладиган ўтишлар учунгина нолдан фарқли бўлади деган хулосага келамиз:

$$l' = l, \quad m' = m. \quad (18.4)$$

Бундан ташқари, m сони системанинг фақат координата ўқларига нисбатан ориентациясини аниқлаганидан ва f скаляр катталиқнинг қиймати эса ориентацияга умуман боғлиқ бўлмаганидан $\langle n'l'm | f | nlm \rangle$ матрица элементи m нинг қийматига боғлиқ бўлмайди деб айтиш мумкин.

Худди шу йўл билан A вектор катталикининг $\langle n'l'm' | A | nlm \rangle$ матрица элементи учун танлаш қоидалари топиш мумкин. A вектор катталikka 1 га тенг „момент“ ни мослаб қўямиз. Уни l момент билан қўшиб, $l \neq 0$ учун $l+1$, l , $l-1$ қийматлар оламиз ($l=0$ да қўшиш натижасида фақат битта 1 қиймат ҳосил бўлиши мумкин). Агар биз интегралнинг нолдан фарқли бўлишини истасак, у ҳолда навбатдаги l' момент билан қўшиш $A=0$ йиғинди „момент“ га олиб келиши керак. Бунинг учун l' олдинги қўшиш натижаларининг биттасига тенг бўлиши лозим, яъни

$$l' = l, l \pm 1 \quad (18.5)$$

лар l' учун йўл қўйилиши мумкин бўлган қийматлар бўлиши керак. Бунда $l' = l = 0$ ли ҳолатлар орасидаги ўтишлар тақиқланган бўлади.

Момент проекцияси m бўйича танлаш қоидалари векторнинг ҳар компонентлари учун ҳар хил. (18.1) ни ҳисобга олган ҳолда қуйидаги қоидаларни топиш мумкин:

$$\begin{aligned} A_+ &= A_x + iA_y & \text{учун} & M' = M + 1, \\ A_- &= A_x - iA_y & \text{учун} & M' = M - 1 \\ A_z & & \text{учун} & M' = M. \end{aligned} \quad (18.6)$$

Вектор катталикининг матрица элементи M га боғлиқ. Бу боғланиш универсал характерга эга бўлиб, унинг бевосита момент хос функцияларининг трансформацион хоссаларидан келиб чиқишини кўрсатиш мумкин (бу нарса устида бу ерда тўхталиб ўтирмаймиз).

Иккинчи ранг симметрик тензор ҳисобланган A_{ik} катталики учун юқоридаги масалани қараб чиқамиз. Бундай тензор 6 та ҳар хил компонентга эга бўлади. Лекин бу компонентлар тўплами уларнинг трансформацион хоссаларини нуқтаи назаридан ягона бирликка эга эмас. Масала шундаки, тензор изи (яъни $A_{ii} = A_{xx} + A_{yy} + A_{zz}$ йиғинди) скаляр бўлиб, у алмашинувчи катталиклар қаторидан чиқариб ташланиши, яъни изи ноль бўлган тензор қаралиши керак. Бундай тензор *келтирилмас тензор* деб аталиб, у 5 та компонентга эга ва унга $L=2$ бўлган „момент“ни ($2L+1=5$) мослаб қўйиш мумкин¹.

¹ Системанинг электр квадруполь моменти шундай физикавий катталikka мисол бўлади.

Биз юқорида гарчи фақат битта заррага тегишли матрица элементларини кўрган бўлсак-да, олинган натижалар тўлқин функцияларнинг умумий трансформацион хоссаларидан келиб чиққанини ва шу сабабли, улар моменти сақланадиган ҳар қандай зарралар системаси учун ҳам ўринли бўлишини таъкидлаб ўтамиз.

19-§. Ҳолатлар жуфтлиги

Координаталар системасини параллел кўчириш ва буриш билан бир қаторда (бу алмаштиришларга нисбатан инвариантлик фазонинг мос равишда бир жинслилиги ва изотроплигини ифодалайди) ёпиқ система гамильтонианини ўзгартирмай қолдирувчи яна бир алмаштириш мавжуд. Бу *инверсия* деб аталувчи алмаштириш бўлиб, у ҳамма координаталарнинг ишораларини бараварига ўзгартиришдан, яъни ҳамма ўқларнинг йўналишларини тескарисига ўзгартиришдан иборат. Бундай алмаштиришларда ўнг винтли координаталар системаси чап винтлгига ўтади ва аксинча. Гамильтонианнинг бу алмаштиришга нисбатан инвариантлиги фазонинг кўзгули аксланишга нисбатан симметриклигини билдиради¹. Классик механикада Гамильтон функциясининг инверсияга нисбатан инвариантлиги ҳеч қандай сақланиш қонунига олиб келмайди. Квант механикасида эса аҳвоёт тамомияла бошқачадир.

$\psi(\mathbf{r})$ тўлқин функцияга таъсири координаталар ишорасини ўзгартиришдан иборат бўлган символик „инверсия оператори“ ни $\hat{P}$ билан белгилайлик²:

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \quad (19.1)$$

Бу операторнинг

$$\hat{P}\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = P\psi(\mathbf{r}) \quad (19.2)$$

тенгламадан аниқланувчи P хос қийматларини топиш қийин эмас. Инверсия операторининг кетма-кет икки марта таъсири функцияни дастлабки ҳолига қайтаришини, яъни функция аргументининг умуман ўзгар-

¹ Инверсияга нисбатан шунингдек, марказий-симметрик майдондаги зарранинг (координаталар боши майдон маркази билан устма-уст тушиши керак) гамильтониани ҳам инвариантдир.

² Инглизча *Parity* (жуфтлик) сўзининг бош ҳарфи P .

маслигини эслатиб ўтамыз. Бошқача айтганда $\hat{P}^2\psi = P^2\psi = \psi$ ҳосил бўлади, яъни $P^2 = 1$, бундан

$$P = \pm 1. \quad (19.3)$$

Шундай қилиб, инверсия операторининг хос функциялари ушбу оператор таъсирида ё умуман ўзгармайди, ё ўз ишорасинигина ўзгартиради. Биринчи ҳолда тўлқин функцияни (ва унга мос ҳолатни) *жуфт*, иккинчи ҳолда эса *тоқ* деб аталади.

Гамильтонианнинг инверсияга нисбатан инвариант-лиги (яъни $\hat{P}$ ва $\hat{H}$ операторларнинг коммутативлиги) *жуфтликнинг сақланиш қонунини* ифодалайди. Бу қонун қуйидагича таърифланади: агар ёпиқ система ҳолати маълум бир жуфтликка эга бўлса (яъни агар у жуфт ёки тоқ бўлса), у ҳолда бу жуфтлик вақт ўтиши билан сақланади¹.

Шунингдек, момент оператори ҳам инверсияга нисбатан инвариантдир: инверсия ҳам координата, ҳам шу координата бўйича олинган ҳосила операторларининг ишорасини ўзгартиради ва шу сабабли, (14.3) оператор ўзгармай қолади. Бошқача айтганда, инверсия оператори момент оператори билан коммутатив. Бу — система L момент ва M момент проекциясининг аниқ қийматлари билан бир вақтда маълум жуфтликка эга бўлиши мумкин, демакдир.

Ҳар хил физикавий катталикларнинг матрица элементлари учун жуфтлик бўйича маълум танлаш қоидалари мавжуд.

Аввал скаляр катталикларни қараб чиқамиз. Бунда инверсия натижасида умуман ўзгармайдиган *ҳақиқий скалярлар* билан инверсия натижасида ўз ишорасини ўзгартирувчи *псевдоскаляр* (масалан, аксиал ва қутбий векторларнинг скаляр кўпайтмаси псевдоскалярдир) ларни бир-биридан фарқлаш керак.

f ҳақиқий скаляр катталик учун фақат жуфтликлари бир хил ҳолатлар орасидаги ўтишнинг матрица элементларигина нолдан фарқли бўлиши мумкин. Ҳа-

¹ Тушунмовчиликлардан холи бўлиш мақсадида гап норелятивистик назария ҳақида юритилаётганини эслатамиз. Табиатда шундай ўзаро таъсир ҳам (релятивистик назария соҳасига тегишли бўлган) мавжудки, у жуфтликнинг сақланиш қонунини бузади (90-§ га қаранг).

қиқатан ҳам, f катталиқ учун ҳар хил жуфтликка эга бўлган ҳолатлараро ўтишнинг матрица элементи

$$f_{ug} = \int \psi_u^* \hat{f} \psi_g dq$$

интегралдан иборат, бунда ψ_g — жуфт, ψ_u эса тоқ функция. Ҳамма координаталар ишораларини бир вақтда ўзгартирганда интегралости ифода ўз ишорасини ўзгартиради; иккинчи томондан, бутун фазо бўйича олинган интегралнинг қиймати интегралланувчи ўзгарувчининг қандай белгиланишига боғлиқ эмас. Бундан $f_{ug} = -f_{ug}$, яъни $f_{ug} = 0$. Аксинча, псевдоскаляр катталиқлар учун ҳар хил жуфтликка эга бўлган ҳолатлараро ўтишнинг матрица элементларигина нолдан фарқлидир.

Худди шу йўл билан вектор катталиқлар учун ҳам танлаш қоидаларини топиш мумкин. Бунда шуни эсда тутиш керакки, одатдаги *қутбий* векторлар инверсия натижасида ўз ишорасини ўзгартиради, *аксиал* векторлар эса бундай алмаштиришда ўзгармайди (масалан, вектор момент—иккита қутбий вектор $\mathbf{p}$ ва $\mathbf{g}$ нинг вектор кўпайтмаси ана шундай вектордир). Шуни ҳисобга олган ҳолда қутбий вектор учун жуфтликлари ҳар хил бўлган, аксиал вектор учун эса жуфтликлари бир хил бўлган ҳолатлар орасидаги ўтишнинг матрица элементлари нолдан фарқли бўлишини топамиз.

l моментли битта зарра ҳолати қандай жуфтликка эга бўлишини аниқлаймиз. Сферик координаталар учун инверсия алмаштириши ($x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$)

$$r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi \quad (19.4)$$

алмаштиришдан иборат. Зарра тўлқин функциясининг бурчакка боғлиқлиги моментнинг Y_{lm} хос функциялари (16.5) орқали берилади. φ ни $\varphi + \pi$ га алмаштирганда $e^{im\varphi}$ кўпайтувчи $(-1)^m$ га кўпаяди, θ ни $\pi - \theta$ га алмаштирганда эса $P_l^m(\cos\theta)$ функция $P_l^m(-\cos\theta) = (-1)^{l-m} P_l^m(\cos\theta)$ га айланади. Шундай қилиб, тўла функция $(-1)^l$ сонга кўпаяди, яъни берилган l даги ҳолат жуфтлиги

$$P = (-1)^l \quad (19.5)$$

бўлади. Кўриниб турибдики, жуфт l га эга ҳолатлар—жуфт, тоқ l га эга ҳолатлар тоқ бўлиб, ҳолат жуфтлиги m га эмас, балки фақат l га боғлиқ бўлар экан.

Энди *жуфтликларни қўшиш қондасини* аниқлаймиз. Иккита мустақил қисмдан иборат системанинг Ψ тўлқин функцияси ҳар бир қисм тўлқин функциялари Ψ_1 ва Ψ_2 нинг кўпайтмасига тенг. Шу сабабли, равшанки, агар иккала қисм бир хил жуфтликка эга бўлса (яъни ҳамма координаталар ишораларини ўзгартирганда иккаласи ўз ишорасини ўзгартирса ёки сақлаб қолса), тўла системанинг тўлқин функцияси жуфт бўлади. Аксинча, агар Ψ_1 ва Ψ_2 функциялар ҳар хил жуфтликка эга бўлса, у ҳолда Ψ функция тоқ бўлади. Бу хулосани қуйидаги тенглик орқали ифодалаш мумкин:

$$P = P_1 P_2, \quad (19.6)$$

бунда P — тўла системанинг жуфтлиги, P_1 , P_2 — айрим қисмларнинг жуфтлиги. Албатта, бу қонда исталганча ўзаро таъсирлашмайдиган қисмлардан ташкил топган система учун бевосита умумлаштирилиши мумкин.

Хусусий ҳолда, марказий-симметрик майдондаги зарралар системаси (зарралар орасидаги ўзаро таъсирни заиф деб ҳисоблаш мумкин) учун ҳолат жуфтлиги

$$P = (-1)^{l_1 + l_2 + \dots + l_n} \quad (19.7)$$

бўлади. Таъкидлаб ўтамизки, кўрсаткичда зарралар моментларининг алгебраик йиғиндиси турибди; бу йиғинди, умуман айтганда, моментларнинг „вектор йиғиндиси“, яъни L моментдан фарқ қилади.

Агар ёпиқ система ички кучлар таъсирида қисмларга ажралса, у ҳолда унинг тўла моменти ва тўла жуфтлиги сақланиши керак. Бу ҳол системанинг емирилишига (ҳатто у энергетик жиҳатдан мумкин бўлганда ҳам) йўл қўймаслиги мумкин.

Масалан, моменти $L=0$ ва жуфт ҳолатда бўлган атомни олайлик. Бундай атом энергетик жиҳатдан эркин электрон ва $L=0$ моментли тоқ ҳолатдаги ионга ажралиши мумкин. Амалда эса бундай емирилиш юз бермайди (яъни у *тақиқланган*). Ҳақиқатан ҳам, моментнинг сақланиш қонунига биноан, эркин электрон ҳам нолга тенг моментга эга бўлиши ва шунинг учун жуфт ҳолат ($P = (-1^0) = 1$) да жойлашиши керак эди. Лекин бу ҳолда „ион + эркин электрон“ системанинг ҳолати тоқ бўлиб қолади, атомнинг дастлабки ҳолати эса жуфт эди.

III боб

ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИ

20- §. Шредингер тенгламаси

Физикавий система тўлқин тенгламасининг кўриниши система гамильтониани орқали белгиланади. Шу сабабли, квант механикасининг ҳамма математикавий аппаратида гамильтониан фундаментал аҳамиятга эга.

Эркин зарра гамильтонианининг кўриниши фазонинг бир жинслилиги ва изотроплиги ҳамда Галилейнинг нисбийлик принципи билан боғлиқ бўлган умумий талаблар асосида белгиланади. Классик механикада бу талаблар зарра энергиясининг зарра импульсига квадратик боғлиқ бўлишига олиб келади: $E = \frac{p^2}{2m}$, бунда ўзгармас m зарра массаси дейилади (1, 4- § га қаранг). Квант механикасида шу талабларнинг ўзи энергия ва импульснинг хос қийматлари ўртасида худди шундай муносабат ўрнатади. Эркин зарра учун бу хос қийматлар бир вақтда ўлчанадиган сақланувчи катталиклардир.

Лекин $E = \frac{p^2}{2m}$ муносабат энергия ва импульснинг ҳамма хос қийматларида ўринли бўлиши учун у энергия ва импульс операторлари учун ҳам ўринли бўлиши керак:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2). \quad (20.1)$$

Бу ифодага (12.4) ни қўйиб, эркин ҳаракатланаётган зарра учун гамильтониан кўринишани топамиз:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (20.2)$$

бунда $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — Лаплас оператори.

Ўзаро таъсирлашмайдиган зарралар системасининг гамильтониани ҳар бир зарра гамильтонианларининг йиғиндисига тенг:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_a \frac{1}{m_a} \Delta_a, \quad (20.3)$$

бунда a — зарранинг тартиб номери; Δ_a Лаплас оператори бўлиб, дифференциаллаш a -зарранинг координатаси бўйича бажарилади.

Классик (норелятивистик) механикада зарраларнинг ўзаро таъсири гамильтониандаги аддитив ҳад — зарралар координаталарининг функцияси ҳисобланган $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ ўзаро таъсир потенциал энергияси орқали тавсифланади. Квант механикасида ҳам зарраларнинг ўзаро таъсирини тавсифлаш учун система гамильтонианига худди шундай ҳад қўшилади:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_a \frac{\Delta_a}{m_a} + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots). \quad (20.4)$$

Биринчи ҳадни кинетик энергия оператори деб, иккинчи ҳадни эса потенциал энергия оператори деб қараш мумкин. Сўнгги оператор U функцияга кўпайтириш амалининг ўзи бўлиб, классик механикага чегаравий ўтиш ёрдамида бу функциянинг одатдаги классик потенциал энергия эканини кўрсатиш мумкин. Хусусий ҳолда, ташқи майдондаги битта зарра гамильтониани

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z) \quad (20.5)$$

бўлади, бунда $U(x, y, z)$ — зарранинг ташқи майдондаги потенциал энергияси.

(20.2 — 5) ифодаларни (8.1) умумий тенгламага қўйиб тегишли системалар учун тўлқин тенгламалар олинади. Биз бу ерда ташқи майдондаги зарра учун тўлқин тенгламани ёзиб кўрсатамиз:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(x, y, z) \Psi. \quad (20.6)$$

Стационар ҳолатларни аниқловчи (10.2) тенглама эса

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + [E - U(x, y, z)] \psi = 0 \quad (20.7)$$

кўринишга келади. (20.6 — 7) тенгламалар 1926 йилда Эрвин Шредингер томонидан топилган ва *Шредингер тенгламалари* деб аталади. Битта эркин зарра учун (20.7) тенглама

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + E\psi = 0 \quad (20.8)$$

кўринишда бўлиб, у бутун фазода E энергиянинг изоталланган мусбат қийматлари учун чекли ечимга эга. Аниқ ҳаракат ҳолатлари учун бундай ечимлар вазифасини импульс оператори (12.5) нинг хос функциялари бажаради, бунда $E = \frac{p^2}{2m}$. Бундай стационар ҳолатларнинг тўла (вақтга боғлиқ) тўлқин функциялари

$$\Psi = \text{const} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})} \quad (20.9)$$

кўринишга эга.

Шу хилдаги ҳар бир функция (яъни *ясси тўлқин*) аниқ E энергияга ва $\mathbf{p}$ импульсга эга бўлган зарра ҳолатини тавсифлайди. Бу тўлқиннинг частотаси $\frac{E}{\hbar}$ га, унинг тўлқин вектори эса $\mathbf{k} = -\frac{\mathbf{p}}{\hbar}$ га тенг (мас $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$ тўлқин узунлигини зарранинг *де-Бройль тўлқин узунлиги* деб аталади¹).

Шундай қилиб, эркин ҳаракатланаётган зарранинг энергия спектри узлуксиз бўлиб, 0 дан $+\infty$ гача қийматлар қабул қилар экан. Бу хос қийматларнинг ҳар бири ($E=0$ қиймат бундан мустасно) чексиз карралайниган. Ҳақиқатан ҳам, E нинг нолдан фарқли ҳар бир қийматига абсолют қийматлари бир хил бўлиб, лекин йўналишлари билан фарқланувчи чексиз кўп $\mathbf{p}$ импульс мос келади, демак, E нинг бу қийматига (20.9) кўринишдаги шунча донга хос функция тўғри келади.

21- §. Оқим зичлиги

Классик механикада зарранинг $\mathbf{v}$ тезлиги билан унинг импульси қуйидагича боғланган: $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. Квант механикасида худди шундай боғланиш кутганимиздек,

¹ Зарра билан боғлиқ бўлган тўлқин ҳақидаги тушунчани биринчи бўлиб 1924 йилда Луи де-Бройль киритди.

бу катталикларнинг операторлари ўртасида ўринли бўлади. Бунга ишонч ҳосил қилиш учун операторларни вақт бўйича дифференциаллашнинг умумий қондаси

(9.2) га биноан, $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{r}}$ ни ҳисоблаймиз. Гамильтонианнинг (20.5) ифодасидан фойдаланиб,

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\mathbf{r} - \mathbf{r}\hat{H}) = -\frac{i\hbar}{2m}(\Delta\mathbf{r} - \mathbf{r}\Delta)$$

ифодани ёзиш мумкин. Ифодадаги коммутаторни аниқлаш учун шу коммутаторнинг ихтиёрий функцияга таъсирини кўрамыз:

$$\Delta(\mathbf{r}\psi) - \mathbf{r}(\Delta\psi) = 2(\nabla\psi),$$

лекин $-i\hbar\nabla = \hat{\mathbf{p}}$ бўлганидан

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \quad (21.1)$$

ҳосил бўлади. Равшанки, худди шундай муносабат тезлик ва импульснинг хос қийматлари ва уларнинг исталган ҳолатдаги ўртача қийматлари орасида ҳам мавжуддир.

Тезлик ҳам зарра импульси каби, зарра координаталари билан бир вақтда аниқ қийматга эга бўла олмайди. Лекин dt чексиз кичик вақт элементига кўпайтирилган тезлик зарранинг dt вақт ичида силжишини аниқлайди. Шу сабабли, зарра координаталари билан тезлиkning бир вақтда мавжуд бўлмаслиги бирор вақт моментида фазонинг аниқ бир нуқтасида жойлашган зарра координаталари навбатдаги чексиз кичик вақтда энди аниқ қийматга эга бўлмаслигини кўрсатади.

Энди тезланиш операторини топамиз:

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\mathbf{v}} - \hat{\mathbf{v}}\hat{H}) = \frac{i}{m\hbar} (\hat{H}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{H}) = \frac{1}{m}(U\nabla - \nabla U).$$

Бу ерда ҳам оператор маъносини аниқлаш учун уни бирор ψ функцияга таъсир қилдирамыз:

$$U(\nabla\psi) - \nabla(U\psi) = -(\nabla U)\psi.$$

Демак,

$$m\hat{\mathbf{v}} = \nabla U \quad (21.2)$$

экан. Бу оператор тенглама шаклан классик механикадаги ҳаракат тенгламасига (Ньютон тенгламасига) батамом ўхшайди.

Бирор чекли V ҳажм бўйича олинган $\int_V |\Psi|^2 dV$ интеграл зарранинг шу ҳажмда топилиш эҳтимолини беради. Бу катталиқдан вақт бўйича ҳосила оламиз:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 dV &= \int_V \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dV = \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_V (\Psi \hat{H}^* \Psi^* - (\Psi^* \hat{H} \Psi)) dV. \end{aligned}$$

Бу ифодага

$$\hat{H} = \hat{H}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z)$$

ни қўйиб ва

$$\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi = \operatorname{div}(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

айниятдан фойдаланиб,

$$\frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 dV = - \int_V \operatorname{div} \mathbf{j} dV$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бунда $\mathbf{j}$ вектор

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \operatorname{grad} \Psi^* - \Psi^* \operatorname{grad} \Psi) = \frac{1}{2} (\Psi^* \hat{\mathbf{v}} \Psi + \Psi \hat{\mathbf{v}}^* \Psi^*) \quad (21.3)$$

дан иборат.

$\operatorname{div} \mathbf{j}$ дан олинган интеграл Гаусс теоремасига асосан V ҳажми ўраб турган ёпиқ S сирт бўйича олинган интегралга ўтказилиши мумкин¹:

$$\frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 dV = - \oint_S \mathbf{j} \, d\mathbf{f}. \quad (21.4)$$

Кўриниб турибдики, $\mathbf{j}$ ни *эҳтимоллар оқими зичлигининг вектори* ёки содда қилиб *оқим зичлигининг вектори* деб аташ мумкин. Бу вектордан сирт бўйича олинган интеграл зарранинг вақт бирлиги ичида шу сиртни кесиб ўтиш эҳтимолини билдиради.

$\mathbf{j}$ вектор ва $|\Psi|^2$ эҳтимоллар зичлиги классик механикадаги узлуксизлик тенгламаси (I, 55-§) га ўхшаш тенгламани қаноатлантиради:

$$\frac{\partial_t |\Psi|^2}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0. \quad (21.5)$$

¹ Одатдагидек, $d\mathbf{f}$ сирт элементи катталиқ жиҳатидан $d\mathbf{f}$ юза элементига тенг ва сирт элементига ўтказилган ташқи нормал бўйича йўналган вектор деб қаралади.

Эркин ҳаракат тўлқин функцияси, яъни ясси тўлқин (20.9) шундай нормалаштирилиши мумкинки, энди у оқим зичлиги 1 га тенг бўлган зарралар оқимини (кўндаланг кесимининг бирлик юзидан вақт бирлигида битта зарра ўтадиган оқим) тавсифласин. Бундай нормалаштирилган функция

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - pr)} \quad (21.6)$$

кўринишда бўлади, бу ерда v — зарра тезлиги. Дарҳақиқат, бу функцияни (21.3) га қўйиб, $\mathbf{j} = \frac{\mathbf{p}}{mv}$ ни, яъни ҳаракат йўналишидаги бирлик векторни оламиз.

22- §. Шредингер тенгламаси ечимларининг умумий хоссалари

Шредингер тенгламасининг ечимлари қаноатлантирадиган шартлар анча умумий характерга эга. Аввало тўлқин функция (ўзининг биринчи ҳосилалари билан биргаликда) бутун фазода бир қийматли ва узлуксиз бўлиши керак. Ҳосиланинг узлуксизлик шarti оқим зичлиги узлуксиз бўлиши кераклигини ифодалайди.

Агар $U(x, y, z)$ майдон ҳеч қаерда чексизликка айланмаса, у ҳолда тўлқин функция ҳам бутун фазода чекли бўлиши лозим. Бу шарт U нинг бирор нуқтада $-\infty$ га унча тез айланмайдиган¹ ҳолларда ҳам ўринли бўлиши керак.

Айтайлик, $U_{\min}$ функция $U(x, y, z)$ нинг минимал қиймати бўлсин. Гамильтониан икки ҳад — кинетик (T) ва потенциал энергия операторлари йиғиндисидан иборат бўлганидан, энергиянинг ихтиёрий ҳолатдаги ўртача қиймати $\overline{E} = \overline{T} + \overline{U}$ йиғиндига тенгдир. Лекин $\hat{T}$ оператор (эркин зарра гамильтониани)нинг ҳамма хос қийматлари мусбат, шунинг учун ўртача қиймати

¹ Яъни $-\frac{1}{r^2}$ дан секинроқ айланадиган ҳолатларда, бунда r — нуқтагача бўлган масофа. Агар U функция $-\infty$ га $-\frac{1}{r^2}$ дан тезроқ айланса, у ҳолда „нормал“ ҳолат $r = 0$ нуқтанинг ўзида ётган заррага мос келишини, яъни зарра марказга „қулаши“ ни кўрсатиш мумкин.

$\overline{T} \geq 0$ бўлади. Шунингдек, ўз-ўзидан маълум бўлган $\overline{U} > U_{\min}$ тенгсизликни эътиборга олиб, $\overline{E} > U_{\min}$ ни топамиз. Бу тенгсизлик ҳар қандай ҳолат учун ўринли бўлганидан, равшанки, у энергиянинг ҳамма хос қийматлари учун ҳам ўринли бўлади:

$$E_n > U_{\min}. \quad (22.1)$$

Чексизликда йўқолувчи куч майдонида ҳаракатланаётган заррани қарайлик. $U(x, y, z)$ функцияни одатда қабул қилинганидек, чексизликда нолга айланади деб оламиз. Бу ҳолда энергиянинг манфий хос қийматлари спектри дискрет бўлади, яъни $E < 0$ бўлган ҳамма ҳолатлар боғланган ҳолатлар бўлиб чиқади. Ҳақиқатан ҳам, узлуксиз спектрли стационар ҳолатларда (бунда зарра инфинит ҳаракат қилади) зарра чексизликда ётади (10- § га қаранг). Лекин етарлича катта масофаларда майдонни ҳисобга олмаслик ва заррани эркин ҳаракат қилади деб қараш мумкин; эркин ҳаракатда эса энергия фақат мусбат бўлиши мумкин.

Аксинча, мусбат хос қийматлар узлуксиз спектр ҳосил қилади ва инфинит ҳаракатга мос келади, умуман айтганда, $E > 0$ да Шредингер тенгламаси $\int |\psi|^2 dV$ интегрални яқинлаштирувчи ечимларга эга эмас (қаралаётган майдон учун).

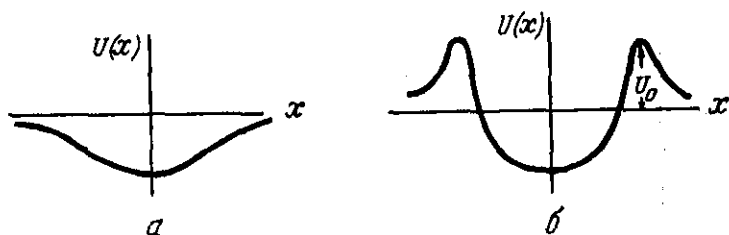
Квант механикасида фикит ҳаракатда зарра фазонинг $E < U$ бўлган соҳаларига ҳам тушиши мумкин; зарранинг $|\Psi|^2$ топилиш эҳтимоли гарчи масофанинг ортиши билан (соҳа ичкарисига томон) нолга тез интилса ҳам, лекин бярча чекли масофаларда ҳар ҳолда нолдан фарқли бўлади. Шу маънода квант механикаси классик механикадан (классик механикада зарра $E < U$ бўлган соҳага умуман кира олмайди) принципиал фарқ қилади. Классик механикада зарранинг $E < U$ соҳага кира олмаслиги ушбу соҳада зарра кинетик энергиясининг манфий, яъни тезликнинг эса мавҳум бўлиши (мавҳум тезлик албатта, маънога эга эмас) билан боғлиқдир. Кинетик энергиянинг хос қийматлари квант механикасида ҳам мусбатдир; шунга қарамай, бу ерда ҳеч қандай қарама-қаршиликка дуч келмаймиз. Чунки ўлчаш процесси заррани фазонинг маълум бир нуқтасига локаллаштиради, натижада зарранинг

ҳолати шундай ўзгарадики, энди у умуман ҳеч қандай аниқ кинетик энергияга эга бўлмай қолади.

Юқорида айтилганларни бир ўлчовли ҳаракат мисолида кўриб ўтамиз. Бундай ҳаракатга мисол қилиб битта координатага боғлиқ бўлган $U(x)$ майдондаги ҳаракатни олиш мумкин. Бунда зарранинг у ва z ўқлари бўйлаб ҳаракати эркин бўлади, x бўйича ҳаракат эса бир ўлчовли Шредингер тенгламаси

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi = 0 \quad (22.2)$$

га бўйсунди.



1- расм.

1-а расмда тасвирланган типдаги „потенциал ўрада“ $E < 0$ энергияли ҳаракат финит бўлиб, мос энергия сатҳлари спектри дискретдир. $E > 0$ энергиялар эса узлуксиз спектр ҳосил қилади ва ҳаракат инфинит бўлади. Шу икки ҳол учун тўлқин функцияларнинг катта x масофалардаги асимптотик кўринишини аниқлаймиз. $x \rightarrow \pm \infty$ да $U \rightarrow 0$ бўлганидан, катта масофаларда (22.2) тенгламадаги U майдонни E га нисбатан ҳисобга олмай ташлаб юбориш мумкин. У ҳолда

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \quad (22.3)$$

ҳосил бўлади. Бу $E > 0$ да бир ўлчовли эркин ҳаракат тенгламасидир. Унинг умумий ечими

$$\psi = a_1 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (22.4)$$

кўринишга эга бўлиб, x ўқ бўйича чапга ва ўнгга қараб юз бераётган ҳаракатга мос келувчи иккита ясси тўлқин суперпозициясидан иборат. Бу ерда энергиянинг ҳар бир сатҳи қарама-қарши йўналишларда юз

бериши мумкин бўлган иккита ҳаракатга мос ҳолда икки карралаи айниган бўлади.

$E < 0$ манфий энергиялар учун эса иккинчи тартибли дифференциал тенглама (22.2) нинг иккита мустақил ечимидан қуйидаги чегаравий шартни қаноатлантирувчи биттасигина яроқли бўлади. Бу чегаравий шарт бўйича финит ҳаракатнинг тўлқин функцияси $x \rightarrow \pm \infty$ да нолга интилиши лозим. Катта масофаларда биз яна (22.3) тенгламага келамиз, лекин бу тенгламанинг ечими асимптотик кўринишга эга бўлади:

$$x \rightarrow \pm \infty \text{ да } \psi = \text{const} \cdot e^{\pm \kappa x}, \quad \left(\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|} \right), \quad (22.5)$$

яъни у классик йўл қўйиб бўлмайдиган соҳа томонга экспоненциал сўнади ((22.3) нинг иккинчи ечими эса $x \rightarrow \pm \infty$ да чексизга интилади).

Агар гап фақат финит ҳаракат ёки инфинит ҳаракат устида кетса, у ҳолда биз кўриб ўтган типдаги (1-а расм) майдон учун иккала имконият классик ва квант механикасида бир хил ҳолларда (мос ҳолда $E < 0$ ва $E > 0$ да) амалга ошади. Лекин бу айтилган фикр 1-б расмда тасвирланган майдон (бунда потенциал ўра чекли U_0 баландликка эга бўлган „потенциал тўсиқ“ билан ўралган) учун ўринли эмас. $E < 0$ да ҳаракат олдингидек бу ерда ҳам финитдир. Классик механикада ҳаракат ўра ичида шунингдек $0 < E < U_0$ энергия учун ҳам финит бўлган бўлур эди. Квант механикасида эса ҳаракат ҳар қандай $E > 0$ энергияларда (яъни потенциал тўсиқ баландлигидан юқори ёки паст бўлган мусбат энергияларда) инфинит бўлади. Бирор вақт моментида „ўра ичида“ турган $E > 0$ энергияли зарра кейин „тўсиқни тешиб ўтиб“ ўра ташқарисига чиқиши мумкин.

Шундай қилиб, квант механикаси зарранинг инфинит ҳаракатига йўл қўяди, лекин бу шароитларда классик механикада ҳеч қандай ҳаракат умуман юз бермаган бўлур эди. Тўсиқдан ўтиш ҳодисасининг табиати (28-§ да батафсил кўрилади) юқорида эслатилган ҳол, яъни классик ҳаракат юз бермайдиган соҳаларда тўлқин функциянинг қатъий нолга айланмаслиги билан боғлиқ.

Шредингер тенгламаси $\hat{H}\psi = E\psi$ умумий кўринишда вариацион принцип

$$\delta \int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = 0 \quad (22.6)$$

дан ҳам чиқарилиши мумкин. ψ комплекс функция бўлгани учун ψ ва ψ^* бўйича вариациялаш мустақил бажарилиши мумкин. ψ^* бўйича вариациялаб,

$$\int \delta \psi^* (\hat{H} - E) \psi dq = 0$$

ни оламир. $\delta \psi^*$ ихтиёрий бўлганидан бу ифода $\hat{H}\psi = E\psi$ тенгламани беради. ψ бўйича вариациялаш бирор янги нарса бермайди, у фақат $\hat{H}^*\psi^* = E\psi^*$ комплекс-қўшма тенгламага олиб келади.

Вариацион ҳисоб методлари ёрдамида зарра стационар ҳолатлари тўлқин функцияларининг умумий хос-салари ҳақидаги бир қатор муҳим теоремалар исбот қилиниши мумкин.

Нормал ҳолатнинг ψ_0 тўлқин функцияси ҳеч қандай чекли координатада нолга айланмайди (ёки тугунларга эга эмас деб ҳам гапирилади). Бошқача айтганда, у бутун фазода бир хил ишорага эга. Бундан ψ_0 га ортогонал бўлган бошқа стационар ҳолатларнинг $\psi_n (n > 0)$ функциялари албатта тугунларга эга бўлади деган хулосага келамиз (агар ψ_n ҳам бутун фазода бир хил ишорага эга бўлса, у ҳолда $\int \psi_n \psi_0 dV$ интеграл нолга айлана олмайди).

ψ_0 да тугунларнинг йўқлиги нормал энергетик сатҳнинг айнамаган бўлишини кўрсатади. Ҳақиқатан ҳам, тескариси фараз қилинса, E_0 сатҳга иккита ҳар хил хос функция ψ_0 ва ψ'_0 мос келган бўлур эди. Ҳар қандай $s\psi_0 + s'\psi'_0$ чизиқли комбинация ҳам E_0 нинг хос функцияси бўлади. Лекин s ва s' ларни мос ҳолда танлаб, ҳар доим фазонинг исталган нуқтасида бу функцияни нолга айлантириш, яъни тугунли хос функциялар ҳосил қилиш мумкин.

Бир ўлчовли ҳаракат учун анча умумийроқ бўлган *осцилляция теорема* деб аталувчи теорема ўринлидир. Бу теоремага кўра, дискрет спектрнинг катталиги жиҳатидан E_n хос қийматнинг $n + 1$ -сига мос келувчи $\psi_n(x)$ тўлқин функцияси x нинг чекли қийматларида n марта нолга айланади.

23- §. Вақтнинг ўгирилиши

Стационар ҳолатларнинг тўлқин функциялари учун ёзилган Шредингер тенгламаси унинг ечимларига қўйилган шартлар каби ҳақиқийдир. Шунинг учун унинг

ечимлари ҳамма вақт ҳақиқий қилиб танланиши мумкин. Бунда айнимаган энергия сатҳларининг хос функциялари ўз-ўзидан ҳақиқий бўлар экан (унча аҳамиятли бўлмаган фазавий кўпайтувчигача аниқлик билан). Ҳақиқатда ψ^* функция ψ қаноатлантирадиган тенгламани қаноатлантиради ва шу сабабли, энергиянинг худди шу қийматларининг хос функциялари бўлади; Шунинг учун агар энергиянинг бу қиймати айнимаган бўлса, у ҳолда ψ ва ψ^* амалда бир хил бўлиб, бир-биридан фақат ўзгармас фазавий кўпайтувчиси билангина фарқланади. Энергиянинг битта айниган сатҳига мос келувчи тўлқин функцияларнинг ҳақиқий бўлиши шарт эмас, лекин уларнинг чизикли комбинацияларини тегишлича танлаш йўли билан доимо ҳақиқий функциялар тўпламини ҳосил қилиш мумкин.

Вақтга боғлиқ бўлган тўла тўлқин функциялар (Ψ) коэффициентларида i комплекс бирлик қатнашган тенгламадан аниқланади. Бироқ бу тенгламада t ни — t га алмаштириш билан бир вақтда комплекс қўшмага ҳам ўтилса, у ўз кўринишини ўзгартирмайди. Шу сабабли, Ψ ни ҳамма вақт шундай танлаш мумкинки, бунда Ψ ва Ψ^* бир-биридан фақат вақт олдидаги ишораси билангина фарқ қилсин. Бу бизга (10.1) ва (10.3) формулалардан таниш бўлган натижадир.

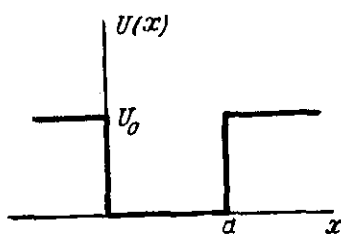
Маълумки, классик механика тенгламалари вақтнинг ўгирилишида, яъни унинг ишорасини ўзгартирганда ўзгармай қолади. Квант механикасида вақтнинг иккала йўналишига нисбатан симметрия кўриб турганимиздек, t вақтнинг ишорасини ўзгартириш билан бир вақтда Ψ ни Ψ^* га алмаштирганда тўлқин тенгламанинг ўзгармаслиги билан ифодаланади.

Таъкидлаб ўтамизки, бу симметрия бунда фақат тўлқин тенгламагагина тегишлидир. Квант механикасида фундаментал роль ўйновчи ўлчаш процессига унинг ҳеч қандай алоқаси йўқ. Бу процесс квант механикасида „икки юзлама“ характерга эга бўлиб, у ўтмишга ва келажакка нисбатан ҳар хил роль ўйнайди. Ўтмишга нисбатан у олдинги ўлчаш процесси яратган ҳолат бўйича аниқланувчи мумкин бўлган ҳар хил натижаларнинг эҳтимолини тасдиқлаб беради. Келажак учун эса у янги ҳолат яратади (бу масалага биз 37- § да яна қайтамиз). Шундай қилиб, квантомеханикавий ўлчаш процесси табиатининг ўзида қатъий қайтмовчанлик қарор топгандир.

Бу қайтмовчанлик муҳим принципиал аҳамиятга эга. Гарчи квант механикасининг асосий тенгламалари ўз-ўзидан вақт ишорасининг ўзгаришига нисбатан симметрик бўлса-да (бу маънода квант механикаси классик механикадан фарқ қилмайди), ўлчаш процессининг қайтмовчанлиги квант ҳодисаларида вақтнинг иккала йўналиши физикавий жиҳатдан тенг кучли бўлмаслигини тақозо қилади, яъни у ўтмиш ва келажак ўртасида фарқ пайдо бўлишига олиб келади.

24- §. Потенциал ўра

Бир ўлчовли ҳаракатнинг оддий мисоли сифатида 2- расмда тасвирланган тўғри бурчакли потенциал ўрадаги ҳаракатни кўриб ўтамиз (бу ерда потенциал энергияни унинг чексизликдаги қийматидан эмас, балки ўра тубидан ҳисоблаш қулайдир). Бизни ҳозир $0 < E < U$ энергиялар дискрет спектрига алоқадор бўлган



2- расм.

финит ҳаракатнинг ҳолати қизиқтиради.

Шредингер тенгламаси $0 < x < a$ соҳада

$$\psi'' + k^2\psi = 0,$$

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (24.1)$$

кўринишда (штрих x бўйича ҳосилани билдиради), ўра ташқарисидagi соҳада эса

$$\psi'' - \kappa^2\psi = 0, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (24.2)$$

кўринишда бўлади. $x = 0$ ва $x = a$ нуқтада бу тенгламаларнинг ечимлари бир-бирлари билан шундай „тикилган“ бўлиши керакки, бунда ψ ва ψ' узлуксиз бўлсин.

(24.2) тенгламанинг чексизликда нолга айланadиган ечими

$$\psi = \text{const} \cdot e^{\pm \kappa x} \quad (24.3)$$

бўлиб, кўрсаткичдаги $-$ ва $+$ ишора мос ҳолда $x > a$ ва $x < 0$ соҳаларга тааллуқлидир. Ўра чегараларида ψ ва ψ' нинг узлуксизлиги ўрнига ψ ва $\frac{\psi'}{\psi}$ логариф-

мик ҳосиланинг узлуксиз бўлишини талаб қилиш қулайроқдир. (24.3) ни ҳисобга олиб,

$$\frac{\psi'}{\psi} = \mp \kappa \quad (24.4)$$

чегаравий шартни ҳосил қиламиз. Бу ерда биз ихтиёрий U_0 чуқурликка эга бўлган ўрадаги энергия сатҳларини аниқлашга тўхтаб ўтирмаймиз (2-масалага қаранг). Фақат девор баландлиги чексизликка интилган чегаравий ҳолнигина охиригача қараб чиқамиз.

$U_0 \rightarrow \infty$ да (24.3) функция айнан нолга айланади: табиийки, потенциал энергияси чексиз катта бўлган соҳага зарра умуман кира олмайди. Шундай қилиб (22.1) тенгламани

$$x = 0, \text{ а да } \psi = 0 \quad (24.5)$$

чегаравий шартларни назарда тутган ҳолда ечиш лозим. Бундай ечимни „турғун тўлқин“ кўринишда қидирамиз:

$$\varphi = c \sin (kx + \delta). \quad (24.6)$$

$x = 0$ да $\psi = 0$ бўлишлик шarti $\delta = 0$ ни беради, сўнг-ра $x = a$ да $\psi = 0$ бўлишлик шартдан $\sin ka = 0$ ҳосил бўлади, бундан $ka = \pi(n + 1)$ эканлиги (бу ерда $n = 0, 1, 2, \dots$) келиб чиқади.

Шундай қилиб, ўрадаги зарра энергияси сатҳлари

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n + 1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (24.7)$$

экан. Хусусан, асосий ҳолат энергияси $E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ га тенг. Бу натижа ноаниқлик муносабатига мос ҳолда топилади: координата ноаниқлиги $\sim a$ бўлса, импульс ноаниқлиги ва шу билан бирга импульснинг ўзи $\sim \frac{\hbar}{a}$ тартибга эга; мос энергия эса $\sim \frac{1}{m} \left(\frac{\hbar}{a} \right)^2$ бўлади.

Стационар ҳолатларнинг нормалаштирилган тўлқин функциялари

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a} \quad (24.8)$$

бўлиб, у осцилляцион теоремага биноан ҳаракатланиш соҳаси ичида ҳақиқатан ҳам n марта нолга айланади. Осцилляцион теорема татбиқ қилинганда ноллар сонини ҳисоблашда бу соҳанинг чегаралари (ушбу ҳолда $x = 0$ ва $x = a$ нуқталар) эътиборга олинмайди.

Бир ўлчовли исталган шаклдаги потенциал ўра ҳамма вақт (ҳатто потенциал ўра жуда саёз бўлганда ҳам) ҳеч бўлмаганда битта энергия сатҳига эга (масалан, 2- масалага қаранг). Бироқ бу хосса фақат бир ўлчовли ўра учун ўринли бўлиб, анча реал бўлган уч ўлчовли потенциал ўра учун ўринли бўлмайди, агар борди-ю, ўранинг чуқурлиги $|U|$

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad (24.9)$$

тенгсизлики (бунда a — ўранинг чизиқли ўлчамлари китталигининг тартиби) қаноатлантирса, у ҳолда ўра битта ҳам дискрет сатҳга эга бўлмайди. Бошқача айтганда, агар ўра етарлича чуқур бўлмаса, у ҳолда ўрада боғланган ҳолатлар бўлмайди, яъни ўра заррани „тутиб тура олмайди“. Таъкидлаб ўтамизки, бу хосса соф квант характериға эга бўлиб, классик механикаға биноан зарра ҳар қандай потенциал ўрада ҳам финит ҳаракат қилиши мумкин. Бу хоссанинг келиб чиқиши 32- § да ойдинлаштирилади (30- § даги 1-масалада эса бу хосса хусусий ҳол, яъни сферик-симметрик ўра учун бевосита ҳисоблаб чиқарилади).

М а с а л а л а р

1. Чексиз чуқур тўғри бурчакли потенциал ўрада бир ўлчовли ҳаракат қилаётган зарранинг нормал ҳолати учун ҳар хил импульс қийматлари эҳтимолларининг тақсимоти топиладин.

Е ч и л и ш и. p импульс қийматлағининг dp интервалдаги эҳтимоли $|a(p)| dp$ га тенг, бунда $a(p)$ бир ўлчовли ҳол учун

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \psi_0(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx$$

кўринишда аниқланади [(12.12) билан таққосланг]. Бу ифодадаги ψ_0 ўрниға унинг (24.8) даги ифодасини қўйиб ва интегрални ҳисоблаб қидириладиётган эҳтимоллар тақсимотини топамиз:

$$|a(p)|^2 = \frac{4\pi\hbar^3 a}{(p^2 a^2 - \pi^2 \hbar^2)^2} \cos^2 \frac{pa}{2\hbar}.$$

2. 2- расмда тасвирланган потенциал ўра учун энергия сатҳлари аниқлансин.

Е ч и л и ш и. Ўра чегараларида (24.4) шарт

$$k \operatorname{ctg} \delta = -k \operatorname{ctg}(ak + \delta) = -\chi \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U_0 - k^2}$$

тенгламани ёки

$$\sin \delta = -\sin(ka + \delta) = \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}$$

тенгламани беради. δ ни чиқариб ташлаб,

$$ka = (n + 1)\pi - 2\arcsin \frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \quad (1)$$

трансцендент тенгламага келамиз (бунда $n = 0, 1, 2, \dots$ бўлиб, $\arcsin$ нинг қиймати 0 билан $\frac{\pi}{2}$ оралигида олинади).

Бу тенглама илдизлари $E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$ энергия сатҳини аниқлайди. n сони сатҳларни уларнинг ортқи тартибида номерлайди. Чекли U_0 да сатҳлар сони чекли бўлади.

Янги $\xi = \frac{ka}{2}$ ўзгарувчи ва $\gamma = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{2}{mU_0}}$ параметр киритиб, (1) тенгламани қулай кўринишда ёзиш мумкин. n жуфт бўлганда

$$\cos \xi = \pm \gamma \xi \quad (2)$$

тенглама ҳосил бўлади. Бунда тенгламанинг фақат $\operatorname{tg} \xi > 0$ тенгсизлиқни қаноатлантирадиган илдизлари олинishi керак. n тоқ бўлганда

$$\sin \xi = \pm \gamma \xi \quad (3)$$

ҳосил бўлади. Бунда $\operatorname{tg} \xi < 0$ тенгсизлиқни қаноатлантирадиган илдизлар олинishi лозим.

Хусусан, $U_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$ бўлган саёз ўра учун $\gamma \gg 1$ бўлади ва бу ҳолда (3) тенглама умуман илдизга эга бўлмайди. (2) тенглама эса (ўнг томондаги $+$ ишорани олганда)

$$\xi \approx \frac{1}{\gamma} \left(1 - \frac{1}{2\gamma^2} \right)$$

га тенг бўлган биттагина илдизга эга бўлади. Шундай қилиб, бу ҳолда ўрада унинг „устига“ (оғзига) яқин бўлган биттагина

$$E_0 = \frac{2\xi^2\hbar^2}{ma^2} \approx U_0 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0^2$$

сатҳ мавжуддир.

3. Қирралари a, b, c бўлган тўғри бурчакли „потенциал яшиқда“ ҳаракат қилаётган зарранинг энергия сатҳлари аниқлансин: соҳа ичида $U = 0$, ташқарисида эса $U = \infty$.

Е ч и л и ш и. Яшиқ ичида зарранинг эркин ҳаракати учта йўналиш бўйича мустақил юз беради. Шу сабабли, энергия сатҳлари (24.7) кўринишдаги учта ифоданинг

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \dots$$

йиғиндисидан иборат бўлади, яшиқнинг ўлчамлари ортиши билан сатҳлар орасидаги интерваллар нолга интилади. Стационар ҳолатларнинг тўлқин функциялари эса

$$\psi_{n_1, n_2, n_3} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{b} \sin \frac{\pi n_3 z}{c}$$

бўлиб, бунда x , y ва z лар яшиқнинг учта қирраси бўйлаб йўналган.

25-§. Чизиқли осциллятор

Бир ўлчамли кичик тебранишлар (*чизиқли осциллятор* деб аталадиган) ҳосил қилувчи заррани кўрайлик. Бундай зарранинг потенциал энергияси $\frac{m\omega^2 x^2}{2}$ га тенг бўлиб, бунда ω тебранишнинг классик механикадаги хос частотасини билдиради (I, 58-§ га қаранг). Шунга биноан, осциллятор гамильтоннани

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (25.1)$$

бўлади.

Потенциал энергия $x \rightarrow \pm \infty$ да чексизга айланганидан, зарра фақат финит ҳаракат қилиши мумкин. Шу сабабли, энергия хос қийматларининг ҳамма спектри дискрет бўлади.

Осциллятор энергия сатҳларини матрица методи ёрдамида аниқлаймиз¹. Бунинг учун (21.2) кўринишдаги „ҳаракат тенгламаларига“ асосан иш кўраимиз; ушбу ҳолда бу тенгламалар

$$\hat{H}x + \omega^2 x = 0 \quad (25.2)$$

кўринишга келади. Бу тенглама матрица кўринишида қуйидагича ёзилади:

$$(\ddot{x})_{mn} + \omega^2 x_{mn} = 0.$$

Тезланишнинг матрица элементлари учун (11.8) га биноан $(\ddot{x})_{mn} = i\omega_{mn} (x)_{mn} = -\omega_{mn}^2 x_{mn}$ ни олаимиз. Шу сабабли,

$$(\omega_{mn}^2 - \omega^2)x_{mn} = 0$$

¹ Бу ҳисоб *Гейзенберг* тэмонида Шредингер тўлқин тенгламани кашф қилгунга қадар (1925) бажарилган.

ифода ҳосил бўлади. Кўриниб турибдики, частоталари $\omega_{mn} = \pm \omega$ бўлган матрица элементларидан бошқа ҳамма x_{mn} элементлар нолга тенг экан. Стационар ҳолатларни шундай номерлаймизки, бунда $\pm \omega$ частоталар $n \rightarrow n \mp 1$ ўтишларга мос келсин, яъни $\omega_{n, n \mp 1} = \pm \omega$ бўлсин. У ҳолда фақат $x_{n, n+1}$ матрица элементларигина нолдан фарқли бўлади.

ψ_n тўлқин функцияларни ҳақиқий функциялар деб фараз қиламиз. x ҳақиқий катталиқ бўлганидан, унинг ҳамма x_{mn} матрица элементлари ҳам ҳақиқий бўлади. (11.10) эрмитлик шарти энди $x_{mn} = x_{nm}$ тенгликка олиб келади, яъни x_{mn} матрица симметрикдир.

Координатанинг нолдан фарқли бўлган матрица элементини ҳисоблаш учун ушбу

$$[x, x] = i \frac{\hbar}{m}$$

коммутация қондасидан фойдаланамиз. Агар бу ифодани

$$(\dot{x}x)_{mn} - (x\dot{x})_{mn} = -\frac{i\hbar}{m}\delta_{mn}$$

матрица кўринишда ёзиб, кейин унга (11.12) матрицаларни кўпайтириш қондасини қўлласак, $m = n$ учун

$$i \sum_l (\omega_{nl} x_{nl} x_{ln} - x_{nl} \omega_{ln} x_{ln}) = 2i \sum_l \omega_{nl} x_{nl}^2 = -i \frac{\hbar}{m}$$

ифодани топамиз. Бу йиғиндида фақат $l = n \pm 1$ ли ҳадларигина нолдан фарқли бўлганидан,

$$(x_{n+1, n})^2 - (x_{n, n-1})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (25.3)$$

ҳосил бўлади.

Ушбу тенгликдан $(x_{n+1, n})^2$ катталиқ юқоридан чегараланмаган арифметик прогрессия тузади, лекин (25.3) даги ҳадлар фақат мусбат бўлганидан, тенгликни қаноатлантириш учун $(x_{n+1, n})^2$ нинг қиймати албатта қуйи чегарага эга бўлмоғи лозим деган хулосага келамиз. Ҳозирча биз ҳолат номерлари n нинг абсолют қийматларини эмас, балки фақат нисбий жойлашишларинигина аниқлаганимиз учун осцилляторнинг биринчи нормал ҳолатига мос келган n ни ихтиёрий танлашимиз мумкин. Уни нолга тенг деб оламиз. Шунга мос

ҳолда $x_{0, -1}$ ни айни нолга тенг деб ҳисоблашимиз керак; энди (25.3) тенгламани $n = 0, 1, 2 \dots$ лар учун кетма-кет қўласак,

$$(x_{n, n-1})^2 = \frac{n\hbar}{2m\omega}$$

натижага келамиз. Шундай қилиб, координатанинг нолдан фарқли матрица элементлари учун қуйидаги ифодани ҳосил қиламиз:

$$x_{n, n-1} = x_{n-1, n} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}. \quad (25.4)$$

$\hat{H}$ операторнинг матрицаси диагонал кўринишга эга бўлиб, унинг H_{nn} матрица элементлари осциллятор энергияси E_n нинг изланаётган хос қийматларини ифодалайди. Уларни ҳисоблаш учун

$$\begin{aligned} H_{nn} = E_n &= \frac{m}{2} \left[(\dot{x}^2)_{nn} + \omega^2 (x^2)_{nn} \right] = \\ &= \frac{m}{2} \left[\sum_l i\omega_{nl} x_{nl} i\omega_{ln} x_{ln} + \omega^2 \sum_l x_{nl} x_{ln} \right] = \\ &= \frac{m}{2} \sum_l (\omega^2 + \omega_{nl}^2) x_{ln}^2 \end{aligned}$$

ларни ёзиб оламиз. l бўйича йиғиндида фақат $l = n \pm 1$ ли ҳадлар нолдан фарқли бўлганидан, ифодага (25.4) ни қўйиб,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (25.5)$$

га эга бўламиз.

Шундай қилиб, осцилляторнинг энергия сатҳлари бир-бирларидан бир хил $\hbar\omega$ интервалда жойлашар экан. Нормал ҳолат ($n = 0$) энергияси $\frac{\hbar\omega}{2}$ га тенг; унинг нолдан фарқли эканини таъкидлаб ўтамиз.

(25.5) натижани Шредингер тенгламасини ечиш йўли билан ҳам ҳосил қилиш мумкин. Осциллятор учун бу тенглама қуйидаги кўринишга эга:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi = 0. \quad (25.6)$$

Бу ерда x координата ўрнига

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (25.7)$$

кўринишдаги ўлчамсиз ўзгарувчи киритган маъқул.
У ҳолда

$$\psi'' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi = 0 \quad (25.8)$$

тенгламани ҳосил қиламиз (штрих ξ бўйича дифференциаллашни билдиради).

ξ нинг катта қийматларида $\frac{2E}{\hbar\omega}$ ни ξ^2 га нисбатан ҳисобга олмаса ҳам бўлади. У ҳолда мос $\psi'' = \xi^2 \psi$

тенглама ўз ечими сифатида $\psi = e^{\pm \frac{\xi^2}{2}}$ асимптотик интегралларни беради (бу функцияни дифференциаллаш ξ бўйича паст тартибли ҳадлар ҳисобга олинмаганда, ҳақиқатан ҳам, $\psi'' = \xi^2 \psi$ ни беради). ψ тўлқин функция $\xi = \pm \infty$ да чекли қолиши кераклигидан кўрсаткичда манфий ишора олиниши керак. Шу муносабат билан табиийки, (25.8) тенгламага

$$\psi = e^{-\xi^2/2} \chi(\xi) \quad (25.9)$$

ифода қўйилиши керак. У ҳолда $\chi(\xi)$ функция учун

$$\chi'' - 2\xi\chi' + 2n\chi = 0 \quad (25.10)$$

тенглама ҳосил бўлади, бунда

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n$$

белгилаш киритилган. $\chi(\xi)$ функция ҳамма чекли ξ ларда чекли бўлиши керак, $\xi \rightarrow \pm \infty$ да эса чексизликка ξ нинг чекли даражасидан тез интилмаслиги шарт (бу шарг бажарилганда $x \rightarrow \pm \infty$ да ψ функция нолга айланади).

(25.10) тенглама ечимини

$$\chi = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s \quad (25.11)$$

қатор кўринишида қидирамиз. Агар қатор тенгламага қўйилса,

$$\sum_{s=2}^{\infty} a_s s(s-1) \xi^{s-2} - 2 \sum_{s=0}^{\infty} a_s s \xi^s + 2n \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s = 0$$

ҳосил бўлади. Биринчи йиғиндидаги s йиғиш индексини $s+2$ га алмаштирсак,

$$\sum_{s=0}^{\infty} [(a_{s+2}(s+1)(s+2) + 2(n-s)a_s)] \xi^s = 0$$

ҳосил бўлади. Бу тенглик айнан бажарилиши учун ξ нинг ҳар бир даражаси олдидаги коэффициент нолга айланиши лозим. Бундан (25.11) қатордаги кетма-кет ҳадлар коэффициентларини ўзаро боғловчи қуйидаги рекуррент муносабат келиб чиқади:

$$a_{s+2} = -\frac{2(n-s)}{(s+1)(s+2)}a_s. \quad (25.12)$$

Аввало шуни кўрамизки, қаторда ξ нинг бир хил жуфтликка эга даражалари қатнашади. Юқорида қўйилган шарт бажарилиши учун қатор ҳадлари чекли даражага эга бўлиши, яъни қатор маълум бир чекли s да узилиши керак. (25.12) дан кўриниб турибдики, бунинг учун n бутун мусбат сон бўлиши керак; у ҳолда қатор $s = n$ даражали ҳадда узилади, яъни n -даражали полиномга айланади. Шу билан биз энергиянинг хос қийматлари учун олдиндан маълум бўлган (25.5) натижага қайтиб келамиз.

Тўлқин функцияни осцилляторнинг асосий ҳолати учунгина ошкор кўринишда ёзамиз. $n = 0$ да полином ўзгармас сонга айланади. Агар бу ўзгармас сон тўлқин функциянинг

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(x) dx = 1$$

нормаллаштириш шартини қаноатлантиришидан топилса, асосий ҳолат функцияси

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (25.13)$$

кўринишини олади. Кутганимиздек, бу функция чекли x ларда нолга эга эмас.

Масала

Осцилляторнинг нормал ҳолатида импульс ҳар хил қийматларнинг эҳтимоллар тақсимооти аниқлансин.

Ечилиши. 24- § нинг 1- масаласидагига ўхшаб

$$a(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) e^{\frac{i}{\hbar}px} dx$$

интеграл ҳисобланади. $x + ip/m\omega = z$ алмаштириш ёрдамида бу интеграл Пуассон интегралига келтирилади, ва ниҳоят,

$$|a(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi m \hbar \omega}} \exp\left(-\frac{p^2}{m \hbar \omega}\right)$$

га эга бўламиз.

26- §. Квазиклассик тўлқин функция

Агар зарранинг де-Бройль тўлқин узунлиги берилган масала шартини белгиловчи характеристик ўлчамларга нисбатан кичик бўлса, у ҳолда системанинг хоссалари классик хоссаларга яқин бўлади. 6- § да шундай квазиклассик ҳоллар учун тўлқин функциянинг умумий кўриниши кўрсатилган, 12- ва 14- § ларда эса бундай функциялардан асосий физикавий катталикларнинг квантомеханикавий операторларини чиқаришда фойдаланилган эди. Энди биз Шредингер тенгламасида квазиклассик ҳолга чегаравий ўтиш қандай бажарилишини батафсилроқ кўриб ўтамиз.

6- § да айтилганидек, квант механикасидан классик механикага чегаравий ўтиш расман $\hbar$ ни нолга интиштириш ($\hbar \rightarrow 0$) дан иборат эди. Демак, квазиклассик механикада $\hbar$ ни кичик параметр деб,

$$\Psi = ae^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (26.1)$$

ифодани эса (бунда a ва S лар $\hbar$ га боғлиқ эмас, деб фараз қилинади) шу параметр даражалари бўйича тўлқин функция ёйилмасининг бошланиши деб қараш мумкин. Агар (26.1) ифодани $\exp\left\{\frac{i S + \hbar \ln a}{\hbar}\right\}$ кўринишда олсак, у ҳолда биз унинг экспонента ёйилмасидаги биринчи икки ҳадга мос келишини кўрамиз. Шу сабабли кейинги ҳисобларда ҳам $\hbar$ бўйича фақат дастлабки иккита даражани олиш керак.

Соддалик учун ташқи майдондаги битта зарранинг ҳаракатини кўриб ўтамиз. (26.1) ифодани (20.6) Шредингер тенгламасига қўйиб, мос дифференциаллашни бажарамиз, сўнгра $\hbar$ бўйича фақат иккита даражани сақлаб қолиб,

$$a \frac{\partial S}{\partial t} - i \hbar \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} (\nabla S)^2 \frac{i \hbar}{2m} a \Delta S - \frac{i \hbar}{m} \nabla S \nabla a + Ua = 0 \quad (26.2)$$

ифодани ҳосил қиламиз.

Ў бўйича нолинчи ва биринчи даражаларнинг ҳар бири алоҳида нолга айланиши керак. Бундан қуйидаги иккита

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + U = 0, \quad (26.3)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m}\Delta S + \frac{1}{m}\nabla S \nabla a = 0 \quad (26.4)$$

тенглама ҳосил бўлади.

Кутилганидек, булардан биринчиси зарранинг S таъсир функцияси учун Гамильтон-Якоби тенгламасини беради (I, 31- § га қаранг). (26.4) тенглама эса $2a$ га кўпайтирилгандан сўнг

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \operatorname{div} \left(a^2 \frac{\Delta S}{m} \right) = 0 \quad (26.5)$$

кўринишни қабул қилади. Бу тенглама аниқ физикавий маънога эга: $|\Psi|^2 = a^2$ зарранинг фазода топилиш эҳтимоли зичлигини англатади; $\nabla S/m = \mathbf{p}/m$ эса зарранинг $\mathbf{v}$ классик тезлиги. Шу сабабли, (26.5) тенглама узлуксизлик тенгламаси бўлиб, у эҳтимоллар зичлигининг ҳар бир нуқтада классик механика қонуналарига бўйсунган ҳолда $\mathbf{v}$ классик тезлик билан „силжишини“ кўрсатади.

Берилган E энергияда, яъни стационар ҳолатлар учун таъсир функцияси

$$S = -Et + S_0(x, y, z) \quad (26.6)$$

бўлиб, бунда S_0 („қисқартирилган таъсир“ деб аталади) —

$$\frac{1}{2m}(\nabla S_0)^2 + U = E \quad (26.7)$$

тенгламани қаноатлантирувчи координата функцияси. Стационар ҳолатлар тўлқин функцияларининг a амплитудаси эса вақтга боғлиқ эмас ва

$$\operatorname{div}(a^2 \nabla S) = 0 \quad (26.8)$$

тенгламани қаноатлантиради.

Стационар ҳолатларнинг квазиклассик функцияларини зарранинг $U(x)$ майдондаги бир ўлчовли ҳаракати учун ошкор кўринишда ёзамиз. Ҳолда (26.7) тенгламада $(\nabla S_0)^2 = \left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2$ га эга бўламиз ва унинг ечими

$$S_0 = \pm \int p dx, p(x) = \sqrt{2m(E - U)} \quad (26.9)$$

бўлиб чиқади. Интеграл остидаги $p(x)$ ифода зарраний координата функциясида ифодаланган классик импульсини беради. Энди (26.8) ифодадан

$$\frac{d}{dx}(a^2 p) = 0, \quad a^2 p = \text{const}$$

ларни ва демак, $a = \text{const}/\sqrt{p}$ ни ҳосил қиламиз. Шундай қилиб, Шредингер тенгламасининг умумий ечими

$$\psi = \frac{C_1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int p dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int p dx} \quad (26.10)$$

кўринишга келади. Бунда C_1 ва C_2 — ўзгармас коэффициентлар.

Тўлқин функцияда $\sqrt{\frac{1}{p}}$ кўпайтувчининг бўлиши оддий маънога эга. Координаталари x ва $x + dx$ оралиқда ётган нуқталарда заррани топиш эҳтимоли $|\psi|^2$ дан аниқланади, яъни асосан $\frac{1}{p}$ га пропорционал бўлади. Бу „квазиклассик зарра“ учун бевосита кутилган натижанинг ўзгинасидир, чунки классик ҳаракатда зарранинг dx кесмада ҳаракатланиши учун кетган вақт зарра тезлигига (ёки импульсига) тескари пропорционал.

Фазонинг $E < U(x)$ бўлган „классик йўл қўйиб бўлмайдиган“ соҳасида $p(x)$ соф мавҳум функция бўлганидан, кўрсаткичлар ҳақиқий бўлади. Шу сабабли бу соҳаларда тўлқин функцияни

$$\psi = \frac{C_1'}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int |p| dx} + \frac{C_2'}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int |p| dx} \quad (26.11)$$

кўринишда ёзиш мумкин.

Юқорида олинган натижаларнинг қўлланилиш шартини батафсилроқ аниқлаймиз. Чунончи (26.2) тенгламадаги $\hbar$ қатнашган ҳадлар $\hbar$ қатнашмаган ҳадлардан ҳақиқатан ҳам кичик бўлиши лозим. Масалан, ушбу иккита

$$\begin{aligned} \frac{a}{2m} (\Delta S)^2 &= \frac{a}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 = \frac{a}{2m} p^2, \\ \frac{\hbar a}{2m} \Delta S &= \frac{\hbar a}{2m} \frac{d^2 S}{dx^2} = \frac{\hbar a}{2m} \frac{dp}{dx} \end{aligned}$$

ҳадни солиштирайлик; иккинчи ҳаднинг биринчисига нисбатан кичиклик шarti ($\hbar/p^2$) $\left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1$ ёки

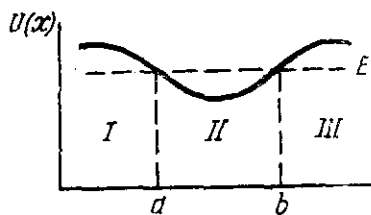
$$\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1 \quad (26.12)$$

орқали ифодаланади, бунда $\gamma = \frac{\gamma}{2\pi}$; $\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}$ эса зарранинг $p(x)$ классик функция ёрдамида x нинг функцияси сифатида ифодаланган де-Бройль тўлқин узунлигини билдиради. Шундай қилиб, биз квазиклассикликнинг миқдорий шартини топдик: зарранинг тўлқин узунлиги унинг ўз узунлигига тенг масофада кам ўзгариши керак. Юқорида чиқарилган формулаларни фазонинг бу шарт бажарилмайдиган соҳаларида қўллаб бўлмайди.

Квазиклассик яқинлашишни *бурилиш нуқталари* атрофида, яъни зарра классик механикага биноан олдин тўхтаб, кейин тескари йўналишга қайтадиган нуқталар атрофида умуман қўллаб бўлмайди. Бу нуқталар $p(x) = 0$ тенгликдан топилади. $p = 0$ да де-Бройль тўлқин узунлиги чексизликка интилади ва ҳар ҳолда уни кичик деб ҳисоблаш мумкин бўлмайди.

27-§. Бор — Зоммерфельднинг квантлаш қондаси

Ўтган параграфда чиқарилган формулалар квазиклассик ҳолда энергиянинг квант сатҳларини аниқловчи шартларга олиб келади. Бунинг учун зарранинг потенциал ўрадаги бир ўлчовли финит ҳаракатини кўриб чиқамиз; классик йўл қўйилган соҳа ($a \leq x \leq b$) иккита бурилиш нуқтаси билан чегараланган (3-расм)¹.



3- расм.

Тўлқин функцияга қўйилган чегаравий шарт шундан иборатки, у классик йўл қўйиб бўлмайдиган I ва III соҳага ичкари-

¹ Классик механикада бундай майдондаги зарра a дан b га ва b дан a гача $T = 2 \int_a^b \frac{dx}{v} = 2m \int_a^b \frac{dx}{p}$ давр билан даврий ҳаракатланган бўлар эди (v — зарра тезлиги).

лаб кирган сари кўпроқ сўниши ва $x \rightarrow \pm \infty$ да нолга айланиши керак. Бундан ташқари, биз биламизки, бу соҳаларда III предингер тенгламасининг умумий ечими (26.11) кўринишга, II соҳада эса (26.10) кўринишга эга. Бу шартлардан фойдаланиб, $x = a$ ва $x = b$ нуқталарда I — III соҳаларни ўзаро бир-бирига „тикиш“ йўли билан ҳар бир соҳа ечими учун ўзгармас коэффициентларни аниқлаш мумкин эди. Лекин худди шу нуқталар атрофида квазиклассик яқинлашиш ((26.10 — 11) функциялар ҳисобланган яқинлашиш) ўз кучини йўқотганидан, бундай „тикиш“ ни бевосита амалга ошириб бўлмайди.

Агар биринчи — энг қўпол яқинлашиш билангина чегаралансак, бу қийинчиликдан қутилиш мумкин. Бундай яқинлашиш тўлқин функциянинг чексизликда нолга айланиш чегаравий шартини унинг энди $x = a$ ва $x = b$ нуқталарда нолга айланиш шарти билан алмаштиришдан иборат.

Классик чегаравий ҳолда бу нуқталар ҳаракатнинг абсолют чегаралари ҳисобланади ва зарра бу чегарадан ташқарига умуман чиқа олмайди. Квазиклассик яқинлашишда эса зарра гарчи классик йўл қўйиб бўлмайдиган соҳаларга кира олса ҳам, лекин бу соҳаларда унинг тўлқин функциялари жуда тез сўнади; мана шу ҳол чегаравий шартларни юқоридагидек алмаштириш учун асос бўлади.

II соҳадаги тўлқин функция учун $x = a$ да $\psi = 0$ бўладиган чегаравий шарт

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin \frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx \quad (27.1)$$

ифодага олиб келади. Худди шундай йўл билан $x = b$ да $\psi = 0$ шартни қўллаб,

$$\psi = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin \frac{1}{\hbar} \int_x^b p dx$$

ифода олинади.

Бу икки ифода соҳанинг ҳамма жойида бир хил бўлиши учун уларнинг фазалари йиғиндиси (ўзгармас сон бўлган) π га бутун каррали бўлиши лозим:

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx = n\pi \quad (27.2)$$

(С учун эса $C=(-1)^n C'$). Буни бошқача қилиб, қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\oint p dx = 2\pi\hbar n, \quad (27.3)$$

бунда интеграл зарра классик ҳаракатининг тўла даври бўйича олинади (яъни a дан b га ва тескарисича). Мана шунинг ўзи квазиклассик ҳолда зарранинг стационар ҳолатларини аниқловчи шарт бўлиб ҳисобланади. Бу Бор — Зоммерфельднинг эски квант назариясидаги квантлаш қондасига мос келади.

Квазиклассик яқинлашишда $\hbar$ кичик параметр вазифасини ўтагани учун (27.2) тенгликнинг чап томонидаги ифода катта сонни беради. Худди шу нарса ўнг томондаги n бутун сонга ҳам тааллуқлидир. (27.1) тўлқин функциянинг фазаси 0 дан ($x=a$ да) πn гача ($x=b$ да) ўзгаради, шу сабабли бу интервал ичида синус $n-1 \approx n$ марта нолга айланади. Шундай қилиб, n бутун сон тўлқин функциянинг ноллари сонини беради. Шу билан у осцилляциян теоремага биноан (22-§), энергиянинг кетма-кет квант сатҳларини номерловчи квант сони ролини ўйнайди¹.

Квазиклассик яқинлашишга n квант сонининг катта қиймати мос келиш сабабини тушунтириш қийин эмас. Равшанки, тўлқин функциянинг қўшни ноллари орасидаги масофа де-Бройль тўлқин узунлиги тартибидадир. Катта қийматли n ларда бу масофа кичик бўлганидан ($\sim \frac{b-a}{n}$), тўлқин узунлик ҳам ҳаракатланиш соҳасининг ўлчамларига нисбатан кичик бўлади.

Квантлаш қондаси (27.3) га асосланиб энергетик спектрда сатҳлар тақсимотининг умумий характерини аниқлаш мумкин. Қўшни сатҳлар, яъни n квант сонлари биттага фарқ қиладиган сатҳлар орасидаги масофа ΔE бўлсин. ΔE қиймат энергия сатҳининг ўзига нисбатан кичик (катта n ларда) бўлганидан, (27.3) га асосланиб қуйидагини ёзиш мумкин:

$$\Delta E \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = 2\pi\hbar.$$

¹Бурилиш нуқтаси атрофида Шредингер тенгламасининг аниқ ечимларини (квазиклассик бўлмаган) қўллаб ўтказилган анча аниқ тадқиқотлар (27.2—3) даги n бутун соннинг $n + \frac{1}{2}$ га алмашинишига олиб келади. Худди шу тадқиқотлардан ҳаракатланишнинг бутун соҳасида тўлқин функциянинг чекли масофалардаги ноллари сони аниқ n га тенглиги келиб чиқади.

Лекин классик ҳаракат учун $\frac{\partial E}{\partial p}$ ҳосила v тезликини беради, шу сабабли

$$\oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \oint \frac{dx}{v} = T$$

бўлади. Бундан

$$\Delta E = \frac{2\pi}{T} \hbar = \hbar \omega \quad (27.4)$$

ни оламиз.

Шундай қилиб, қўшни сатҳлар орасидаги масофа $\hbar \omega$ га тенг экан. Бир қатор қўшни сатҳларга (n номерларининг фарқи n нинг ўзига нисбатан кичик бўлган) мос ω частоталарни тахминан бир хил деб ҳисоблаш мумкин. Шунинг учун биз спектрнинг квазиклассик қисмининг катта бўлмаган ҳар бир қисмида сатҳлар бир-биридан бир хил $\hbar \omega$ масофада ётади деган хулосага келамиз. Ҳақиқатан ҳам, бу тасодифий хулоса эмас. Чунки квазиклассик ҳолда энергиянинг ҳар хил сатҳлари орасидаги ўтишга мос келган частоталар ω классик частотага бутун қаррали бўлиши лозим.

Бирор физикавий $\hat{f}$ катталикининг матрица элементи классик чегарада нимага айланишига эътибор берайлик. Агар ҳолат классик чегарада зарранинг маълум бир траектория бўйича ҳаракатини берса, у ҳолда квант ҳолатидаги $\bar{f}$ ўртача қиймат классик чегарада ўзининг классик қийматига ўтиши керак. Бундай ҳолатга энергия қийматлари бир-бирига яқин бўлган бир қатор стационар ҳолатларнинг суперпозициясидан тuzилган тўлқин пакет (6-§ га қаранг) мос келади. Бундай ҳолатнинг тўлқин функцияси

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n$$

кўринишда бўлади, бунда a_n коэффициент n квант сонининг фақат $1 \ll \Delta n \ll n$ ни қаноатлантирувчи Δn қийматлар интервалидагина нолдан сезиларли фарқ қилади. Стационар ҳолатлар квазиклассик деб олинганидан n катта деб фараз қилинади. $\bar{f}$ ўртача қиймат таъриф бўйича

$$\bar{f} = \int \Psi^* \hat{f} \Psi dx = \sum_n \sum_m a_m^* a_n f_{mn} e^{i\omega_{mn}t}$$

га тенг ёки агар n ва m бўйича йиғиндиларни n ва $s = m - n$ фарқ бўйича йиғиндига ўтказилса,

$$\bar{f} = \sum_n \sum_s a_n^* a_n f_{n+s, n} e^{i\omega t}$$

ни оламиз. Бунда (27.4) га асосан $\omega_{mn} = s\omega$ деб ёзилган. Квазиклассик тўлқин функциялар ёрдамида ҳисобланган f_{mn} матрица элементлари $m - n$ айирманинг ортиши билан тез камаёди, лекин айти шу вақтнинг ўзига n сонининг секин ўзгарувчи функциялари бўлади (берилган $m - n$ да). Шунга мувофиқ тақрибан қуйидаги

$$\bar{f} = \sum_n \sum_s a_n^* a_n f_s e^{i\omega t} = \sum_n |a_n|^2 \sum_s f_s e^{i\omega t}$$

тенгликни ёзиш мумкин, бунда

$$f_s = f_{\bar{n}+s, \bar{n}}$$

$\bar{n}$ — квант сони n нинг Δn интервалдаги маълум ўртача қиймати. Лекин $\sum_n |a_n|^2 = 1$ бўлганидан,

$$\bar{f} = \sum_s f_s e^{i\omega t} \quad (27.5)$$

ҳосил бўлади. Бу йиғинди одатдаги Фурье қатори кўринишига эга. $\bar{f}$ қиймат чегарада $f(t)$ классик катталikka мос келиши кераклигидан, f_{mn} матрица элементлари чегарада $f(t)$ классик функция Фурье қаторига ёйилмасининг f_{m-n} компонентларига ўтади деган хулосага келамиз.

(27.3) муносабатга бошқача маъно бериш ҳам мумкин. $\oint p dx$ интеграл зарранинг классик фазавий траекторияси (яъни зарранинг фазавий фазосидаги — p, x текисликдаги эгри чизик) ўраб олган юзни беради. Бу юзни ҳар бирининг юзи $2\pi\hbar$ га тенг бўлган катакларга ажратиб, n та катак ҳосил қиламиз. Лекин n энергияси маълум қийматдан (кўрилган фазавий траекторияга мос келувчи) ошмайдиган квант ҳолатларининг сонидир. Шундай қилиб, квазиклассик ҳолда ҳар бир квант ҳолатига *фазавий фазодаги* юзи $2\pi\hbar$ га тенг бўлган *битта катак* мос келади деб айтишимиз

мумкин. Шундай қилиб, фазавий фазонинг $\Delta p \Delta x$ ҳажм элементидаги ҳолатлар сони

$$\frac{\Delta p \Delta x}{2\pi\hbar} \quad (27.6)$$

га тенг. Агар импульс ўрнига $k = p/\hbar$ тўлқин вектор киритилса, у ҳолда бу сон $\frac{\Delta k \Delta x}{2\pi}$ кўринишида ёзилади.

Кутилганидек, бу ифода тўлқин майдондаги хос тебранишлар сони учун олдиндан маълум бўлган ифодага мос келади (1,76-§ га қarang).

Фазавий фазодаги „катак“ лар ҳақидаги муҳим тушунча бу ерда кўрганимиздек, фақат бир ўлчовли ҳаракатгагина тааллуқли бўлмасдан, умуман ҳар қандай квазиклассик ҳаракатга хосдир. Бу хулоса унинг берилган фазо ҳажмидаги тўлқин майдон хос тебранишларининг сонига юқорида кўрсатилган боғланишдан кўриниб турибди. Умумий ҳолда, яъни эркинлик даражасига эга бўлган системада фазавий фазонинг ҳажм элементига

$$\frac{\Delta q_1 \dots \Delta q_s \Delta p_1 \dots \Delta p_s}{(2\pi\hbar)^s} \quad (27.7)$$

та квант ҳолати тўғри келади. Хусусан, фазонинг етарлича катта бўлган Ω ҳажмидаги эркин ҳаракат доимо квазиклассикдир¹. Импульс компонентлари берилган Δp_x , Δp_y ва Δp_z интервалларда ётувчи бундай ҳаракатда квант ҳолатлари сони

$$\frac{\Omega \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z}{(2\pi\hbar)^3} \quad (27.8)$$

га тенг бўлади.

Фазонинг катта, лекин чекланган Ω ҳажмида ҳаракатланувчи зарра ҳақидаги тасаввурдан баъзан узлуксиз спектр ҳолатларини дискрет спектр ҳолатларига алмаштиришда фойдаланилади. Шу йўл билан формулалар кўринишини соддалаштиришга эришиш мумкин (биз бу усулдан китобнинг иккинчи қисмида фойдаланамиз). Чегараланган ҳажмдаги ҳаракатда импульс компонентларининг хос қийматлари дискрет қаторни қабул

¹. „Нормалаштирувчи ҳажм“ киритилиши керак бўлган ҳамма жойда биз уни Ω ҳарфи билан белгилаймиз. Бу фиктив катталиқ бўлиб, у фақат қулайлик мақсадида киритилади ва охириги физикавий натижаларга қирмайди.

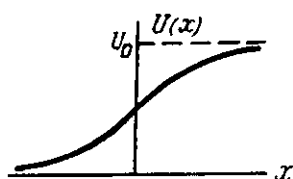
қилади (бунда қўшни қийматлар орасидаги интервал соҳанинг чизиқли ўлчамларига тескари пропорционал бўлиб, уларнинг ортиши билан нолга интилади). Қаторда бу қийматларнинг тақсимот зичлиги (ҳолатлар сони зичлиги) (27.8) ифода билан аниқланади. Бундай дискрет спектрга тегишли стационар ҳолатларнинг нормалаштирилган тўлқин функциялари (ясси тўлқинлар) қуйидаги кўринишга эга:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{p}r} \quad (27.9)$$

(буни „ Ω ҳажмда битта заррага“ нормалашган деб гапирилади).

28- §. Ўтиш коэффициенти

Зарранинг 4-расмда тасвирланган майдондаги бир ўлчовли ҳаракатини кўриб чиқамиз. Бунда $U(x)$ бир ўзгармас чегарадан ($x \rightarrow -\infty$ да $U=0$) иккинчисигача ($x \rightarrow +\infty$ да $U=U_0$) монотон ортади. Классик механикага биноан бундай майдонда чапдан ўнгча қараб ҳаракатланаётган $E < U_0$ энергияли зарра *потенциал деворга* етиб боргач, ундан қайтади ва тескари томонга ҳаракатлана бошлайди. Агар зарра $E > U_0$ энергияга эга бўлса, у ҳолда у ўз ҳаракатини илгариги йўналишда камайган тезлик билан давом эттиради. Квант механикасида эса янги ҳодиса кузатилади:



4- расм.

хатто $E > U_0$ да ҳам зарра потенциал девордан қайтиши мумкин. Қайтиш эҳтимоли принцип жиҳатдан қуйидагича ҳисобланмоғи лозим.

Айтайлик, зарра чапдан ўнгга қараб ҳаракатланаётган бўлсин. x нинг катта мусбат қийматларида тўлқин функция „девор устидан“ ўтиб, x нинг мусбат йўналиши бўйлаб ҳаракатланаётган заррани тасвирлаши керак ёки бошқача айтганда, у қуйидаги асимптотик кўринишга эга бўлиши керак, яъни $x \rightarrow \infty$ да:

$$\psi \approx A e^{ik_1 x}, \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)} \quad (28.1)$$

(A — ўзгармас сон). Шредингер тенгламасининг бу чегаравий шартни қаноатлантирадиган ечимини топган-

дан сўнг, $x \rightarrow -\infty$ даги асимптотик ифодани ҳисоблаймиз. Бу ифода эркин ҳаракат тенгламаси иккита ечимининг чизиқли комбинациясидан иборат, яъни $x \rightarrow -\infty$ да

$$\psi \approx e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, \quad k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (28.2)$$

кўринишга эга.

Биринчи ҳад „деворга“ тушаётган заррага мос келади (ψ функция шундай нормалаштирилганки, бунда биринчи ҳад олдидаги коэффициентни бирга тенг деб фараз қиламиз); иккинчи ҳад эса „девордан“ қайтган заррани тасвирлайди. Оқим зичлиги тушган тўлқинда k_1 га, қайтган тўлқинда $k_1|B|^2$ га, ўтган тўлқинда эса $k_2|A|^2$ га пропорционал. D ўтиш коэффициентини ўтган тўлқиндаги оқим зичлигининг тушган тўлқиндаги оқим зичлигига нисбати каби аниқлаймиз:

$$D = \frac{k_2}{k_1} |A|^2. \quad (28.3)$$

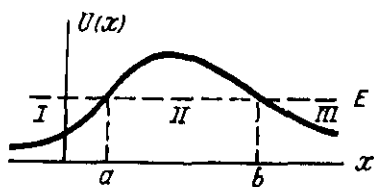
Худди шунга ўхшаш, R қайтариш коэффициентини қайтган оқим зичлигининг тушган оқим зичлигига нисбати каби аниқлаш мумкин. Равшанки, $R = 1 - D$, демак,

$$R = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1} |A|^2 \quad (28.4)$$

(A ва B орасида бу муносабат ўз-ўзидан бажарилади).

Агар зарра чапдан ўнгга $E < U_0$ энергия билан ҳаракатланаётган бўлса, у ҳолда k_2 маъхум катталиқ бўлади ва тўлқин функция потенциал девор ичкарисига кирган сари экспоненциал равишда сўнади. Бу ҳолда қайтган оқим тушган оқимга тенг бўлади, яъни заррлар девордан тўла қайтади.

Худди шунга ўхшаш йўл билан зарранинг потенциал тўсиқдан (тўсиқ фазонинг шундай қисмики, бу қисмда потенциал энергия зарранинг тўла энергиясидан катта бўлади) ўтиш ҳодисасини кузатамиз (5-расмда бир ўлчовли тўсиқ тасвирланган). 22-§ да эслатилган эдики, квант механикасида тўсиққа тушган зарра нолдан фарқли эҳтимол билан шу „тўсиқдан“ ўти-



5- расм.

ши мумкин. Тўсиқнинг ўзига тушган зарраларни ўтказиш қобилияти ўтиш коэффициентлари орқали характерланади. Бу коэффициент юқорида кўрсатганимиздек, тўсиқ орқали ўтган оқим зичлигининг унга тушаётган оқим зичлигига нисбати билан аниқланади.

Бу коэффициентни умумий ҳолда квазиклассиклик шартини қаноатлантирувчи бир ўлчовли тўсиқ учун баҳолаш мумкин. Бу шартга ((26.12) га қара) биноан, зарранинг $p(x)$ „классик импульси“ ва шу билан бирга унинг $U(x)$ потенциал энергияси x ўзгариши билан етарлича секин ўзгариши лозим. Бу айтилганлардан, квазиклассик потенциал тўсиқнинг қия ва шу билан бирга кенг бўлиши кераклиги ва шу сабабли ўтиш коэффициентининг квазиклассик ҳолда кичик бўлиши келиб чиқади.

Зарралар тўсиққа чап томондаги I соҳадан келиб тушаётган бўлсин (5-расм). „Классик йўл қўйиб бўлмайди“ II соҳада тўлқин функция чапдан ўнгга экспоненциал қонун бўйича камайиб боради:

$$\psi \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx\right), \quad |p| = \sqrt{2m(U-E)}$$

((26.11) билан солиштиринг); нисбатан секин ўзгарувчи, экспоненциал бўлмаган кўпайтувчиларни бу ерда ва бундан сўнг тушириб қолдирамиз. Демак, тўсиқнинг иккинчи чегарасида ($x=b$ нуқтада) тўлқин функция ўзининг тушувчи тўлқиндаги ($x=a$ нуқтадаги) қийматига нисбатан

$$\exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right)$$

нисбатда заифлашади. Оқим зичлиги тўлқин функция модулининг квадратига пропорционал (яна секин ўзгарувчи кўпайтувчигача аниқликда). Шунинг учун тўсиқдан ўтган оқимнинг унга тушувчи оқимга нисбати

$$D \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right) \quad (28.5)$$

бўлади.

Тўсиқдан ўтиш коэффициентига берилган бу баҳо ўзининг кўп қисмида квазиклассиклик шарт бажариладиган тўсиқ (анчагина реал ҳол) учун ҳам ўз кучини

сақлайди. Бундай ҳолга мисол қилиб, потенциал энергия эгри чизиги бир томонида қия, иккинчи томонида эса квазиклассик яқинлашишни қўллаб бўлмайдиган даражада тик бўлган тўсиқни олиш мумкин. (28.5) формулани қўллашнинг умумий шarti шундан иборатки, бунда экспонентада турувчи катталиқ катта бўлиши керак.

Масалалар

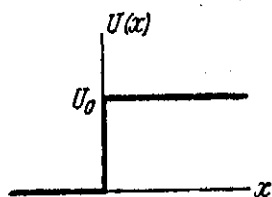
1. Зарранинг тўғри бурчакли потенциал девордан қайтиш коэффициенти ҳисоблансин (6- расм): зарра энергияси $E > U_0$.

Ечилиши. Тўлқин функция $x > 0$ бўлган соҳанинг ҳаммасида (28.1) кўринишга, $x < 0$ соҳада эса (28.2) кўринишга эга. A ва B коэффициентлар $x = 0$ да ψ ва $\frac{d\psi}{dx}$ нинг узлуксизлик шартларидан аниқланади:

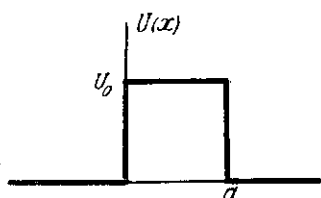
$$1 + B = A, \quad k_1(1 - B) = k_2 A,$$

бундан

$$A = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \quad B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}.$$



6-расм.



7-расм.

Қайтариш коэффициенти эса (28.4) га биноан:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left(\frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} \right)^2$$

Классик чегаравий ҳолда қайтариш коэффициенти нолга айланиши керак. Лекин олинган ифодада квант доимийси умуман қатнашмайди. Биринчи қарашда зиддиятга ўхшаб кўринган бу масала қуйидагича тушунирилади. Классик чегаравий ҳолга зарранинг де-Бройль тўлқин узунлиги $\lambda = \hbar(p)$ масала шartiдаги характеристик ўлчамларга нисбатан кичик бўлган ҳол (яъни $U(x)$ майдон сезиларли ўзгариб улгурадиган масофаларга нисбатан кичик бўлган ҳол) мос келади. Қаралаётган схематик мисолда бу масофа нолга тенг ($x = 0$ нуқтада), шунинг учун чегаравий ўтишни амалга ошириб бўлмайди.

бўлади. $E = U_0$ ($k_2 = 0$) да R бирга айланади, $E \rightarrow \infty$ да эса нолга $\left(\frac{U_0}{4E}\right)^2$ каби интилади.

2. Зарранинг тўғри бурчакли потенциал тўсиқдан ўтиш коэффициентни аниқлансин (7-расм).

Ечилиши. Зарра чапдан ўнгга ҳаракат қилаётган ва унинг энергияси $E > U_0$ бўлсин. У ҳолда ҳар хил соҳалардаги тўлқин функциялар учун қуйидаги ифодаларни оламиз:

$$\begin{aligned} x < 0 & \quad \text{да } \psi = e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x}, \\ 0 < x < a & \quad \text{да } \psi = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x}, \\ x > a & \quad \text{да } \psi = Ce^{ik_1x} \end{aligned}$$

($x > a$ томонда фақат x нинг мусбат йўналиши бўйлаб тарқалувчи ўтган тўлқингина бўлиши керак). A , B , B' ва C ўзгармаслар $x=0$ ва $x=a$ нуқталарда ψ ва $\frac{d\psi}{dx}$ ларнинг узлуксизлик шартларидан аниқланади. Ўтиш коэффициенти

$$D = k_1 |C|^2 / k_1 = |C|^2$$

каби аниқланади. Ҳисоблаш натижасида

$$D = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 ak_2 + 4k_1^2 k_2^2}$$

ҳосил бўлади.

$E < U_0$ да k_2 мавҳум катталиқдир; шу сабабли, мос D коэффициент k_2 ни ik_2 га алмаштириш орқали топилади:

$$D = \frac{4k_1^2 \kappa_2^2}{(k_1^2 + \kappa_2^2)^2 \sinh^2 a\kappa_2 + 4k_1^2 \kappa_2^2}$$

бунда

$$\kappa_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}.$$

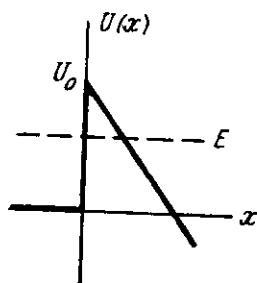
3. (28.5) формула ёрдамида 8-расмда тасвирланган потенциал тўсиқдан ўтиш коэффициенти баҳолансин; бунда $x < 0$ да $U_0(x) = 0$; $x > 0$ да $U_0(x) = U_0 - Fx$.

Ечилиши. Оддий ҳисоблашлар

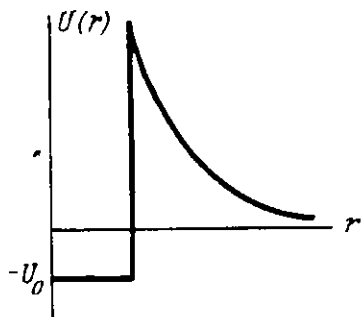
$$D \sim \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar F} (U_0 - E)^{3/2} \right]$$

натижага олиб келади.

4. $r < r_0$ да $U(r) = -U_0$, ва $r > r_0$ да $U(r) = \frac{\alpha}{r}$ Кулон итаришишга эга (9-расм) бўлган марказий-симметрик потенциал ўрадан моменти нолга тенг зарранинг чиқиш эҳтимоли ҳисоблансин.



8- расм.



9- расм.

Ечилиши, (28.5) га биноан¹

$$w \sim \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{a/E} \sqrt{2m \left(\frac{a}{r} - E \right)} dr \right]$$

га эга бўламиз. Интегрални ҳисобласак,

$$w \sim \exp \left\{ -\frac{2a}{\hbar} \left[\sqrt{\frac{2m}{E}} \arccos \sqrt{\frac{Er_0}{a}} - \sqrt{\frac{Er_0}{a} \left(1 - \frac{Er_0}{a} \right)} \right] \right\}$$

ҳосил бўлади. $r \rightarrow 0$ бўлган чегаравий ҳолда бу формула

$$w \sim \exp \left(-\frac{\pi a}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right) = \exp \left(-\frac{2\pi a}{\hbar v} \right)$$

га ўтади. Бу формулалар фақат кўрсаткич катта бўлган, яъни $\frac{a}{\hbar v} \gg 1$ бўлган ҳоллардагина қўлланиши мумкин.

29- §. Марказий-симметрик майдондаги ҳаракат

Иккита ўзаро таъсирлашувчи зарра масаласи квант механикасида ҳам, классик механикада кўрганимиздек (I, 11-§), битта зарра масаласига келтирилиши мумкин. Ўзаро $U(r)$ қонун (r — зарралар орасидаги масофа)

¹ Бу ерда моменти ноль бўлган зарранинг марказий майдондаги ҳаракати масаласини худди шундай потенциал энергияли бир ўлчовли ҳаракат масаласига келтириш мумкинлигидан фойдаланилган (30- § га қаранг).

бўйича таъсирлашадиган иккита зарра (массалари m_1 ва m_2 бўлган) гамильтониани

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + U(r) \quad (29.1)$$

кўринишга эга, бунда Δ_1 ва Δ_2 — зарраларнинг координаталари бўйича Лаплас операторлари, $\mathbf{r}_1$ ва $\mathbf{r}_2$ ўрнига янги $\mathbf{R}$ ва $\mathbf{r}$ ўзгарувчилар киритамиз:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1; \quad \mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (29.2)$$

($\mathbf{r}$ — ўзаро масофа вектори, $\mathbf{R}$ — зарралар инерция марказининг радиус-вектори). Оддий ҳисоблашлардан сўнг система гамильтониани учун

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \quad (29.3)$$

ифодани оламиз (Δ_R ва Δ — мос ҳолда $\mathbf{R}$ ва $\mathbf{r}$ векторлар компонентлари бўйича Лаплас операторлари; $m_1 + m_2$ — системанинг тўла массаси, $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ — келтирилган масса).

Шундай қилиб, гамильтониан иккита мустақил қисмлар йиғиндисига ажралади. Шунга биноан $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ни $\varphi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$ кўпайтма шаклида қидириш мумкин, бунда $\varphi(\mathbf{R})$ инерция маркази ҳаракатини ($m_1 + m_2$ массали эркин зарра ҳаракати) тавсифлайди, $\psi(\mathbf{r})$ эса зарраларнинг нисбий ҳаракатини ($U(r)$ марказий майдонда m массали зарра ҳаракати) тавсифлайди.

Марказий майдондаги зарра ҳаракати учун Шредингер тенгламаси

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0 \quad (29.4)$$

кўринишда бўлади. Лаплас операторининг сферик координаталардаги ифодасидан фойдаланиб,

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0 \end{aligned} \quad (29.5)$$

ни ёзамиз. Агар бунга $\hat{L}^2$ момент квадрати оператори (14.15) киритилса, у

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{r^2} \psi \right] + U(r) \psi = E \psi \quad (29.6)$$

кўринишга келади.

Марказий майдондаги ҳаракатда импульс моменти сақланади. L моменти ва унинг m проекцияси аниқ қийматга эга бўлган стационар ҳолатларни кўриб чиқайлик. L ва m нинг берилиши билан тўлқин функциянинг бурчакка боғлиқ қисми тўла аниқланади. Шунга биноан (29.6) тенглама ечимини

$$\psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (29.7)$$

кўринишда қидирамиз. Моментнинг хос функцияси $\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}$ тенгламани қаноатлантиришини ҳисобга олиб, $R(r)$ „радиал функция“ учун

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0 \quad (29.8)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Ушбу тенгламага $l_z = m$ қийматларнинг умуман кирмаслигини ва бу ҳол сатҳларнинг момент йўналишлари бўйича бизга маълум бўлган $2l+1$ каррали айланишига мос келишини эслатиб ўтамиз.

Энди тўлқин функцияларнинг радиал қисмини ўрганиш билан шуғулланамиз. (29.8) тенглама

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r} \quad (29.9)$$

алмаштириш ёрдамида

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0 \quad (29.10)$$

кўринишга келтирилади.

$U(r)$ потенциал энергия агар $r \rightarrow 0$ да чексизга айланса ҳам, $\frac{1}{r^2}$ дан секинроқ айланади деб ҳисоблаймиз, яъни

$$r \rightarrow 0 \text{ да } r^2 U(r) \rightarrow 0. \quad (29.11)$$

Шу билан зарранинг 80-бетдаги изоҳда эслатилган марказга „қулаш“ имконияти ($r \rightarrow 0$ да $U \rightarrow -\infty$ га

интиладиган майдонда) бартараф қилинади. У ҳолда тўлқин функция (ψ билан бирга эҳтимоллар зичлиги $|\psi|^2$) $r=0$ нуқтани ўз ичига олган бутун фазода чекли бўлади. Бинобарин, $\chi = rR$ функция $r=0$ нуқтада нолга айланиши керак:

$$\chi(0) = 0. \quad (29.12)$$

(29.10) тенглама шаклан потенциал энергияси

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (29.13)$$

бўлган майдондаги бир ўлчовли ҳаракат учун Шредингер тенгламасига ўхшайди. (29.13) нинг иккинчи ҳадини марказдан қочма энергия деб аташ мумкин. Шундай қилиб, марказий майдондаги ҳаракат масаласи, бир томонидан чекланган соҳадаги (чегаравий шарт: $r=0$ да $\chi=0$) бир ўлчовли ҳаракат масаласига келтирилади. Ҳаракатнинг „бир ўлчовлилик характери“, шунингдек, χ функция учун

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi|^2 dr = 1 \quad (29.14)$$

интеграл билан аниқланувчи нормалаштириш шартига ҳам эга.

(29.10) тенгламанинг (29.12) чегаравий шартни қаноатлантирадиган ечими E қийматлар (йўл қўйилган) бериш орқали тўла аниқланади. Бу марказий майдондаги ҳаракатда ҳолат E , l , m қийматлар орқали тўла аниқланади, демакдир: энергия, момент ва унинг проекцияси биргаликда бундай ҳаракат учун физикавий катталикларнинг тўла тўпламини ташкил қилади.

Марказий майдондаги ҳаракат масаласини бир ўлчовли ҳаракатга келтириш осцилляцион теоремани (22-§) қўллаш имкониятини беради. Энергиянинг берилган l даги хос қийматларини (дискрет спектр учун) n_r тартиб номерлари орқали номерлаб, ўсиш тартиби бўйича жойлаштирамиз, бунда энг қуйи сатҳга $n_r=0$ номер мос келади. У ҳолда n_r номер тўлқин функция радиал қисмининг чекли r лардаги ($r=0$ нуқта ҳисобга кирмайди) тугунлар сонини аниқлайди. n_r ни *радиал квант сони* деб аталади. Марказий майдондаги ҳаракатда l ни баъзан *азимутал квант сони* деб, m ни эса *магнит квант сони* деб аталади.

Зарра l моментининг ҳар хил қийматларга эга бўлган ҳолатларини белгилаш учун умумий қабул қилинган символ мавжуд; ҳолатлар l нинг қийматларига мос ҳолда қуйидаги латин ҳарфлари билан белгиланади:

$$l = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \ \dots$$

$$s \ p \ d \ f \ g \ h \ i \ k \ \dots \quad (29.15)$$

Радиал функциянинг координата боши яқинидаги кўринишини аниқлаймиз. Бунинг учун аввало (29.8) тенгламани r^2 га кўнайтириб ва сўнгра (29.11) ни назарда тутган ҳолда $r \rightarrow 0$ га ўтиб, уни

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - l(l+1)R = 0$$

кўринишга келтирамиз. Кичик r лар учун $R(r)$ ни $R = \text{const} \cdot r^s$ кўринишда қидирамиз. R нинг бу қийматини юқоридаги тенгламага қўйиб,

$$s(s+1) = l(l+1)$$

ифодага келамиз. Бундан $s = l$ ёки $s = -l - 1$ ҳосил бўлади. $s = -l - 1$ ли ечим зарурий шартни қаноатлантирмайди, чунки бу ечим $r \rightarrow 0$ да чексизга айланади. Шундай қилиб, $s = l$ ли ечим қолади, яъни марказ яқинида маълум l га эга ҳолатларининг тўлқин функциялари r^l га пропорционалдир:

$$R \approx \text{const} \cdot r^l. \quad (29.16)$$

Зарранинг марказдан r ва $r + dr$ интервалдаги масофада топилиш эҳтимоли $|rR|^2$ орқали аниқланганидан, у $r^{2(l+1)}$ га пропорционал бўлади. Кўрамизки, бу эҳтимолик l қанча катта бўлса, $r \rightarrow 0$ да шунча тез нолга айланади.

30-§. Сферик тўлқинлар

(20.9) ясси тўлқин эркин зарра маълум p импульсга (ва $E = p^2/2m$ энергияга) эга бўладиган стационар ҳолатларни тавсифлайди. Эндч шундай стационар ҳолатларни кўрамизки (*сферик тўлқинлар*), бу ҳолатларда зарра энергия билан бир қаторда аниқ момент ва унинг проекциясига ҳам эга бўлади. Бу ҳолда энергия ўрнига тўлқин векторнинг

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (30.1)$$

абсолют қийматини олиш қулай.

l момент ва унинг m проекциясига эга бўлган ҳолатларнинг тўлқин функцияси

$$\psi_{klm} = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (30.2)$$

кўринишга эга бўлиб, бунда радиал функция

$$R''_{kl} + \frac{2}{r} R'_{kl} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl} = 0 \quad (30.3)$$

тенгламадан аниқланади (бу $U(r)$ тушириб қолдирилган (29.8) тенгламанинг ўзидир). Узлуксиз спектрга (k бўйича) тегишли бўлган ψ_{klm} тўлқин функциялар ушбу

$$\int \psi_{k'l'm'}^* \psi_{klm} dV = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(k' - k)$$

нормалаштириш ва ўзаро ортогоналлик шартларини қаноатлантиради. Ҳар хил l, l' ва m, m' лар учун ўзаро ортогоналликни бурчакли функциялар таъминлайди. Радиал функциялар эса қуйидаги шарт бўйича нормалаштирилиши лозим:

$$\int_0^\infty r^2 R_{k'l} R_{kl} dr = \delta(k' - k). \quad (30.4)$$

$l = 0$ да (30.3) тенглама

$$\frac{d^2}{dr^2} (r R_{k0}) + k^2 R_{k0} = 0 \quad (30.5)$$

кўринишга келади. Унинг (30.4) шарт бўйича нормалаштирилган ҳамда $r = 0$ да чекли бўлган ечими қуйидагичадир:

$$R_{k0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin kr}{r}. \quad (30.6)$$

Радиал функция учун нормалаштириш шартининг тўғрилигини текшириб кўриш учун

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^2 R_{k'0} R_{k0} dr &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \sin k'r \sin kr \cdot dr = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos(k' - k)r \cdot dr + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos(k' + k)r \cdot dr \end{aligned} \quad (30.7)$$

ни ёзамиз.

$$\int_0^\infty \cos ax \cdot dx = \pi \delta(a) \quad (30.8)$$

формулага биноан (30.7) даги биринчи интеграл талаб қилинган δ -функцияни беради; иккинчи интегралда $k + k' \neq 0$ бўлганидан, у нолга айланади¹.

$l \neq 0$ да R_{kl} функция мураккаброқ кўринишга эга бўлади. Лекин катта r масофаларда улар (30.6) дан фақат тригонометрик кўпайтувчисининг фазаси билангина фарқ қилади. Бунинг сабаби шундаки, $r \rightarrow \infty$ да (30.3) тенгламадан $\frac{l(l+1)}{r^2}$ ҳадни тушириб қолдириш мумкин ва бу ҳолда янги тенглама $l=0$ ли тенгламадан фарқ қилмайди (лекин бундай тенглама r нинг катта қийматлари соҳасига тегишли бўлганидан, унинг иккита мустақил ечимидан $r=0$ даги чеклилик шарти бўйича биттасини танлаб олиш имконияти йўқдир). Бунда $l=0$ ҳолга нисбатан фаза ўзгариши $\frac{\pi l}{12}$ га тенг бўлар экан. Шу сабабли, сферик тўлқинларнинг катта масофалардаги асимптотик кўриниши

$$R_{kl} \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr - \pi l/2)}{r} \quad (30.9)$$

бўлади².

Тўлқин функциянинг радиал қисми учун худди шундай асимптотик ифода зарранинг фақат эркин ҳаракатидагина эмас, балки $r \rightarrow \infty$ да етарлича тез камаядиган ҳар қандай майдондаги ҳаракатида (мусбат энергияли) ҳам ўринли бўлади³. Катта масофаларда Шредингер тенгламасида майдонни ҳам, марказдан қочма энергияни ҳам ҳисобга олмай ташлаб юбориш мумкин ва натижада биз яна R_{kl} учун (30.5) кўринишдаги тенгламага келамиз. Бу тенгламанинг умумий ечими

$$R_{kl} \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right) \quad (30.10)$$

¹ (30.8) формула (12.9) да унинг ҳар иккала томонидаги ҳақиқий қисмини ажратиб олиш ҳамда $-\infty$, $+\infty$ чегарали интегрални 0 дан $+\infty$ гача интегралнинг иккиланганига алмаштириш натижа-сида ҳосил қилинади.

² (30.3) тенгламанинг $r=0$ да чекли бўлган ечими ярим бутун тартибли Бессель функцияси

$$R_{kl} = J_{l+1/2}(kr)/\sqrt{kr}$$

срқали ифодаланади. Бессель функциясининг асимптотик ифодаси эса (30.9) ни беради.

³ Чунончи, $U(r)$ майдон $\frac{1}{r}$ га нисбатан тезроқ камайиши лозим.

бўлиб, бунда δ_l ўзгармас *фазавий силжишни* билдиради; майдон йўқлигида $\delta_l = 0$ бўлиши учун синус аргументига $\frac{\pi l}{2}$ ҳад киритилган (чунки майдон бўлмаганда (30.10) ифода (30.9) га айланиши лозим—*тарж*). δ_l ўзгармас фаза IIIредингернинг аниқ тенгламаси ечилиши керак бўлган чегаравий шарт ($r=0$ да R_{kl} чекли) билан аниқланади, лекин уни умумий кўринишда ҳисоблаш мумкин эмас. δ_l фазалар албатта, ҳам l , ҳам k нинг функциялари бўлиб, узлуксиз спектр хос функцияларининг муҳим характеристикасини ифодалайди.

z ўқининг мусбат йўналиши бўйлаб ҳаракатланаётган аниқ $p = \hbar k$ импульсли эркин заррани кўрамыз. Бундай зарранинг тўлқин функцияси

$$\psi = \text{const} \cdot e^{ikz} = \text{const} \cdot e^{ikr \cos \theta} \quad (30.11)$$

кўринишдаги ясси тўлқиндан иборат бўлади. Бу функцияни аниқ орбитал моментга эга бўлган эркин ҳаракатнинг ψ_{klm} тўлқин функциялари бўйича қаторга ёямиз. (30.11) функция z ўқиға нисбатан аксиал симметрияга эга бўлганидан, унинг ёйилмасига φ бурчакка боғлиқ бўлмаган, яъни $m=0$ ли функцияларгина кира олади. $\psi_{kl0} = \text{const} \cdot P_l(\cos \theta) R_{kl}$ шундай функциялардир. Шундай қилиб, қидириладиётган ёйилма

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta) \quad (30.12)$$

кўринишга эга бўлади, бунда a_l — ўзгармас коэффициентлар.

Бу коэффициентларни аниқлаш учун (30.12) тенгликни $P_l(\cos \theta) \sin \theta$ га кўпайтириб, сўнгга $d\theta$ бўйича интеграллаймиз. Ҳар хил l ли P_l полиномларнинг ўзаро ортогонал эканини ҳамда нормаловчи интеграл қиймати

$$\int_0^{\pi} P_l^2(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \quad (30.13)$$

ни ҳисобга олиб,

$$\int_0^{\pi} e^{ikr \cos \theta} P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta = a_l \frac{2}{2l+1} R_{kl}(r) \quad (30.14)$$

ни топамиз. Тенгликнинг чап томонида турган интеграл r нинг катта қийматлари соҳасида (бунда $\frac{1}{r}$ бўйича

юқори тартибли бўлган ҳадларни эътиборга олмаслик мумкин) осон ҳисобланади. Интегрални $\mu = \cos \theta$ ўзгарувчи бўйича бўлак-лаб интегралласак, $\frac{1}{r}$ гача аниқлик билан

$$\int_{-1}^1 e^{ikr\mu} P_l(\mu) d\mu \approx P_l(\mu) \frac{e^{ikr\mu}}{ikr} \Big|_{-1}^1 = \frac{e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}}{ikr}$$

ни ҳосил қиламиз (бу ерда бизга маълум бўлган $P_l(1) = 1$, $P_l(-1) = (-1)^l$ қийматлардан фойдаланилган). Бу ифодани

$$\frac{2il}{kr} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right)$$

кўринишда ёзиш мумкин. Энди (30.14) ифодадаги R_{kl} ўрнига унинг (30.9) даги ифодаси қўйилса a_l учун

$$a_l = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{i^l}{k} (2l + 1) \quad (30.15)$$

ҳосил бўлади. Бу коэффициентлар (30.12) га қўйилса, ёйилма катта r масофаларда

$$e^{ikz} \approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l + 1) P_l(\cos \theta) \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) \quad (30.16)$$

асимптотик шаклни қабул қилади. Бу ёйилма бизга кейин, зарралар сочилиши назариясида керак бўлади.

Масалалар

Моменти $l = 0$ бўлган зарранинг $r < 0$ да $U(r) = -U_0$ ҳамда $r > a$ да $U(r) = 0$ бўладиган марказий-симметрик потенциал ўрадаги ҳаракати учун энергия сатҳлари аниқлансин.

Ечилиши. $l = 0$ да тўлқин функция фақат r га боғлиқ бўлади. Ўра ичида Шредингер тенгламаси қуйидаги кўринишга эга:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) + k^2 \psi = 0, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - |E|)}.$$

$r = 0$ даги чекли ечим:

$$\psi = A \frac{\sin \hbar r}{r}.$$

$r > a$ да эса

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) - \kappa^2 \psi = 0, \quad \kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E|}$$

тенгламага эга бўламиз. Бу тенгламанинг чексизликда нолга айланивчи ечими

$$\psi = A' \frac{e^{-\kappa r}}{r}$$

бўлади. $\psi(r)$ дан олинган логарифмик ҳосиланинг $r = a$ нуқтадаги узлуксизлик шарти

$$k \operatorname{ctg} ka = -\kappa = -\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - k^2} \quad (1)$$

ифодани ёки

$$\sin ka = \pm ka \sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2U_0}} \quad (2)$$

ифодани беради. Бу тенгламадан энергия сатҳларини ошқормас ҳолда аниқлаш мумкин ((1) га биноан, (2) тенгламанинг $\operatorname{ctg} ka < 0$ шартни қаноатлантирувчи яддизлари олинishi керак). Бу сатҳларнинг биринчиси ($l = 0$ бўлган сатҳ) умуман энергия сатҳлари орасида энг қуйи сатҳга, яъни зарранинг нормал ҳолатига мос келади.

Потенциал ўра чуқурлиги U_0 жуда кичик бўлганда манфий энергия сатҳлари умуман мавжуд бўлмайди, чунки ўра заррани „тутиб“ тура олмайди. Буни (2) тенглама учун тузилган қуйидаги графикдан яққол кўриш мумкин. $\pm \sin x = \alpha x$ кўринишидаги тенгламанинг ечимлари $y = \alpha x$ тўғри чизиқ билан $y = \pm \sin x$ эгри чизиқларнинг кесилиш нуқталаридан топилади. Бунда фақат шундай кесилиш нуқталари олиндики, улар $\operatorname{ctg} x < 0$ шартни қаноатлантирсин; $y = \pm \sin x$ эгри чизиқларнинг мос қисмлари 10-расмда туташ чизиқ билан тасвирланган. α жуда катта (U_0 кичик) бўлганда бундай кесилиш нуқталари умуман бўлмайди. Биринчи шундай нуқта $y = \alpha x$ тенглама расмда кўрсатилган вазиятни эгаллаганда,

яъни $\alpha = \frac{2}{\pi}$ да $x = \frac{\pi}{2}$ нуқтада ҳосил бўлади.

$$\alpha = \frac{\hbar}{\sqrt{2ma^2U_0}} \text{ ва } x = ka$$

деб фараз қиламиз ва бундан ўрада биринчи манфий сатҳни ҳосил қила оладиган минимал чуқурликни топамиз:

$$U_{0\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}. \quad (3)$$

10- расм

a ўра радиуси қанча кичик бўлса, бу миқдор шунча каттадир. Биринчи сатҳнинг ўзининг юзага келиш вақтидаги катталиги $ka = \frac{\pi}{2}$ ифодадан топилади ва табиийки, нолга тенг бўлади. Ўра чуқурлигининг бундан кейинги ортишларида нормал сатҳ ҳам пасая боради.

2. Фазовий осциллятор ($U = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$ майдондаги зарра)нинг энергия сатҳлари ҳамда бу сатҳларнинг айланиш даражалари аниқлансин.

Ейчи л и ш и. $U = \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$ майдондаги зарранинг Шредингер тенгласини ўзгарувчилар бўйича ажратиш мумкин

Натижада учта чизиқли осциллятор типигаги тенглама ҳосил бўлади. Шу сабабли, энергия сатҳлари

$$E = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right) = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right)$$

га тенг бўлади. n -сатҳнинг айниш даражаси n ни учта мусбат бутун сон (бу сонлар қаторига 0 ҳам кирди) йиғиндиси сифатида ёзиш усуллариининг сонига, яъни

$$\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

га тенгдир¹.

31- §. Кулон майдонидаги ҳаракат

Электроннинг водород атомидаги ёки водородсимон ион ($+Ze$ зарядли ядро майдонидаги электрон) даги ҳаракатини кўриб чиқайлик. Ядрони қўзғалмас деб фараз қилинса, бу масала зарранинг Кулон тортишиш майдонидаги ҳаракати масаласига келади. Бу майдоннинг потенциал энергияси

$$U = -\frac{Ze^2}{r} \quad (31.1)$$

кўринишга эга.

22- § да баён этилган умумий мулоҳазаларга кўра олдиндан маълумки, E энергиянинг мусбат хос қийматлари спектри узлуксиз, манфий энергия спектри эса дискрет бўлади. Бу ерда бизни электроннинг боғланган ҳолатларига мос келувчи кейинги ҳол қизиқтиради.

Кулон майдони билан боғлиқ бўлган масалаларда барча физикавий катталикларни ўлчаш учун *атом бирликлари* деб аталувчи махсус бирликлардан фойдаланиш қўлайдир. Чунончи, масса, узунлик ва вақт бирликлари сифатида мос ҳолда

$$m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ г}, \quad \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

$$\frac{\hbar^3}{me^4} = 2,42 \cdot 10^{-17} \text{ сек}$$

ларни олиш мумкин (m — электрон массаси); узунликнинг атом бирлигини *Бор радиуси* дейилади. Бошқа

¹ Бошқача қилиб айтганда, бу n та бир хил шарни учта яшиқка тақсимлаш усуллариининг сонига.

ҳамма бирликлар хулди шулардан ҳосил қилинади; масалан, энергиянинг бирлиги

$$\frac{mc^4}{\hbar^2} = 4,36 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 27,21 \text{ эв}$$

бўлади¹. $e = 4,80 \cdot 10^{-10} \text{ CGSE}$ элементар заряд заряднинг атом бирлигидир. Формулаларда атом бирликларига ўтиш учун $e = 1$, $m = 1$ ва $\hbar = 1$ деб ҳисоблаш керак.

Радиал функциялар учун (29.8) тенглама

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) R = 0 \quad (31.2)$$

кўринишда ёки янги бирликларда

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + 2 \left(E + \frac{Z}{r} \right) R = 0 \quad (31.3)$$

кўринишда бўлади. E параметр ва r ўзгарувчи ўрнига янги

$$n = \frac{Z}{\sqrt{-2E}}, \quad \rho = \frac{2rZ}{n} \quad (31.4)$$

катталиклар киритамиз (манфий E ларда n катталик ҳақиқий мусбат сон бўлади). Бу ўзгартиришлардан сўнг (31.3) тенглама

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (31.5)$$

кўринишга келади (бунда штрих ρ бўйича дифференциаллашни билдиради).

ρ нинг кичик қийматларида чеклилиكنинг зарурий шартларини қаноатлантирадиган ечим ρ^l га пропорционалдир ((29.16) га қаранг). R нинг катта ρ лардаги асимптотик кўринишини аниқлаш учун (31.5) даги $\frac{1}{\rho}$

ва $\frac{1}{\rho^2}$ ли ҳадларни ташлаб юборамиз ва

$$R'' = \frac{R}{4}$$

тенгламани оламиз, бундан $R = e^{\pm \frac{\rho}{2}}$ ҳосил бўлади. Бинобарин, бизни қизиқтираётган чексизликда йўқоладиган ечим катта ρ ларда $e^{-\frac{\rho}{2}}$ каби характерга эга.

¹ Бу катталикнинг ярми *ридберг* (Ry) деб аталади.

Бу айтилганларни элтиборга олсак, R ни

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho) \quad (31.6)$$

кўринишда ёзишимиз табиий. (31.6) ни (31.5) га қўйиб, $w(\rho)$ учун

$$\rho w'' + (2l + 2 - \rho)w' + (n - l - 1)w = 0 \quad (31.7)$$

тенгламага келамиз. Бу тенгламанинг ечими чексизликда ρ нинг чекли даражасидан тез узоқлашмаслиги, $\rho = 0$ да эса чекли бўлиши керак.

Худди 25- § дагидек усул қўллаб, тенглама ечимини

$$w = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \rho^s \quad (31.8)$$

қатор шаклида қидирамиз. Бунини (31.7) га қўйсак,

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} [a_s s(s-1) + (2l+2)a_s s] \rho^{s-1} + \\ + \sum_{s=0}^{\infty} [-a_s s + a_s (n-l-1)] \rho^s = 0 \end{aligned}$$

ифода ҳосил бўлади. Бунда биринчи йиғиндидаги йиғувчи индекс s ни $s+1$ га алмаштириб,

$$\sum_{s=0}^{\infty} [a_{s+1}(s+1)(s+2l+2) + a_s(n-l-1-s)] \rho^s = 0$$

ни толамиз. Ёйилма коэффициентларини полга тенглаштириб

$$a_{s+1} = -a_s \frac{n-l-1-s}{(s+1)(s+2l+2)} \quad (31.9)$$

кўринишдаги рекуррент муносабатни ҳосил қиламиз. Кўриниб турибдики, агар n сонини $l+1, l+2, \dots$ қийматлар қабул қилса, (31.8) қатор $(n-l-1)$ -даражали полиномга айланади.

Демак, n сонини бутун мусбат бўлиши лозим. Бунда берилган l учун

$$n \geq l+1 \quad (31.10)$$

ифода ўринли бўлади.

n параметрнинг (31.4) таърифини эслаб,

$$E = -\frac{Z^2}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (31.11)$$

ни топамиз. Шунинг билан Кулон майдонида дискрет спектр энергия сатҳларини аниқлаш масаласи ҳал қилинади. Кўриб турибмизки, нормал сатҳ ($E_1 = -\frac{1}{2}$) билан ноль орасида чексиз кўп сатҳлар мавжуд экан. Ҳар бир иккита кетма-кет сатҳлар орасидаги интервал n нинг ортиши билан камайиб боради; яъни энергиянинг дискрет спектри узлуксиз спектрга туташадиган $E=0$ қийматига яқинлашган сари сатҳлар зичлаша боради. Одатдаги birlikларда (31.11) формула қуйидаги кўринишга эга¹:

$$E = -\frac{Z^2 mc^2}{2\hbar^2 n^2}. \quad (31.12)$$

n бутун сон бош квант сони деб аталади. 29- § да аниқланган радиал квант сони эса

$$n_r = n - l - 1$$

га тенг.

Бош квант сонининг берилган қийматида l сони

$$l = 0, 1, \dots, n - 1 \quad (31.13)$$

лардан иборат n та ҳар хил қиймат қабул қилади. Энергиянинг (31.11) ифодасига фақат n сони киради. Шунинг учун l лари ҳар хил, лекин n лари бир хил бўлган барча ҳолатлар бир хил энергияга эга бўлади.

Шундай қилиб, энергиянинг ҳар бир хос қиймати фақат m магнит квант сони бўйича айланиб (марказий-симметрик майдонда юз берувчи ҳар қандай ҳаракатдаги каби) бўлмай, балки l сони бўйича ҳам айланиб бўлади. l бўйича айланиш (уни *масодифий ёки кулон айланиши* дейилади) фақат Кулон майдони учунгина хосдир. Бизга маълумки, l нинг ҳар бир муайян қийматида m нинг $2l + 1$ та ҳар хил қиймати мосу кела-

¹ (31.12) формула биринчи марта квант механикаси яратилишидан олдин 1913 йилда Бор томонидан кашф этилган. Квант механикасида у матрица методлари ёрдамида Паули томонидан (1926) чиқарилган, бир неча ойдан сўнг Шредингер бу формулани тўлқин тенгламасидан чиқарди.

ди. Шу сабабли, n -энергия сатҳининг айниш даражаси

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (31.14)$$

га тенг.

Биз электроннинг тўлқин функциялари учун умумий ифодани ёзиб ўтирмаймиз ва фақат унинг асосий ҳолатининг тўлқин функцияси билан чегараланамиз. $n=1$ ва $l=0$ да (31.8) қатор ўзгармасга айланади; худди шу Y_{00} бурчакли функцияга ҳам тааллуқлидир. Шу сабабли, асосий ҳолат тўлқин функцияси:

$$\psi = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-Zr}. \quad (31.15)$$

Бу функция одатдаги шартга биноан нормалаштирилади:

$$\int |\psi|^2 dV = 4\pi \int_0^\infty r^2 |\psi|^2 dr = 1.$$

Атом „ўлчамлари“ шундай r масофа билан характерланадики, бу масофада электрон эҳтимоли зичлиги $|\psi|^2$ етарли даражада камаяди. (31.15) дан кўриниб турибдики, водород атоми учун ($Z=1$) бу масофаларнинг катталиқ тартиби узунликнинг худди атом бирлигига тенг. Одатдаги birlikларда бу Бор радиуси $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ ни беради. Электроннинг атомдаги тезлигининг катталиқ тартиби ноаниқлик муносабатидан топилади: $mv \sim \frac{\hbar}{a_B}$, бундан

$$v \sim \frac{e^2}{\hbar}.$$

Масала

1. Водород атомининг ($Z=1$) асосий ҳолатида импульс ҳар хил қийматлари эҳтимоллариининг тақсимоти топилин.

Ечилиши (31.15) тўлқин функциянинг $\mathbf{p}$ тасаввурдаги ифодаси (12.12) интегралдан топилади. Интегрални ҳисоблаш учун кутб ўқи $\mathbf{p}$ бўйлаб йўналган сферик координаталарга ўтамиз:

$$a(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi(r) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} dV = \frac{1}{\pi \sqrt{2}} \int_0^\infty \int_{-1}^1 e^{-r-i\mathbf{p}\mathbf{r} \cos\theta} d\cos\theta \cdot r^2 dr.$$

Натижада

$$a(\mathbf{p}) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \frac{1}{(1+p^2)^2}$$

ҳосил бўлади. p -тасаввурдаги эҳтимол зичлиги $|a(p)|^2$ га тенг бўлади.

2. Водород атоми асосий ҳолатида ядро ҳамда электрон ҳосил қилган майдоннинг ўртача потенциали ҳисоблансин.

Е ч и л и ш и. Ихтиёрий r нуқтада „электрон булут“ томонидан ҳосил қилинган φ_e ўртача потенциални зичлиги $\rho = -|\psi|^2$ бўлган заряд учун ёзилган Пуассон тенгламаси $\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\varphi_e) = -4\pi\rho = -4e^{-2r}$ нинг сферик-симметрик ечими сифатида аниқлаш осон. Бу тенгламани интеграллашда ихтиёрий ўзгармасларни шундай танлаймизки, $\varphi_e(0)$ чекли ва $\varphi_e(\infty) = 0$ бўлсин. Бундай шартлар асосида топилган ечимга ядро майдони потенциалини қўшиб

$$\varphi = \frac{1}{r} + \varphi_e(r) = \left(\frac{1}{r} + 1\right)e^{-2r}$$

натижага келамиз. $r \ll 1$ да $\varphi \approx \frac{1}{r}$ бўлади (бу ядро майдони), $r \gg 1$ да эса $\varphi \approx e^{-2r}$ ҳосил бўлади (ядронинг электронлар билан экраниланиши).

IV боб

ҒАЛАЁНЛАНИШ НАЗАРИЯСИ

32- §. Вақтга боғлиқ бўлмаган ғалаёнланишлар

Шредингер тенгламасининг аниқ ечими фақат бир неча содда ҳоллар учунгина топилиши мумкин. Квант механикасида кўпчилик масалалар аниқ ечиб бўлмайдиган жуда мураккаб тенгламаларга олиб келади. Лекин, кўп ҳолларда масала шартига ҳар хил тартибдаги катталиклар киради; улар орасида кичик катталиклар учраши мумкин бўлиб, бу катталикларни ҳисобга олишмаганда тенглама шунчалик соддалашадикки, уни энди аниқ ечиш мумкин бўлиб қолади. Бундай ҳолда қўйилган физикавий масалани ечишдаги биринчи қадам соддалаштирилган масалани аниқ ечишдан иборат бўлади. Иккинчи қадам эса кичик ҳад (соддалаштирилган масалада ташлаб юборилган) билан боғлиқ бўлган тузатмани тақрибий ҳисоблашдан иборат. Бу тузатмаларни ҳисоблашнинг умумий методи *ғалаёнланиш назарияси* деб аталади.

Берилган физикавий системанинг гамильтониани

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

кўринишга эга деб фараз қиламиз. Бунда $\hat{V}$ „ғалаёнланмаган“ $\hat{H}_0$ операторга киритиладиган тузатма (*ғалаёнланиш*) ни ифодалайди. Бу ва бундан кейинги параграфларда биз ғалаёнланишни вақтга ошкор боғлиқ эмас деб қараймиз ($\hat{H}_0$ ҳам вақтга ошкор боғлиқ эмас деб фараз қилинади). $\hat{V}$ операторни $\hat{H}_0$ операторга нис-

батан „кичик“ деб ҳисоблашнинг зарурий шarti қуйида аён бўлади.

Дискрет спектр учун ғалаёнланиш назарияси масаласи қуйидагича ифодаланиши мумкин. $\hat{H}_0$ ғалаёнланмаган оператор дискрет спектрининг $\psi_n^{(0)}$ хос функциялари ва $E_n^{(0)}$ хос қийматлари маълум деб, яъни

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)} \quad (32. 1)$$

тенгламанинг аниқ ечимларини маълум деб фараз қиламиз.

$$\hat{H} \psi = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi \quad (32. 2)$$

тенгламанинг тақрибий ечимларини, яъни $\hat{H}$ ғалаёнланган операторнинг ψ_n хос функциялари ва E_n хос қийматларини топиш талаб қилинади.

Бу параграфда биз $\hat{H}_0$ операторнинг ҳамма хос қийматларини айнимаган деб фараз қиламиз. Бундан ташқари, мулоҳазаларни соддалаштириш мақсадида энергия сатҳларини дискрет деб ҳисоблаймиз.

Ҳисоблашни бошиданоқ матрица кўринишида олиб бориш қулайдир. Бунинг учун қидирилаётган ψ функцияни $\psi_n^{(0)}$ лар бўйича қаторга ёямиз:

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)}. \quad (32. 3)$$

Бу ифодани (32. 2) га қўйсак,

$$\sum_m c_m (E_m^{(0)} + \hat{V}) \psi_m^{(0)} = \sum_m c_m E \psi_m^{(0)}$$

ҳосил бўлади. Ушбу тенгликни иккала томондан $\psi_k^{(0)}$ га кўпайтириб, сўнгра интегралласак,

$$(E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m \quad (32. 4)$$

ни топамиз. Бу ерда V_{km} — ғалаёнланмаган $\psi_m^{(0)}$ функциялар ёрдамида аниқланган ғалаёнланиш операторининг матрица элементи, яъни:

$$V_{km} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} dq. \quad (32. 5)$$

c_m коэффициентлар ва E энергиянинг қийматларини

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots, \quad c_m = c_m^{(0)} + c_m^{(1)} + c_m^{(2)} + \dots,$$

қаторлар кўринишида қидирамиз. Бунда $E^{(1)}$ ва $c_m^{(1)}$ ўз катталиклари бўйича $\hat{V}$ ғалаёнланиш тартибидаги, $E^{(2)}$ ва $c_m^{(2)}$ лар эса иккинчи тартибли кичик миқдорлардир ва ҳоказо.

n -хос қиймат ва хос функциялар (ғалаёнланмаган $n = E_n^{(0)}$ ва $\psi_n^{(0)}$ лар — тарж.) га киритиладиган тузатмаларни аниқлаймиз. Демак, масала шартига биноан $c_n^{(0)} = 1$, $c_m^{(0)} = 0$ ($m \neq n$ да). Биринчи яқинлашишдаги тузатмаларни топиш учун (32. 4) тенгламага фақат биринчи тартибли ҳадларни ўз ичига олган $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$ ва $c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)}$ ифодаларни қўямиз. $k = n$ бўлган тенглама

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq \quad (32. 6)$$

ни беради. Шундай қилиб, $E_n^{(0)}$ хос қийматга биринчи яқинлашишда киритиладиган тузатма ғалаёнланишнинг $\psi_n^{(0)}$ ҳолатдаги ўртача қийматига тенг экан.

(32. 4) тенгламалардан $k \neq n$ бўлганлари эса қуйидагини беради:

$$c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (k \neq n). \quad (32. 7)$$

Демак, $c_n^{(1)}$ ихтиёрий бўлиб қолади ва у шундай танланиши керакки, бунда $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$ функция биринчи тартибли ҳадларгача (биринчи тартибли ҳадни ўз ичига олган ҳолда) аниқликда нормалаштирилади. Бунинг учун $c_n^{(1)} = 0$ деб фараз қилиш лозим. Ҳақиқатан ҳам,

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m' \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \quad (32. 8)$$

функция (йиғинди белгисидаги штрих m бўйича йиғинди олинаётганда $m = n$ номерли ҳадни тушириб қолдириш лозимлигини билдиради) $\psi_n^{(0)}$ га ортогонал бўлганидан, $|\psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}|^2$ дан олинган интеграл 1 дан фақат иккинчи тартибли кичик ҳадга фарқ қилади.

(32. 8) формула $\psi_n^{(0)}$ тўлқин функцияга биринчи яқинлашишда киритиладиган тузатмани аниқлайди. Шунинг

айтиш керакки, бу формуладан қаралаётган методни қўллаш шарт келиб чиқади. Чунинчи,

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}| \quad (32. 9)$$

тенгсизлик ўринли бўлиши, яъни ғалаёнланишнинг матрица элементлари ғалаёнланмаган мос энергия сатҳлари айирмасидан кичик бўлиши лозим.

$E_n^{(0)}$ хос қиймагга киритиладиган тузатмани иккинчи яқинлашишда аниқлайлик. Бунинг учун (32. 4) га $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}$ ва $c_k = c_k^{(0)} + c_k^{(1)} + c_k^{(2)}$ ифодаларни қўямиз ва иккинчи тартибли кичик ҳадни кўриб чиқамиз. $k = n$ бўлган тенглама

$$E_n^{(2)} c_n^{(0)} = \sum_m V_{nm} c_m^{(1)}$$

ни беради, бундан

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (32. 10)$$

(биз (32. 7) даги $c_m^{(1)}$ дан ҳамда $\hat{V}$ операторнинг $V_{mn} = V_{nm}^*$ эрмитлигидан фойдаландик).

Қайд қилиб ўғамизки, нормал ҳолат энергиясига иккинчи яқинлашишда киритиладиган тузатма ҳамма вақт манфийдир. Дарҳақиқат, агар $E_n^{(0)}$ энг кичик қийматга мос келса, у ҳолда (32. 10) йиғиндидаги ҳамма ҳадлар манфий бўлади.

Юқорида олинган натижалар бевосита $\hat{H}_0$ оператор узлуксиз спектрга эга бўлган ҳол (агар бу операторда шундай спектр бор бўлса) учун ҳам умумлаштирилади (бунда аввалгидек, дискрет спектрнинг ғалаёнланган ҳолатлари устида фикр юритилади). Бунинг учун дискрет спектр бўйича олинadиган йиғиндиларга узлуксиз спектр бўйича олинadиган тегишли интегралларни қўшиш лозим.

Узлуксиз спектр ҳолатларида энергия сатҳларининг ўзгариши ҳақида, равшанки, умуман савол туғилмайди. Бу ҳолда гап фақат хос функцияларга киритиладиган тузатмаларни ҳисоблаш ҳақида бориши мумкин.

Шу муносабат билан ғалаёнлаш вазифасини заиф ташқи майдонда (яъни унча чуқур бўлмаган потенциал ўрада) ётувчи зарранинг потенциал энергияси бажарадиган ҳолни эслатиб ўтамиз. Бу ҳолда ғалаёнланмаган

Шредингер тенгламаси зарранинг эркин ҳаракат тенгламасини ифодалайди, энергия сатҳлари эса мусбат ва узлуксиз спектрни ҳосил қилади.

24- § охирида эслатиб ўтганимиздек, бундай ўрада боғланган ҳолатлар мавжуд эмас, яъни манфий энергия сатҳлари йўқ. Ҳақиқатан ҳам, $E = 0$ да эркин ҳаракатнинг ғалаёнланмаган тўлқин функцияси ўзгармас сонга айланади: $\psi^{(0)} = \text{const}$. Тузатма $\psi^{(1)} \ll \psi^{(0)}$ бўлганидан, равшанки, ўрадаги ҳаракатнинг $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$ ғалаёнланган тўлқин функцияси ҳеч қаерда нолга айланмайди. Тугунларга эга бўлмаган хос функция эса нормал ҳолатга қарашлидир (22- §). Бошқача айтганда, $E = 0$ қиймат зарра энергияси учун мумкин бўлган қийматларнинг энг кичиги бўлиб қолади.

Ғалаёнланиш назариясини бу ҳолга қўллаш шarti $|U|$ ўра чуқурлигининг ўра ичидаги зарра эришган ўртача кинетик энергияга нисбатан кичик бўлишидан иборат. Ноаниқлик муносабатига биноан, бундай зарранинг импульси $p = \frac{\hbar}{a}$ бўлар эди (бунда a — ўранинг чизиқли ўлчамлари); бундан эса 24- § да кўрсатилган $|U| \ll \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$ шарт келиб чиқади¹.

М а с а л а

Гамильтониони

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4$$

кўринишга эга бўлган ангармоник чизиқли осцилляторнинг энергия сатҳлари аниқлансин.

Ечилиши, x^3 ва x^4 нинг матрица элементларини x нинг (25, 4) орқали берилган матрица элементларидан фойдаланган ҳолда бевосита матрицаларни кўпайтириш қондасига биноан топиш мумкин. Натижада, x^3 нинг нолдан фарқли матрица элементлари учун

$$(x^3)_{n-3, n} = (x^3)_{n, n-3} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/4} \sqrt{n(n-1)(n-2)}.$$

¹ Бир ёки икки ўлчовли ўра (майдон фақат битта ёки иккита координатанинг функцияси бўлган) учун унинг бошқа ўлчовлари чекланмаган (масалан, бир ўлчовли ўра учун u ва z чексиз, икки ўлчовли ўра учун z чексизга тенг — тарж). Шу сабабли, бундай ўралар учун келтирилган шарт бажарилмайди ва шунинг учун ҳам бундай ўралардаги ҳаракатга (кичик энергияли) ғалаёнланиш назариясини қўллаб бўлмайди. Демак, уларда боғланган ҳолатлар йўқ деган хулоса ҳам нотўғридир.

$$(x^3)_{n-1, n} = (x^3)_{n, n-1} = 3 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} n^{3/2}$$

ифодаларини топамиз.

Бу матрицада диагональ элементлар йўқ. Шу сабабли, гамильтонияндаги αx^3 ҳад (гармоник осцилляторга таъсир қилувчи ғалаёнланиш сифатида) биринчи яқинлашишда ҳеч қандай тузатма бермайди. Бу ҳаднинг иккинчи яқинлашишда берадиган тузатмаси βx^4 ҳаднинг биринчи яқинлашишда берадиган тузатмаси тартибидадир, x^4 нинг диагональ матрица элементлари

$$(x^4)_{n, n} = \frac{3}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 (2n^2 + 2n + 1)$$

га тенг. Ниҳоят, (32. 6) ва (32. 10) формулалар ёрдамида ангармоник осцилляторнинг энергия сатҳлари учун

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{15 \alpha^2}{4 \hbar \omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^3 \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) + \frac{3\beta}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right)$$

тақрибий ифодани ҳосил қиламиз.

33- §. Секуляр тенглама

Энди $\hat{H}_0$ ғалаёнланмаган операторнинг хос қийматлари айниган ҳолни кўриб чиқамиз. Энергиянинг айнан битта $E_n^{(0)}$ хос қийматига қарашли хос функцияларни $\psi_n^{(0)}$, $\psi_{n'}^{(0)}$ лар орқали белгилаймиз. Биз биламизки, бу функцияларни бир қийматли танлаб бўлмайди, яъни бу функциялар ўрнига уларнинг исталган s ($s = E_n^{(0)}$ энергия сатҳининг айниш даражаси) та мустақил чизиқли комбинацияларини олиш мумкин. Лекин кичик ғалаёнланиш таъсирида тўлқин функцияларнинг ўзгариши ҳам кичик бўлади деб шартлашсак, у ҳолда функцияларни танлаш усуллари ихтиёрий бўлмай қолади.

Ҳозирча $\psi_n^{(0)}$, $\psi_{n'}^{(0)}$ ларни ихтиёрий танланган ва ғалаёнланмаган функциялар деб фараз қиламиз. Нолинчи яқинлашишда тўғри танланган функциялар $c_n^{(0)} \psi_n^{(0)} + c_{n'}^{(0)} \psi_{n'}^{(0)} + \dots$ кўринишдаги чизиқли комбинациялардан иборат бўлсин. Бу комбинациялардаги коэффициентлар (хос қийматларга биринчи яқинлашишда кiritиладиган тузатмалар билан биргаликда) қуйидагича аниқланади.

(32. 4) тенгламани $k = n, n', \dots$ лар учун ёзиб оламиз. Уларга биринчи яқинлашишда $E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$ ни

қўйиб, бунда c_n катталиклар учун нолинчи қийматлар, яъни $c_n = c_n^{(0)}$, $c_{n'} = c_{n'}^{(0)}$... ва $m \neq n, n'$... да $c_m = 0$ билан чегараланамиз. У ҳолда

$$E^{(1)} c_n^{(0)} = \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)}$$

ёки

$$\sum (V_{nn'} - E^{(1)} \delta_{nn'}) c_{n'}^{(0)} = 0 \quad (33. 1)$$

ҳосил бўлади, бунда n, n' ... лар берилган ғалаёнланмаган $E_n^{(0)}$ хос қийматга тегишли ҳолатларни номерловчи ҳамма қийматларни қабул қилади. $c_n^{(0)}$ катталиклар учун бир жинсли ва чизиқли бўлган бу тенгламалар системаси номаълумлар олдидаги коэффицентлардан тузилган детерминант нолга тенг бўлган шароитдагина нолдан фарқли ечимга эга бўлади. Шундай қилиб,

$$|V_{nn'} - E^{(1)} \delta_{nn'}| = 0 \quad (33. 2)$$

тенгламани ҳосил қиламиз.

Бу ифода $E^{(1)}$ ларга нисбатан s -даражали тенглама бўлиб, умуман айтганда, s та ҳар хил ҳақиқий илдизга эга. Худди ана шу илдизлар хос қийматларга биринчи яқинлашишда киритиладиган тузатмаларни ифодалайди. (33. 2) тенглама *секуляр¹ тенглама* деб аталади.

(33. 1) системага (33. 2) тенглама илдизларини навбати билан қўйиб ҳамда ҳар бир илдиз учун бу системани ечиб, $c_n^{(0)}$ коэффицентларни топамиз ва шундай қилиб, нолинчи яқинлашишдаги хос функцияларни топамиз.

Олдин айниган энергия сатҳи ғалаёнланиш натижасида, умуман айтганда, айнамаган сатҳга айланиб қолади (чунки (33. 2) нинг илдизлари ҳар хилдир); бу ҳолда ғалаёнланиш айнишни „йўқотади“ деб гапирилади. Айниш ҳам тўла, ҳам қисман йўқолиши мумкин (кейинги ҳолда қўйилган ғалаёнланиш айниш даражасини дастлабкисидан камайтиради).

Масалалар

1. Икки каррали айниган сатҳ учун хос қийматга биринчи яқинлашишда киритиладиган тузатма ҳамда нолинчи яқинлашишдаги тўғри функциялар топилсин.

¹ Бу ном осмон механикасидан олинган.

Ечилиши, (33, 2) тенглама бу ҳолда

$$\left| \begin{array}{cc} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{array} \right| = 0$$

кўринишга эга (1, 2 индекслар икки каррали айниган сатҳнинг ихтиёрий танланган иккита $\psi_1^{(0)}$ ва $\psi_2^{(0)}$ ғалаёнланмаган хос функцияларига мос келади). Тенгламани ечиб, қуйидагини топамиз:

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} [V_{11} + V_{22} \pm \hbar \omega^{(1)}], \quad \hbar \omega^{(1)} = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4 |V_{12}|^2}, \quad (1)$$

бунда $\hbar \omega^{(1)}$ орқали $E^{(1)}$ тузатманинг иккита қиймати орасидаги фарқ белгиланган. (33, 1) тенгламани $E^{(1)}$ нинг ана шу қийматларида ечиб, нолинчи яқинлашишда тўғри ва нормалашган $\psi^{(0)} = c_1^{(0)} \psi_1^{(0)} + c_2^{(0)} \psi_2^{(0)}$ функциялар коэффициентлари учун

$$c_1^{(0)} = \left\{ \frac{V_{12}}{2 |V_{12}|} \left[1 \pm \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar \omega^{(1)}} \right] \right\}^{1/2},$$

$$c_2^{(0)} = \pm \left\{ \frac{V_{21}}{2 |V_{12}|} \left[1 \mp \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar \omega^{(1)}} \right] \right\}^{1/2} \quad (2)$$

қийматлар топилади.

2. Вақтнинг бошланғич $t = 0$ momentiда система икки каррали айниган сатҳга қарашли бўлган $\psi_1^{(0)}$ ҳолатда ётади. Системанинг кейинги t вақт momentiда шу энергияга қарашли бошқа $\psi_2^{(0)}$ ҳолатда ётиш эҳтимоли топилсин; ўтиш ўзгармас ғалаёнланиш таъсирида юз беради.

Ечилиши. Нолинчи яқинлашишда тўғри бўлган

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad \psi' = c'_1 \psi_1 + c'_2 \psi_2$$

функциялар тузамиз. Бунда икки жуфт c_1, c_2 ва c'_1, c'_2 коэффициентлар 1- масаланинг (2) формуласидан топилади (қисқалик мақсадида ҳамма катталиклардаги 0 индекс тушириб қолдирилган). Аксинча, ψ_1 учун:

$$\psi_1 = \frac{c'_2 \psi - c_2 \psi'}{c_1 c'_2 - c_1 c_2}.$$

ψ ва ψ' функциялар ғалаёнланган $E + E^{(1)}$ ва $E + E^{(1)'}$ энергияли ҳолатларга қарашли бўлиб, бунда $E^{(1)}$ ва $E^{(1)'}$ — 1- масаладаги (1) тузатманинг иккита қиймати. Вақтга боғлиқ кўпайтувчи киритиб, вақтга боғлиқ бўлган тўлқин функцияга ўтамиз:

$$\Psi_1 = \frac{e^{-iEt/\hbar}}{c_1 c'_2 - c_1 c_2} [c'_2 \psi e^{-iE^{(1)}t/\hbar} - c_2 \psi' e^{-iE^{(1)'}t/\hbar}]$$

($t' = 0$ моментда $\Psi_1 = \psi_1$). Ниҳоят, ψ ва ψ' ларни яна ψ_1 ва ψ_2 лар орқали ифодалаб, Ψ_1 ни ψ_1 ва ψ_2 ларнинг чизиқли комбинацияси кўринишига келтирамиз. Бунда чизиқли комбинация коэффициентлари вақтга боғлиқдир. ψ_2 олдидаги коэффициент модулининг

квадрати изланаётган w_{12} ўтиш эҳтимолини беради. (1) ва (2) дан фойдаланиб, ҳисоблаш натижасида

$$w_{12} = 2 \frac{|V_{12}|^2}{(\hbar\omega^{(1)})^2} [1 - \cos\omega^{(1)}t]$$

ни оламиз. Кўрамызки, эҳтимоллиқ $\omega^{(1)}$ частота билан даврий тебраниб турар экан,

34- §. Вақтга боғлиқ ғалаёнланишлар

Вақтга ошкор боғлиқ бўлган ғалаёнланишларни ўрганишга ўтамыз. Бу ҳолда энергиянинг хос қийматларига тузатма киритиш ҳақида умуман гап бўлиши мумкин эмас. Чунки вақтга боғлиқ бўлган гамилтониан учун (бунда ғалаёнланган оператор $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ кўринишда бўлади) энергия сақланмайди, демак, стационар ҳолатлар мавжуд эмас. Бу ерда масала тўлқин функцияларни ғалаёнланмаган система стационар ҳолатларининг тўлқин функциялари бўйича тақрибан ҳисоблашдан иборатдир.

Бунинг учун қизиқли дифференциал тенгламаларни ечишда ишлатиладиган ўзгармасларни вариациалаш методига ўхшаш метод қўллаймиз¹. Айтайлик, вақтга боғлиқ кўпайтувчиси бўлган $\Psi_k^{(0)}$ тўлқин функциялар ғалаёнланмаган системанинг стационар ҳолатларини тавсифласин. У ҳолда ғалаёнланмаган тўлқин тенгламанинг ихтиёрий ечими $\Psi = \sum a_k \Psi_k^{(0)}$ йиғинди шаклида ёзилиши мумкин. Энди ғалаёнланган

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi \quad (34. 1)$$

тенглама ечимини

$$\Psi = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)} \quad (34. 2)$$

йиғинди кўринишида қидирамиз, бунда ёйилма коэффициентлари вақтнинг функцияларидир. (34. 2) ни (34. 1) га қўйиб ва $\Psi_k^{(0)}$ функцияларнинг

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k^{(0)}}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_k^{(0)}$$

¹ Бу методнинг квант механикасидаги татбиқи *Диракка* мансубдир (1926).

тенгламани қаноатлантиришини ҳисобга олиб,

$$i\hbar \sum_k \Psi_k^{(0)} \frac{da_k}{dt} = \sum_k a_k \hat{V} \Psi_k^{(0)}$$

га эга бўламиз.

Тенгликнинг иккала томонини чапдан $\Psi_m^{(0)*}$ га кў-
пайтириб, сўнгга интегралласак

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) a_k \quad (34.3)$$

ҳосил бўлади, бунда

$$V_{mk}(t) = \int \Psi_m^{(0)*} \hat{V} \Psi_k^{(0)} dq = V_{mk} e^{i\omega_{mk}t}, \quad \omega_{mk} = \frac{1}{\hbar} (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})$$

ғалаёнланишнинг вақтга боғлиқ кўпайтувчини ўз ичига
олган матрица элементлари (шуни назарда тутиш ке-
ракки, агар V вақтга ошкор боғлиқ бўлса, V_{mk} катта-
лик ҳам вақтнинг функцияси бўлади).

Ғалаёнланмаган тўлқин функция сифатида i -ста-
ционар ҳолатнинг тўлқин функциясини оламиз. Бу
функцияга (34.2) даги коэффициентларнинг $a_i^{(0)} = 1$
ҳамда $k \neq i$ бўлганда $a_k^{(0)} = 0$ қийматлари мос келади.
Масалани биринчи яқинлашишда ечиш учун a_k ни $a_k =$
 $= a_k^{(0)} + a_k^{(1)}$ кўринишда қидирамиз. Бунда (34.3) тенг-
ламанинг (таркибида кичик V_{mk} катталики бўлган) ўнг
томонига $a_k = a_k^{(0)}$ ни қўйсак,

$$i\hbar \frac{da_k^{(1)}}{dt} = V_{ki}(t) \quad (34.4)$$

ҳосил бўлади.

Ҳисобланаётган тузатма ғалаёнланмаган функция-
ларнинг қайси бирига алоқадор эканини кўрсатиш учун
 a_k коэффициентга иккинчи индекс киритамиз. У ҳолда

$$\Psi_i = \sum_k a_{ki}(t) \Psi_k^{(0)} \quad (34.5)$$

бўлади. Бунга мос ҳолда (34.4) тенгламани интеграл-
лаш натижасини

$$a_{ki}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int V_{ki}(t) dt = -\frac{i}{\hbar} \int V_{ki} e^{i\omega_{ki}t} dt \quad (34.6)$$

кўринишда ёзамиз. Биринчи яқинлашишда тўлқин
функция ана шу ифода билан аниқланади.

(34.6) интегралларда чегаралар танлаш конкрет
масала шартларига боғлиқдир. Фараз қилайлик, маса-

лан, ғалаёнланиш муайян чекли вақт оралигидагина таъсир қилсин (ёки $V(t)$ ғалаёнланиш $t \rightarrow \pm \infty$ да етарлича тез сўнсин). Ғалаёнланиш таъсир қилишдан олдин (ёки $t \rightarrow -\infty$ да) система i -стационар ҳолатда (дискрет спектрли) ётган бўлсин. Системанинг ҳолати исталган кейинги вақт моментида биринчи яқинлашишдаги кўриниши

$$a_{kl} = a_{kl}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{kl} e^{i\omega_{kl}t} dt \quad (k \neq i),$$

$$a_{ii} = 1 + a_{ii}^{(1)} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{ii} dt \quad (34. 7)$$

бўлган (34. 5) функция орқали аниқланади. (34. 7) да интеграл чегаралари шундай танланганки, бунда ҳамма $a_{kl}^{(1)}$ коэффициентлар $t \rightarrow -\infty$ да нолга айланади. Ғалаёнланиш таъсир қиладиган вақтнинг ортиши билан (ёки $t \rightarrow \infty$ чегарада) a_{kl} коэффициентлар ўзгармас $a_{kl}(\infty)$ қийматлар қабул қилади. Демак, система яна ғалаёнланмаган тўлқин тенгламани қаноатлантирувчи, лекин дастлабки $\Psi_i^{(0)}$ функциядан фарқли бўлган

$$\Psi = \sum_k a_{ki}(\infty) \Psi_k^{(0)}$$

тўлқин функция билан тавсифланадиган ҳолатда жойлашади. Умумий ҳолатда биноан, $a_{ki}(\infty)$ коэффициент модулининг квадрати системанинг $E_k^{(0)}$ энергияга эга бўлиш эҳтимолини, яъни k -стационар ҳолатда ётиш эҳтимолини аниқлайди.

Шундай қилиб, система ғалаёнланиш таъсирида дастлабки стационар ҳолатидан исталган бошқасига ўтади. Ушбу ва бундан кейинги параграфларда бошланғич ҳолатни i индекс орқали, охириги ҳолатни эса f индекс орқали белгилашни шартлашиб оламиз. Демак, $i \rightarrow f$ ўтиш эҳтимоли

$$W = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 \quad (34. 8)$$

га тенг.

Агар $V(t)$ ғалаёнланиш $\frac{1}{\omega_{fi}}$ давр тартибидаги вақт оралиги давомида кам ўзгарса, у ҳолда (34. 8) интегралнинг қиймати жуда кичик бўлади: интегралости

ифодасида тез осцилляцияланувчи ишораси ўзгариб турадиган $e^{i\omega_{\mu}t}$ кўпайтувчининг бўлиши унинг қийматини камайтиради. Чегаравий ҳолда, яъни кўйилган ғалаёнланишнинг ўзгариши исталганча кам бўлганда энергиясини ўзгартириб юз берадиган (яъни ω_{μ} частотаси нолдан фарқли бўлган) ўтишлар эҳтимоли нолга интилади. Шундай қилиб, ғалаёнланиш жуда секин ўзгарганда (адиабатик тарзда) муайян айнамаган стационар ҳолатда ётган система шу ҳолатнинг ўзида қола беради.

35- §. Узлуксиз спектрда ўтиш

Ғалаёнланиш назариясининг муҳим татбиқларидан бири узлуксиз спектр ҳолатлари орасида ўзгармас ғалаёнланиш (вақтга боғлиқ бўлмаган) таъсирида юз берадиган ўтиш эҳтимолини ҳисоблашдир. Бундай ўтишларга ҳар хил тўқнашиш процесслари мисол бўлади; бунда системанинг дастлабки ва охириги ҳолатлари ўзаро тўқнашувчи зарралар тўпламидан иборат бўлиб, ғалаёнланиш вазифасини улар орасидаги ўзаро таъсир бажаради. Қуйида баён қилинадиган метод билан тушунтириладиган ҳодисалар категориясига шундай процесслар ҳам кирадики, бунда система (ўзининг муайян боғланган ҳолатида ётган) эркин ҳаракат қилувчи қисмларга ажралади. Аниқлик учун биз аввал худди шу кейинги ҳолни назарда тутамиз¹).

Узлуксиз спектр ҳолатларини аниқловчи ва шунинг учун ҳам узлуксиз қийматлар қаторини қабул қилувчи катталиклар тўпламини ν символ билан белгилаймиз. $d\nu$ белгиси остида шу катталиклар бўйича дифференциални тушунамиз. Узлуксиз спектр ғалаёнланмаган тўлқин функцияларини „ ν катталик шкаласи бўйича“ δ - функцияга нормалаштирилган деб фараз қиламиз (масалан, эркин зарралар импульсларининг компонентлари ν катталиклар сифатида олиниши мумкин; у ҳолда бу зарраларнинг тўлқин функциялари δ - функцияга импульс

¹ Аниқроқ қилиб айтганда, емирилиш қобилятига эга бўлган системанинг дискрет спектр ҳолатлари стационар эмас, балки квазистационардир (38- § га қаранг). Лекин бу нарса баён қилинаётган масала учун муҳим эмас ва биз бу масалага 102- § да яна қайтамиз.

бўйича нормалаштирилиши керак). Бундай нормалаштирилган тўлқин функциянинг ёйилмаси ((34. 2) ўрнига)

$$\Psi = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)} + \int a_\nu(t) \Psi_\nu^{(0)} d\nu \quad (35. 1)$$

кўринишга эга, бу ерда йиғинди ҳамма дискрет спектр бўйича, интеграл эса ҳамма узлуксиз спектр бўйича олинади; бунда $|a_\nu(t)|^2 d\nu$ катталик система ҳолатининг (t вақт моментида) ν ва $\nu + d\nu$ интервал ичида топилиш эҳтимолини беради (5-§ билан солиштиринг).

Шундай қилиб, система $t = 0$ вақт моментида i индекс билан белгиланган бошланғич ҳолатда ётган бўлсин. Системанинг f ҳолатга, яъни ν катталикларнинг қийматлари $d\nu_f$ интервалда ётган ҳолатга ўтиш эҳтимолини топиш керак бўлсин.

(34. 6) даги индекс белгиларини мос ҳолда ўзгартириб ҳамда интеграллашни бажариб (вақтга боғлиқ бўлмаган V_{fi} да)

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} dt = V_{fi} \frac{1 - e^{i\omega_{fi}t}}{\hbar\omega_{fi}} \quad (35. 2)$$

ни оламиз. Интегралнинг қуйи чегараси бошланғич шартга мос ҳолда $t = 0$ да $a_{fi} = 0$ бўладиган қилиб танланган.

(35. 2) ифода модулининг квадрати

$$|a_{fi}|^2 = |V_{fi}|^2 \frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi}}{2} t}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \quad (35. 3)$$

га тенг. Катта t ларда бу функция t га пропорционал бўлишини кўриш осон.

Бунни аниқ кўрсатиш учун

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi t \alpha^2} = \delta(\alpha) \quad (35. 4)$$

формула ўринли эканини эслаймиз. Ҳақиқатан ҳам, $\alpha \neq 0$ да юқорида ёзилган лимит нолга тенг, $\alpha = 0$ да эса $\frac{\sin^2 \alpha t}{\alpha^2 t} = t$ га эга бўламиз, демак, бу ҳолда лимит

чексизликка тенг экан. dx бўйича ($x t = \xi$ белгилаш ёрдамида) $-\infty$ дан $+\infty$ гача чегарада интегралласак,

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{t^2} dx = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \xi}{\xi^2} d\xi = 1$$

ни ҳосил қиламиз.

Шундай қилиб, (35. 4) тенгликнинг чап томонидаги функция ҳақиқатан ҳам δ - функциянинг ҳамма хоссаларига эга экан.

Бу формулага биноан катта t ларда (35. 3) ни

$$|a_{fi}|^2 = \frac{1}{h^2} |V_{fi}|^2 \pi t \delta\left(\frac{\omega_{fi}}{2}\right)$$

кўринишда ёки $\delta(\alpha x) = \frac{\delta(x)}{\alpha}$ эканлигини эътиборга олиб,

$$|a_{fi}|^2 = \frac{2\pi}{h} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) t \quad (35. 5)$$

кўринишда ёзишимиз мумкин.

$|a_{fi}|^2 d\nu_f$ ифода бошланғич ҳолатдан $d\nu_f$ интервалдаги ҳолатларга ўтиш эҳтимолини беради. Кўриб турибмизки, катта t ларда бу эҳтимоллик $t=0$ моментдан бошлаб ўтган вақт оралиғига пропорционал экан. t кўпайтувчисиз бу ифода вақт бирлиги ичидаги $d\omega$ ўтиш эҳтимолини беради (бу катталиқ ўлчамсиз (34. 7) эҳтимолдан фарқли равишда, $\frac{1}{\text{сек}}$ ўлчамликка эгадир):

$$d\omega = \frac{2\pi}{h} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) d\nu_f. \quad (35. 6)$$

Бу эҳтимол энергиянинг сақланиш қонунига биноан, фақат $E_f = E_i$ энергияли ҳолатларга ўтишлар учунгина нолдан фарқли бўлади. (35. 6) формулада энергиянинг сақланиш қонунини ифодаловчи δ - функциянинг қатнашиши $E_f = E_i$ да эҳтимолликнинг чексизликка айланишини билдирмайди, албатта. Чунки бу маъносиздир; δ - функция ҳолатларнинг чекли интервали бўйича интеграллаш натижасида йўқотилади. Масалан, агар узлуксиз спектр ҳолатлари айнамаган бўлса, у ҳолда $d\nu_f$ сифатида фақат энергия қийматини олиш мумкин. У ҳолда (35. 6) ни $d\nu_f = dE_f$ бўйича интеграллаш ўтиш эҳтимоли учун қуйидаги қийматни беради:

$$w = \frac{2\pi}{h} |V_{fi}|^2. \quad (35. 7)$$

(35. 6) формула системанинг шунингдек бошланғич ҳолати ҳам узлуксиз спектрга қарашли бўлган ҳолларда ҳам ўринлидир (бундай ҳолларга тўқнашиш ҳақидаги масалалар мисол бўлади, биз улар билан 67- § да танишамиз). Лекин таъкидлаб ўтиш зарурки, бундай ҳолларда (35. 6) формула билан аниқланувчи $d\omega$ катталиқ бевосита ўтиш эҳтимолини бермайди; у ҳатто, тегишли ўлчамликка $\left(\frac{1}{\text{сек}}\right)$ ҳам эга бўлмайди. (35. 6) ифода вақт бирлигидаги ўтишлар сонига пропорционал бўлиб, унинг ўлчамлиги ҳамда физикавий маъноси узлуксиз спектр бошланғич ҳолат тўлқин функцияларини нормалаштириш усулига боғлиқдир (масалан, $d\omega$ тўқнашиш кесими бўлиб чиқиши мумкин — 67- § даги мисолга қаранг).

36- §. Оралик ҳолатлар

V_{fi} матрица элементи қаралаётган ўтиш учун нолга тенг бўлиб қолиши мумкин. У ҳолда (35. 6) формула қўйилган масалага жавоб бермайди ва ўтиш эҳтимолини аниқлаш учун ғалаёнланиш назариясининг навбатдаги яқинлашишига мурожаат қилиш керак.

V_{fi} билан биргаликда $a_{fi}^{(1)}$ тузатма ҳам нолга айланади. Иккинчи тартибли $a_{fi}^{(2)}$ тузатма учун (34. 3) тенглама

$$i\hbar \frac{da_{fi}^{(2)}}{dt} = \sum_k V_{fk} e^{i\omega_{fk}t} a_{ki}^{(1)} \quad (36. 1)$$

ни беради. Бунда йиғинди $k \rightarrow f$ ўтишларга мос матрица элементлари нолдан фарқли бўлган ҳолатлар бўйича олинади. Биринчи тартибли $a_{ki}^{(1)}$ тузатмалар

$$i\hbar \frac{da_{ki}^{(1)}}{dt} = V_{ki} e^{i\omega_{ki}t}$$

тенгламадан топилади ((34. 4) билан солиштиринг), бундан:

$$a_{ki}^{(1)} = -\frac{V_{ki}}{\hbar\omega_{ki}} (e^{i\omega_{ki}t} - 1).$$

Бу ифодани (36. 1) га қўйиб, сўнггра интегралласак

$$a_{fi}^{(2)} = \frac{i}{\hbar^2} \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{\omega_{ki}} \int_0^t (e^{i\omega_{fi}t} - e^{i\omega_{fk}t}) dt$$

ни оламиз. Интегралда махражи кичик бўлган (яъни махражи ω_{fi} бўлган) биринчи ҳаднигина сақлаб қолиш лозим. Шундай қилиб,

$$a_{fi}^{(2)} = \left(\sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{\hbar \omega_{ki}} \right) \frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{\hbar \omega_{fi}}$$

ни ҳосил қиламиз.

Бу ифода (35. 2) дан V_{fi} матрица элементи ўрнида қавс ичида йиғинди туриши билан фарқланади. Мос ҳолда (35. 6) ўрнига

$$d\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_k \frac{V_{fk} V_{ki}}{E_i - E_k} \right|^2 \delta(E_f - E_i) dv_f \quad (36. 2)$$

келиб чиқади.

Шу сабабли, V_{fk} ва V_{ki} матрица элементлари нолдан фарқли бўлган k ҳолатларни $i \rightarrow f$ ўтишнинг *оралиқ ҳолатлари* дейилади. Очiqроқ қилиб айтганда, бу ўтиш икки поғонада, яъни $i \rightarrow k$ ва $k \rightarrow f$ ўтишлар ёрдамида амалга оширилади (лекин бундай тушунтиришни асл маъносида қабул қилиш керак эмас, албатта).

37-§. Энергия учун ноаниқлик муносабати

Иккита ўзаро зaиф таъсирлашувчи қисмдан иборат бўлган системани қараб чиқамиз. Фараз қилайлик, муайян вақт моментида бу қисмлар аниқ энергияга эга бўлсин. Уларни мос равишда E ва ϵ билан белгилаймиз. Муайян Δt вақт интервалидан сўнг энергияларни яна ўлчайлик. Ўлчаш, умуман айтганда, E ва ϵ дан фарқли бўлган E' ва ϵ' қийматларни беради. $E' + \epsilon' - E - \epsilon$ айирманинг ўлчаш натижасида топиладиган эҳтимоллиги энг катта бўлган қиймати қайси тартибда эканини аниқлаш қийин эмас.

(35. 3) формулага биноан, системанинг t вақт ичида вақтга боғлиқ бўлмаган ғалаёнланиш таъсирида E энергияли ҳолатдан E' энергияли ҳолатга ўтиш эҳтимоли

$$\frac{1}{(E' - E)^2} \sin^2 \frac{E' - E}{2\hbar} t$$

га пропорционалдир. Бундан кўриниб турибдики, $E' - E$ айирманинг эҳтимоллиги энг катта бўлган қиймати $\frac{\hbar}{t}$ катталик тартибида экан.

Бу натижани кўрилайётган ҳолга (ғалаёнланиш сис-

тема зарраларининг ўзаро таъсиридан иборат бўлган) қўллаб,

$$|E + \varepsilon - E' - \varepsilon'| \Delta t \sim \hbar \quad (37. 1)$$

ифодани оламиз. Шундай қилиб, Δt вақт интервали қанча кичик бўлса, кузатиладиган энергия ўзгариши шунча катта бўлади. Муҳими шундаки, бу ўзгаришнинг $\frac{\hbar}{\Delta t}$ катталиқ тартиби ғалаёнланиш катталигига боғлиқ бўлмайди. (37. 1) ифода билан аниқланадиган энергия ўзгариши ҳатто система қисмлари орасидаги таъсир исталганча заиф бўлганда ҳам кузатила беради. Бу натижа соф квант характериға эға бўлиб, чуқур физикавий маъноға эғадир. У квант механикасида энергиянинг сақланиш қонуни иккита ўлчаш воситасида фақат $\frac{\hbar}{\Delta t}$ тартибли катталиқгача аниқлик билан текширилиши мумкинлигини кўрсатади, бунда Δt — ўлчашлар орасидаги вақт интервали.

(37. 1) муносабатни кўпинча энергия учун ноаниқлик муносабати деб аталади. Шуни таъкидлаш зарурки, бу муносабатнинг маъноси координата ва импульс учун ўринли бўлган ноаниқлик муносабати маъносидан тубдан фарқ қилади. Координата ва импульс учун ноаниқлик муносабатида Δp ва Δx импульс ва координатанинг айни бир вақт моментидаги қийматларининг ноаниқликлари; $\Delta p \cdot \Delta x \sim \hbar$ муносабат бу иккита катталиқнинг бир вақтда қатъий аниқ қийматларға эға бўла олмаслигини кўрсатади. Энергия E ва ε эса, аксинча, ҳар бир берилган вақт моментида исталган аниқлик билан ўлчаниши мумкин. (37. 1) даги $(E + \varepsilon) - (E' + \varepsilon')$ катталиқ муайян вақт моментидаги энергия қийматларининг ноаниқлиги бўлмасдан, балки $E + \varepsilon$ энергиянинг иккита турли вақт моментида аниқ ўлчанган қийматларининг айирмасидир.

Агар E ни бирор системанинг энергияси деб, ε ни эса „ўлчов асбоби“ нинг энергияси деб қаралса, у ҳолда улар орасидаги ўзаро таъсир энергиясини фақат $\frac{\hbar}{\Delta t}$ гача аниқлик билан ҳисобға олиш мумкин деган хулосаға келамиз. ΔE ва $\Delta \varepsilon$ орқали мос катталиқларни ўлчашлардаги хатоликларни белгилайлик. Қулай шароитда, яъни ε ва ε' лар батамом аниқ бўлганда ($\Delta \varepsilon = \Delta \varepsilon' = 0$)

$$\Delta(E - E') \sim \frac{\hbar}{\Delta t} \quad (37. 2)$$

га эга бўламиз. Бу муносабатдан импульсни ўлчаш ҳақида муҳим хулоса чиқариш мумкин. Зарра импульсини ўлчаш процесси деганда (аниқлик учун электрон ҳақида гапирамиз) электроннинг ўлчашдан олдинги ва кейинги импульси аниқ деб ҳисобланган бошқа („ўлчагич“) зарра билан тўқнашиши кўзда тутилади. Бу процессга импульснинг сақланиш қонунини ва энергиянинг сақланиш қонунини қўллаш керак. Лекин энергиянинг сақланиш қонунини юқорида кўрдикки, фақат $\frac{\hbar}{\Delta t}$ гача аниқлик билан қўллаш мумкин; бунда Δt — қаралаётган процесснинг бошланиши ва тамом бўлиши орасидаги вақт.

Бундан кейинги мулоҳазаларни соддалаштириш учун „ўлчагич зарра“ сифатида идеал қайтарувчи ясси кўзгу олинган фикрий эксперимент ўтказамиз; бу ҳолда импульснинг фақат битта компоненти, яъни кўзгу текислигига перпендикуляр бўлган компоненти роль ўйнайди. Зарранинг P импульсини аниқлаш учун импульс ва энергиянинг сақланиш қонунларидан

$$p' + P - p - P = 0, \quad (37. 3)$$

$$|\epsilon' + E' - \epsilon - E| \sim \frac{\hbar}{\Delta t} \quad (37. 4)$$

тенгламаларни ёзамиз (P, E — зарранинг импульс ва энергияси, p ва ϵ — кўзгу учун шу катталикларнинг ўзи; штрихсиз ва штрихли катталиклар мос ҳолда тўқнашишдан олдинги ва кейинги моментларга алоқадор). $p, p', \epsilon, \epsilon'$ лар „ўлчагич заррага“ тегишли бўлиб, уларни тўла аниқ, яъни хатоликлари нолга тенг деб қараш мумкин. У ҳолда юқорида ёзилган тенгламалардан бошқа катталикларнинг хатоликлари учун

$$\Delta P = \Delta P', \quad \Delta E' - \Delta E \sim \frac{\hbar}{\Delta t}$$

ифода вужудга келади. Лекин $\Delta E = (\partial E / \partial P) \Delta P = v \Delta P$ (бунда v — электроннинг тўқнашгунга қадар тезлиги) ва шунга ўхшаш $\Delta E' = v' \Delta P' = v' \Delta P$ бўлганидан

$$(v'_x - v_x) \Delta P_x \sim \frac{\hbar}{\Delta t} \quad (37. 5)$$

ни ёзиш мумкин. Бунда тезлик ва импульсда x индекси ёзишдан мақсад, (37. 5) муносабатнинг ҳар бир компонент учун ўз ҳолича ўринли бўлишини таъкидлашдир.

Мана шу биз қидираётган муносабатдир. Бу муносабат электрон импульсининг ўлчаниши $\{(\text{берилган } \Delta P \text{ аниқлик даражасида}) \text{ сўзсиз унинг тезлиги (яъни импульси ҳам) ўзгаришига боғлиқ бўлишини кўрсатади. Ўлчаш процесси қанча қисқа вақт давом қилса, бу ўзгариш шунча катта бўлади. Тезликнинг ўзгаришини фақат } \Delta t \rightarrow \infty \text{ дагина истаганча кичик қилиш мумкин; лекин узоқ вақтга чўзиладиган импульс ўлчаниши фақат эркин зарра учунгина маънога эгадир. Бу ерда айниқса импульсни қисқа вақт оралиқларидан сўнг қайта ўлчаб бўлмаслиги ва квант механикасида ўлчаш процессининг "икки юзламалиги" (яъни катталиكنинг ўлчанаётган қийматини унинг ўлчаш натижасида ҳосил қилинган қийматидан фарқлаш лозимлиги) яққол намоён бўлади}^1.$

38- §. Квазистационар ҳолатлар

Олдинги параграф бошида кўрилган келтириб чиқариш усулига бошқача нуқтаи назардан ёндошиш, яъни уни бирор ғалаёнланиш таъсирида қисмларга ажралувчи системага қўллаш мумкин. Системанинг емирилиш имкониятини ҳисобга олинмаган ҳолда топилган энергия сатҳларидан бирини E_0 орқали белгилайлик. Системанинг шу ҳолатда *яшаш вақтини*, яъни унинг вақт бирлигидаги w емирилиш эҳтимолига тесқари бўлган катталиكنи τ орқали белгилаймиз:

$$\tau = \frac{1}{w}. \quad (38. 1)$$

У ҳолда худди шу усул ёрдамида қуйидагини топамиз:

$$|E_0 - E - \epsilon| \sim \frac{\hbar}{\tau},$$

бунда E, ϵ — системанинг емирилишидан ҳосил бўлган иккала қисмнинг энергиялари. Лекин $E \pm \epsilon$ йиғинди бўйича системанинг емирилишдан олдинги энергияси ҳақида мулоҳаза юритиш мумкин. Шунинг учун топилган муносабат емирилишга қодир бўлган система энергиясини фақат $\frac{\hbar}{\tau}$ гача аниқлик билан топиш мумкинлигини кўрсатади.

¹ (37, 5) ифода ва энергия учун ноаниқлик муносабатининг физикавий маъноси Бор томонидан очилган (1928).

Емирилишга қодир бўлган система энергияси, қатъий айтганда, дискрет спектрга эга эмас. Емирилиш вақтида ундан учиб чиқадиган зарра чексизликка кетади; шу маънода система ҳаракати инфинитдир. Шунинг учун ҳам унинг энергия спектри узлуксиз бўлади.

Лекин баъзан системанинг емирилиш эҳтимоли жуда кичик бўлиши мумкин (бунга энг содда мисол сифатида етарлича баланд ва кенг потенциал тўсиқ билан ўралган заррани олиш мумкин). Емирилиш эҳтимоли кичик бўлган бундай система учун *квазистационар* ҳолатлар тушунчасини киритиш мумкин. Бундай ҳолатда зарра „система ичида“ узоқ вақт ҳаракат қилади ва анча вақт ўтгандан кейингина ундан чиқиб кетади. Бу ҳолатларнинг энергия спектри *квазидискретдир*; бу спектр ёйилган сатҳлар қаторидан иборат бўлиб, уларнинг кенгликлари яшаш вақтлари орқали аниқланади. Сатҳ кенглигининг миқдорий характеристикаси сифатида

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau} = \hbar\omega \quad (38. 2)$$

катталикни олиш мумкин. Квазидискрет сатҳларнинг кенглиги улар орасидаги масофаларга нисбатан кичикдир.

Квазистационар ҳолатларни ўрганишда қуйидаги формал методни қўллаш мумкин. Ҳозирга қадар биз Шредингер тенгламасини ечишда тўлқин функциянинг чексизликда чекли бўлишини чегаравий шарт қилиб олган эдик. Бунинг ўрнига энди чексизликда тарқалувчи сферик тўлқинни ($\psi \sim e^{ikr}/r$) берадиган ечимни қидирамиз; бу емирилиш вақтида системадан учиб чиқадиган заррачага мос келади. Келтирилган бу чегаравий шарт комплекс бўлганидан, энергиянинг хос қийматлари ҳақиқий сонлар бўлади деб айтиш мумкин эмас. Аксинча, Шредингер тенгламасини ечиш натижасида биз энди энергия учун қуйидаги кўринишда ёзиладиган комплекс қийматлар тўпламини оламиз:

$$E = E_0 - \frac{i\Gamma}{2}, \quad (38. 3)$$

бунда E_0 ва Γ — иккита мусбат сон.

Энергия комплекс қийматларининг физикавий маъноси нимада эканини кўриш қийин эмас. Квазистацио-

нар ҳолатлар тўлқин функцияларининг вақтга боғлиқ кўпайтувчиси

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t} e^{\frac{i}{\hbar}Et}$$

кўринишга эга. Шунинг учун тўлқин функция модули квадратлари орқали аниқланадиган ҳамма эҳтимоллар вақт ўтиши билан $e^{-\Gamma t/\hbar}$ қонуни бўйича камаёди. Хусусан, зарранинг „система ичида“ қолиш эҳтимоли ҳам шу қонун бўйича камаёди.

Квазистационар ҳолатларнинг бир қадар кенг категорияси билан биз *таркибий ядро*¹⁾ ҳосил бўладиган босқич орқали ўтувчи ва энергияси унча катта бўлмаган ядро реакциялари соҳасида танишамиз. Бу ҳолда юз берадиган процессларнинг кўргазмали физикавий манзараси шундан иборатки, ядрога тушган зарра (масалан, нейтрон) ядродаги нуклонлар билан ўзаро таъсирлашиб, уларга „қўшилиб кетади“ ва мураккаб система ҳосил қилади; бу системада зарра олиб кирган энергия кўп сонли нуклонлар ўртасида тақсимланади. Бундай системанинг квазистационар ҳолатларда узоқ вақт яшашлари (ядродаги нуклонлар ҳаракати „даврларига“ нисбатан) сабаб, ташқаридан олиб кирилган энергиянинг кўп зарралар ўртасида тақсимланганича узоқ вақт қолишидадир. Демак, уларнинг ҳар бири эга бўлган энергия бошқа зарраларнинг тортишиш кучларини енгиб, ядродан чиқиб кетишига етмайди. Фақат жуда кам ҳоллардагина битта заррада етарлича катта энергия йиғилиб қолади ва бу ҳол таркибий ядронинг емирилишига сабаб бўлади.

¹ Таркибий ядро ҳақидаги тасаввур 1936 йилда *Нильс Бор* томонидан илгари сурилган.

V боб

СПИН

39- §. Спин

Бир бутунлигича тинч турган ҳамда муайян ички ҳолатга эга бўлган мураккаб заррани (масалан, атом ядросини) олайлик. Муайян ички энергиядан ташқари, у ядро ичидаги зарралар ҳаракати билан боғлиқ бўлган маълум катталиқдаги L моментга ҳам эгадир. Бизга маълумки, берилган L да момент фазода $2L + 1$ та ориентацияга эга бўлиши мумкин.

18 § да кўрсатилганидек, квант механикасида момент тушунчасининг муҳим аспекти шундан иборатки, у система ҳолатларининг фазодаги бурилишларга нисбатан симметрия хоссаларини аниқлайди. Чунончи, координата системаларини бурганда M момент проекциясининг турли қийматларига қарашли $2L + 1$ та ψ_{LM} тўлқин функция бир-бирлари орқали маълум қонун бўйича алмашинади.

Бундай таърифланганда моментнинг келиб чиқиши ҳақидаги масала муҳим бўлмай қолади ва биз табиий ҳолда „хусусий“ момент ҳақидаги тасаввурга келамиз. Бу хусусий момент зарранинг „мураккаб“ ёки „элементар“ бўлишидан қатъи назар, унга хос бўлган катталиқдир.

Шундай қилиб, квант механикасида элементар зарра ўзининг фазодаги ҳаракатига боғлиқ бўлмаган маълум бир „хусусий“ моментга эгадир. Элементар зарраларнинг бу хоссаси специфик квант характерига (яъни $\hbar \rightarrow 0$ чегарада йўқолувчи) эга, шунинг учун унга принцип жиҳатдан классик маъно бериб бўлмайди¹.

¹ Хусусан, элементар зарра „хусусий“ моментини, унинг „ўз ўқи атрофида айланиши“ натижаси деб тасаввур қилиш умуман ўринсиз бўлган бўлур эди.

Зарранинг хусусий моментини, унинг фазодаги ҳаракатига боғлиқ бўлган *орбитал моментидан* фарқли ҳолда, зарра *спини* деб аталади. Бу тушунча элементар зарра билан бир қаторда баъзи ҳодисалар доирасида ўзини элементар зарра каби тутадиган мураккаб зарралар учун (масалан, атом ядроси учун) ҳам ўринлидир. Зарра спинини (орбитал момент каби $\hbar$ бирликларида ўлчанувчи) s орқали белгилаймиз¹.

Спинга эга бўлган зарра ҳолатини тўлқин функция ёрдамида тавсифлаш бу зарранинг фақат фазодаги ҳар хил вазиятлари эҳтимолини эмас, балки унинг спинининг мумкин бўлган ҳар хил ориентациялари эҳтимолини ҳам аниқлаши лозим. Бошқача қилиб айтганда, тўлқин функция фақат узлуксиз учта ўзгарувчи (зарра координаталари) га боғлиқ бўлибгина қолмай, балки яна битта дискрет *спин ўзгарувчига* ҳам боғлиқ бўлиши лозим. Бу ўзгарувчи зарра спинининг фазода танланган йўналиш (z ўқ) га проекцияларини кўрсатади ҳамда чекли сондаги дискрет қийматлар қабул қилади (бундан сўнг уни σ ҳарфи билан белгилаймиз).

Худди шу айтилган функция $\psi(x, y, z; \sigma)$ бўлсин. Ҳақиқатда эса бу функция σ нинг ҳар хил қийматларига мос келувчи бир нечта турли координата функциялари тўпламидан иборатдир. Бу функцияларни биз тўлқин функциянинг *спинли компонентлари* деб юритамиз. Бунда

$$\int |\psi(x, y, z; \sigma)|^2 dV$$

интеграл зарранинг аниқ σ қийматга эга бўлиш эҳтимолини беради. Зарранинг ихтиёрий σ қийматга эга бўлган ҳолда dV ҳажм элементида ётиш эҳтимоли эса

$$\sum_{\sigma} |\psi(x, y, z; \sigma)|^2$$

бўлади.

Спиннинг квантомеханикавий операторини тўлқин функцияга қўлланганда у фақат σ спин ўзгарувчигагина таъсир қилади. Бошқача айтганда, у тўлқин функция компонентларини бирор усулда бирини бошқаси орқали алмаштиради. Бу операторнинг кўриниши қуйида аниқланади. Лекин шу нарса олдиндан маълумки,

¹ Электронда хусусий моментнинг борлиги ҳақидаги физикавий ғоя 1925 йилда Г. Юленбек ва С. Гаудсмит томонидан ўртага ташланган. Спин тушунчаси квант механикасига 1927 йили Паули томонидан киритилган.

спиннинг учта компоненти операторлари $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ лар ҳам орбитал момент операторлари бўйсунган коммутация қоидаларига бўйсунди. Квант механикасида момент операторларининг умумий таърифи бу операторларнинг чексиз кичик бурилиш операторлари билан боғлиқлигидан келиб чиқади. 14- § да бу операторларнинг ифодаларини келтириб чиқаришда ва сўнгра уларнинг коммутация қоидаларини чиқаришда биз уларни фақат координата функциясигагина таъсир этади деб фараз қилган эдик. Лекин ҳақиқатда эса бу қоидалар уларнинг қайси математикавий объектга таъсир қилишидан қатъи назар, умуман буриш операциясининг хоссаларини ифодалайди ва шу сабабли, универсал характерга эга.

Коммутация қоидаларини билиш спин катталиги ва компонентининг мумкин бўлган қийматларини аниқлаш имкониятини беради. Дарҳақиқат, 15- § даги (15. 6—8) формулаларни келтириб чиқаришда фақат шу қоидаларга асосланилган эди. Шунинг учун бу ерда ҳам биз уларни қўллаймиз, фақат бу формулалардаги L ўрнига энди s ни қўйиш лозим. (15. 6) формулалардан спин z - компонентининг хос қийматлари бир-биридан бирга фарқланувчи сонлар кетма-кетлигини ҳосил қилиши келиб чиқади. Лекин энди биз бу қийматлар ҳам L_z орбитал момент проекцияси каби бутун сонлар қабул қилади деб айта олмаймиз (15- § бошида келтирилган мулоҳазаларни бу ерда қўллаб бўлмайди, чунки улар фақат координата функциясига таъсир қиладиган $\hat{L}_z$ орбитал момент операторининг махсус ифодасига асослангандир).

Булардан ташқари, s_z хос қийматлар кетма-кетлиги пастдан ва юқоридан катталиклари бўйича бир хил, лекин ишоралари бўйича қарама-қарши бўлган қийматлар билан чегаралангандир; бу қийматларни $\pm s$ орқали белгилаймиз. s_z қийматларнинг энг каттаси билан энг кичиги орасидаги $2s$ фарқ бутун сон ёки ноль бўлиши лозим. Бинобарин, s сони фақат $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ қийматларинигина қабул қилиши мумкин.

Шундай қилиб, спин квадратининг хос қийматлари

$$s^2 = s(s + 1) \quad (39. 1)$$

га тенг экан; бунда s ёки бутун сон (нолни ҳам ўз ичига олган), ёки ярим бутун сон бўлиши мумкин.

s нинг муайян қийматларида спин проекцияси $s_z = \sigma = -s, -s + 1, \dots, s$ лардан иборат $2s + 1$ та қиймат қабул қилади. s спинли зарранинг тўлқин функцияси ҳам, юқорида айтилганга кўра, шунча компонентга эга бўлади¹.

Кўпчилик элементар зарралар (жумладан, электронлар, протонлар, нейтронлар, μ - мезонлар) нинг спини $\frac{1}{2}$ га тенг. Бошқа спинга эга бўлган элементар зарралар ҳам мавжуд (масалан, π - мезонлар ва K - мезонлар 0 спинга эга).

Зарранинг тўла моменти (уни j орқали белгилаймиз) l орбитал момент ва s спиннинг йиғиндисидан иборат. Уларнинг операторлари ҳар хил ўзгарувчилар функцияларига таъсир қилади ва ўзаро коммутатив бўлади, албатта.

Тўла момент

$$j = l + s \quad (39. 2)$$

нинг хос қийматлари, иккита ҳар хил зарра орбитал моментлари йиғиндиси каби, „векторли модель“ қондасига асосланиб топилади (17- §). Чунончи, l ва s нинг берилган қийматларида тўла момент $j = l + s, l + s - 1, \dots, |l - s|$ қийматларга эга бўлиши мумкин. Масалан, l орбитал моменти нолдан фарқли бўлган электрон учун (спини $\frac{1}{2}$) тўла момент $j = l \pm \frac{1}{2}$ бўлиши мумкин; $l = 0$ да эса j тўла момент фақат битта қийматга эга бўлади, яъни $j = \frac{1}{2}$.

Зарралар системасининг J тўла момент оператори ҳар бир зарра моменти операторлари j нинг йиғиндиси га тенг бўлиб, унинг хос қийматлари ҳам яна шу векторли модель қоидаларидан аниқланади. J моментни $J = L + S$ йиғинди кўринишида тасвирлаш мумкин, бунда S — натижавий спин, L — натижавий орбитал момент.

¹ Ҳар бир турдаги зарра учун s маълум сон бўлганидан классик механикага ўтиш чегарасида ($\hbar \rightarrow 0$) $\hbar s$ спин-момент нолга айланади. Орбитал момент учун бу мулоҳаза ўринли эмас, чунки l ихтиёрий қиймат қабул қилади. Бу ҳолда классик механикага ўтиш бир вақтнинг ўзида $\hbar$ нинг нолга, l нинг эса чексизга интилишини талаб қилади, шу сабабли, $\hbar l$ кўпайтма чекли бўлиб қолади.

Коммутация қоидалари билан бир қаторда, момент компонентларининг матрица элементлари учун ёзилган (15. 11) формулалар ҳам универсал характерга эга (яъни исталган момент учун ўринли). Ҳар хил физикавий катталикларнинг матрица элементлари учун 18- § да келтирилган момент бўйича танлаш қоидалари ҳам (белгилари тегишлича ўзгартирилган) бу ҳолда ўз кучини сақлайди.

40- §. Спин оператори

Ушбу ва 41, 42- § ларда биз тўлқин функциянинг координатага боғлиқлигини эътиборга олмаймиз. Масалан, $\psi(\sigma)$ тўлқин функциянинг координаталар системасини бурган вақтдаги ўзгариши ҳақида гапирар эканмиз, заррани координата бошида жойлашган деб қараш мумкин; демак, унинг координатаси бундай бурилишда ўзгаришсиз қолади ва олинган натижалар ψ функциянинг фақат σ спин ўзгарувчига боғлиқ бўлган ўзгаришлари учун характерли бўлади.

σ ўзгарувчи одатдаги ўзгарувчилар (координаталар) дан ўзининг дискретлиги билан фарқ қилади. Дискрет ўзгарувчили функцияга таъсир қиладиган чизиқли операторнинг энг умумий кўриниши қуйидагича:

$$f\psi(\sigma) = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'} \psi(\sigma') \quad (40. 1)$$

бунда $f_{\sigma\sigma'}$ — ўзгармас катталиклар.

Бу катталиклар одатдаги (11. 6) қоида ёрдамида $\hat{s}_z$ операторнинг хос функциялари бўйича аниқланган $\hat{f}$ операторнинг матрица элементларига мос келишини кўриш осон. (11. 6) таърифдаги координата бўйича интеграллаш бу ерда дискрет ўзгарувчи бўйича йиғиндига алмаштирилади. Демак, матрица элементининг таърифи

$$f_{\sigma_1\sigma_2} = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma_1}^*(\sigma) [\hat{f}\psi_{\sigma_2}(\sigma)] \quad (40. 2)$$

кўринишга келади. Бунда $\psi_{\sigma_1}(\sigma)$ ва $\psi_{\sigma_2}(\sigma)$ оператор $\hat{s}_z$ нинг $s_z = \sigma_1$ ва $s_z = \sigma_2$ хос қийматларга тегишли хос функциялари; ҳар бир шундай функция зарранинг

аниқ s_z қийматга эга бўлган ҳолатини тавсифлайди, яъни тўлқин функция компонентларидан фақат биттаси нолдан фарқли бўлади¹:

$$\psi_{\sigma_1}(\sigma) = \delta_{\sigma, \sigma_1}, \quad \psi_{\sigma_2}(\sigma) = \delta_{\sigma, \sigma_2}. \quad (40. 3)$$

(40. 1) га биноан

$$\hat{f}_{\psi_{\sigma_1}}(\sigma) = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma_1}(\sigma') = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'} \delta_{\sigma_1, \sigma'} = f_{\sigma\sigma_1}$$

га эга бўламиз; бу ифода $\psi_{\sigma_1}(\sigma)$ билан бирликда (40. 2) га қўйилса, у айнан қаноатланади ва бу билан юқоридаги фаразнинг тўғри эканлиги исботланади.

Шундай қилиб, s спинли зарра тўлқин функциясига таъсир қилувчи операторни $2s + 1$ та сатрли матрица кўринишида тасвирлаш мумкин. Хусусан, спин операторининг ўзи учун

$$\hat{s}_x \psi(\sigma) = \sum_{\sigma'} (s_x)_{\sigma\sigma'} \psi(\sigma'), \dots \quad (40. 4)$$

ифодага эга бўламиз.

Юқорида айтилганларга биноан (39- § охирида) $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ матрицалар 15- § да L_x , L_y , L_z катталиклар учун олинган матрицалар билан бир хил бўлиб, бунда фақат (15. 11) формулалардаги L ва M ни мос ҳолда s ва σ га алмаштириш kifоядир. Шу билан биз спин операторини аниқлаган бўламиз.

Спин $\frac{1}{2}$ га тенг бўлган муҳим ҳолда ($s = \frac{1}{2}$, $\sigma = \pm \frac{1}{2}$) бу матрицалар икки сатрли бўлиб, уларни

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \sigma_x, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \sigma_y, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \sigma_z \quad (40. 5)$$

¹ Аниқроқ қилиб,

$$\psi_{\sigma_1}(x, y, z; \sigma) = \psi(x, y, z) \delta_{\sigma, \sigma_1}, \dots$$

кўринишда ёзиш керак эди; (40. 3) да эса юқорида айтилганларга кўра, муҳим бўлмаган координатали кўпайтувчилар тушириб қолдирилган.

Шуни яна бир марта таъкидлаб ўтамизки, σ мустақил ўзгарувчинини берилган s_z хос қиймат (σ_1 ёки σ_2) дан фарқлаш зарур!

кўринишда ёзилади. Бунда¹:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (40.6)$$

(40. 6) матрицалар *Паули матрицалари* деб аталади. s_z матрицанинг диагонал матрица эканини таъкидлаймиз. Чунки у $\hat{s}_z$ оператор ўзининг хос функциялари бўйича аниқланган матрицадир.

41- §. Спинорлар

Тўлқин функцияларнинг „спин“ хоссаларини батафсил ўрганишга ўтамыз.

Спини 0 бўлган зарранинг тўлқин функцияси координата системаси бурилишларида узгармайдиган битта компонентга эга, яъни у скалярдир.

Нолдан фарqli спинга эга бўлган зарраларнинг тўлқин функциялари учун энг аввал уларнинг координаталар системасини z ўқи атрофида буришдаги табиатини кўрсатамиз. z ўқи атрофида $\delta\varphi$ бурчакка буришдаги чексиз кичик буриш оператори момент оператори (ушбу ҳолда спин оператори) ёрдамида $1 + i\delta\varphi \cdot \hat{s}_z$ кўринишда ифодаланади. Шу сабабли, буриш натижасида $\psi(\sigma)$ функция $\psi(\sigma) + \delta\psi(\sigma)$ га ўтади, бунда

$$\delta\psi(\sigma) = i\delta\varphi \cdot \hat{s}_z \psi(\sigma).$$

Лекин $\hat{s}_z$ диагонал матрица бўлиб, унинг элементлари $\hat{s}_z = \sigma$ хос қийматларга мос келади. Шунинг учун $\hat{s}_z \psi(\sigma) = \sigma\psi(\sigma)$, бундан:

$$\delta\psi(\sigma) = i\sigma\psi(\sigma) \cdot \delta\varphi.$$

Бу тенгликни $d\psi/d\varphi = i\sigma\psi$ дифференциал тенглама кўринишида ёзиб олиб, интегралласак $\psi(\sigma)$ функциянинг

¹ Матрицани (40. 6) жадвал кўринишида ёзганда унинг сатр ва устунлари σ нинг қийматлари бўйича номерланади. Бунда сатр номери матрица элементининг биринчи индексига, устун номери эса унинг иккинчи индексига мос келади. Ушбу ҳолда бу номерлар: $\frac{1}{2}$ ва $-\frac{1}{2}$. Операторнинг (40. 1) қоидага асосланган таъсири, матрицанинг σ - сатрини тўлқин функциянинг „устун“ шаклида жойлаштирилган $\psi = \begin{pmatrix} \psi_{(1/2)} \\ \psi_{(-1/2)} \end{pmatrix}$ компонентларига кўпайтиришни англатади.

исталган чекли φ бурчакка бурилгандаги қиймати ҳосил бўлади; бу қийматни функция устига қўйилган штрих орқали белгилаб,

$$\psi(\sigma)' = \psi(\sigma) e^{i\sigma} \quad (41. 1)$$

ифодани оламиз.

$\varphi = 2\pi$ бўлган хусусий ҳолда $\psi(\sigma)$ нинг ҳамма компонентлари бир хил

$$e^{2\pi i \sigma} = (-1)^{2\sigma} = (-1)^{2s}$$

кўпайтувчига кўпайтирилади (равшанки, $2s$ сони доимо $2s$ сони эга бўлган жуфтликка эгадир). Шундай қилиб, координата системасини ўқ атрофида тўла бурганда бутун спинли зарранинг тўлқин функцияси ўзининг дастлабки қийматига қайтиб келади, ярим бутун спинли зарранинг тўлқин функцияси эса ўз ишорасини ўзгартиради.

Спини $\frac{1}{2}$ бўлган зарранинг (масалан, электроннинг) тўлқин функцияси $\psi\left(\frac{1}{2}\right)$ ва $\psi\left(-\frac{1}{2}\right)$ га тенг бўлган иккита компонентга эга. Бундан кейинги умумлаштиришлар осон бўлсин учун, бу компонентларни 1 ва 2 қийматлар қабул қиладиган индекслар орқали белгилаймиз:

$$\psi^{(1)} = \psi\left(\frac{1}{2}\right), \quad \psi^{(2)} = \psi\left(-\frac{1}{2}\right). \quad (41. 2)$$

Координаталар системасининг ихтиёрий бурилишида ψ^1 ва ψ^2 лар бир-бири орқали алмашинади, яъни улар устида

$$\psi^{1'} = \alpha\psi^1 + \beta\psi^2, \quad \psi^{2'} = \gamma\psi^1 + \delta\psi^2 \quad (41. 3)$$

чизиқли алмаштириш бажарилади. Бу ифодадаги α, β, γ ва δ лар, умуман айтганда, комплекс сонлар бўлиб, улар бурилиш бурчагининг функцияларидир. Улар бир-бири билан қуйида чиқариладиган маълум муносабатлар орқали боғланган.

Иккита электрон (нисбий ҳаракат орбитал моменти нолга тенг бўлган) дан иборат системани қарайлик. Бу системанинг йиғинди спини $S = 0$ ёки $S = 1$ бўлиши мумкин. Биринчи ҳолда система бир бутунлигича ўзини ноль спинли заррадек тутади, демак, унинг тўлқин функцияси скаляр бўлиши керак. Иккинчи томондан, агар зарралар ўзаро таъсирлашмайди деб қаралса, у ҳолда системанинг тўлқин функцияси ҳар бир айрим

зарра тўлқин функцияларининг кўпайтмаси орқали ифодаланиши керак (бу функцияларни мос равишда ψ ва φ орқали белгилаймиз). Бу функция ψ ва φ компонентлардан 1 ва 2 индексларга нисбатан антисимметрик бўлган

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^1 \varphi^2 - \psi^2 \varphi^1) \quad (41. 4)$$

бичизиқли ифода шаклида тузилиши лозимлигини кўриш осон. Ҳақиқатан ҳам, (41. 3) ёрдамида бажарилган оддий ҳисоблаш

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi^{1'} \psi^{2'} - \psi^{2'} \varphi^{1'}) = (\alpha\delta - \beta\gamma) \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi^1 \varphi^2 - \psi^2 \varphi^1)$$

га олиб келади, яъни (41, 4) катталик координаталар системаси бурилишида ўз-ўзи орқали алмашинади. Бу унинг скаляр катталик эканини билдиради; бунда

$$\alpha\delta - \alpha\gamma = 1 \quad (41. 5)$$

бўлиши керак. Мана шу ифода қидирилаётган муносабатлардан бирidir.

Равшанки, фазонинг муайян нуқтасида электроннинг топилиш эҳтимолини аниқловчи

$$|\psi^1|^2 + |\psi^2|^2 = \psi^1 \psi^{1*} + \psi^2 \psi^{2*}$$

ифода ҳам скаляр бўлиши керак. Бу ифодани (41. 4) скаляр билан солиштириб, ψ^1 , ψ^2 га комплекс қўшма бўлган ψ^{1*} ва ψ^{2*} тўлқин функциялар мос ҳолда ψ^2 ва $-\psi^1$ функциялар каби алмашиниши кераклигини топамиз, яъни

$$\psi^{1*'} = \delta \psi^{1*} - \gamma \psi^{2*}, \quad \psi^{2*'} = -\beta \psi^{1*} + \alpha \psi^{2*}$$

бўлиши керак. Иккинчи томондан, (41. 3) га комплекс қўшма бўлган

$$\psi^{1*'} = \alpha^* \psi^{1*} + \beta^* \psi^{2*}, \quad \psi^{2*'} = \gamma^* \psi^{1*} + \delta^* \psi^{2*}$$

тенгликларни ёзиб ва уларни олдинги тенгликлар билан солиштирсак, α , β , γ ва δ коэффициентларнинг бири-бири билан яна

$$\alpha = \delta^*, \quad \beta = -\gamma^* \quad (41. 6)$$

муносабатлар орқали боғланганлигини топамиз. (41. 5—6) ифодалар тўртта α , β , γ , δ комплекс катталикнинг ҳаммаси бўлиб фақат учтагина мустақил ҳақиқий параметрга, яъни сони уч ўлчовли координаталар сис-

темасининг бурилишини тўла аниқлайдиган бурчаклар сонига тенг бўлган параметрга боғлиқлигини кўрсатади.

Координаталар системаси бурилишларида (41. 3) қонун бўйича алмашинадиган икки компонентли $\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix}$ катталиқ 1- ранг спинор ёки содда қилиб спинор деб аталади. Шундай қилиб, $\frac{1}{2}$ спинли зарранинг тўлқин функцияси спинордан иборатдир.

Энди икки электрондан иборат системанинг спини $S=1$ бўлган ҳолатини кўриб чиқамиз. Системанинг тўлқин функцияси спиннинг учта $+1, 0, -1$ проекциясига мос ҳолда учта компонентга эга бўлиши керак. Бу функциялар ψ ва φ спинорлар компонентларининг кўпайтмаларидан ўз индексларига нисбатан симметрик қилиб тuzилади, яъни

$$\psi^1\varphi^1, \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi^1\varphi^2 + \psi^2\varphi^1), \psi^2\varphi^2 \quad (41. 7)$$

кўринишга эга бўлади. Ундан ташқари, бу компонентлар (41. 3) алмаштиришларда бир-бирлари орқали алмашинади. Система тўла спинининг σ проекцияси иккала электрон спинлари проекцияларининг йиғиндисига тенг. Шу сабабли, (41. 7) функцияларнинг σ нинг қийматларига мос келиши айрим электрон спин проекцияларини кўрсатувчи спинор индекслари 1 ва 2 нинг маъносига боғлиқдир: масалан, бу функциялардан биринчиси иккита 1 индексга эга ва шу туфайли $\sigma = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ проекцияга мос келади; иккинчиси биттадан 1 ва 2 индексга эга бўлганидан, $\sigma = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ проекцияга мос келади; ниҳоят, иккита 2 индексга эга бўлган учинчи функция учун $\sigma = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1$ га эга бўлаемиз.

Тўлқин функцияларнинг „спин“ хоссалари моҳият жиҳатдан уларнинг координаталар системаси бурилишларига нисбатан хоссаларини билдирганидан, бу хоссалар спини 1 га тенг бўлган битта зарра учун қандай бўлса, тўла спини 1 га тенг бўлган зарралар системаси учун ҳам шундай бўлиши ўз-ўзидан тушунарлидир. Шу сабабли, (41. 7) натижа анча кенг маънога эга: спини 2 га тенг бўлган ҳар қандай зарранинг тўлқин функцияси 2- ранг симметрик спинор бўлади. 2- ранг

спинор деб, умуман, координаталар системаси бурилишларида 1- ранг 2 та спинор мос компонентларининг кўпайтмалари каби алмашинадиган тўртта ψ^{11} , ψ^{22} , ψ^{12} , ψ^{21} катталиқ тўпламига айтилади (лекин, албатта, амалда шундай кўпайтмаларга келтириш шарт эмас)¹. 2- ранг симметрик спинорлар учун $\psi^{12} = \psi^{21}$ бўлганидан, у фақат учтагина мустақил компонентга эга бўлади². Уларнинг $\psi(\sigma)$ тўлқин функциядаги қайси компонентга мос келиши

$$\psi(1) = \psi^{11}, \psi(0) = \sqrt{2} \psi^{12}, \psi(-1) = \psi^{22} \quad (41.8)$$

формулалар орқали аниқланади.

Спини 1 га тенг бўлган зарранинг тўлқин функцияси уч ўлчовли ψ вектор сифатида ҳам берилиши мумкин. Бу уч ўлчовли векторнинг координаталар системаси бурилишларида бир-бирлари орқали алмашинадиган катталиқлар сонига тенг сондаги (учта) катталиқлар тўплами эканлигиданоқ равшандир. 2- ранг симметрик спинор компонентлари билан вектор компонентлари орасидаги ўзаро мослик

$$\psi^{11} = -(\psi_x - i\psi_y), \quad \psi^{21} = \psi_x + i\psi_y, \quad \psi^{12} = \psi_z \quad (41.9)$$

формулалар ёрдамида аниқланади. Бу ифодаларнинг маъноси шундан иборатки, тенгликларнинг чап томонида турган спинор компонентлари уларнинг ўнг томонидаги вектор компонентлари комбинациялари алмашинадиган қонун бўйича алмашинади. Бу мосликнинг тўғрилигига ишонч ҳосил қилиш учун z ўқи атрофидаги бурилишни кўриб ўтиш кифоядир³. Бунда спи-

¹ Иккинчи ранг тензор—вектор компонентлари кўпайтмалари каби алмашинадиган катталиқлар тўпламига ўхшаш.

² 2- ранг антисимметрик спинор эса фақат битта мустақил компонент ($\psi^{11} = \psi^{22} = 0, \psi^{12} = -\psi^{21}$) га эга. Бу компонентнинг хоссалари юқорида кўриб ўтилган (41. 4) катталиқнинг хоссаларига ўхшайди. Бошқача айтганда, 2- ранг антисимметрик спинор скалярга келиб қолади.

³ (41. 1) ва (41. 2) га биноан

$$\psi^{1'} = e^{i\varphi/2} \psi^1, \quad \psi^{2'} = e^{-i\varphi/2} \psi^2$$

га эга бўламиз, бунда $\psi^{1'}$, $\psi^{2'}$ — олдинги системага нисбатан z ўқи атрофида φ бурчакка бурилган янги координата системасидаги спинор компонентлари. Шунинг учун 2- ранг спинор компонентлари учун

$$\psi^{11'} = e^{i\varphi} \psi^{11}, \quad \psi^{12'} = \psi^{12}, \quad \psi^{22'} = e^{-i\varphi} \psi^{22}$$

ни топамиз. Иккала системада $\psi_x - i\psi_y$, ψ_z , $\psi_x + i\psi_y$ вектор компонентлари бир-бири билан худди шундай формулалар орқали боғланган.

норларнинг алмашиниш қонуни (41. 1) дан келиб чиқади. Иккинчи томондан, координата ўқларининг ихтиёрий бурилишларида вектор компонентларини алмаштиришнинг умумий маълум қонунини (41. 9) билан солиштириб, спинорларни алмаштиришнинг умумий қонунини (яъни (41. 3) алмаштириш коэффициентларининг бурилиш бурчакларига боғлиқлигини) толиш мумкин; биз бу ерда бу масалага тўхтаб ўтирмаймиз.

Ниҳоят, зарра ихтиёрий спинга эга бўлган умумий ҳолда тўлқин функция ҳамма ўз индекслари бўйича симметрик бўлган $2s$ - ранг спинорни беради. Бундай спинорнинг мустақил компонентлари сонни қутганимиздек, $2s + 1$ га тенг бўлишини кўриш осон. Ҳақиқатан ҳам, симметрик спинорда индексларнинг жойлашиш тартиби аҳамиятга эга бўлмаганидан, индекслари орасида фақат $2s$ та бир ва 0 та икки, $2s - 1$ та бир ва 1 та икки ва ҳоказо 0 та бир ва $2s$ та икки индексга эга бўлган компонентларгина ҳар хил бўлади¹.

42- §. Электронларнинг қутбланиши

Спини $\frac{1}{2}$ бўлган зарралар (электронлар) учун хос бўлган хусусият шундан иборатки, агар электроннинг ҳолати бирор тўлқин функция билан тавсифланса, у ҳолда фазода шундай бир йўналиш мавжуд бўлиб, спиннинг ана шу йўналишга проекцияси аниқ $s_z = \frac{1}{2}$ қийматга эга бўлади. Бу йўналишни электроннинг *қутбланиш* йўналиши деб аташ мумкин; шундай ҳолатдаги электронни эса *тўла қутбланган* деб гапирилади.

Ҳақиқатан ҳам, z ўқи йўналишини тегишлича танлаб, берилган $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ спинор — спини $\frac{1}{2}$ га тенг бўлган

¹ Математик тилда $1, 2, 3$ - ранг симметрик спинорлар айланиш группаларининг келтирилмайдиган тасаввурларини амалга оширади деб гапирилади (67-бетдаги изох билан таққосланг). Бу тасаввурларнинг ўлчамликлари $2s + 1$ га тенг бўлиб, $s = 0, \frac{1}{2}, 1$ бўлганда у $1, 2, 3$ қийматларнинг ҳаммасини қабул қилади. ψ_{LM} орбитал момент хос функциялари ёрдамида амалга ошириладиган тасаввурлар (бу ҳақда 18- § да гапирилган эди) $1, 3, 5, \dots$ ўлчамликларга мос келувчи хусусий ҳолдир.

зарранинг тўлқин функцияси — компонентларидан бит-тасини (масалан, ψ^2) ҳамма вақт нолга айлантириш мумкин. Бу фазодаги йўналишнинг иккита катталик билан аниқланишидан (масалан, сферик координаталар система-сидаги иккита бурчак билан), яъни ихтиёримиздаги пара-метрлар сони худди биз нолга айлантирмоқчи бўлган кат-таликлар (ψ^2 комплекснинг ҳақиқий ва мавҳум қисми) со-нига тенглигидан равшандир. $\psi^2 = 0$ тенглик эса $s_z = -\frac{1}{2}$ хос қийматнинг эҳтимоли нолга айланишини билдиради. $s > \frac{1}{2}$ спинли зарралар учун тўлқин функциянинг бит-тадан бошқа ҳамма компонентларини худди шу усул билан нолга айлантириш мумкин эмас, чунки уларнинг сони жуда каттадир.

z ўқи электроннинг қутбланиш йўналиши бўйлаб олинган бўлсин. Равшанки, спиннинг ўртача вектори $\overline{s}$ ҳам худди шу йўналишда жойлашиб, унинг қиймати $\frac{1}{2}$ га тенг. z ўқига нисбатан θ бурчакка оғишган бошқа z' йўналишдаги спин проекцияси қийматлари $s_z = \pm \frac{1}{2}$ нинг $\omega_{\pm}$ эҳтимолларини аниқлаймиз.

$\overline{s}$ ни z' ўқига проекциялаб, спиннинг бу ўқдаги ўр-тача қиймати $\overline{s}_{z'} = \frac{1}{2} \cos \theta$ эканини топамиз. Иккинчи томондан $\omega_{\pm}$ эҳтимолларнинг таърифига биноан

$$\overline{s}_{z'} = \frac{1}{2} (\omega_{+} - \omega_{-})$$

га эга бўламиз. Шунингдек, $\omega_{+} + \omega_{-} = 1$ эканини ҳи-собга олиб,

$$\omega_{+} = \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad \omega_{-} = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (42. 1)$$

ифодаларни топамиз.

Тўла қутбланиш билан бир қаторда электроннинг шундай ҳолатлари ҳам мавжудки, уларни қисман қутбланиш деб аташ мумкин. Бундай ҳолатлар (ўз спин хоссалари бўйича) тўлқин функциялар билан эмас, балки фақат зичлик матрицалари билангина тав-сифланади, яъни улар ўз спинлари бўйича аралаш ҳо-латлардир (шу хилдаги тушунчалар 7- § да зарралар-нинг орбитал ҳаракати ҳолатлари учун киритилган эди).

Биз аввал соф ҳолатдаги (тўла қутбланиш ҳолатидаги) спин ўртача вектори таърифини қараб, табиий ҳолда бундай ҳолатларни тавсифлаш усулига келамиз. Физикавий катталиклар операторларининг таърифига биноан, ψ тўлқин функцияли ҳолат учун

$$\bar{s} = \sum_{\alpha} \psi^{\alpha*} (\hat{s} \psi^{\alpha}) \quad (42. 2)$$

га эга бўламиз¹. Бунда σ спин ўзгарувчи бўйича йиғиндида спинор компонентлари бўйича йиғинди кўринишида тасвирланган. α, β ҳарфлари орқали биз бу параграфда 1 ва 2 қийматларни қабул қилувчи спинор индексларини белгилаймиз. Тўқ ёзилган σ ҳарфи билан

компонентлари $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ Паули матрицаларидан иборат бўлган „матрица векторини“ белгилаймиз. (40. 1) га

биноан $\hat{s} = \frac{1}{2} \sigma$ спин операторининг таъсири

$$\hat{s} \psi^{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\beta} \sigma^{\alpha\beta} \psi^{\beta}$$

алмаштиришни билдиради, бунда $\sigma^{\alpha\beta}$ — матрица элементлари. Шу сабабли, (42. 2) ифодани

$$\bar{s} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \rho^{\alpha\beta} \sigma^{\alpha\beta} \quad (42. 3)$$

кўринишда ёзиш мумкин, бунда:

$$\rho^{\beta\alpha} = \psi^{\beta} \psi^{\alpha*}. \quad (42. 4)$$

Равшанки,

$$(\rho^{\alpha\beta})^* = \rho^{\beta\alpha} \quad (42. 5)$$

бўлиб, тўлқин функцияларнинг нормалаштириш шартига биноан:

$$\rho^{11} + \rho^{22} = 1. \quad (42. 6)$$

Қисман қутбланишнинг умумий ҳолида электроннинг ҳолати (42. 5—6) ни қаноатлантирувчи ва (42. 3)

¹ Эслатиб ўтамизки, биз бу параграфда (40- ва 41- § лардаги каби) тўлқин функцияларнинг координатага боғланишини ҳисобга олмаймиз; шунинг учун (42. 2) да фазо бўйича интеграл ёзилмаган. Бунда ψ спинор

$$|\psi^1|^2 + |\psi^2|^2 = 1$$

шарт билан нормалаштирилган деб фараз қилинади.

га биноан $\bar{s}$ ни аниқлайдиган қутбловчи зичлик матрицаси

$$\rho^{z\beta} = \begin{pmatrix} \rho^{11} & \rho^{12} \\ \rho^{21} & \rho^{22} \end{pmatrix}$$

орқали тасвифланади; лекин соф ҳолатдагидан фарқли ҳолда бу матрица элементлари (42. 4) кўпайтмага ажралмайди. $\bar{s}$ векторнинг абсолют қиймати 0 дан $\frac{1}{2}$ гача қиймат қабул қилиши мумкин. $\frac{1}{2}$ қиймат тўла қутбланишга, 0 қиймат эса аксинча, қутбланмаган ҳолатга мос келади.

Тўртта $\rho^{z\beta}$ комплекс катталиқ саккизта ҳақиқий параметрга эквивалентдир, лекин бешта (42. 5—6) муносабатларга асосан улардан фақат учтаси мустақил бўла олади. $\bar{s}$ ҳақиқий вектор ҳам шунча катталиқ (компонент) лардан ташкил топади. Шунинг учун равшанки, бу иккита катталиқнинг бири иккинчиси орқали бир қийматли аниқланади. Бошқача қилиб, $\frac{1}{2}$ спинли зарранинг қутбланиш ҳолати спиннинг ўртача вектори орқали тўла аниқланади, дейиш мумкин.

Спин z - компонентининг ўртача қиймати:

$$\bar{s}_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sigma_z^{\alpha\beta} \rho^{\beta\alpha} = \frac{1}{2} (\rho^{11} - \rho^{22}).$$

Бундан кўришиб турибдики, ρ^{11} ва ρ^{22} лар $s_z = \frac{1}{2}$ ва $s_z = -\frac{1}{2}$ хос қийматларнинг эҳтимоллари экан. ρ^{12} қиймат эса s_x ва s_y ларнинг ўртача қийматлари билан боғлиқдир. (40. 6) даги σ_x ва σ_y матрицалардан фойдаланиб,

$$\rho^{12} = \bar{s}_x - i\bar{s}_y$$

эканига ишонч ҳосил қилиш мумкин.

43- §. Магнит майдондаги зарра

Спинли зарра маълум μ „хусусий“ магнит моментга ҳам эга. Бу моментга мос келган квантомеханикавий оператор $\hat{s}$ операторга пропорционал бўлиб,

$$\hat{\mu} = \mu \frac{\hat{s}}{s} \quad (43. 1)$$

кўринишда ёзилиши мумкин; бунда s — зарра спинининг катталиги, μ эса зарра учун характерли ўзгармас сон. Магнит моменти проекциясининг хос қийматлари $\mu_z = \frac{\mu s}{s}$ га тенг. Бундан кўриниб турибдики, μ коэффициент (одатда уни магнит моменти катталиги деб аталади) μ_z нинг мумкин бўлган энг катта қийматини ($s = s$ да эришадиган) беради.

$\frac{\mu}{\hbar s}$ нисбат зарра хусусий магнит моментининг унинг хусусий механикавий моментига нисбатини беради (агар ҳар иккаласи z ўқи бўйлаб йўналган бўлса). Маълумки, одатдаги (орбитал) момент учун бу нисбат $\frac{e}{2mc}$ га тенг (I, 66- § га қаранг). Зарранинг хусусий магнит моменти билан спини орасидаги пропорционаллик коэффициентини эса бошқача бўлар экан. Электрон учун $\mu = \frac{|e|\hbar}{mc}$ га, яъни одатдаги қийматидан икки марта катта экан (биз кейинчалик кўрамызки, бундай қиймат Диракнинг релятивистик тўлқин тенгламасидан бевосита назарий йўсинда келиб чиқади). Демак, электроннинг (спини $\frac{1}{2}$) хусусий магнит моменти $-\mu_B$ га тенг бўлиб, бунда

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ эрг/гаусс}. \quad (43. 2)$$

Бу катталикни *Бор магнетони* деб аталади.

Оғир зарраларнинг магнит моментини $\frac{e\hbar}{2m_p c}$ каби аниқланадиган ядро магнетонларида ўлчаш қабул қилинган; бунда m_p — протон массаси. Эксперимент протоннинг хусусий магнит моменти учун 2,79 ядро магнетонига тенг қийматни беради, бунда момент спин бўйлаб йўналган. Нейтроннинг магнит моменти эса спинга қарши йўналган бўлиб, 1,91 ядро магнетонига тенг.

(43. 1) тенгликнинг иккала томонида турган μ ва s катталиклар, кутилганидек, ўзларининг вектор характери жиҳатидан бир хил, яъни иккаласи ҳам аксиал вектордир (иккаласи ҳам иккита қутбий векторларнинг вектор кўпайтмаси орқали аниқланади). $\mathbf{d}$ — электрик диполь моменти ($\mathbf{d} = \text{const} \cdot \mathbf{s}$) учун бу хилдаги тенглик координата инверсиясига нисбатан симметрияга зид келган бўлур эди: инверсия натижасида

тенгликнинг иккала томонидаги нисбий ишора ўзгарган бўлур эди¹.

Ҳам ташқи электр майдонда, ҳам ташқи магнит майдонда ҳаракатланувчи зарра учун Шредингер тенгладаси қандай ёзилиши кераклигини аниқлаймиз.

Классик назарияда электромагнит майдондаги зарядли зарранинг Гамильтон функцияси

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi.$$

кўринишга эга, бунда Φ — майдоннинг скаляр потенциали, $\mathbf{A}$ эса вектор потенциали, $\mathbf{p}$ — зарранинг умумлашган импульси (I, 43- § га қаранг). Агар зарра спинга эга бўлмаса, у ҳолда квант механикасига ўтиш одатдаги тарзда бажарилади, яъни умумлашган импульсни $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ операторга алмаштириб,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi \quad (43.3)$$

гамильтонианни оламмиз².

Агар зарра спинга эга бўлса, у ҳолда бу операция етарли бўлмайди. Гап шундаки, зарранинг хусусий магнит моменти магнит майдон билан бевосита таъсирлашади. Классик Гамильтон функциясида бундай таъсир умуман бўлмайди, чунки спин соф квант эффекти бўлганидан, классик чегарага ўтишда йўқолади. Гамильтонианнинг тўғри ифодасини ҳосил қилиш учун (43.3) га μ магнит моментнинг $\hat{\mathbf{H}}$ майдондаги энергиясини берадиган — $\mu \hat{\mathbf{H}}$ қўшимча ҳад киритилиши

¹ Таъкидлаб ўтамизки, бу тенглик (шу билан бирга элементар зарраларда электр моментнинг мавжудлиги) шунингдек, вақтнинг ўгирилишига нисбатан симметрияга ҳам зид келган бўлар эди: вақт ишорасининг ўзгариши электр моментни ўзгартирмайди, лекин спин ишорасини ўзгартиради (бу масалан, ушбу катталикларнинг орбитал ҳаракатдаги таърифидан маълум: $\mathbf{d}$ нинг таърифига фақат координаталар, магнит момент таърифига эса зарра тезлиги ҳам киради).

² Биз бу ерда умумлашган импульсини одатдаги импульсини кўрсатувчи $\mathbf{p}$ ҳарфи билан белгилаймиз (I, 43- § даги $\mathbf{P}$ ўрнига). Биз умумлашган импульсга ҳам худди шу оператор мос келишини таъкидлаш мақсадида шундай қилдик.

лозим¹. Шундай қилиб, спинга эга бўлган ва магнит майдонда жойлашган зарранинг гамильтониани

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \hat{\mu} H \quad (43. 4)$$

кўринишга эга.

Бу операторнинг хос қийматлари учун ёзилган $\hat{H}\psi = E\psi$ тенглама магнит майдондаги ҳаракат ҳоли учун қидирилади. Шредингер тенгламаси бўлиб, ундаги ψ тўлқин функция $2s + 1$ - ранг спинордир.

44- §. Бир жинсли магнит майдондаги ҳаракат

Бир жинсли доимий магнит майдонда жойлашган электроннинг энергия сатҳларини аниқлаймиз.

z ўқини $\mathbf{H}$ майдон бўйича йўналтирамиз ва майдоннинг вектор потенциалини эса

$$A_x = Hy, \quad A_y = A_z = 0 \quad (44. 1)$$

кўринишда ёзиб оламиз ($\text{rot } \mathbf{A}$ нинг ҳақиқатан ҳам $\mathbf{H}$ га тенг бўлишини текшириш осон). У ҳолда электрон учун (заряди $e = -|e|$ ва магнит моменти $\mu = -\mu_B$ га тенг бўлган) (43. 4) гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \frac{eH}{mc} s_z \quad (44. 2)$$

кўринишга келади.

Энг аввал s_z операторнинг гамильтониан билан коммутатив эканини пайқаймиз (чунки гамильтониан спиннинг бошқа компонентлари операторларини ўз ичига олмайди). Бу эса спиннинг z проекцияси сақланишини билдиради. Шунинг учун уни $s_z = \sigma$ хос қиймат билан алмаштириш мумкин. Шундан сўнг тўлқин функциянинг спинга боғлиқлиги аҳамиятсиз бўлиб қолади ва Шредингер тенгламасидаги ψ ни одатдаги координата функцияси деб ҳисоблаш мумкин. Бу функция учун

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{eH}{c} y \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] \psi - \frac{eH}{mc} \psi = E\psi \quad (44. 3)$$

тенгламага эга бўламиз.

¹ Майдон катталиги ва гамильтониани бир хил ҳарф билан белгилаш бу ерда тушунмовчиликка олиб келмайди. Чунки гамильтонианда ҳарф устига қалпоқча қўйилган.

(44. 2) гамильтонианга x ва z координаталар ошкор кирмайди. Шу сабабли, $\hat{p}_x$ ва $\hat{p}_y$ операторлар (x ва z бўйича дифференциаллаш амали) билан ҳам коммутативдир, яъни умумлашган импульснинг x ва z компонентлари сақланади. Шунга мос ҳолда ψ ни

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} \chi(y) \quad (44. 4)$$

кўринишда қидирамиз.

p_x ва p_z хос қийматлар $-\infty$ дан $+\infty$ гача ҳамма қийматларни қабул қилади. $A_z = 0$ бўлганидан, умумлашган p_z импульснинг z - компоненти одатдаги $p_z = mv_z$ импульс компонентига мос келади. Шундай қилиб, электроннинг майдон йўналишидаги тезлиги ихтиёрий қиймат қабул қилиши мумкин; яъни майдон йўналишидаги ҳаракат „квантланмайди“ деб айтиш мумкин.

(44. 4) ни (44. 3) га қўйиб, χ функция учун

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \omega_H \sigma - \frac{p_z^2}{2m} - \frac{m}{2} \omega_H^2 (y - y_0)^2 \right] \chi = 0$$

тенгламани оламиз. Бунда $y_0 = -cp_x/eH$ ва

$$\omega_H = \frac{|e|\hbar H}{mc} \quad (44. 5)$$

белгилашлар киритилган. Бу тенглама ўз шакли жиҳатидан $y = y_0$ нуқта атрофида ω_H частота билан тебранувчи чизиқли осциллятор учун ёзилган (25. 6) Шредингер тенгламасига ўхшайди. Шу сабабли, биз бирданига осциллятор энергияси ролини ўйновчи $(E - \sigma\omega_H - p_z^2/2m)$ доимий $(n + \frac{1}{2}) \hbar\omega_H$ қиймат (n — бутун сонлар) қабул қилади деб хулоса чиқаришимиз мумкин.

Шундай қилиб, бир жинсли магнит майдондаги электроннинг энергия сатҳлари учун

$$E = \left(n + \frac{1}{2} + \sigma \right) \hbar\omega_H + \frac{p_z^2}{2m} \quad (44. 6)$$

ифодани ҳосил қиламиз. (44. 6) даги биринчи ҳад майдонга перпендикуляр текисликда юз бераётган ҳаракатга мос келувчи дискрет энергия қийматларини аниқлайди; уларни *Ландау сатҳлари* деб аталади¹.

¹ Бу масала биринчи марта металлдаги электронларнинг диамагнетизми масаласи муносабати билан *Ландау* томонидан кўрилган (1930).

VI боб

ЗАРРАЛАРНИНГ АЙНАН ЎХШАШЛИГИ

45- §. Бир хил зарраларни фарқ қилиб бўлмаслик принципи

Классик механикада бир хил зарралар (масалан, электронлар) физикавий хоссаларининг айнан ўхшашлигига қарамай, ўз „индивидуаллигини“ сақлаб қолади. Агар берилган физикавий система таркибига кирган зарраларни маълум бир вақт моментида „номерланган“ деб қараб, кейинги моментларда уларнинг ўз траекториялари бўйича ҳаракати кузатиб борилса, у ҳолда исталган вақт моментида бу зарраларни идентификация қилиш мумкин.

Квант механикасида аҳвол батамом бошқача. Ноаниқлик принципига биноан, электроннинг траекторияси ҳақидаги тушунча ўз маъносини батамом йўқотишини кўп марта таъкидлаб ўтилган. Агар электроннинг берилган вақт моментидаги вазияти аниқ бўлса, у ҳолда унинг координаталари кейинги вақт моментида умуман ҳеч қандай аниқ қийматга эга бўлмайди. Шу сабабли, электронлар вазиятини маълум вақт моментида қайд қилиб ва уларни номерлаб, биз кейинги вақт моментларида уларни идентификация қилишга бари-бир эриша олмаймиз; кейинги вақт моментида фазонинг бирор нуқтасида бирор электронни қайд қилиб, унинг аввалги электронлардан қайси бири эканини айтиб бера олмаймиз.

Шундай қилиб, квант механикасида бир хил зарраларнинг ҳар бирини алоҳида кузатиб бориш ва шунинг билан уларни бир-биридан фарқ қилишнинг принцип жиҳатдан ҳеч қандай имкони йўқ. Квант механикасида бир хил зарралар ўз „индивидуаллиги“ни тўла йўқотди деб айтиш мумкин. Зарраларнинг физикавий хоссалари жиҳатидан бир хиллиги бу ерда жуда чуқур

маънога эга бўлиб, шу туфайли зарраларни бир-биридан мутлақо фарқ қилиб бўлмайди.

Бир хил зарраларни *фарқ қилиб бўлмаслик принципи* деб аталадиган бу принцип бир хил зарралардан ташкил топган системаларнинг квант назариясида асосий роль ўйнайди. Мулоҳаза юритишни фақат иккита заррадан ташкил топган системани қарашдан бошлаймиз. Бу зарралар айнан ўхшаш бўлганидан, системадаги иккала зарра ўринларининг алмашишидан ҳосил бўлган ҳолатлар физикавий жиҳатдан тўла эквивалент бўлиши керак. Бу шундай ўрин алмаштириш натижасида системанинг тўлқин функцияси фақат аҳамиятсиз фазавий кўпайтувчигагина ўзгаради, демакдир. Системанинг тўлқин функциясини $\psi(\xi_1, \xi_2)$ деб олайлик. Бунда ξ_1, ξ_2 лар орқали шартли равишда ҳар бир зарранинг учта координатаси тўплами ҳамда спин проекцияси белгиланади. У ҳолда юқорида айтилганга кўра

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = e^{i\alpha} \psi(\xi_2, \xi_1)$$

бўлиши лозим; бунда α — бирор ҳақиқий ўзгармас сон. Зарралар ўрнини такроран алмаштириш натижасида системанинг дастлабки ҳолатига қайтиб келамиз, лекин ψ функция энди $e^{2i\alpha}$ га кўпайиб қолган бўлади. Бундан $e^{2i\alpha} = 1$ ёки $e^{i\alpha} = \pm 1$ ҳосил бўлади. Шундай қилиб, $\psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \psi(\xi_2, \xi_1)$.

Биз функция учун фақат иккита имконият бор, яъни у симметрик (зарраларнинг ўрни алмашиниши натижасида мутлақо ўзгармайдиган) ёки антисимметрик (ўрин алмашинишда ишорасини ўзгартирадиган) бўлиши мумкин деган хулосага келамиз. Равшанки, битта системанинг ҳамма ҳолатларини тавсифловчи функциялар бир хил симметрияга эга бўлмоғи лозим. Акс ҳолда, ҳар хил симметрия ҳолатлари суперпозициясидан иборат бўлган ҳолатнинг тўлқин функцияси симметрик ҳам, антисимметрик ҳам бўлмаган бўлур эди.

Бу натижа ҳар қандай ихтиёрий сондаги бир хил зарралардан ташкил топган система учун ҳам бевосита умумлаштирилиши мумкин. Ҳақиқатан ҳам, зарралар айнан ўхшашлигидан равшанки, агар уларнинг бирор жуфти, симметрик тўлқин функция билан тавсифланиш хоссасига эга бўлса, у ҳолда зарраларнинг ҳар қандай бошқа жуфти ҳам худди шундай хоссага эга бўлади. Шунинг учун айнан ўхшаш зарраларнинг тўлқин функцияси зарраларнинг исталган жуфтининг ўрнини

алмаштириганда (ва демак, зарраларнинг умуман ҳар қандай ўрин алмашинишида) ё мутлақо ўзгармаслиги, ё фақат ишорасини ўзгартириши лозим. Биринчи ҳолда тўлқин функция *симметрик*, иккинчи ҳолда эса *анти-симметрик* деб аталади.

Зарраларнинг симметрик ёки антисимметрик тўлқин функциялар билан тавсифланиш хоссаси уларнинг турига боғлиқ. Антисимметрик функциялар билан тавсифланадиган зарралар *Ферми—Дирак статистикасига* бўйсунди ва *фермионлар* деб аталади, симметрик функциялар билан тавсифланадиган зарралар эса *Бозе—Эйнштейн статистикасига* бўйсунди ва *бозонлар* деб аталади¹.

Биз кейинроқ (87- § да) кўрамизки, релятивистик квант механикаси қонунларидан зарралар бўйсунадиган статистика билан уларнинг спинлари орасидаги бир қийматли боғланиш келиб чиқади. Ярим бутун спинли зарралар фермионлар бўлади, бутун спинли зарралар эса бозонлардир.

Мураккаб зарраларнинг статистикаси уларнинг таркибига кирувчи элементар фермионлар сонининг жуфт ёки тоқлигига боғлиқ. Ҳақиқатан ҳам, иккита мураккаб зарранинг ўринларини ўзаро алмаштириш бир вақтнинг ўзида бир неча жуфт бир хил элементар зарраларнинг ўринларини ўзаро алмаштиришга тенг кучлидир. Бозонларнинг ўрнини ўзаро алмаштириш тўлқин функцияни умуман ўзгартирмайди, фермионларнинг ўрнини алмаштириш эса уларнинг ишорасини ўзгартиради. Шу сабабли, тоқ сондаги элементар фермионлардан ташкил топган мураккаб зарралар Ферми статистикасига, жуфт сондаги фермионлардан ташкил топган мураккаб зарралар эса Бозе статистикасига бўйсунди. Бу натижа, албатта, юқорида келтирилган умумий қоидага тўла мос келади: мураккаб зарра ўз таркибига кирувчи ярим бутун спинли зарралар сонининг

¹ Бу терминология мос ҳолда антисимметрик ёки симметрик тўлқин функцияли зарралардан ташкил топган идеал газни тавсифловчи статистикалар номи билан боғлиқ. Ҳақиқатда эса биз бу ерда ҳар хил статистикалар билангина эмас, балки аслида ҳар хил механикалар билан ҳам иш кўрамиз. Ферми статистикаси 1926 йилда *Энрико Ферми* томонидан электронлар учун таклиф қилинган, унинг квант механикаси билан боғланишини эса *Дирак* (1926) аниқлаган. Бозе статистикаси *Д. Бозе* томонидан ёруғлик квантлари учун таклиф қилинган ва *Эйнштейн* томонидан умумлаштирилган (1924).

тоқ ёки жуфтлигига қараб бутун ёки ярим бутун спинга эга бўлади.

Масалан, тоқ атом оғирликка эга бўлган атом ядролари (яъни тоқ сондаги протон ва нейтронлардан ташкил топган) Ферми статистикасига, жуфт атом оғирликка эга бўлган атом ядролари эса Бозе статистикасига бўйсунadi. Атомлар учун эса (улар ядро билан бир қаторда электронларга ҳам эгадир) статистика, равшанки, атом оғирлик ва атом номери йиғиндисининг жуфт ёки тоқлигидан аниқланади.

Ўзаро таъсир кучларини ҳисобга олмаса ҳам бўладиган N та бир хил зарралардан ташкил топган системани қараймиз. Ҳар бир зарра айрим ҳолда бўлиши мумкин бўлган ҳар хил стационар ҳолатларнинг тўлқин функциялари $\psi_1, \psi_2, \dots$ лар билан берилган бўлсин. Системанинг ҳолатини бир бутунлигича аниқлаш учун айрим зарралар жойлашган ҳолатлар номерларини бериш лозим. Қандай қилиб ψ_1, ψ_2 функциялардан системани бир бутунлигича тавсифловчи ψ функцияни тузиш мумкин деган савол туғилади.

Айрим зарралар жойлашган ҳолатлар номерини $p_1, p_2, \dots, p_N$ лар билан белгилайлик (бу номерлар орасида бир хиллари ҳам бўлиши мумкин). Бозонлар системаси учун $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ тўлқин функция

$$\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N) \quad (45. 1)$$

кўринишдаги кўпайтмалар йиғиндиси орқали ифодаланади (бунда кўпайтмалар сони ҳар хил $p_1, p_2, \dots$ индексларнинг мумкин бўлган барча ўрин алмаштиришлари сонига тенгдир). Равшанки, бундай йиғинди симметрия хоссаларига қўйилган ҳамма талабларни қаноатлантиради. Масалан, ҳар хил ҳолатларда ($p_1 \neq p_2$) ётган иккита заррадан иборат система учун:

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) + \psi_{p_1}(\xi_2) \psi_{p_2}(\xi_1)]. \quad (45. 2)$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ кўпайтувчи нормалаштириш мақсадида киритилган (ҳамма $\psi_1, \psi_2, \dots$ функциялар ўзаро ортогонал бўлиб, уларни нормалаштирилган деб фараз қилинади). Умумий ҳолда, зарралар сони ихтиёрий N та бўлган система учун нормалаштирилган тўлқин функция

$$\psi = \left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N) \quad (45. 3)$$

бўлади. Бу ерда йиғинди ҳар хил $p_1, p_2, \dots, p_N$ индексларнинг мумкин бўлган ҳамма ўрин алмаштиришлари бўйича олинади, N_i эса бу индекслардан қанчаси бир хил i қийматга эга эканлигини кўрсатади (бунда $\sum N_i = N$). $|\psi|^2$ ни $d\xi_1, d\xi_2, \dots, d\xi_N$ лар бўйича интеграллаганда йиғиндидаги ҳар бир ҳад модулининг квадрати қатнашган ҳадлардан бошқа ҳамма ҳадлар нолга айланиб кетади¹; (45. 3) йиғиндидаги ҳадларнинг умумий сони, равшанки,

$$\frac{N!}{N_1! N_2! \dots}$$

га тенг бўлганидан, ундан (45. 3) даги нормалаштириш коэффиценти ҳосил қилинади.

Фермионлар системаси учун ψ тўлқин функция (45. 1) кўпайтмаларнинг антисимметрик комбинациясидан иборат. Масалан, иккита заррали система учун

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) - \psi_{p_1}(\xi_2) \psi_{p_2}(\xi_1)] \quad (45. 4)$$

га эга бўламиз. N та заррали умумий ҳолда эса системанинг тўлқин функцияси

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (45. 5)$$

кўринишдаги детерминантдан иборат бўлади. Иккита зарранинг ўрин алмаштиришига бу ерда детерминантнинг иккита устунининг ўрнини алмаштириш мос келади. Натижада детерминант ўз ишорасини ўзгартиради.

(45. 5) дан муҳим натижа келиб чиқади. Агар $p_1, p_2, \dots$ номерлар орасида иккита бир хили бўлса, у ҳолда детерминантнинг иккита сатри бир хил бўлиб қолади ва бутун детерминант айнан нолга айланади. Бу детерминант фақат ҳамма $p_1, p_2, \dots$ номерлар ҳар хил бўлгандагина нолдан фарқли бўлади. Шундай қи-

¹ $d\xi$ бўйича интеграллаш деганда (бу ерда ва 46—47- § ларда) шартли равишда координаталар бўйича интеграллаш ва шу билан бирга σ бўйича йиғинди олиш тушунилади.

либ, бир хил фермионлар системасида бир вақтда иккита (ёки ундан кўп) зарраларнинг айнан битта ҳолатда ётиши мумкин эмас. Бу *Паули принципи* деб аталади. У 1925 йилда *Вольфганг Паули* томонидан кашф қилинган.

46- §. Алмашинувчи ўзаро таъсир

Шредингер тенгламасида зарра спинининг ҳисобга олинмаслиги тенглама ва ундан келиб чиқадиган барча хулосалар аҳамиятини заррача ҳам камайтирмайди. Гап шундаки, зарраларнинг ўзаро электрик таъсири уларнинг спинларига боғлиқ эмас¹. Бу математикавий жиҳатдан ўзаро электрик таъсирлашувчи (магнит майдон бўлмаганда) зарралар системасининг гамилътонига спин операторининг кирмаслигини билдиради. Шу сабабли, гамилътонианни тўлқин функцияга қўллаганда у спин ўзгарувчиларга ҳеч қандай таъсир кўрсатмайди. Ана шунинг учун ҳам Шредингер тенгламасини ҳақиқатда тўлқин функциянинг ҳар бир компоненти қаноатлантиради; бошқача қилиб айтганда, зарралар системасининг тўлқин функцияси

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots) = \chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots) \varphi(r_1, r_2, \dots) \quad (46. 1)$$

кўпайтма кўринишида ёзилиши мумкин. Бунда φ функция фақат зарралар координатасига, χ функция эса фақат зарра спинига боғлиқ; биринчи функцияни *координата ёки орбитал*, иккинчисини эса *спин* тўлқин функция деб аталади. Шредингер тенгламаси фақат φ координата функциясинигина аниқлайди, χ спин функцияни эса ихтиёрий қолдиради. Зарра спини бизни қизиқтирмайдиган ҳамма ҳолларда тўлқин функция сифатида фақат координата функциясини олиб, унга Шредингер тенгламасини қўллаш мумкин. Олдинги параграфларда биз худди шундай қилган эдик.

Лекин зарралар ўзаро электрик таъсирининг спинга боғлиқ бўлмаслигига қарамай, система энергияси билан унинг тўла спини ўртасида ўзига хос боғланиш мавжуд. Бу боғланиш пировард натижада бир хил зарраларни фарқ қилиб бўлмаслик принциpidан келиб чиқади.

¹ Бу фақат норелятивистик яқинлашишдагина тўғридир. Релятивистик эффектлар ҳисобга олинса, зарядли зарраларнинг ўзаро таъсири спинга боғлиқ бўлиб қолади.

Фақат иккита бир хил заррадан ташкил топган системани қараймиз. Шредингер тенгламасини ечиш натижасида ҳар бирига маълум симметрик ёки антисимметрик $\varphi(r_1, r_2)$ координата тўлқин функцияси мос келадиган бир қатор энергия сатҳларини топамиз. Ҳақиқатан ҳам, зарраларнинг айнан ўхшашлиги туфайли системанинг гамильтониани (у билан бирга Шредингер тенгламаси ҳам) зарраларнинг ўрин алмаштиришига нисбатан инвариантдир. Агар энергия сатҳлари аинмаган бўлса, у ҳолда r_1 ва r_2 координаталарнинг ўринини алмаштириш натижасида $\varphi(r_1, r_2)$ тўлқин функция фақат ўзгармас кўпайтувчига ўзгариши мумкин; яна бир марта зарралар ўрнини алмаштириб, бу кўпайтувчининг ± 1 га тенглигига ишонч ҳосил қиламиз¹.

Аввал спини ноль бўлган зарраларни кўрамиз. Бундай зарралар учун спин кўпайтувчи умуман мавжуд эмас ва зарранинг тўлқин функцияси симметрик бўлган $\varphi(r_1, r_2)$ координата функцияси (чунки ноль спинли зарра Бзе статистикасига бўйсунди) га келади. Шундай қилиб, Шредингер тенгламасини расман ечиш натижасида топилган энергия сатҳларининг ҳаммаси ҳам ҳақиқатда амалга оша бермайди. Булардан φ антисимметрик функцияларга мос келадиганлари қаралаётган система учун тақиқлангандир.

Иккита бир хил зарранинг ўрнини алмаштириш координаталар системасини (бу системанинг боши иккала заррани туташтирувчи тўғри чизиқнинг ўртасида олинган) инверсиялаш операциясига эквивалентдир. Иккинчи томондан, инверсия натижасида φ тўлқин функция $(-1)^l$ га кўпайиши лозим, бунда l — иккала зарра нисбий ҳаракатининг орбитал моменти (19- § га қаранг). Бу мулоҳазаларни юқорида айтилганлар билан солиштириб, ноль спинли иккита бир хил заррадан тузилган система фақат жуфт орбитал моментга эга бўлиши мумкин деган хулосага келамиз.

Энди $\frac{1}{2}$ спинли иккита заррадан (масалан, иккита электрондан) ташкил топган системани кўрайлик. У ҳолда системанинг тўла тўлқин функцияси (яъни $\varphi(r_1, r_2)$ функция билан $\chi(\sigma_1\sigma_2)$ спин функциянинг кўпайт-

¹ Айниш мавжуд бўлганда эса ҳамма вақт берилган сатҳга тегишли функцияларнинг шундай чизиқли комбинациясини таплаш мумкинки, улар ҳам шу шартни қаноатлантиради.

маси) иккала зарранинг ўрин алмаштиришига нисбатан албатта антисимметрик бўлиши керак. Шу сабабли, координата функцияси симметрик бўлганда, спин функция антисимметрик бўлиши керак ва аксинча. Спин функцияни спинор кўринишида, яъни ҳар бир индекси электронлардан биттасининг спинига мос келадиган иккинчи ранг $\chi^{\alpha\beta}$ спинор кўринишида ёзамиз. Иккала зарра спинлари бўйича симметрик бўлган функцияга ($\chi^{\alpha\beta} = \chi^{\beta\alpha}$) симметрик спинор, антисимметрик функцияга эса ($\chi^{\alpha\beta} = -\chi^{\beta\alpha}$) антисимметрик спинор мос келади. Лекин бизга маълумки, иккинчи ранг симметрик спинор тўла спини 1 га тенг бўлган системани, антисимметрик спинор эса скаляр бўлиб, тўла спини ноль бўлган системани тавсифлайди.

Шундай қилиб, биз қуйидаги натижага келамиз. Шредингер тенгламасининг $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ симметрик ечимларига мос келган энергия сатҳлари амалда фақат тўла спини ноль бўлган, яъни иккала электроннинг спинлари „антипараллел“ бўлиб, қўшилганда нолни берадиган система учунгина ўринли бўлади. Энергиянинг $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ антисимметрик функция билан боғлиқ бўлган қийматлари тўла спиннинг 1 га тенг бўлишини, яъни иккала электрон спинларининг ўзаро „параллел“ бўлишини тақазо қилади.

Бошқача қилиб айтганда, электронлар системаси энергиясининг мумкин бўлган қийматлари унинг тўла спинига боғлиқ экан. Мана шунга асосланиб, бундай боғланишга олиб келган ўзаро таъсирни ўзига хос таъсир дейиш мумкин. Бу ўзаро таъсир *алмашинувчи ўзаро таъсир* деб аталади. Бу соф квант эффекти бўлиб, классик механикага чегаравий ўтишда батамом йўқолади (спиннинг ўзи каби).

47- §. Иккиламчи квантланиш (Бозе статистикаси учун)

Катта сондаги бир хил зарралардан ташкил топган система назариясида *иккиламчи квантланиш* деб юритилувчи алоҳида метод кенг қўлланилади. Бу метод зарралари сонининг ўзи ўзгарувчи бўлган системалар билан иш кўрувчи релятивистик назарияда ай-

ниқса зарурдир¹. $\psi_1(\xi)$, $\psi_2(\xi)$... лар битта зарра стационар ҳолатларини тавсифловчи ортонормалаштирилган тўлқин функцияларнинг бирор тўла системаси бўлсин. Бундай функциялар сифатида одатда ясси тўлқинлар, яъни импульси (ва спин проекцияси) аниқ қийматга эга бўлган эркин зарра тўлқин функциялари танлаб олинади; бунда ҳолатлар спектрини дискрет спектрга келтириш учун зарранинг ҳаракати фазонинг жуда катта, лекин чекланган Ω соҳасида юз беради деб қаралади (27- § охирида тушунтирилганидек).

Эркин зарралар системасида ҳар бир зарранинг импульси ўз ҳолича алоҳида сақланади. Шу билан бирга ҳолатларни тўлдирувчи сонлар ҳам сақланади. N_1 , N_2 ... тўлдирувчи сонлар ψ_1 , ψ_2 ... ҳолатларнинг ҳар бирида қанча зарра жойлашганини кўрсатади. Ўзаро таъсирлашувчи зарралар системасида ҳар бир зарранинг импульси ўз ҳолича сақланмайди ва шу сабабли, тўлдирувчи сонлар ҳам сақланмайди. Бундай системалар учун фақат ундаги тўлдирувчи сонлар ҳар хил қийматларининг тақсимот эҳтимоли ҳақидагина гапириш мумкин. Шундай математикавий аппарат яратишни мақсад қилиб қўйايликки, унда мустақил ўзгарувчилар ролин зарраларнинг координатаси ва спин проекцияси эмас, балки тўлдирувчи сонлар бажарсин.

Бундай аппаратда система ҳолати „тўлдирувчи сонлар фазосидаги тўлқин функция“ билан тавсифланади. Бу функциянинг одатдаги $\Psi(\xi_1, \xi_2, \xi_N; t)$ координата-спин функциядан фарқли эканини таъкидлаш мақсадида уни $\Phi(N_1, N_2 \dots; t)$ билан белгилаймиз. $|\Phi|^2$ модуль квадрати $N_1, N_2 \dots$ тўлдирувчи сонлар ҳар хил қийматларининг эҳтимолини беради.

Мустақил ўзгарувчиларнинг бундай танланишига мос ҳолда ҳар хил физикавий катталикларнинг операторлари ҳам (шу жумладан система гамильнониани ҳам) уларнинг тўлдирувчи сонлар функцияларига таъсири тилида ифодаланиши лозим. Бундай ифодалашга операторларнинг одатдаги матрица тасаввурларини қўллаб эришиш мумкин. Бунда ўзаро таъсирлашмайдиган зарралар системаси стационар ҳолатларининг тўлқин

¹ Дирак иккиламчи квантланиш методини ривожлантириб, уни нурланиш назариясига қўллашда фотонларга татбиқ қилди (1927), кейин уни Вигнер ва Иордан (1928) фермионларга татбиқ қилди.

функциялари бўйича олинган операторларнинг матрица элементларини қараш лозим. Бу ҳолатларни тўлдирувчи сонларнинг аниқ қийматлари орқали тавсифлаш мумкин бўлганидан, операторларнинг бу ўзгарувчиларга таъсир қилиш характери ҳам ўз-ўзидан ойдинлашади.

Даставвал, Бозе статистикасига бўйсунадиган зарралардан ташкил топган системани кўриб чиқамиз.

$\hat{f}_a^{(1)}$ фақат битта заррага (a -) алоқадор бўлган, яъни фақат ξ_a ўзгарувчининг функциясига таъсир кўрсатадиган бирор катталиқнинг оператори бўлсин. Ҳамма зарралар бўйича симметрик бўлган ушбу

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_a \hat{f}_a^{(1)} \quad (47. 1)$$

операторни киритамиз (йиғинди ҳамма зарралар бўйича олинади) ва унинг (45. 3) тўлқин функцияларга нисбатан матрица элементларини аниқлаймиз.

Аввало шуни тушуниш осонки, бу матрица элементларидан фақат $N_1, N_2, \dots$ сонлар ўзгармай қоладиган ўтишларга мос келадиганлари (диагонал элементлар) ҳамда бу сонлардан бири биттага ошиб, иккинчиси эса биттага камайиб қоладиган ўтишларга мос келадиганларигина нолдан фарқли бўлади. Ҳақи-

қатан ҳам, ҳар бир $\hat{f}_a^{(1)}$ оператор $\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N)$ кўпайтманинг битта кўпайтувчисигагина таъсир қилганидан, операторнинг матрица элементи фақат битта зарра ҳолати ўзгарадиган ўтишлар учунгина нолдан фарқли бўлиши мумкин; бу эса бирор ҳолатда ётган зарраларнинг биттага камайганини, иккинчи ҳолатдаги зарраларнинг эса биттага ошганини билдиради. Бундай матрица элементларини ҳисоблаш жуда осон; ўқувчи бу ҳисоблаш жараёнини чеккадан туриб кузатгандан кўра, бевосита ўзи бажаргани маъқул. Шунинг учун биз фақат ҳисоблаш натижасини келтирамиз. Матрицанинг нодиагонал элементлари

$$\langle N_i, N_k - 1 | F^{(1)} | N_i - 1, N_k \rangle = f_{ik}^{(1)} \sqrt{N_i N_k} \quad (47. 2)$$

га тенг. Биз бу ерда қисқалик мақсадида фақат шундай индексларни кўрсатдикки, бу индекслар бўйича матрица элементлари нодиагонал бўлади, бошқа ин-

дексларни эса тушириб қолдирдик. Бунда $f_{ik}^{(1)}$ — матрица элементи:

$$f_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(\xi) \hat{f}^{(1)} \psi_k(\xi) d\xi. \quad (47. 3)$$

$\hat{f}_a^{(1)}$ оператор бошқалардан ўзи таъсир қиладиган ўзгарувчиларнинг белгиланиши билан фарқланганидан, (47. 3) интеграл a индексга боғлиқ эмас ва (47. 3) да бу индекс ёзилмаган. $F^{(1)}$ нинг диагонал матрица элементлари $\psi_{N_1, N_2}, \dots$ ҳолатлардаги $F^{(1)}$ катталикининг ўртача қийматини ифодалайди. Ҳисоблаш

$$\overline{F^{(1)}} = \sum_i f_{ii}^{(1)} N_i \quad (47. 4)$$

қийматни беради.

Энди иккиламчи квантланиш методида асосий бўлган ҳамда координата функциясига эмас, балки тўлдирувчи сонлар функциясига таъсир қиладиган $\hat{a}_i$ оператор киритамиз. Таъриф бўйича $\hat{a}_i$ оператор $\Phi(N_1, N_2, \dots)$ функцияга таъсир қилиб, ундаги N_i ўзгарувчининг қийматини биттага камайтиради ва шу билан бирга функцияни $\sqrt{N_i}$ га кўпайтиради:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i, \dots) = \\ = \sqrt{N_i} \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots). \end{aligned} \quad (47. 5)$$

$\hat{a}_i$ оператор i - ҳолатдаги зарралар сонини биттага камайтиради, деб айтиш мумкин; шунинг учун уни зарраларни *йўқотиш оператори* деб аталади. Бу операторни нолдан фарқли бирдан-бир элементи

$$\langle N_i - 1 | a_i | N_i \rangle = \sqrt{N_i} \quad (47. 6)$$

бўлган матрица кўринишида тасаввур қилиш мумкин.

$\hat{a}_i$ га қўшма бўлган $\hat{a}_i^+$ оператор таърифга биноан [(11. 9) га қаранг],

$$\langle N_i | a_i^+ | N_i - 1 \rangle = \langle N_i - 1 | a_i | N_i \rangle^* = \sqrt{N_i} \quad (47. 7)$$

элементигина нолдан фарқли матрица шаклида ифодаланadi. Бу, оператор $\Phi(N_1, N_2, \dots)$ функцияга таъсир қилганда N_i сонни биттага оширади, демакдир:

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i, \dots) = \\ = \sqrt{N_i + 1} \Phi(N_1, N_2, \dots, N_i + 1, \dots). \end{aligned} \quad (47. 8)$$

Бошқача қилиб айтганда, $\hat{a}_i^+$ оператор i - ҳолатдаги зарралар сонини биттага оширади; шунинг учун уни зарраларни ҳосил қилиш оператори деб аталади.

$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ операторлар кўпайтмаси функцияга таъсир қилганда ҳамма $N_1, N_2 \dots$ ўзгарувчиларни ўзгаришсиз қолдириб, фақат тўлқин функцияни ўзгармас сонга кўпайтиради, холос. Ҳақиқатан ҳам, $\hat{a}_i$ оператор N_i ни 1 га камайтиради, кейин $\hat{a}_i^+$ эса уни дастлабки ҳолига қайтаради. (47. 6) ва (47. 7) матрицаларни бевосита кўпайтириш кўрсатадики, ҳақиқатан ҳам $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ оператор диагональ элементлари N_i га тенг бўлган диагональ матрица билан ифодаланади. Демак,

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i = N_i \quad (47. 9)$$

деб ёзиш мумкин. Худди шунга ўхшаш йўл билан

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ = N_i + 1 \quad (47. 10)$$

ни топамиз.

Бу икки ифода айирмаси $\hat{a}_i$ ва $\hat{a}_i^+$ операторлар учун ушбу

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = 1 \quad (47. 11)$$

коммутация қондасини беради. Ҳар хил i ва k индексга эга бўлиб, ҳар хил N_i ва N_k ўзгарувчиларга таъсир қиладиган операторлар ўзаро коммутативдир:

$$\hat{a}_i \hat{a}_k - \hat{a}_k \hat{a}_i = 0, \quad \hat{a}_i \hat{a}_k^+ = \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = 0 \quad (i \neq k). \quad (47. 12)$$

$\hat{a}_i$ ва $\hat{a}_i^+$ операторларнинг юқорида келтирилган хоссаларига асосланиб,

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_{i,k} f_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k \quad (47. 13)$$

операторнинг (47. 1) оператор билан мос тушишини кўриш қийин эмас. Дарҳақиқат, бу операторнинг (47. 6—7) ёрдамида ҳисобланиши мумкин бўлган барча матрица элементлари (47. 2) элементларга ўхшайди. Бу натижа жуда муҳим. (47. 13) даги $f_{ik}^{(1)}$ катталиқ

оддий сондир. Шундай қилиб, биз координата функциясига таъсир қилувчи одатдаги операторни янги ўзгарувчилар (N_i тўлдирувчи сонлар) функцияларига таъсир қилувчи оператор кўринишида ифодалашга муваффақ бўлдик.

Олинган натижалар бошқа кўринишдаги операторларга ҳам осон умумлаштирилади. Айтайлик,

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{a>b} \hat{f}_{ab}^{(2)} \quad (47. 14)$$

бўлсин, бунда $\hat{f}_{ab}^{(2)}$ — бир жуфт заррага алоқадор бўлган ва шу сабабли, ξ_a ва ξ_b ўзгарувчилар функциясига таъсир қиладиган физикавий катталикнинг оператори. Юқоридагига ўхшаш ҳисоблашлар кўрсатадики, бундай оператор $\hat{a}_i$ ва $\hat{a}_i^+$ операторлар орқали

$$\hat{F}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i, k, l, m} (f^{(2)})_{lm}^{ik} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_m \hat{a}_l \quad (47. 15)$$

кўринишда ифодаланиши мумкин, бунда

$$(f^{(2)})_{lm}^{ik} = \iint \psi_i^*(\xi_1) \psi_k^*(\xi_2) \hat{f}^{(2)} \psi_l(\xi_1) \psi_m(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2.$$

Худди шу йўл билан формулалар зарралар бўйича симметрик бўлган ҳар қандай бошқа кўринишдаги операторлар учун ҳам умумлаштирилади.

Бу формулалар ёрдамида N та ўзаро таъсирлашувчи зарралардан тузилган ва амалда ўрганиладиган системанинг гамильтонианини ҳам $\hat{a}_i$ ва $\hat{a}_i^+$ операторлар орқали ифодалаш мумкин. Бундай системанинг гамильтониани турган гапки, ҳамма зарраларга нисбатан симметрик. Масалан, агар системадаги ўзаро таъсир, ҳар бир зарралар жуфтнинг ўзаро таъсирига келтирилса, у ҳолда гамильтониан

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}_a^{(1)} + \sum_{a>b} U^{(2)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) \quad (47. 16)$$

кўринишга эга бўлади. Бунда $H_a^{(1)}$ — гамильтонианининг фақат битта зарра координатасига боғлиқ бўлган қисми, яъни эркин зарра гамильтониани:

$$\hat{H}_a^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_a. \quad (47. 17)$$

$U^{(2)}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ функция иккита зарранинг ўзаро таъсир энергияси. (47. 16) га (47. 13) ва (47. 15) ни қўллаб,

$$\hat{H} = \sum_{i, k} H_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2} \sum_{i, k, l, m} (U^{(2)})_{lm}^{ik} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_m \hat{a}_l \quad (47. 18)$$

ифодани оламиз. Шунинг билан биз гамильтонианнинг қидирилаётган кўринишини тўлдирувчи сонлар функциясига таъсир қиладиган оператор кўринишида топган бўламиз.

Ўзаро таъсирлашмайдиган зарралар учун (47. 18) ифодада фақат биринчи ҳад қолади:

$$\hat{H} = \sum_{i, k} H_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k. \quad (47. 19)$$

Агар ψ_i функция сифатида (шартлашилганга биноан) эркин зарра гамильтониани $\hat{H}^{(1)}$ нинг хос функциялари олинса, у ҳолда $H_{ik}^{(1)}$ матрица диагонал кўринишга келади ва унинг диагонал элементлари зарра энергиясининг ϵ_i хос қийматларига тенг бўлади. Шундай қилиб, оператор

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad (47. 20)$$

кўринишга келади. Бу ифодада $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ операторни унинг (47. 9) даги хос қийматлари билан алмаштирсак, системанинг энергия сатҳлари учун

$$E = \sum_i \epsilon_i N_i \quad (47. 21)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бу эса тривиал натижа бўлиб, у ўз-ўзидан келиб чиқиши керак эди.

ψ оператор деб аталадиган оператор киритиб, иккиламчи квантланиш аппарати формулаларини ихчам кўринишга келтириш мумкин:

$$\hat{\psi}(\xi) = \sum_i \psi_i(\xi) \hat{a}_i, \quad \hat{\psi}^+(\xi) = \sum_i \psi_i^*(\xi) \hat{a}_i^+, \quad (47. 22)$$

бу ерда ξ ўзгарувчилар параметр сифатида қаралади $\hat{a}_i$ ва $\hat{a}_i^+$ операторлар ҳақида юқорида келтирилган мулоҳазалардан, равшанки, $\hat{\psi}$ оператор системадаги

зарраларнинг тўла сонини биттага камайтиради, $\hat{\psi}^+$ эса биттага оширади¹.

ψ - операторлар ёрдамида (47. 18) гамильтониан

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^+(\xi) \hat{H}^{(1)} \hat{\psi}(\xi) d\xi + \\ + \frac{1}{2} \iint \hat{\psi}^+(\xi) \hat{\psi}^+(\xi') U^{(2)} \hat{\psi}(\xi') \hat{\psi}(\xi) d\xi d\xi' \quad (47. 23)$$

кўринишда ёзилади. Бунга ишонч ҳосил қилиш учун (47. 22) ψ - операторларни бевосита (47. 23) га қўйиб кўриш етарли.

ψ тўлқин функцияли ҳолатда зарралар эҳтимоли зичлигини аниқловчи $\psi^*\psi$ кўпайтмага ўхшаб, ψ - операторлардан тузилган $\hat{\psi}^+\hat{\psi}$ оператор зарралар зичлиги оператори деб аталади. Ушбу:

$$\hat{N} = \int \hat{\psi}^+\hat{\psi} d\xi \quad (47. 24)$$

интеграл эса иккиламчи квантланиш аппаратида системадаги зарраларнинг тўла сони оператори ролини ўйнайди. Дарҳақиқат, унга (47. 22) кўринишдаги ψ - операторларни қўйиб ҳамда ψ_i тўлқин функцияларнинг ортонормалашганини эътиборга олиб,

$$\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad (47. 25)$$

ифодани ҳосил қиламиз.

Бу йиғиндидаги ҳар бир ҳад i - ҳолатдаги зарралар сони оператори бўлиб, (47. 9) га биноан унинг хос қийматлари N_i тўлдирувчи сонларга тенг; ҳамма бундай сонларнинг йиғиндиси системадаги зарраларнинг тўла сонига тенг. Зарралар сони олдиндан берилган система учун бу фикр [эркин зарралар системаси (47. 19) гамильтонианининг хоссалари каби] тривиал бўлади. Лекин биз кўрамизки, уларнинг релятивистик назариядаги умумлашмаси мутлақо тривиал бўлмаган натижаларга олиб келади.

¹ (47. 22) ифодалар билан ихтиёрий тўлқин функциянинг функцияларнинг бирор тўла системаси бўйича $\psi = \sum a_i \psi_i$ ёйилмаси ўртасида ўхшашлик борлигига эътибор қиламиз. Бу ерда бу ёйилма гўё яна бир марта квантланади. Баён қилинаётган методнинг иккиламчи квантланиш деб аталиши ҳам шундадир.

48- §. Иккиламчи квантланиш (Ферми статистикаси учун)

Иккиламчи квантланиш методининг ҳамма принципиал томонлари бир хил фермионлардан ташкил топган система учун ҳам ўринли бўлади. Катталикларнинг матрица элементлари ва $\hat{a}_i$ операторлар учун ёзиладиган конкрет формулалар эса албатта ўзгаради.

Биз бу ерда тегишли ҳисоблашларнинг айрим деталларини келтирмаймиз, балки фақат уларнинг олдинги параграфдаги ҳисоблашлардан фарқ қиладиган муҳим моментларинигина таъкидлаб ўтамиз.

Ψ_{N,N_i} тўлқин функция энди (45.5) кўринишга эга бўлади. Юқорида кўрсатилганидек, банд ҳолатларни номерловчи $p_1, p_2 \dots$ сонлар орасида бир хиллари бўлиши мумкин эмас, чунки акс ҳолда детерминант нолга айланиб кетади. Бошқача айтганда, N_i тўлдирувчи сонлар фақат 0 ва 1 қийматлар қабул қилиши мумкин.

(45.5) функциянинг антисимметриклигидан, энг аввал унинг қайси ишорасини олиш масаласи туғилади. Бозе статистикаси ҳолида бундай масала туғилмаган, чунки бозонлар системаси учун тўлқин функция симметрик бўлиб, унинг учун олдиндан бир марта танланган ишора зарраларнинг ҳамма ўрин алмаштиришларида сақланиб қолади. (45.5) функциянинг ишорасини тайин қилиш учун уни қуйидагича жойлаштиришга келишамиз. Ҳамма ψ_i ҳолатларни бундан сўнг ўзгармай қоладиган номерлар кетма-кетлиги билан таъминлаймиз. Кейин (45.5) детерминант сатрларини $p_1 < p_2 < p_3 < \dots < p_N$ кетма-кетликка роя қилган ҳолда тўлдириб чиқамиз. Бунда унинг устунларига ҳар хил ўзгарувчиларнинг функциялари $\xi_1, \xi_2 \dots \xi_N$ тартибда жойлашади. Шундай қилиб, тўлқин функциянинг ишораси ҳамма $p_1, p_2 \dots$ номерларнинг тўпламига, яъни ҳамма тўлдирувчи сонларга боғлиқ бўлади.

Натижада уларга зарраларни йўқотиш ва ҳосил қилиш операторлари матрица элементларининг ишоралари ҳам боғлиқ бўлиб қолади. Чунончи, бу операторлар нолдан фарқли биттагина

$$\langle 0_i | a_i | 1_i \rangle = \langle 1_i | a_i^\dagger | 0_i \rangle = (-1)^{\sum_{k=1}^{i-1} N_k} \quad (48.1)$$

элементга эга бўлган матрица сифатида аниқланиши лозим экан.

Матрицаларни кўпайтириб, $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ ва $\hat{a}_i \hat{a}_i^+$ кўпайтмаларнинг диагонал матрицалар эканига ишонч ҳосил қилиш мумкин. Бунда

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i = N_i, \quad \hat{a}_i \hat{a}_i^+ = 1 - N_i \quad (48. 2)$$

бўлиб, уларнинг йиғиндиси эса

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = 1. \quad (48. 3)$$

$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ кўпайтманинг $N_i = 0$ да ва $\hat{a}_i \hat{a}_i^+$ кўпайтманинг $N_i = 1$ да нолга айланиши табийий ҳол эканига эътиборни жалб қиламиз. Бу кўпайтмаларда биринчи бўлиб ўнг томонда турган оператор таъсир кўрсатади; лекин i - ҳолатда йўқ бўлган заррани ($N_i = 0$) йўқотиш мумкин эмас; Паули принципига биноан i - ҳолат банд, яъни $N_i = 1$ бўлса, у ҳолда бу ҳолатда электрон ҳосил қилиш мумкин эмас. Худди шу сабабларга кўра, аввалдан равшанки:

$$\hat{a}_i \hat{a}_i = 0, \quad \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ = 0. \quad (48. 4)$$

Ҳар хил i ва k индексли ҳамма оператор жуфтлари учун

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i &= 0, \quad \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i^+ = 0, \\ \hat{a}_i \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i &= 0 \quad (i \neq k) \end{aligned} \quad (48. 5)$$

ифодадалар ҳосил бўлади. Яъни уларнинг ҳаммаси *антикоммутатив* дейилади—кўпайтувчиларнинг ўринлари алмашганда кўпайтма ўз ишорасини ўзгартиради. Бозе статистикасига нисбатан Ферми статистикасидаги бу фарқ батамом табийийдир. Бозе статистикасида $\hat{a}_i$ ва $\hat{a}_k$ операторлар бир-бирларидан тамоман мустақил эди; $\hat{a}_i$ операторларнинг ҳар бири фақат битта N_i га таъсир қилар эди. Бунда оператор таъсирининг натижаси бошқа тўлдирувчи сонларнинг қийматларига боғлиқ

бўлмасди. Ферми статистикаси ҳолида эса $\hat{a}_i$ оператор таъсирининг натижаси фақат N_i сонининг ўзигагина эмас, балки ҳамма олдинги ҳолатларнинг тўлдирувчи сонларига ҳам боғлиқ. Шунинг учун ҳар хил $\hat{a}_i$ ва $\hat{a}_k$ операторларнинг таъсирини мустақил деб бўлмайди.

$\hat{a}_i$ ва $\hat{a}_k$ операторларнинг хоссалари шу тарзда аниқланганидан сўнг, бошқа ҳамма (47.13—25) формулалар ўз кучини тўла сақлайди.

VII б о б

АТОМ

49- §. Атомнинг энергия сатҳлари

Норелятивистик яқинлашишда атомнинг стационар ҳолатлари ядронинг Кулон майдонида ҳаракатланувчи ҳамда бир-бири билан электрик таъсирлашувчи электронлар системаси учун ёзилган Шредингер тенгламасидан аниқланади. Бизга маълумки, ташқи марказий-симметрик майдонда ҳаракатланаётган зарралар системаси учун L тўла орбитал момент ҳамда ҳолатлар жуфтлиги сақланувчи катталиклардир. Шунинг учун атомнинг ҳар бир стационар ҳолати L моментнинг маълум қиймати ва ўзининг жуфтлиги билан характерланади. Булардан ташқари, 46- § да баён қилинган алмашинувчи ўзаро таъсир ҳодисаси туфайли, атомнинг ҳар бир стационар ҳолати электронларнинг S тўла спинининг қиймати билан ҳам характерланади.

Шундай қилиб, норелятивистик яқинлашишда атомнинг энергия сатҳлари L ва S нинг қийматлари ҳамда жуфтлик бўйича классификацияланади (албатта, бунда тескари фараз ўринсиз, яъни бу квант сонларининг қийматлари ҳолат энергиясини бир қийматли тарзда аниқлаб бера олмайди). Ҳар бир шундай энергия сатҳи L ва S векторларнинг фазодаги мумкин бўлган ҳар хил йўналишларига мос ҳолда айланиб бўлади. Бу йўналишлар бўйича айланиш даражаси мос ҳолда $2L+1$ ва $2S+1$ га тенг. Демак, муайян L ва S га эга бўлган сатҳнинг айланиш даражаси ҳаммаси бўлиб $(2L+1) \cdot (2S+1)$ кўпайтмага тенг бўлади.

Лекин ҳақиқатда эса электронларнинг ўзаро электромагнитик таъсирида уларнинг спинларига боғлиқ бўлган релятивистик эффектлар мавжуд (бу масала

51- § да анча батафсил кўрилади). Бу эффектлар атомнинг энергиясини L ва S векторлар катталигидан ташқари, уларнинг ўзаро вазиятларига ҳам боғлиқ бўлишига олиб келади. Қатъий айтганда, релятивистик ўзаро таъсир ҳисобга олинганда атомнинг L орбитал моменти ва S спинининг ҳар бири энди айрим ҳолда сақланмайди. Бу ҳолда ёпиқ система учун фазонинг изотропия хоссасидан келиб чиқадиган ва универсал аниқ бўлган $J = L + S$ тўла моментнинг сақланиш қонунигина ўринли бўлади. Шу сабабли, атомнинг аниқ энергия сатҳлари J тўла моментнинг қийматлари билан характерланиши лозим.

Лекин релятивистик эффектлар нисбатан кичик бўлса (кўп ҳолларда шундай бўлади), у ҳолда уларни ғалаёнланиш сифатида қараш мумкин. Бу ғалаёнланиш таъсирида муайян L ва S га эга бўлган айниган сатҳ J тўла моментнинг қийматлари бўйича фарқланадиган бир қатор ҳар хил сатҳларга (бир-бирларига яқин бўлган) „ажралади“. Бу сатҳлар биринчи яқинлашишда мос секуляр тенгламадан (33- §) аниқланади. Уларнинг тўлқин функциялари эса (нолинчи яқинлашишдаги) муайян L ва S га эга бўлган дастлабки айниган сатҳлар тўлқин функцияларининг маълум чизиқли комбинациясидан иборат бўлади. Демак, бу яқинлашишда аввалгидек, орбитал момент ва спиннинг абсолют қийматларини (лекин уларнинг йўналишларини эмас) сақланади деб қараш ва сатҳларни L ва S нинг қийматлари орқали характерлаш мумкин.

Шундай қилиб, релятивистик эффектлар натижасида L ва S ларининг қийматлари берилган сатҳ J ларининг қийматлари ҳар хил бўлган бир қатор сатҳларга ажралади. Бундай ажралишни сатҳнинг *нозик структураси (мультиплет ажралиш)* дейилади. Маълумки, J сони $L + S$ дан $|L - S|$ гача қийматлар қабул қилади; шу сабабли, муайян L ва S га эга бўлган сатҳ $2S + 1$ (агар $L > S$ бўлса) ёки $2L + 1$ (агар $L < S$ бўлса) та ҳар хил сатҳга ажралади. Бу сатҳларнинг ҳар бири J векторнинг ҳар хил йўналишлари бўйича айниганича қолади; бу айнишнинг даражаси $2J + 1$ га тенг¹.

Атомнинг энергия сатҳлари (ёки атомларнинг *спектрал термлари*) ни моментининг қиймати аниқ

¹ Водород атоми энергия сатҳларининг нозик структураси баъзи бир специфик хоссаларга эга (94- § га қаранг).

бўлган айрим зарралар ҳолатларини белгилашда ишлатиладиган символларга ўхшаш символлар билан белгилаш қабул қилинган (29- §). Чунончи, L тўла орбитал моменти ҳар хил қийматларга эга бўлган ҳолатлар латин алфавитининг катта ҳарфлари орқали қуйидаги

$$L = 0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ \dots$$

$$S \ P \ D \ F \ G \ H \ \dots$$

мосликка риоя қилган ҳолда белгиланади. Бу символларнинг чап томони устида термнинг *мультиплетлиги* деб аталувчи $2S + 1$ сони кўрсатилади (лекин шуни унутмаслик керакки, бу сон сатҳнинг нозик структураси компонентлари сонига фақат $L \geq S$ дагина мос келади)¹. Ўнг томонда пастда эса J тўла моментнинг қиймати кўрсатилади. Масалан, $^2P_{1/2}$, $^2P_{3/2}$ символлар $L = 1$, $S = \frac{1}{2}$, $J = \frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$ бўлган сатҳларни билдиради.

50- §. Атомдаги электронларнинг ҳолатлари

Биттадан ортиқ электронга эга бўлган атом ядро майдонида ҳаракатланувчи ва бир-бири билан ўзаро таъсирлашадиган электронларнинг мураккаб системасидан иборат. Бундай система ҳолатини қатъий айтганда, бир бутунлигича қараш мумкин. Лекин шунга қарамай, атом учун етарлича аниқлик билан ҳар бир электроннинг алоҳида ҳолати тушунчасини киритиш мумкин экан. Бу ҳолатлар ядронинг бошқа ҳамма электронлар билан биргаликда ҳосил қилган маълум эффектив марказий-симметрик майдондаги айрим электроннинг стационар ҳолатларидир. Атомдаги ҳар хил электронлар учун бу майдонлар, умуман айтганда ҳар хил бўлиб, уларнинг ҳаммаси бир вақтда аниқланиши лозим. Чунки бу майдонларнинг ҳар бири қолган бошқа электронларнинг ҳолатларига боғлиқ. Бундай майдон *ўз-ўзидан мосланган* майдон деб аталади.

Ўз-ўзидан мосланган майдон марказий-симметрик бўлганидан, электроннинг ҳар бир ҳолати унинг l орбитал моментининг тайин қиймати билан характерланади. Берилган l да айрим электроннинг ҳолати $l+1$, $l+2 \dots$ қийматлар қабул қилувчи n бош квант сони

¹ $2S + 1 = 1, 2, 3 \dots$ ларда сатҳлар мос ҳолда синглет, дублет, триплет $\dots$ сатҳлар дейилади.

ёрдамида номерланади (энергиянинг ошиш тартибида). Номерлашнинг бу тартиби водород атоми учун қабул қилинган тартибга мос келади. Лекин мураккаб атомларда ҳар хил l ли энергия сатҳларининг ўсиш кетма-кетлиги, умуман айтганда, водород атомидагидан фарқ қилади. Водород атомида энергия l га умуман боғлиқ эмас, демак, катта n ли ҳолатлар ҳамма вақт катта энергияга эга бўлади. Мураккаб атомларда эса масалан, $n=5$ ва $l=0$ бўлган сатҳ $n=4$ ва $l=2$ бўлган сатҳдан пастда ётади (бу ҳақда 52- § да батафсилроқ гапирилган).

Айрим электронларнинг ҳар хил n ва l ли ҳолатларини бош квант сонининг қийматини кўрсатувчи рақам ҳамда l нинг қийматини кўрсатувчи ҳарфдан иборат символ орқали белгилаш қабул қилинган¹. Масалан, $4d$ символ $n=4$ ва $l=2$ бўлган ҳолатни билдиради. Атом ҳолатларини тўла тавсифлаш L , S , J нинг қиймаглари кўрсатиш билан бир қаторда ҳамма электронлар ҳолатларини ҳам кўрсатишни талаб қилади. Масалан, $1s2p^3P_0$ символ гелий атомининг $L=S=1$, $J=0$ бўлган ҳолатини билдиради, иккита электрон эса биттадан $1s$ ва $2p$ ҳолатда ётади. Агар n ва l лари бир хил бўлган ҳолатларда бир қанча электронлар ётса, у ҳолда бу сонни ҳолат белгисининг даража кўрсаткичи кўринишида ёзиш қабул қилинган; масалан, $3p^2$ символ $3p$ ҳолатда 2 та электрон ётганини кўрсатади. Атомдаги электронларнинг ҳар хил n ва l ли ҳолатлар бўйича тақсимооти *электрон конфигурация* дейилади.

n ва l нинг берилган қийматларида электроннинг орбитал моменти проекцияси (m) ва спини проекцияси (σ) ҳар хил қийматларга эга бўлиши мумкин. l нинг берилган қийматида m сони $2l+1$ та қиймат қабул қилади; σ сони эса фақат иккита $\pm \frac{1}{2}$ қиймат билан чегараланган. Шу сабабли, n ва l лари бир хил бўлган $2(2l+1)$ та ҳолат мавжуд; уларни *эквивалент ҳолатлар* деб аталади. Бу ҳолатларнинг ҳар бирида Паули принципига биноан биттадан электрон жойлашиши мумкин. Шундай қилиб, атомда бир вақтнинг ўзида фақат $2(2l+1)$ тагача электрон бир хил n ва l га эга бўла олади.

¹ Бош квант сонлари $n=1, 2, 3 \dots$ бўлган электронларни мос ҳолда K -, L -, M -қобикларнинг электронлари деб аташ ҳам қабул қилинган.

Берилган n ва l ли ҳолатларнинг ҳаммасидаги электронлар тўплами шу типдаги *ёпиқ қобик* дейилади.

Электрон конфигурацияси бир хил, лекин L ва S лари ҳар хил бўлган атом энергия сатҳлари орасидаги фарқ электронларнинг электростатик ўзаро таъсири билан боғлиқ (ҳар бир мультиплет сатҳнинг нозик структураси ҳақида биз ҳозирча гапирмаймиз). Одатда бу энергияларнинг фарқи анчагина кичик бўлиб, ҳар хил конфигурацияли сатҳлар орасидаги масофадан бир неча марта кичик. Бир хил конфигурацияли, лекин L ва S лари билан фарқланувчи сатҳларнинг ўзаро жойланишлари қуйидаги эмпирик қоидага (*Хунд қондаси*) бўйсунди:

Берилган электрон конфигурацияда S тўла спини мумкин бўлган энг катта қийматга эга бўлган ва шу S да L тўла орбитал момент мумкин бўлган энг катта қийматга эга бўлган терм энг кичик энергияга эга бўлади.

Берилган электрон конфигурацияда мумкин бўлган атом термларини қандай топиш мумкинлигини кўрсатамиз. Агар электронлар эквивалент бўлмаса, у ҳолда Δ ва S нинг мумкин бўлган қийматларини топиш учун бевосита моментларни қўшиш қондасидан фойдаланилади. Масалан, $np, n'p$ (n ва n' лар ҳар хил) конфигурациялар учун L тўла момент 2, 1, 0 қийматларни, S тўла спин эса 0, 1 қийматларни қабул қилиши мумкин; бу қийматларни ўзаро бир-бири билан комбинациялаб, $^{1,3}S$, $^{1,3}P$ ва $^{1,3}D$ термларни топамиз.

Эквивалент электронлардан тузилган конфигурация учун эса мумкин бўлган термлар сони Паули принципи қўядиган чегара туфайли анча камаяди. Масалан, np^2 конфигурацияни олайлик. $l = 1$ да (p - ҳолат) электроннинг m орбитал моменти проекцияси 1, 0, — 1 қийматларга эга бўлиши мумкин, Ҳемак, m ва s сонлар жуфти

$$\begin{array}{lll} a) 1, \frac{1}{2}, & b) 0, \frac{1}{2}, & c) -1, \frac{1}{2}, \\ a') 1, -\frac{1}{2}, & b') 0, -\frac{1}{2}, & c') -1, -\frac{1}{2} \end{array}$$

бўлган олти ҳолат бўлиши мумкин. Иккита электронни бу ҳолатларнинг исталган иккитасига биттадан қилиб жойлаштириш мумкин. Натижада $M_L = \sum m$ тўла орбитал моменти проекцияси ва $M_S = \sum s$ тўла спин проекциясининг қийматлари

$$\begin{array}{lll}
 a + a') \ 2, \ 0, & a + b) \ 1, \ 1, & a + c) \ 0, \ 1, \\
 & a + b') \ 1, \ 0, & a + c') \ 0, \ 0, \\
 & a' + b) \ 1, \ 0, & a' + c) \ 0, \ 0, \\
 & & b + b') \ 0, \ 0
 \end{array}$$

бўлган атом ҳолатларини топамиз (M_L ва M_S нинг манфий қийматларига эга бўлган ҳолатларни кўрсатишнинг ҳожати йўқ, чунки улар бирор янги нарса бермайди). $M_L = 2$ ва $M_S = 0$ ли ҳолатнинг бўлиши ^1D термнинг бўлиши кераклигини кўрсатади; бу термга яна биттадан (1, 0) ва (0, 0) ҳолат ҳам мос келиши керак. Кейин (1, 1) ли ҳолат қолади, демак, ^3P терм бўлиши керак; бу термга яна (0, 1), (1, 0), (0, 0) ҳолатлар ҳам мос келади. Охирида ^1S термга мос келадиган битта (0, 0) ҳолат қолади. Шундай қилиб, иккита эквивалент p -электронлардан тузилган конфигурация учун $^1S, ^3P$ ва ^1D тип термлардан фақат биттадан тўғри келиши мумкин.

Максимал сондаги эквивалент электронлардан тузилган конфигурация (яъни, тўлган ёпиқ қобиқ) учун ҳамма вақт фақат битта ^1S ҳолат тўғри келиши мумкин, чунки бундай қобиқда электронларнинг моментлари ўзаро компенсацияланади. Шунинг ҳам таъкидлаймизки, биттадаги электронлар сони иккинчисини тўла тўлдириш учун керак бўладиган электронлар сонига тенг бўлган конфигурацияларга бир хил тип термлар мос келади (масалан, np^4 конфигурация np^2 конфигурация учун юқорида топилган термлар типидagi термларга эга). Агар қобиқда бўлиши мумкин бўлган электронлар ўрнини ковак деб қаралса, юқоридаги натижа ўз-ўзидан равшанлашади. Ковакнинг ҳолати йўқ электронларнинг ҳолатларини характерловчи квант сонлари билан аниқланади.

51-§. Атом сатҳларининг нозик структураси

Юқорида кўрсатилганидек, атом гамильтониани фақат релятивистик эффектлар, яъни $c \rightarrow \infty$ чегаравий ўтишда йўқоладиган эффектлар ҳисобга олингандагина электронларнинг спин операторларига боғлиқ бўлади. Гамильтонианга релятивистик ҳадларнинг кирганлиги ҳақидаги масалага 94-§ да қайтамыз, ҳозирча бу ҳад-

ларнинг умумий кўринишларини натижа тарзида тавсифлаймиз.

Маълум бўлишича, атом гамильтонианидаги релятивистик ҳадлар икки категорияга ажралар экан: булардан бири электрон спини операторларига нисбатан чизиқли бўлиб, иккинчиси эса улар бўйича квадратик бўлади. Биринчи категория электронлар хусусий магнит моментларининг орбитал ҳаракат магнит моментлари билан гўё ўзаро таъсирга мос келади; уни *спин — орбитал ўзаро таъсир* деб аталади. Иккинчи категория эса электронлар магнит моментларининг бир-бири билан таъсирини билдиради (*спин — спин ўзаро таъсир*); ўзаро таъсирларнинг иккала кўриниши электронлар тезлигининг ёруғлик тезлигига нисбати v/c бўйича бир хил тартибга (иккинчи) эга. Лекин амалда оғир атомларда спин — орбитал ўзаро таъсир спин — спин ўзаро таъсирдан анча кучли. Бунинг сабаби шундаки, атом номерининг ортиши билан спин — орбитал ўзаро таъсир тез ортади. Спин — спин ўзаро таъсир эса Z га боғлиқ эмас. Бу спин — спин ўзаро таъсирнинг табиатидан келиб чиқади, яъни электронларнинг бир-бири билан бевосита таъсирга ядро майдонининг ҳеч қандай алоқаси бўлмайди.

Спин — орбитал ўзаро таъсир оператори

$$\hat{V}_{st} = \sum_a \alpha_a \hat{\mathbf{l}}_a \hat{\mathbf{s}}_a \quad (51. 1)$$

кўринишга эга (йигинди атомдаги ҳамма электронлар бўйича олинади); бу ерда $\hat{\mathbf{s}}_a$ ва $\hat{\mathbf{l}}_a$ — электронларнинг спин ва орбитал момент операторлари, α_a — координата функцияси.

Атом сатҳлари нозик структурасининг энергиясини ҳисоблаш $\hat{V}_{st}$ ғалаёнланиш операторини электрон қобиқ ғалаёнланмаган ҳолатлари бўйича ўртачалашдан иборат. Бундай ўртачалаш икки босқичда амалга оширилади. Энг аввал атомнинг L тўла орбитал моменти ва S тўла спини катталиклари берилган (лекин уларнинг йўналишлари берилмаган) электрон ҳолатлари бўйича ўртачалаштирамиз. Бундай ўртачалаштиришдан сўнг $\hat{V}_{st}$ яна операторлигича қолади. Лекин энди у атомдаги айрим электронларни характерловчи операторлар орқали эмас, балки фақат атомни бир бутунлигича ха-

рактерловчи операторлар орқали ифодаланиши керак. $\hat{S}$ ва $\hat{L}$ лар шундай оператор ҳисобланади¹.

Шу йўсинда ўртачалаштирилган спин — орбитал ўзаро таъсир операторини $\hat{V}_{LS}$ билан белгилаймиз. $\hat{S}$ бўйича чизиқли бўлган бу оператор

$$\hat{V}_{LS} = A \hat{L} \hat{S} \quad (51. 2)$$

кўринишга эга. Бунда A берилган (сатҳларга ажралмаган) терм учун характерли бўлган, яъни атомнинг J тўла моментига эмас, балки S ва L га боғлиқ бўлган ўзгармас.

Ажралиш энергиясини ҳисоблаш учун энди (51. 2) операторларнинг матрица элементларидан тузилган секуляр тенгламани ечиш керак. Лекин бу ҳолда биз V_{LS} матрица диагонал бўладиган нолинчи яқинлашишдаги тўғри функцияларни олдиндан биламиз. Булар муайян J тўла момент қийматига эга бўлган ҳолатларнинг тўлқин функцияларидир. Шундай ҳолатлар бўйича ўртачалаш $\hat{S} \hat{L}$ операторни унинг (17. 3) га биноан

$$LS = \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]$$

га тенг бўлган хос қийматлари билан алмаштиришни билдиради. Мультиплетнинг ҳамма компонентларида L ва S нинг қийматлари бир хил бўлганидан ва бизни

¹ Баён қилинган операцияни яхшироқ тушунтириш учун ўртачалаш квант механикасида умуман мос диагонал матрица элементларини топиш эканлигини эслатиб ўтамиз. Қисман ўртачалаш эса система ҳолатини аниқловчи ҳамма квант сонларидан фақат баъзилари бўйича диагонал матрица элементлари олишни билдиради. Масалан, ушбу ҳолда (51. 1) операторни ўртачалаш мумкин бўлган ҳамма M_L , M'_L ва M_S , M'_S ларни ўз ичига олган ва бошқа ҳамма квант сонлари (бу сонлар тўплами n билан белгиланади) бўйича диагонал бўлган $\langle n M'_L M'_S | V_{SL} | n M_L M_S \rangle$ элементлардан матрица тузишни билдиради. Мос ҳолда $\hat{S}$ ва $\hat{L}$ операторларни ҳам элементлари (15. 11) формулалар билан бериладиган $\langle M'_S | S | M_S \rangle$ ва $\langle M'_L | L | M_L \rangle$ матрицалар деб тушуниш керак. Ўртачалашнинг мана шундай босқичли усулини кейин кўп ишлатишга тўғри келади,

фақат бу компонентларнинг ўзаро жойлашишларигина қизиқтирганидан, бўлиниш энергиясини

$$\frac{1}{2} AJ(J+1) \quad (51.3)$$

кўринишда ёзиш мумкин. Бинобарин, қўшни компонентлар (J ва $J-1$ сонлар билан характерланувчи) орасидаги интерваллар

$$\Delta E_{J,J-1} = AJ \quad (51.4)$$

га тенг бўлади. Бу формула *интерваллар учун Ланде қоида*си деб аталади.

A ўзгармас сон мусбат ҳам, манфий ҳам бўлиши мумкин. $A > 0$ да мультиплет сатҳнинг энг қуйи компоненти мумкин бўлган энг кичик J , яъни $J = |L - S|$ ли сатҳ бўлади; бундай мультиплетлар *нормал мультиплетлар* деб аталади. Агар $A < 0$ бўлса, у ҳолда $J = L + S$ ли сатҳ энг қуйи сатҳ бўлади (*ўгирилган мультиплет*).

Спин — спин ўзаро таъсирнинг ўртачалашган оператори учун (51.2) формулага ўхшаш $\hat{S}$ бўйича квадратик ифода ҳосил бўлиши керак. $\hat{S}^2$ ва $(\hat{S}\hat{L})^2$ лар $\hat{S}$ бўйича квадратик ифодалардир. Булардан биринчисининг хос қийматлари J га боғлиқ эмас ва шу сабабли, термини ажрата олмайди. Шунинг учун уни тушириб қолдириб,

$$\hat{V}_{ss} = B (\hat{S}\hat{L})^2 \quad (51.5)$$

ни ёзиш мумкин; бунда B — ўзгармас. Бу операторнинг хос қийматлари J га боғлиқ бўлмаган, $J(J+1)$ га пропорционал бўлган ҳалларни ва ниҳоят, $J^2(J+1)^2$ га пропорционал бўлган ҳадни ўз ичига олади. Булардан биринчиси ажралишга олиб келмайди, шунинг учун у бизни қизиқтирмайди. Иккинчиси эса (53.1) ифода таркибига киритилиши мумкин. Бунда A нинг қиймати маълум миқдорга ўзгаради, холос. Ниҳоят, учинчиси терм энергияси учун

$$\frac{B}{4} J^2 (J+1)^2 \quad (51.6)$$

ифодани беради.

Атом сатҳларини тузишнинг баён қилинган схемаси электронлар орбитал моментлари қўшилиб, атомнинг L тўла орбитал моментини, унинг спинлари қўшилиб S тўла спинни беради деган тасаввурга асосланган. Юқорида айтиб ўтганимиздек, бундай фараз релятивистик эффектлар кичик бўлган шароитдагина ўринли; тўғрироғи, нозик структура интерваллари ҳар хил L, S га эга бўлган сатҳлар орасидаги фарқдан кичик бўлиши керак. Бундай яқинлашиш *Рассель-Саундерс* ҳоли деб аталади; баъзан *LS-тип боғланиш* ҳам дейилади.

Амалда бу яқинлашишни қўллаш мумкин бўлган соҳа чеклангандир. *LS-тип боғланиш* бўйича енгил атом сатҳлари тузилади, атом номерининг ортиши билан эса атомда релятивистик ўзаро таъсир кучая боради ва *Рассель-Саундерс* яқинлашишни қўллаш мумкин бўлмай қолади.

Қарама-қарши чегаравий ҳолда релятивистик ўзаро таъсир электростатик таъсирга нисбатан катта. Бу ҳолда орбитал момент ва спин ҳақида алоҳида гапириб бўлмайди, чунки улар сақланмайди. Ҳар бир айрим электрон ўзининг j тўла моменти орқали характерланади. Бу моментлар қўшилиб, атомнинг умумий J тўла моментини беради. Атом сатҳларини тузишнинг бу схемаси *jj-тип боғланиш* дейилади. Амалда бу тип боғланиш соф ҳолда учрамайди; жуда оғир атомларнинг сатҳлари ичида, *LS-ва jj-тип боғланишлар* орасига тўғри келувчи ҳар хил кўринишдаги оралиқ боғланишлар кузатилади.

Атом энергия сатҳларининг навбатдаги (нозик структурадан кейинги) *ўта нозик ажралиш* деб аталувчи ажралиши электрон ва ядро магнит моментларининг ўзаро таъсири натижасида вужудга келади. Ядроларнинг магнит моментлари кичик (электронларнинг моментларига нисбатан) бўлганидан, бу ўзаро таъсир ҳам ниҳоятда кучсиз бўлади. Шу сабабли, бу таъсир вужудга келтирган ажралиш интерваллари нозик структура интервалларига нисбатан жуда кичик. Демак, *ўта нозик структура* нозик структура компонентларининг ҳар бири учун алоҳида-алоҳида кўрилиши лозим.

Ядро спинини атом спекторскопиясида қабул қилинганидек, i билан белгилаймиз. Атомнинг (ядро билан биргаликда) тўла моменти $F = J + i$ бўлсин, бунда J аввалгидек, электрон қобиқнинг тўла моментини кўрсатади. *Ўта нозик структуранинг* ҳар бир компоненти F

нинг аниқ қиймати билан характерланади. Моментларни қўшишнинг умумий қондасига кўра F квант сони

$$F = J + i, \quad J + i - 1, \quad \dots, \quad |J - i| \quad (51. 7)$$

қийматлар қабул қилади.

52-§. Менделеевнинг элементлар даврий системаси

Атом номерининг ортиб бориш тартибида қаторга жойлашган элементлар хоссаларининг даврий ўзгариши кузатилган. Хоссаларнинг бундай даврий ўзгариши *Д. И. Менделеев* томонидан аниқланган бўлиб, уларнинг табиатини тушунгириш атом электрон қобикларининг кетма-кет бўлиб бориш хусусиятларини қараб чиқишни талаб қилади; бу *Н. Бор* томонидан бажарилди (1922).

Бир атомдан назбагдасига ўтганда заряд биттага ошади ва қобикқа битта электрон қўшилади. Биринчи қарашда, қўшилаётган ҳар бир сўнгги электроннинг боғланиш энергияси атом номерининг ортиши билан монотон ўзгарадиганга ўхшайди. Лекин ҳақиқатда бундай эмас.

Водород атомининг нормал ҳолатида ҳаммаси бўлиб, $1s$ ҳолатда ётган фақат битта электрон бор. Кейинги элемент — гелийда битта электрон яна шу $1s$ ҳолатга қўшилади. Лекин гелий атомида ҳар бир $1s$ -электроннинг боғланиш энергияси водород атомидаги электроннинг боғланиш энергиясидан анча катта. Бу ҳол H атомида электрон жойлашган майдон билан He^+ ионга қўшилувчи электрон жойлашган майдон орасидаги фарқдан келиб чиқувчи табиий натижадир; катта масофаларда бу майдонлар тахминан бир хил, лекин $Z = 2$ бўлган ядро яқинида He^+ ионнинг майдони водород атомининг $Z = 1$ бўлган ядроси майдонидан кучлироқ.

Литий атомида ($Z = 3$) учинчи электрон $2s$ ҳолатга тушади, чунки $1s$ ҳолатда бир вақтнинг ўзида 2 тадан ортиқ электрон ёта олмайди. Берилган Z да $2s$ сатҳ $1s$ сатҳдан юқорида жойлашади; ядро зарядининг ортиши билан ҳар иккала сатҳ пасаяди. Лекин $Z = 2$ дан $Z = 3$ га ўтганда биринчи эффект иккинчи эффектдан устун келади. Шунинг учун ҳам Li атомидаги учинчи элек-

троннинг боғланиш энергияси гелий атомидаги электронларнинг боғланиш энергиясидан анча кичик бўлади.

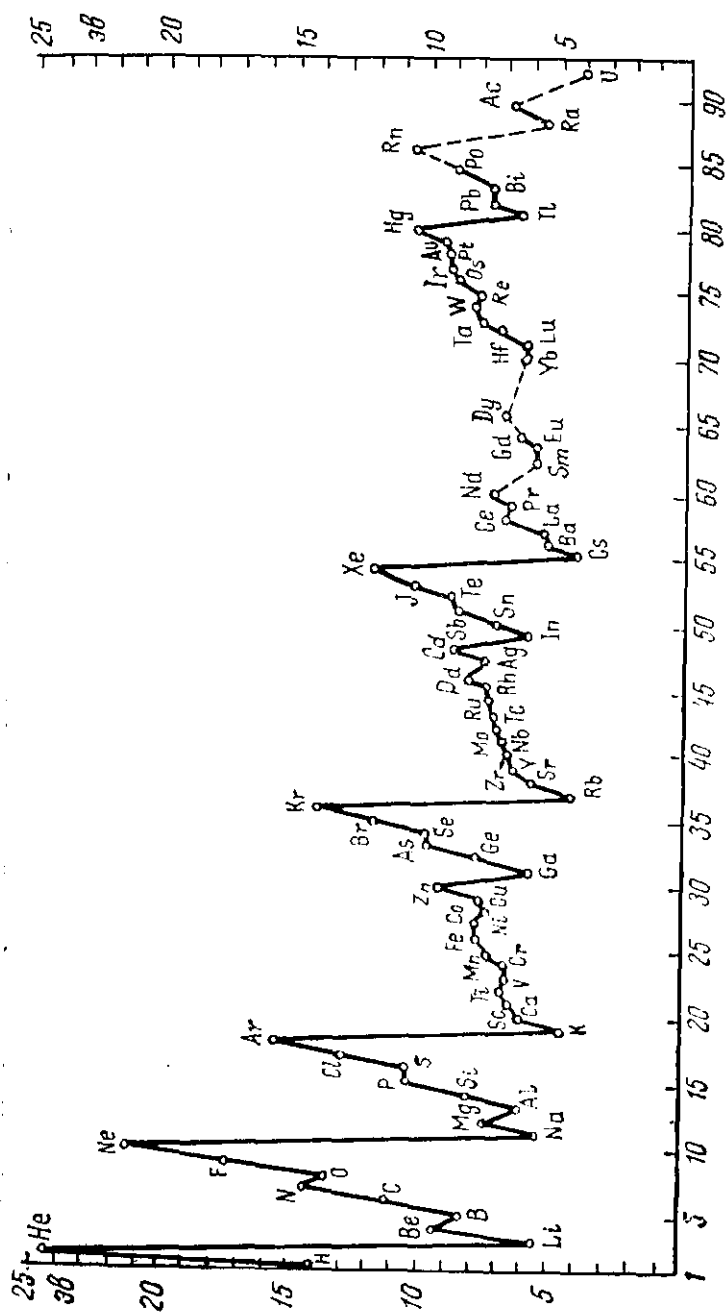
Кейин Be ($Z=4$) дан Ne ($Z=10$) гача атомларда кетма-кет аввал яна битта $2s$ - электрон ва сўнгга олти $2p$ - электрон қўшилади. Ядро заряди ортаётгани сабабли, қўшилади электронларнинг боғланиш энергияси умуман ортади. Na ($Z=11$) атомига ўтишда қўшиладиган электрон $3s$ ҳолатга тушади; бу ҳолда юқорироқ қобиқларга ўтиш эффекти ядро зарядининг ортиш эффектидан устун келади ва боғланиш энергияси яна кескин камаяди.

Электрон қобиқлар тўлиб боришининг бундай манзараси элементларнинг барча кетма-кетлиги учун характерлидир. Ҳамма электрон ҳолатларни кетма-кет тўлувчи группаларга тақсимлаш мумкин: группалар элементлар қатори билан тўла борган сари боғланиш энергияси умуман ортиб боради, лекин навбатдаги группа ҳолатлари тўлишининг бошланғич моментида боғланиш энергияси кескин пасаяди.

11- расмда элементларнинг ионизация потенциаллари учун олинган маълум спектроскопик маълумотлар келтирилган; улар ҳар бир элементдан кейингисига ўтганда қўшиладиган электронларнинг боғланиш энергияларини аниқлайди. Ҳар хил ҳолатлар кетма-кет тўлувчи группаларга қуйидаги тарзда тақсимланади:

$1s$	.	.	.	.	.	.	.	2 та электрон		
$2s, 2p$	.	.	.	.	.	.	.	8 "	"	
$3s, 3p$	.	.	.	.	.	.	.	8 "	"	
$4s, 3d, 4p$	.	.	.	.	.	.	.	18 "	"	(52. 1)
$5s, 4d, 5p$	.	.	.	.	.	.	.	18 "	"	
$6s, 4f, 5d, 6p$	.	.	.	.	.	.	.	32 "	"	
$7s, 6d, 5f, \dots$										

Биринчи группа H ва He билан тўлади; иккинчи ва учинчи группалар даврий системанинг ҳар бирида 8 тадан элементи бўлган биринчи иккита (кичик) даврига мос келади. Сўнгга 18 та элементли иккита катта давр ҳамда ўз ичига нодир-ер элементларини олган ва ҳаммаси бўлиб 32 элементи бўлган катта давр келади. Ҳолатларнинг сўнгги группаси табиатда мавжуд бўлган элементлар (ва сунъий трансурон элементлар) билан тўла тўлдирилган эмас.



Ҳар бир группа ҳолатларининг тўлиш процессида элементлар хоссаларининг ўзгариш жараёнини тушуниш учун d -ва f -ҳолатларни s - ва p -ҳолатлардан фарқлантирувчи қуйидаги муҳим хусусиятни ҳисобга олиш лозим.

Электроннинг марказий-симметрик майдондаги (электр ва марказдан қочма майдонлар қўшилишидан ҳосил бўлган) эффектив потенциал энергия эгри чизиги оғир атомда координата боши яқинида тез, қарийб вертикал пасаяди ва чуқур минимумга эга бўлади. Сўнг-ра юқорига кўтарилиб, ноль қийматга асимптотик яқинлашади. s -ва p -ҳолатлар учун бу эгри чизиқлар ўзларининг ўсадиган қисмида бир-бирига жуда яқин келади.

Бу, s -ва p -ҳолатларда электронлар ядродан тахминан бир хил масофада ётади, демакдир. d -ҳолат, айниқса, f -ҳолат учун эгри чизиқлар анча чапдан ўтади; бу эгри чизиқлар билан чегараланувчи „классик йўл қўйилган“ соҳа электронларнинг худди шундай тўла энергиясида s -ва p -ҳолатлардагига нисбатан ядрога анча яқинроқда ётади. Бошқача айтганда, d -ва f -ҳолатлардаги электрон s -ва p -ҳолатлардаги электронга нисбатан ядрога анча яқин бўлади.

Атомларнинг бир қатор хоссалари (жумладан, элементларнинг химиявий хоссалари — 58-§ га қаранг) асосан электрон қобикларнинг ташқи соҳаларига боғлиқ бўлади. Шу муносабат билан d -ва f -ҳолатларнинг юқорида баён этилган хусусиятлари муҳим аҳамиятга эга. Масалан, $4f$ -ҳолатлар (нодир-ер элементларида — қуйига қаранг) тўлаётганда қўшилувчи электронлар аввал тўлган ҳолатлардаги электронларга нисбатан ядрога анча яқин жойлашади. Натижада бу электронлар химиявий хоссаларда қарийб акс этмайди ва ҳамма нодир-ер элементлари химиявий хоссалари жиҳатида бир-бирига жуда ўхшайди.

d -ва f -қобиклари тўлган (ёки умуман бундай қобикларга эга бўлмаган) элементлар *бош группа* элементлари деб аталади; шундай қобиклари энди тўлаётган элементлар эса *оралиқ группа* элементлари деб аталади. Бу группалар элементларини айрим-айрим кўриб чиққан маъқул.

Бош группа элементларини қарашдан бошлаймиз Водород ва гелийнинг асосий ҳолатлари:



(химиявий символнинг чап томонида турган индекс ҳамма жойда атом номерини билдиради). Бош гурппага тегишли бошқа элементларнинг электрон конфигурациялари 1- жадвалда берилган.

1- ж а д в а л

Бош гурппа элементларининг электрон
конфигурациялари

	s	s^2	s^2p	s^2p^2	s^2p^3	s^2p^4	s^2p^5	s^2p^6	
$n = 2$	${}^3\text{Li}$	${}^4\text{Be}$	${}^5\text{B}$	${}^6\text{C}$	${}^7\text{N}$	${}^8\text{O}$	${}^9\text{F}$	${}^{10}\text{Ne}$	$1s^2$
3	${}^{11}\text{Na}$	${}^{12}\text{Mg}$	${}^{13}\text{Al}$	${}^{14}\text{Si}$	${}^{15}\text{P}$	${}^{16}\text{S}$	${}^{17}\text{Cl}$	${}^{18}\text{Ar}$	$2s^2 2p^6$
4	${}^{19}\text{K}$	${}^{20}\text{Ca}$							$3s^2 3p^6$
4	${}^{29}\text{Cu}$	${}^{30}\text{Zn}$	${}^{31}\text{Ga}$	${}^{32}\text{Ge}$	${}^{33}\text{As}$	${}^{34}\text{Se}$	${}^{35}\text{Br}$	${}^{36}\text{Kr}$	$3d^{10}$
5	${}^{37}\text{Rb}$	${}^{38}\text{Sr}$							$4s^2 p^6$
5	${}^{47}\text{Ag}$	${}^{48}\text{Cd}$	${}^{49}\text{In}$	${}^{50}\text{Sn}$	${}^{51}\text{Sb}$	${}^{52}\text{Te}$	${}^{53}\text{I}$	${}^{54}\text{Xe}$	$4d^{10}$
6	${}^{55}\text{Cs}$	${}^{56}\text{Ba}$							$6s^2 5p^6$
6	${}^{79}\text{Au}$	${}^{80}\text{Hg}$	${}^{81}\text{Tl}$	${}^{82}\text{Pb}$	${}^{83}\text{Bi}$	${}^{84}\text{Po}$	${}^{85}\text{At}$	${}^{86}\text{Rn}$	$4f^{14} 5d^{10}$
7	${}^{87}\text{Fr}$	${}^{88}\text{Ra}$							$6s^2 6p^6$
	${}^2\text{S}_{1/2}$	${}^1\text{S}_0$	${}^2\text{P}_{1/2}$	${}^3\text{P}_0$	${}^4\text{S}_{3/2}$	${}^3\text{P}_2$	${}^2\text{P}_{3/2}$	${}^1\text{S}_0$	

Ҳар бир атомда жадвалнинг ўнг томонида шу ва ундан юқори сатрларда кўрсатилган қобиклар батамом тўлган. Тўлаётган қобиклардаги электрон конфигурация юқорида кўрсатилган, бунда бу ҳолатлардаги электронларнинг бош квант сонлари жадвалдаги шу сатрнинг чап томонида турувчи рақам билан кўрсатилган. Пастда эса атомнинг нормал ҳолати бир бутунлигича кўрсатилган. Масалан, Al атоми $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 P_{1/2}$ электрон конфигурацияга эга.

Инерт газлар атомлари (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) жадвалда алоҳида ўрин эгаллайди — уларнинг ҳар бирида (52. 1) да келтирилган гурппа ҳолатлари тўлишини тугаллайди. Бу элементларнинг электрон конфигурациялари айниқса барқарор (мос қатор учун ионизация потенциаллари энг катта) бўлганидан, улар химиявий инертдир.

Кўрамызки, бош гурппа элементларида ҳар хил ҳолатларнинг тўлиши қонуний равишда юз беради, яъни ҳар бир n бош квант сони учун аввало s - ҳолатлар, кейин p - ҳолатлар тўлади. Бу элементлар ионларининг электрон конфигурациялари ҳам шунингдек, маълум қонуниятга бўйсунди (ионизация ҳодисаси d - ва f - қо-

биқ электронлари устида юз бермагунча), яъни ҳар бир ион ўзидан олдинги атомга мос келган конфигурацияга эга. Масалан, Mg^{+} иони Na атоми конфигурациясига, Mg^{++} ион эса Ne атоми конфигурациясига эга бўлади.

Энди оралиқ группа элементларига ўтамиз. $3d$, $4d$, $5d$ қобикларнинг тўлиши мос ҳолда *темир, палладий, платина* группалари деб аталувчи группалар элемент-

2-жадвал

Темир, палладий ва платина группаларига тегишли
элементлар атомларининг электрон конфигурациялари
Темир группаси

Ar + қобиғи	$_{21}Sc$	$_{23}Ti$	$_{24}V$	$_{24}Cr$	$_{25}Mn$	$_{26}Fe$	$_{27}Co$	$_{28}Ni$
	$3d\ 4s^2$ $^2D_{3/2}$	$3d^2 4s^2$ $^3F_2$	$3d^3 4s^2$ $^4F_{3/2}$	$3d^5 4s$ $^7S_3$	$3d^5 4s^2$ $^6S_{5/2}$	$3d^6 4s^2$ $^5D_4$	$3d^7 4s^2$ $^4F_{9/2}$	$3d^8 4s^2$ $^3F_5$
Палладий группаси								
Kr + қобиғи	$_{39}Y$	$_{40}Zr$	$_{41}Nb$	$_{42}Mo$	$_{43}Tc$	$_{44}Ru$	$_{45}Rh$	$_{46}Pd$
	$4d\ 5s^2$ $^2D_{3/2}$	$4d^2 5s^2$ $^3F_2$	$4d^4 5s$ $^6D_{1/2}$	$4d^5 5s$ $^7S_3$	$4d^5 5s^2$ $^6S_{5/2}$	$4d^7 5s$ $^5F_5$	$4d^8 5s$ $^4F_{9/2}$	$4d^{10}$ $^1S_0$
Платина группаси								
Xe + қобиғи	$_{57}La$							
	$5d 6s^2$ $^2D_{3/2}$							
Xe + 4f ¹⁴ + қобиғи	$_{71}Lu$	$_{72}Hf$	$_{73}Ta$	$_{74}W$	$_{75}Re$	$_{76}Os$	$_{77}Ir$	$_{78}Pt$
	$5d 6s^2$ $^2D_{3/2}$	$5d^2 6s^2$ $^3F_2$	$5d^3 6s^2$ $^4F_{3/2}$	$5d^4 6s^2$ $^5D_0$	$5d^5 6s^2$ $^6S_{5/2}$	$5d^6 6s^2$ $^5D_4$	$5d^7 6s^2$ $^4F_{9/2}$	$5d^8 6s$ $^3D_3$

ларида юз беради. 2- жадвалда бу группа атомларининг конфигурация ва термлари ҳақида экспериментал спектроскопик маълумотлар келтирилган. Жадвалдан кўриниб турибдики, d - қобиқнинг тўлиши бош группа элементлари атомларида s - ва p - қобиқлар тўлиши жараёнига нисбатан унча қонуний бўлмайди. Бу ерда s - ва d - ҳолатлар орасидаги „мусобақа“ характерли белгидир. Бу белги шунда намоён бўладики, ортиб борувчи p га эга бўлган $d^p s^2$ тип конфигурацияларнинг қонуний кетма-кетлиги ўрнига, кўп ҳолатларда $d^{p+1} s$ ёки d^{p+2} тип конфигурациялар анча ўринли бўлар экан. Масалан, темир группасида Cr атоми $3d^4 4s^2$ эмас, балки $3d^5 4s$ конфигурацияга эга; саккизта d - электронли Ni дан сўнг биратўласига d - қобиғи батамом тўлган (ва шу сабабли, бош группага қарашли деб ҳисобланган) Cu атоми келади.

Ионлар термларида ҳам шунга ўхшаб, қонуният йўқлиги кузатилади, яъни ионларнинг электрон конфигурациялари одатда ўзидан олдинги атом конфигурацияларига мос келмайди. Масалан, V^+ иони Ti даги каби $3d^2 4s^2$ эмас, балки $3d^3$ конфигурацияга, Fe^+ иони эса Mn атомининг $3d^5 4s^2$ конфигурацияси ўрнига $3d^6 4s$ конфигурацияга эга. Таъкидлаб ўтамизки, кристаллар ва эритмаларда табиий кўринишда учрайдиган ҳамма ионларнинг тўлмаган қобиқларида фақат d - электронлар жойлашади (лекин s - ва p - электронлар эмас). Масалан, темир кристалл ва эритмаларда фақат мос ҳолда $3d^6$ ва $3d^5$ конфигурацияли Fe^{++} ва Fe^{+++} ионлар кўринишидагина учрайди.

3- ж а д в а л

Нодир-ер элементлари атомларининг
электрон конфигурациялари

Xe + қобиғи	$_{55}\text{Ce}$	$_{59}\text{Pr}$	$_{60}\text{Nd}$	$_{61}\text{Pm}$	$_{62}\text{Sm}$	$_{63}\text{Eu}$	
	$4f^0 6s^2$ $^3H_4$	$4f^3 6s^2$ $^4I_{9/2}$	$4f^4 6s^2$ $^5I_4$	$4f^5 6s^2$ $^6H_{5/2}$	$4f^6 6s^2$ $^7F_0$	$4f^7 6s^2$ $^8S_{7/2}$	
	$_{64}\text{Gd}$	$_{68}\text{Tb}$	$_{69}\text{Dy}$	$_{70}\text{Ho}$	$_{68}\text{Er}$	$_{70}\text{Yb}$	
	$4f^7 5d 6s^2$ $^9D_2$	$4f^8 5d 6s^2$ $^8H_{11/2}$	$4f^{10} 3s^2$ $^5I_8$	$4f^{11} 6s^2$ $^4I_{15/2}$	$4f^{12} 6s^2$ $^3H_6$	$4f^{13} 6s^2$ $^2F_{7/2}$	$4f^{14} 6s^2$ $^1S_0$

Худди шундай ҳол *нодир-ер элементлари* деб ном олган элементларнинг $4f$ -қобиғи тўлишида ҳам юз беради (3-жадвал). $4f$ -қобиқнинг тўлиши ҳам унча қонуний бўлмай, бунда $4f$ -, $5d$ - ва $6s$ -ҳолатлар орасида „мусобақа“ кетади.

Оралиқ элементларнинг охириги группаси актинийдан бошланади. У элементда худди нодир-ер элементларидан юз берадиган тўлишга ўхшаш $6d$ - ва $5f$ -қобиқларнинг тўлиши юз беради.

53- §. Рентген термлари

Атомдаги ички электронларнинг боғланиш энергиялари шунчалик каттаки, агар бундай электрон тўлмаган ташқи қобиққа ўтса (ёки умуман атомдан чиқиб кетса), уйғонган атом (ёки ион) механикавий жиҳатдан ионланишга нисбатан турғунлигини йўқотар экан. Бундай атом ўз электрон қобиқларини қайтадан тузади ва турғун ион ҳосил қилади. Лекин атомдаги электронларнинг ўзаро таъсири нисбатан заиф бўлганидан, бундай ўтиш эҳтимоли ҳар ҳолда нисбатан кичик, демак, уйғонган ҳолатнинг τ яшаш даври катта. Шу сабабли, $\frac{h}{\tau}$ сатҳ кенглиги (38- §) етарли даражада кичик бўлади. Бу эса ўз навбатида ички электрони уйғонган атом энергиясини атомнинг „квазистационар“ ҳолатларининг дискрет энергия сатҳлари сифатида қарашга имкон беради. Бундай сатҳлар *рентген термлари* деб аталади¹.

Рентген термлари аввало электроннинг қайси қобиқдан чиқиб кетганлиги ёки бошқача айтганда, қайси қобиқда „ковак“ ҳосил бўлганлигига қараб классификацияланади. Бунда электроннинг қайси жойга бориб тушиши атом энергиясига қарийб таъсир қилмайди ва шу сабабли, муҳим эмас.

Муайян қобиқни тўлдирган электронлар тўпламининг тўла моменти нолга тенг. Бу қобиқдан битта электрон чиқиб кетса, қобиқ маълум j моментга эга бўлиб қолади. (n, l) қобиқ учун j момент $j = l \pm \frac{1}{2}$ қийматлар қабул қилади. Шундай қилиб, биз $1s_{\frac{1}{2}}$,

¹ Бу ном кўрилатган сатҳлар орасидаги ўтишларда атомнинг рентген нурлари сочиши билан боғлиқдир.

$2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}, \dots$ лар орқали белгилаш мумкин бўлган

сатҳлар оламин. Бунда j нинг қийматлари „ковак“ нинг жойини кўрсатувчи символга индекс сифатида ёзилади. Лекин бу ҳол учун қуйидагича мослик

$$\begin{array}{cccccccccc} 1s_{1/2} & 2s_{1/2} & 2p_{1/2} & 2p_{3/2} & 3s_{1/2} & 3p_{1/2} & 3p_{3/2} & 3d_{3/2} & 3d_{5/2} & \dots \\ \downarrow & K & L_I & L_{II} & L_{III} & M_I & M_{II} & M_{III} & M_{IV} & M_V \dots \end{array}$$

билан махсус символлар қабул қилинган.

Бир хил n ли сатҳлар (бир хил катта ҳарф билан белгиланган) бир-бирига яқин бўлиб, бошқа n ли сатҳлардан узоқда жойлашади. Бунинг сабаби шундаки, ички электронлар ядрога анча яқин жойлашгани сабабли, улар ётган майдон деярли экранлашмаган Кулон майдонидир. Шунинг учун бу электронларнинг ҳолатлари „водородсимон“, яъни уларнинг энергиялари Ze зарядли ядро майдониде ҳаракатланувчи битта электрон энергиясига тахминан мос келади; лекин бундай электроннинг энергияси фақат n бош квант сонигагина боғлиқлиги бизга маълум (31-§).

Ҳар хил j ли термлар релятивистик эффектлар таъсирида бир-биридан ажралади. Масалан, L_I ва L_{II} лар L_{III} дан; M_I ва M_{II} лар M_{III} ва M_{IV} дан ажралади. Сатҳларнинг бундай жуфтлари *релятивистик дублетлар* деб аталади.

Бир хил j га қарашли ҳар хил l ли термларнинг бир-биридан ажралиши (масалан, L_I нинг L_{II} дан, M_I нинг M_{II} дан) ички электронлар жойлашган майдоннинг ядронинг Кулон майдонидан фарқ қилиши, яъни электронларнинг ўзаро таъсири билан боғлиқ. Бундай дублетлар *экранланган дублетлар* деб аталади.

Рентген терминнинг кенглиги берилган „ковак“нинг тўлишида электрон қобиғининг ҳамма мумкин бўлган ўзгаришлари эҳтимолларининг йиғиндиси орқали аниқланади. Бунда оғир атомларда „ковак“ларнинг берилган қобиқдан юқорироқ қобиққа ўтиши (яъни электронларнинг юқорироқ сатҳлардан пастроқ сатҳга ўтиши) асосий роль ўйнайди. Бундай ўтишларда рентген кванти чиқарилади. Атом номерининг ортиши билан бундай „радиацион“ ўтишлар эҳтимоли ва шу билан бирга сатҳ кенглигининг мос қисми тез ортади.

Енгилроқ атомлар учун эса сатҳ кенглигини аниқлашда муҳим, ҳатто ҳал қилувчи ролни ёруғлик соч-

майдиган ўтишлар ўйнайди. Бундай ўтишда баландроқ сатҳдан ўтган электроннинг ковакни тўлдиришда чиқарган энергияси атомдан бошқа ички электронни чиқариб юборишга сарфланади (бу *Оже эффекти* дейилади). Бундай процесс натижасида атом икки ковакли ҳолатда қолади.

54- §. Электр майдондаги атом

Классик механикада зарралар системасининг электрик хоссалари унинг ҳар хил тартибли мультипол моментлари билан характерланади (I, 62-, 63- § га қаранг). Бу катталикларнинг таърифлари квант механикасида ҳам шундайлигича қолади, лекин уларни операторлар сифатида қараш керак.

Мультипол моментлардан биринчиси дипол моменти

$$\mathbf{d} = \sum e \mathbf{r} \quad (54. 1)$$

бўлиб, вектор кўринишида аниқланади. Атом учун (ядроси координата бошида тинч туради деб фараз қилинувчи) бу йиғинди қобиқдаги ҳамма электронлар бўйича олинади (соддалаштириш мақсадида электронни номерловчи индексни тушуриб қолдирамиз). Атомнинг стационар ҳолатида дипол моментининг ўртача қиймати шу стационар ҳолатларнинг тўлқин функциялари бўйича (54. 1) операторни ўртачалаштириш, яъни мос диагональ матрица элементларини олиш билан топилади. Лекин (54. 1) операторнинг матрица элементлари ҳар қандай қутбий вектор каби (19- § га қаранг), бир хил жуфтликка эга бўлган ҳолатлар орасидаги ўтишлар учун нолга айланади. Шу сабабли, диагональ элементлар ҳар ҳолда нолга тенг бўлади. Демак, атом дипол моментининг стационар ҳолатидаги ўртача қиймати нолга тенг экан¹.

¹ Бу ерда атомнинг энергия сатҳлари фақат унинг тўла моменти йўналишлари бўйича айниган деб фараз қилинади. Фақат момент проекциясининг қийматлари билангина фарқланувчи ҳамма ҳолатлар бир хил жуфтликка эга бўлади. Шу сабабли, уларнинг ҳар қандай суперпозицияси ҳам маълум (худди шундай) жуфтликка эга. „Тасодифан“ айниган сатҳларга эга бўлган водород атоми бундан мустаснодир. l орбитал моменти ҳар хил бўлган ўзаро айниган ҳолатлар ҳар хил жуфтликка эга бўлиши мумкин. Бундай ҳолатлар тўлқин функцияларидан умуман аниқ жуфтликка эга бўлмайдиган суперпозиция тузиш мумкин; дипол моментнинг бу ҳолатларга мос диагональ матрица элементлари нолга айланмаслиги керак,

Системанинг квадруполь моменти диагонал ҳадлари йиғиндиси нолга тенг бўлган

$$Q_{ik} = \sum e (3x_i x_k - \delta_{ik} r^2) \quad (54. 2)$$

симметрик тензор кўринишида аниқланади.

Аввало шуни таъкидлаймизки, атом квадруполь моментининг ўртача қийматлари тўла моменти $J=0$ ва $J=\frac{1}{2}$ бўлган ҳамма ҳолатларда нолга тенг бўлади. Вектор ва тензор матрица элементлари учун танлаш қоидалари топишнинг 18- § да келтирилган усули ёрдамида бунга ишонч ҳосил қилиш мумкин. Бу усулга биноан (54. 2) тензорга расман $L=2$ „момент“ни мос қилиб қўйилади. Агар бу „момент“ни дастлабки ва кейинги ҳолат моментлари J_1 ва J_2 билан қўшганда ноль ҳосил бўлсагина, унинг матрица элементлари нолдан фарқли бўлади. Лекин учта 2, 0, 0 ёки 2, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$ моментдан бундай қиймат ҳосил қилиб бўлмайди ва шунинг учун $J_1 = J_2 = 0$ ёки $J_1 = J_2 = \frac{1}{2}$ ли диагонал матрица элементлари нолга айланиб кетади.

J тўла моменти берилган атом ҳолати учун квадруполь моментнинг ўртача қиймати яна M_J момент проекцияларининг қийматига ҳам боғлиқ бўлади. Шу боғланишни толамиз.

(54. 2) операторни атом ҳолати бўйича ўртачалашни икки босқичда ҳисоблаш мақсадга мувофиқ (51- § га қаранг). Ўртачалаш аввал M_J бўйича эмас, балки J нинг қийматлари маълум бўлган ҳолатлар бўйича олинади.

Шу тарзда ўртачалашган оператор (уни $\hat{Q}_{ik}$ билан белгилаймиз) атом ҳолатини бир бутунлигича характерловчи катталикларнинг операторлари орқали ифодаланиши мумкин. $\hat{J}$ вектор шундай ягона „вектор“дир. Шу сабабли, $\hat{Q}_{ik}$ оператор

$$\hat{Q}_{ik} = \frac{3Q}{2J(2J-1)} (\hat{J}_i \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_i - \frac{2}{3} \delta_{ik} \hat{J}^2) \quad (54. 3)$$

кўринишга эга бўлиши лозим. Бунда қавс ичидаги ифода i ва k индекслар бўйича симметрик ҳамда $i=k$ бўйича йиғилганда нолни берадиган қилиб тузилган (Q коэффициентнинг маъноси қуйида берилган). Бу ерда

$\hat{J}_z$ операторларни ҳар хил M_J ли ҳолатлар бўйича олинган ҳамда 15- § дан бизга маълум бўлган матрица деб тушуниш керак.

Момент векторининг учта компоненти бир вақтда аниқ қийматга эга бўла олмаслиги (54. 3) тензор компонентларига ҳам алоқадордир. Q_{zz} компонент учун

$$\hat{Q}_{zz} = \frac{3Q}{J(2J-1)} \left(\hat{J}_z^2 - \frac{1}{3} \hat{J}^2 \right)$$

га эга бўламиз. Бу операторни J ва M_J лари берилган ҳолатлар бўйича ўртачалаш энди бу операторларни уларнинг хос қийматлари билан алмаштириш демакдир. Шундай қилиб,

$$\bar{Q}_{zz} = \frac{3Q}{J(2J-1)} \left[M_J^2 - \frac{1}{3} J(J+1) \right] \quad (54. 4)$$

ни топамиз. Қидирилаётган боғланиш худди шунинг ўзидир. $\bar{M}_J = J$ да (момент „батамом“ z ўқи бўйлаб йўналган) $\bar{Q}_{zz} = Q$ ҳосил бўлади; бу катталикини, одатда, соғда қилиб *квадрупол момент* деб аталади.

Бир жинсли E электр майдонга жойлаштирилган атомни кўриб чиқамиз. Бундай атомда электронлар системаси аксиал-симметрик майдонда (ядро майдони билан ташқи бир жинсли майдон биргаликда) жойлашган бўлади. Шу сабабли, атомнинг J тўла моменти сақланмайди, лекин унинг симметрия ўқи йўналиши (z ўқ) даги проекцияси сақланишда давом этади.

Ташқи майдон фазода маълум устунликка эга бўлган йўналиш ҳосил қилиб, сатҳларнинг момент йўналишлари бўйича айланишни йўқотади: $J_z = M_J$ қийматлари бўйича фарқланувчи ва эркин атомда бир хил энергияга эга бўлган ҳолатлар электр майдонда ҳар хил энергияга эга бўлиб қолади (*Штарк эффекти*). Аммо бунда сатҳлар тўла ажралмайди, яъни M_J нинг ишоралари билангина фарқланувчи ҳолатларнинг энергиялари бир хиллигича қолади. Бу ҳол вақтнинг ўгирилишига нисбатан симметриянинг бевосита натижасидир (23- §). Вақтнинг ўгирилиши ҳамма тезликларнинг йўналишларини тескарига ўзгартиргани ҳолда момент проекциясининг ишорасини ҳам ўзгартиради. Лекин бунда системанинг энергияси ҳамда E майдон ўзгармай қолади (I, 44- § га қаранг).

Шундай қилиб, атомдаги $M_J = 0$ ли сатҳдан бошқа ҳамма энергия сатҳлари электр майдонда икки каррали

айниган бўлади. Лекин агар J тўла момент ярим бутун сон бўлса, у ҳолда $M_J = 0$ қиймат бўлмайди ва ҳамма сатҳлар икки каррали айниганича қолади. Бу ҳол анча умумий қонданинг хусусий ҳолидир. Қоида қуйидагича таърифланади: J тўла моменти ярим бутун сон бўлган системанинг сатҳлари фақат бир жинсли майдондагина эмас, балки ҳар қандай электр майдонда ҳам икки каррали айниган эканини кўрсатиш мумкин (вақтнинг ўгирилишига нисбатан симметрияга асосланиб). Бу *Крамерс теоремаси* деб аталади¹.

Агар электр майдон етарлича заиф бўлиб, бу майдон таъсирида юзага келаётган қўшимча энергия атомнинг ғалаёнланмаган энергия сатҳлари орасидаги масофаларга нисбатан кичик бўлса, у ҳолда сатҳлар силжишини ғалаёнланиш назариясидан фойдаланган ҳолда ҳисоблаш мумкин. Бунда бир жинсли электр майдондаги ғалаёнланиш оператори атомнинг шу майдондаги потенциал энергияси бўлиб, у атомнинг дипол моменти орқали ифодаланади:

$$V = -Ed = -|E|d_z. \quad (54. 5)$$

Биринчи яқинлашишда сатҳларнинг силжиши ғалаёнланиш операторининг мос диагональ матрица элементлари орқали аниқланади. Лекин бу элементлар, диполь моментнинг ўртача қийматлари нолга тенглиги туфайли, нолга айланади. Шу сабабли, сатҳларнинг электр майдондаги ажралиши ғалаёнланиш назариясининг иккинчи яқинлашишидагина намоён бўлади ва шунинг учун ҳам майдон квадратига пропорционал².

E_n сатҳнинг ΔE_n силжиши майдон бўйича квадратик катталиқ сифатида

$$\Delta E_n = -\frac{1}{2} \alpha_{ik}^{(n)} E_i E_k \quad (54. 6)$$

кўринишдаги формула билан ифодаланиши лозим; бунда $\alpha_{ik}^{(n)}$ коэффицентлар иккинчи ранг симметрик тензор-

¹ Таъкидлаб ўтаминки, ихтиёрый электр майдонда атомнинг ҳолатлари энди момент проекциялари қийматлари билан характерлана олмайди. Чунки бир жинсли бўлмаган майдонда момент векторининг абсолют қийматиgina эмас, балки унинг ҳеч қайси компоненти ҳам сақланмайди.

² Водород атоми бундан мустасно, чунки унинг стационар ҳолатлари учун диполь моментнинг ўртача қиймати нолдан фарқли бўлиши мумкин. Шу сабабли, водород атоми энергия сатҳларининг ажралиши майдон бўйича чизиқлидир.

дан иборат. z ўқини майдон бўйича йўналтириб, қуйидаги ифодани ҳосил қиламиз:

$$\Delta E_n = -\frac{1}{2} \alpha_{zz}^{(n)} |E|^2. \quad (54. 7)$$

Бу формулаларга кирган коэффициентлар бошқа маънога ҳам эга: улар айти вақтда ташқи электр майдонда жойлашган атомнинг қутбланиш қобилиятини ҳам билдиради. Бу даъво ушбу

$$\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right)_{nn} = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} \quad (54. 8)$$

умумий формуладан келиб чиқади. Тенгликнинг чап томонида $\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}$ операторнинг диагонал матрица элементлари турибди, бунда $\hat{H}$ —системанинг бирор λ параметрга боғлиқ гамильтониани. Гамильтониан билан бир қаторда унинг E_n хос қийматлари ҳам шу λ параметрнинг функцияси бўлади. Агар бу формулада λ параметр сифатида майдон катталиги $|E|$ тушунилса ва

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_0 - |E| d_z$$

деб фараз қилинса, у ҳолда (54. 7) ифодадан фойдаланган ҳолда

$$\bar{d}_z = \alpha_{zz}^{(n)} |E| \quad (54. 9)$$

ифодани топиш мумкин. Атомнинг қутбланувчанлиги деганда, унинг майдон таъсири натижасида эришган дипол моменти билан майдон катталиги орасидаги пропорционаллик коэффициенти тушунилади.

(54. 8) формулани исбот қилиш учун $\hat{H}$ операторнинг хос қийматларини аниқловчи ушбу

$$(\hat{H} - E_n) \psi_n = 0$$

тенгламага мурожаат қиламиз. Бу тенгламани λ бўйича дифференциаллаб ва сўнгра уни чап томондан ψ_n^* га кўпайтириб,

$$\psi_n^* (\hat{H} - E_n) \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} = \psi_n^* \left(\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right) \psi_n \quad (*)$$

ни топамиз. Бу тенгликни dq бўйича интегралласак, унинг чап томони нолга айланади, чунки $\hat{H}$ операторнинг Эрмит оператори эканлигидан

$$\int \psi_n^* (\hat{H} - E_n) \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} dq = \int \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} (\hat{H}^* - E_n) \psi_n^* dq \quad (**)$$

га эга бўламиз ((3. 10) га қаранг). Лекин $(\hat{H}^* - E_n) \times \psi_n^* = 0$ бўлганидан, (**) тенгликнинг чап томонидаги ифода нолдир. Демак, (*) тенгликнинг ўнг томони ҳам нолга тенг; бу (54. 8) нинг ўзидир.

55- §. Магнит майдондаги атом

Бир жинсли H магнит майдонда жойлашган атомни қараймиз. (43. 4) га биноан, унинг гамильтониани

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_a \left[\hat{\mathbf{p}}_a + \frac{|e|\hbar}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r})_a \right]^2 + U + \frac{\hbar |e|\hbar}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}} \quad (55. 1)$$

бўлиб, бунда йиғинди ҳамма электронлар бўйича олинади (электроннинг заряди $e = -|e|$ кўринишда ёзилган); U — электронларнинг ядро ва бир-бири билан таъсирлашиш энергияси; $\hat{\mathbf{S}} = \sum \hat{\mathbf{S}}_a$ эса атомнинг тўла электрон спин оператори.

Бир жинсли майдон вектор потенциалини

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathbf{H} \mathbf{r}] \quad (55. 2)$$

кўринишда оламиз (I, 46- § га қаранг). Бундай танлашда $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ оператор $\mathbf{A}$ оператор билан коммутатив бўлишини кўриш осон. Ҳақиқатан ҳам, уларни бирор $\psi(\mathbf{r})$ функцияга таъсир этириб,

$$(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}})\psi = -i\hbar \nabla(\mathbf{A}\psi) + i\hbar \mathbf{A}\nabla\psi = -i\hbar \psi \operatorname{div} \mathbf{A}$$

ифодага эга бўламиз, яъни

$$\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \operatorname{div} \mathbf{A}.$$

Лекин (55. 2) вектор учун $\operatorname{div} \mathbf{A} = -\frac{1}{2} \mathbf{H} \operatorname{rot} \mathbf{r} = 0$. (55. 1) даги квадратни очишда бу ифодани эътиборга олсак, гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{mc} \sum_a \mathbf{A}_a \hat{\mathbf{p}}_a + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \mathbf{A}_a^2 + \frac{|e|\hbar}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}}$$

кўринишга келади, бунда $\hat{H}_0$ — атомнинг майдон бўлмаган ҳолдаги гамильтониани. Бунга A нинг (55. 2) даги ифодасини қўйиб,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|\hbar}{2mc} \mathbf{H} \sum_a [\mathbf{r}_a \hat{\mathbf{p}}_a] + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a [\mathbf{H} \mathbf{r}_a]^2 + \frac{|e|\hbar}{mc} \mathbf{H} \hat{\mathbf{S}}$$

ни ҳосил қиламиз. Лекин $[\mathbf{r}_a \hat{\mathbf{p}}_a]$ вектор кўлайтма электроннинг орбитал момент операторидир. Ҳамма электронлар бўйича йиғинди эса атомнинг $\hbar \hat{\mathbf{L}}$ тўла орбитал момент операторини беради. Шундай қилиб,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \mu_B (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathbf{H} + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a [\mathbf{H} \mathbf{r}_a]^2, \quad (55. 3)$$

бунда μ_B — бор магнетони.

Ташқи магнит майдон ҳам электр майдон каби, тўла момент йўналишлари бўйича айланишни йўқотиб, атом сатҳларини ажратади (*Зееман эффекти*). Бу ажралишнинг энергиясини J, L, S квант сонларининг муайян қийматлари билан характерланувчи сатҳлар учун (яъни атомдаги боғланишни LS -боғланиш деб фараз қиламиз — 51- § га қаранг) аниқлаймиз.

Магнит майдонни шунчалик заиф деб қараймизки, бунда $\mu_B |\mathbf{H}|$ катталики атомнинг энергия сатҳлари орасидаги масофага нисбатан ва шу билан бирга сатҳларнинг нозик структураси интервалларига нисбатан кичик дейиш мумкин бўлсин. У ҳолда (55. 3) даги иккинчи ва учинчи ҳадни ғалаёнланиш деб, мультиплетнинг айрим компонентларини эса ғалаёнланмаган сатҳлар деб қараш мумкин. Биринчи яқинлашишда майдон квадратига пропорционал бўлган учинчи ҳадни, майдон бўйича чизиқли бўлган иккинчи ҳадга нисбатан эътиборга олмай ташлаб юбориш мумкин.

Ғалаёнланиш назариясининг биринчи яқинлашишида ΔE ажралиш энергияси ғалаёнланиш операторининг майдон йўналишидаги тўла момент проекциялари билан фарқланувчи ҳолатлар (ғалаёнланмаган) даги ўртача қиймати орқали аниқланади. Бу йўналишни z ўқи бўйича олиб,

$$\Delta E = \mu_B |\mathbf{H}| (\bar{L}_z + 2\bar{S}_z) = \mu_B |\mathbf{H}| (\bar{J}_z + \bar{S}_z) \quad (55. 4)$$

га эга бўламиз. $\bar{J}_z$ ўртача қиймат берилган $J_z = M_J$ хос қийматнинг ўзидир. $\bar{S}_z$ ўртача қийматни эса 51- §

да кўрсатилган „босқичлаб“ ўртачалаш ёрдамида ҳисоблаймиз. Аввал $\hat{S}$ операторни атомнинг берилган S, L ва J қийматли (лекин M_J эмас) ҳолатлари бўйича ўртачалаймиз. Шу тариқа ўртачалаштирилган $\hat{S}$ оператор эркин атомни характерловчи ва бирдан-бир сақланувчи $\hat{J}$ „вектор“ бўйлабгина „йўналтирилиши“ мумкин. Шунинг учун

$$\bar{S} = \text{const} \cdot J$$

деб ёзиш мумкин. Лекин бу тенглик ушбу кўринишда фақат шартли маънога эга бўлади, чунки J векторнинг учта компоненти бир вақтда аниқ қийматга эга бўла олмайди. Фақат унинг z - проекцияси

$$\bar{S}_z = \text{const} \cdot J_z = \text{const} \cdot M_J$$

ва

$$\bar{S}J = \text{const} \cdot J^2 = \text{const} \cdot J(J+1),$$

тенглик бавосита маънога эга. Охирги тенглик $\bar{S} = \text{const} \cdot J$ нинг иккала томонини J га кўпайгиришдан ҳосил бўлади. J сақланувчи векторни ўртача қиймат белгиси остига олиб, $\bar{S}J = \overline{SJ}$ ёзамиз. $\overline{SJ}$ ўртача қиймат муайян L^2, S^2, J^2 қийматга ((17. 3) формулага биноан, ушбу ҳолда L_1, L_2, L лар ўрнида мос равишда S, L ва J ларни тушуниш лозим) эга бўлган ҳолатлардаги

$$SJ = \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]$$

хос қийматга мос келади. Иккинчи тенгликдан const ни аниқлаб ва сўнгра уни биринчига қўйиб,

$$S_z = M_J \frac{JS}{J^2} \quad (55. 5)$$

ифодага эга бўламиз. Топилган ифодаларни йиғиб ва (55. 4) га қўйиб, ажралиш энергияси учун узил-кесил

$$\Delta E = \mu_B g M_J |H| \quad (55. 6)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бунда

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \quad (55. 7)$$

Ланде кўпайтувчиси ёки гиромангнит кўпайтувчи дейилади. Агар спин мавжуд бўлмаса, $g = 1$ (яъни $S = 0$

бўлганидан, $J = L$) ва агар $L = 0$ (демак, $J = S$) бўлса, $g = 2$ бўлишини таъкидлаб ўтамыз.

(55. 6) формула M_J нинг $2J + 1$ та ҳар хил қийматлари, чунончи $M_J = J, J - 1, \dots, -J$ учун ҳар хил энергия қийматларини беради. Бошқача айтганда, магнит майдон сатҳларнинг моментг йўналишлари бўйича айнишини тўла йўқотади (электр майдон эса аксинча, $M_J = \pm |M_J|$ бўлган сатҳларни ажратмай қолдирар эди¹. Лекин шунини таъкидлаймизки, (55. 6) формула билан аниқланадиган чизиқли ажралиш $g = 0$ да юз бермайди (буни $J \neq 0$ да ҳам кузатиш мумкин, масалан, $^4D_{1/2}$ ҳо-

лат учун).

Биз олдинги параграфда электр майдондаги атом энергия сатҳларининг силжиши билан унинг ўртача электрик дипол моменти орасида боғланиш борлигини кўрган эдик. Худди шундай боғланиш магнит майдон учун ҳам мавжуддир. Зарядлар системасининг бир жинсли магнит майдондаги потенциал энергияси классик механикада — $\mu \mathbf{H}$ ифода орқали берилади; бунда μ — системанинг магнит моменти. Квант механикасида эса у мос оператор билан алмаштирилади. Демак, система гамильтониани

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mu \hat{\mathbf{H}} = \hat{H}_0 - \mu_z |\mathbf{H}|$$

кўринишга эга бўлади. Энди (54. 8) формулани қўллаб (λ параметр сифатида $|\mathbf{H}|$ олинади), магнит моментнинг ўртача қиймати

$$\overline{\mu_z} = - \frac{\partial \Delta E}{e |\mathbf{H}|} \quad (55. 8)$$

га тенгличини аниқлаймиз. Бунда ΔE атомнинг берилган ҳолатдаги энергия сатҳининг силжиши. Бунга (55. 6) ни қўйиб, атом тўла моментнинг маълум z йўналишдаги M_J проекцияси аниқ қийматга эга бўлган ҳолатда худди шу йўналишда

$$\overline{\mu_z} = - \mu_B g M_J \quad (55. 9)$$

ўртача магнит моментга эга бўлишини кўрамыз.

¹ Ўтган параграфда шу муносабат билан электр майдон учун юритилган мулоҳазалар магнит майдонга тўғри келмайди. Гап шундаки, вақтни ўгириш операцияси $\mathbf{H} \rightarrow -\mathbf{H}$ (I, 44- § га қаранг) алмаштириш ёрдамида бажарилади. Шу сабабли, операция натижасида бир-биридан ҳосил бўлган ҳолатлар моҳият-жиҳатидан, ҳар хил майдонлардаги атомга тааллуқлидир.

Агар атом спинга ҳам, орбитал моментга ҳам эга бўлмаса ($L = S = 0$), у ҳолда (55. 3) даги иккинчи ҳад биринчи ва ҳатто ундан юқори яқинлашишларда ҳам сатҳ силжишларига ҳеч қандай ҳисса қўшмайди (чунки L ва S нинг ҳамма матрица элементлари йўқолиб кетади). Шу сабабли, ушбу ҳолда ҳамма эффект фақат (55. 3) даги учинчи ҳад билан боғлиқ бўлиб қолади ва ғалаёнланиш назариясининг биринчи яқинлашишида сатҳ силжиши ушбу

$$\Delta E = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a \overline{[Hr_a]^2} \quad (55. 10)$$

ўртача қийматга тенг бўлади. $[Hr_a]^2 = H^2 r_a^2 \sin^2 \theta_a$ деб ёзиб (бунда θ_a бурчак — H ва r_a орасидаги бурчакдир), уни r_a йўналишлар бўйича ўртачалаймиз. Атомнинг $L = S = 0$ ҳолати сферик симметрияга эга. Шу сабабли, йўналишлар бўйича ўртачалош r_a масофалар бўйича ўртачалошга боғлиқ бўлмагани ҳолда $\overline{\sin^2 \theta_a} = 1 - \overline{\cos^2 \theta} = \frac{2}{3}$ ни беради. Шундай қилиб,

$$\Delta E = \frac{e^2}{12mc^2} H^2 \sum_a \overline{r_a^2}. \quad (55. 11)$$

Атомнинг (55. 8) формулага биноан ҳисобланган магнит моменти энди майдон катталигига пропорционал бўлади ($L = S = 0$ ли атом ташқи майдон бўлмаганда, албатта, магнит моментга эга эмас). Уни $\chi |H|$ кўринишда ёзиб, бундаги χ ни биз атомнинг магнит қабул қилувчанлик коэффициенти деб қарашимиз мумкин. Бу коэффициент учун *Ланжвен формуласи* деб аталувчи ушбу

$$\chi = -\frac{e^2}{6mc^2} \sum_a \overline{r_a^2} \quad (55. 12)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бу катталик манфий, яъни атом диамагнитдир.

VIII боб

ИККИ АТОМЛИ МОЛЕКУЛА

56- §. Икки атомли молекуланинг электрон термлари

Молекуляр назарияда атом ядролари массасининг электронлар массасига нисбатан жуда катта эканлиги асосий роль ўйнайди. Массалар орасидаги бундай фарқ туфайли, молекуладаги ядронинг ҳаракат тезлиги электронлар тезлигига нисбатан жуда кичик бўлади. Бу электронлар ҳаракати бир-бирдан маълум масофаларда тинч ётган ядролар атрофида юз беради деб қарашга имкон беради. Бундай системанинг U_n энергия сатҳларини аниқлаб, биз молекуланинг *электрон термларини* топамиз. Энергетик сатҳлари аниқ сонлардан иборат бўлган атомлардан фарқли ҳолда, электрон термлар аниқ сонларнинг эмас, балки параметрларнинг — молекуладаги ядролар орасидаги масофаларнинг функцияси бўлади. U_n энергия таркибига ядроларнинг ўзаро электростатик таъсир энергияси ҳам киради. Демак, U_n ҳаракатсиз ядроларнинг берилган вазияти учун молекулаларнинг тўла энергиясини ифодалайди.

Анчагина батафсил назарий тадқиқот фақат энг содда молекулалар, яъни *икки атомли* молекулалар устидагина олиб борилиши мумкин. Биз бу бобда фақат шундай молекулаларни кўриб чиқамиз. Икки атомли молекуланинг электрон термлари фақат биттагина параметрнинг, яъни ядролар орасидаги r масофанинг функцияси бўлади.

Атом термларини классификациялашнинг асосий принципларидан бири L тўла орбитал моментнинг қийматлари бўйича классификациялаш эди. Молекулаларда эса электронлар тўла орбитал моментининг сақланиш

қонуни умуман ўринли эмас, чунки бир нечта ядронинг электр майдони марказий симметрияга эга эмас.

Лекин икки атомли молекулаларда майдон иккала ядродан ўтган ўққа нисбатан аксиал симметрикдир. Шунинг учун бу ҳолда орбитал моментнинг симметрия ўқиға проекциясигина сақланади ва биз молекуланинг электрон термларини ана шу проекциянинг қийматлари бўйича классификациялашимиз мумкин. Орбитал моментнинг молекула ўқиға проекциясининг абсолют қийматини Λ ҳарфи билан белгилаш қабул қилинган; у 0, 1, 2... — қийматлар қабул қилади. Ҳар хил Λ қийматли термларни ҳар хил L ли атом термларини кўрсатувчи латин ҳарфларига мос ҳолда катта грек ҳарфлари билан белгилаш қабул қилинган. Масалан, $\Lambda = 0, 1, 2$ ларга Σ -, Π -, Δ -термлар мос келади.

Бундан ташқари, молекуланинг ҳар бир электрон ҳолати молекуладаги ҳамма электронларнинг S тўла спини орқали характерланади. Релятивистик эффектларнинг ҳеч қайсиси (масалан, термнинг нозик структураси — 51- §) ҳисобга олинмаганда S спинли электрон терм спин йўналишлари бўйича $2S + 1$ карра айниган бўлади. $2S + 1$ сони атомлардагидек, терм *мультиплетлиги* дейилади ва терм симболи олдиға индекс сифатида ёзилади; масалан, $^3\Pi$ белги $\Lambda = 1$ ва $S = 1$ бўлган термни билдиради.

Молекулаларни симметрия ўқи атрофида ихтиёрий бурчакка буриш билан бир қаторда шу ўқдан ўтувчи исталган текисликда акслантиришга ҳам йўл қўйилади. Бундай акслантириш молекула энергиясини ўзгартирмайди. Лекин акслантириш натижасида ҳосил бўлган ҳолат дастлабки ҳолатга батамом тенг кучли бўлмайди: молекула ўқи орқали ўтган текисликдаги акслантиришда моментнинг шу ўққа нисбатан ишораси ўзгаради¹. Шундай қилиб, нолдан фарқли Λ га эга бўлган ҳамма электрон термлар икки каррали айниган, яъни энергиянинг ҳар бир қийматига молекула ўқидаги орбитал момент проекциясининг йўналиши билан фарқланувчи иккита ҳолат мос келади деган хулосага келамиз. $\Lambda = 0$ бўлган ҳолда эса акслантириш молекула ҳолатини уму-

¹ Ҳақиқатан ҳам агар акслантириш xz текисликда юз берса (бунда z ўқ молекула ўқиға мос келади) бундай алмаштиришда g ва p векторларнинг фақат y -компонентларигина ўз ишорасини ўзгартиради. Шу сабабли $[rp]_z = xp_y - yp_x$ ишорасини ўзгартиради.

ман ўзгартирмайди, демак, Σ -термлар айнамаган бўлади. Σ -термининг тўлқин функцияси акслантириш натижасида фақат ўзгармас сонга кўпайиши мумкин, холос. Айни битта текисликда икки марта акслантириш айний алмаштириш бўлганидан, бу ўзгармас сон ± 1 га тенгдир. Шундай қилиб, акслантиришда тўлқин функцияси умуман ўзгармайдиган Σ -термларни тўлқин функцияси ишорасини ўзгартирадиган Σ -термлардан фарқлантириш зарур. Биринчи хил термлар Σ^+ орқали, иккинчилари эса Σ^- орқали белгиланади.

Агар молекула иккита бир хил атомдан ташкил топган бўлса, у ҳолда молекулада янги симметрия вужудга келади ва демак, электрон термлар учун қўшимча характеристика пайдо бўлади. Чунончи, бир хил ядролари икки атомли молекула ядроларни туташтирувчи чизиқ ўртасидаги шу чизиқни тенг иккига бўлувчи нуқтага нисбатан симметрия марказига эга бўлади (координата бошини шу нуқтага жойлаштирамиз). Шу сабабли, гамильтониан молекуладаги ҳамма электронлар координаталари ишораларининг бир вақтда ўзгаришига (ядро координаталари ўзгармагани ҳолда) нисбатан инвариантдир. Бундай алмаштириш оператори шунингдек, орбитал момент оператори билан ҳам коммутатив бўлганидан, аниқ Λ қийматга эга термларни уларнинг жуфтликлари бўйича ҳам классификациялаш имконияти туғилади: электронлар координаталари ишораларини ўзгартирганда *жуфт ҳолатлар* (g) тўлқин функциялари ўзгармай қолади, *тоқ ҳолатлар* (u) эса ишорасини ўзгартиради. Жуфтликни кўрсатувчи u , g индекслар терм символининг пастига ёзилади: масалан, Π_u , Π_g ва ҳоказо.

Эмпирик жиҳатдан маълумки, химиявий турғун бўлган икки атомли молекуланинг кўпчилигида нормал электрон ҳолат тўла симметрияга эга, яъни электрон тўлқин функциялар молекуланинг ҳамма симметрик алмаштиришларига нисбатан инвариантдир. Кўпчилик нормал ҳолатларда молекуланинг S тўла спини ҳам нолга тенг бўлади (бу масалага биз 58-§ да яна қайтамиз). Бошқача қилиб айтганда, $^1\Sigma^+$ терм молекуланинг асосий терми бўлади. Агар молекула бир хил атомлардан ташкил топган бўлса, асосий терм $^1\Sigma_g^+$ бўлади. O_2 молекуласи (нормал терм $^3\Sigma_g^-$) ва NO молекуласи (нормал терм $^2\Pi$) бу қоидадан мустасно.

57- §. Электрон термларнинг кесишиши

Икки атомли молекуланинг электрон термларини ядролар орасидаги r масофанинг функцияси сифатида график тасвирлаш мумкин (r нинг қийматлари абсцисса ўқиға, энергиянинг қийматлари эса ордината ўқиға қўйилади). Ҳар хил термларни тасвирловчи эгри чизиқларнинг кесишиши бу ерда муҳим аҳамиятга эга.

$U_1(r)$ ва $U_2(r)$ — иккита ҳар хил электрон терм бўлсин. Агар бу термлар бирор нуқтада кесишса, у ҳолда бу нуқта атрофида U_1 ва U_2 функциялар бир-бирига яқин қийматларга эга бўлади. Шу хилда кесишишнинг мумкинлиги масаласини ҳал қилиш учун масалани қуйидагича қўямиз.

r_0 нуқтани қараймиз, бу нуқтада $U_1(r)$ ва $U_2(r)$ функциялар бир-бирига яқин, лекин тенг бўлмаган қийматларга эга бўлади (бу қийматларни E_1 ва E_2 орқали ифодалаймиз). Нуқтани бирор кичик δr катталиққа силжитиш билан, U_1 ва U_2 ни тенглаштириб бўлмасмикан деган саволни ўртага қўямиз. Аввало E_1 ва E_2 энергиялар бир-биридан r_0 масофада ётган ядролар

майдонидаги электронлар системаси $\hat{H}_0$ гамильтонианининг хос қийматлари эканини эслагиб ўтамиз. Агар r масофага δr орттирма берилса, у ҳолда гамильтониан

$\hat{H}_0 + \hat{V}$ кўринишга келади; бунда $\hat{V} = \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial r} \delta r$ — кичик тузатма. U_1 ва U_2 функцияларнинг $r_0 + \delta r$ нуқтадаги қийматларини янги гамильтонианнинг хос қийматлари деб қараш мумкин. Бундай усул $U_1(r)$ ва $U_2(r)$ термларнинг $r_0 + \delta r$ нуқтадаги қийматларини ғалаёнланиш назарияси ёрдамида аниқлашга имкон беради. Бунда $\hat{V}$ оператор $\hat{H}_0$ операторга киритиладиган ғалаёнланиш деб қаралади.

Лекин бу ерда ғалаёнланиш назариясининг одатдаги методини қўллаб бўлмайди, чунки энергиянинг E_1 ва E_2 ғалаёнланмаган хос қийматлари бир-бирига жуда яқин бўлиб, уларнинг айирмаси, умуман айтганда, ғалаёнланишдан катта бўлмайди, яъни (32. 9) шарт бажарилмайди. $E_2 - E_1$ айирманинг камайиб, нолга интилиши натижасида биз айниган хос қийматлар масаласига келамиз. Шу сабабли, бир-бирига яқин хос қийматлар учун 33- § да кўрилган методни қўллаш табиийдир.

ψ_1 ва ψ_2 лар $\hat{H}_0$ ғалаёнланмаган операторнинг E_1 ва E_2 энергияларга мос келувчи хос функциялари бўлсин. Дастлабки нолинчи яқинлашишдаги функция сифатида ψ_1 ва ψ_2 ларнинг ўзларини эмас, балки уларнинг

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (57. 1)$$

чизиқли комбинацияларини оламиз. Бу ифодани

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi \quad (57. 2)$$

ғалаёнланган тенгламага қўйиб,

$$c_1 (E_1 + \hat{V} - E) \psi_1 + c_2 (E_2 + \hat{V} - E) \psi_2 = 0$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бу тенгламани чап томондан навбатма-навбат ψ_1^* ва ψ_2^* га кўпайтириб ва сўнгра интеграллаб, қуйидаги иккита алгебраик тенгламани оламиз:

$$\begin{aligned} c_1 (E_1 + V_{11} - E) + c_2 V_{12} &= 0, \\ c_1 V_{21} + c_2 (E_2 + V_{22} - E) &= 0, \end{aligned}$$

бунда $V_{ik} = \int \psi_i^* \hat{V} \psi_k dq$. $\hat{V}$ оператор Эрмит оператори бўлганидан, V_{11} ва V_{22} ҳақиқий сонлар бўлиб, $V_{12} = V_{21}^*$. Бу тенгламаларнинг бирга ечилиш шарт:

$$\begin{vmatrix} E_1 + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & E_2 + V_{22} - E \end{vmatrix} = 0,$$

бундан

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} (E_1 + E_2 + V_{11} + V_{22} \pm \\ &\pm \sqrt{\frac{1}{4} (E_1 - E_2 + V_{11} - V_{22})^2 + |V_{12}|^2}. \end{aligned} \quad (57. 3)$$

Энергиянинг қидирилаётган хос қийматлари биринчи яқинлашишда ана шу формуладан топилади.

Агар иккала терм энергиясининг қийматлари $r_0 + \delta r$ нуқтада тенг бўлиб қолса (термлар кесишса), у ҳолда (57. 3) дан аниқланувчи ҳар иккала E қиймат тенглашиб қолади. Бунинг учун (57. 3) даги илдизости ифода ноль бўлиши лозим. Бу ифода иккита квадратнинг йиғиндисидан иборат бўлганидан, термларнинг кесишиш нуқталари учун ўшбу тенгламалар

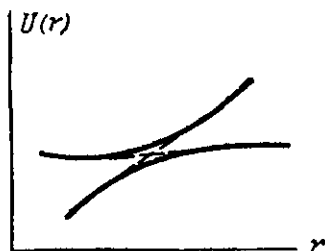
$$E_1 - E_2 + V_{11} - V_{22} = 0, \quad V_{12} = 0 \quad (57. 4)$$

билан берилган мавжудлик шартини топамиз. Лекин бизнинг ихтиёримизда $\hat{V}$ галаёнланишни аниқловчи бор-йўғи биттагина параметр — $\delta\epsilon$ силжиш катталиги бор. Шунинг учун (57. 4) даги иккита тенгламани, умуман айтганда, бир вақтда қаноатлантириш мумкин эмас (ψ_1 ва ψ_2 лар ҳақиқий қилиб танланган; у ҳолда V_{12} ҳам ҳақиқийдир).

Лекин V_{12} матрица элементи айнан нолга айланиши мумкин; у ҳолда (57. 4) нинг $\delta\epsilon$ ни тегишлича танлаш йўли билан қаноатлантирилиши мумкин бўлган фақат битта тенгламаси қолади. Кўрилаётган иккита терм ҳар хил симметрияга эга бўлган ҳолларнинг ҳаммасида бундай танлаш ўринлидир. Симметрия деганда биз бу ерда унинг ҳамма кўринишларини, яъни ўқ атрофида айланишга, текисликларда акслантиришга, инверсияга ва шунингдек, электронларнинг ўрин алмаштиришларига нисбатан симметрияларни тушунамиз. Бу икки атомли молекулаларда гап ҳар хил Λ ли, ҳар хил жуфтликка ёки мультиплетликка эга термлар ҳақида, Σ - термлар учун эса яна Σ^+ ва Σ^- лар ҳақида юритилиши мумкинлигини билдиради.

Бу фикрнинг тўғрилиги $\hat{V}$ операторнинг (шу ҳисобда гамильтонианнинг ўзи ҳам) молекула симметриясининг ҳамма операторлари (ўққа нисбатан момент оператори, акслантириш ва инверсия операторлари ҳамда электронларнинг ўрин алмаштириш операторлари) билан коммутатив бўлишидан келиб чиқади. 18- ва 19-§ларда оператори момент ва инверсия операторлари билан коммутатив бўлган скаляр катталиқнинг матрица элементлари фақат бир хил момент ва жуфтликка эга ҳолатлар орасидаги ўтишлар учунгина нолдан фарқли бўлиши кўрсатилган эди. Бу исбот ихтиёрий симметрия оператори учун умумий ҳолда ҳам ўз кучини сақлайди.

Шундай қилиб, биз икки атомли молекулада фақат ҳар хил симметрияли термларгина ўзаро кесишади, бир хил симметрияли термлар эса кесишиши мумкин эмас, деган хулосага келамиз (Е. Вигнер, И.



12- расм.

Нейман, 1929). Агар бирор тақрибий ҳисоб натижасида бир хил симметрияли иккита терм кесишиб қолса, у ҳолда навбатдаги яқинлашишда бу термлар бир-бирига нисбатан 12- расмда тасвирлангандек (туташ чизиқлар билан) силжиб қолади.

58- §. Валентлик

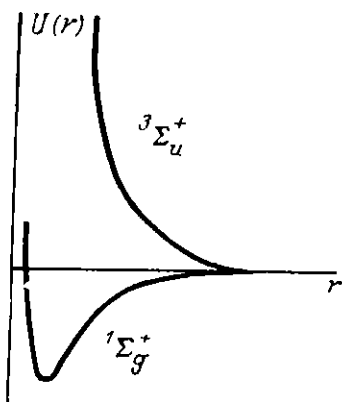
Атомларнинг бир-бирлари билан бирикиб, молекула тузиш хоссаси *валентлик* тушунчаси ёрдамида тушунтирилади. Ҳар бир атомга маълум валентлик мос қилиб қўйилади. Атомлар бирикканларида уларнинг валентликлари ўзаро тўйиниши, яъни атомнинг ҳар бир валент боғланишига бошқа атомнинг маълум валент боғланиши мос келиши керак. Масалан, метан молекуласида (CH_4) тўрт валентли углерод атомининг тўртта валент боғланиши, тўртта бир валентли водород атомининг валент боғланишлари билан тўйинади. Валентликни физикавий нуқтаи назардан тушунтиришга киришар эканмиз, уни энг содда мисол — иккита водород атомининг бирикиб, H_2 водород молекуласини тузишидан бошлаймиз.

Асосий ҳолатда (^2S) ётган иккита водород атомини кўрамиз. Уларнинг ўзаро яқинлашишида $^1\Sigma_g^+$ ёки $^3\Sigma_u^+$ молекуляр ҳолатда ётувчи система ҳосил бўлиши мумкин. Синглет терм антисимметрик спинли тўлқин функцияга, триплет терм симметрик функцияга мос келади. Координата тўлқин функцияси эса аксинча, $^1\Sigma$ терм учун симметрик, $^3\Sigma$ терм учун эса антисимметрик бўлади. Равшанки, H_2 молекуласининг асосий терми фақат $^1\Sigma$ терм бўлиши мумкин. Ҳақиқатан ҳам, $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ антисимметрик тўлқин функция (бунда $\mathbf{r}_1$ ва $\mathbf{r}_2$ — мос равишда иккала электроннинг радиус-вектори) ҳар ҳолда тугунларга эга бўлади (у $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ да нолга айланади) ва шу сабабли, системанинг энг қуйи ҳолатиге қарашли бўла олмайди.

Ҳисоблашлар кўрсатадики, $^1\Sigma$ электрон терм ҳақиқатдан ҳам турғун H_2 молекуласи тузилишига мос келувчи чуқур минимумга эга экан. $^3\Sigma$ ҳолатда эса $V(\mathbf{r})$ энергия ядролар орасидаги масофанинг ортиши билан

монотон камаяди. Бу эса иккита Н атомнинг ўзаро итарилишига мос келади (13-расм)¹.

Шундай қилиб, асосий ҳолатда водород молекуласининг тўла спини нолга тенг: $S = 0$. Маълум бўлишича, бош группа элементларининг деярли ҳамма химиявий турғун бирикмаларининг молекулалари шундай хоссага эга экан. Анорганик молекулалар орасида икки атомли O_2 (асосий ҳолати $^3\Sigma$) ва NO (асосий ҳолати $^2\Pi$) молекулалари ҳамда уч



13-расм.

атомли NO_2 , ClO_2 (тўла спини $S = \frac{1}{2}$) молекулалари бундан мустасно. Оралиқ группага тегишли элементларга келсак, улар алоҳида хоссаларга эга. Биз бу хоссалар билан кейинроқ — бош группа элементларининг валент хоссаларини ўргангандан сўнг танишамиз.

Шундай қилиб, атомларнинг бир-бири билан бирикш қобилияти уларнинг спинларига боғлиқ бўлади (*В. Гайтлер* ва *Г. Лондон*, 1927). Атомлар шундай бирикадики, бунда уларнинг спинлари ўзаро компенсацияланади. Атомларнинг ўзаро бирикш қобилиятини миқдорий характерлаш учун атом спинининг иккиланганига тенг бўлган бутун сондан фойдаланиш қулай. Бу сон атомнинг химиявий валентлигига тенг. Бунда айни битта атомнинг ўзи унинг қандай ҳолатда ётганига қараб, ҳар хил валентликка эга бўлиш мумкинлигини назарда тутиш лозим.

Даврий системанинг бош группа элементларини шу нуқтан назардан кўриб чиқамиз. Бу группанинг (197-бетда келтирилган 1-жадвалдаги биринчи устун, ишқорий металллар группаси) элементлари нормал ҳолатда

¹ Биз бу ерда атомлар орасидаги Ван-дер-Ваальс тортишиш кучларини ҳисобга олмаймиз (61-§). Бу кучларнинг мавжудлиги $^3\Sigma$ терм $U(r)$ эгри чизигида ҳам минимум борлигини (катта масофада жойлашган) билдиради. Лекин бу минимум $^1\Sigma$ терм эгри чизигидаги минимумга нисбатан жуда саёз бўлгани учун у 13-расмдаги масштабда сезилмаган.

$S = \frac{1}{2}$ спинга эга ва шунинг учун уларнинг валентлиги 1 га тенг. Катта спинли уйғонган ҳолат фақат тўлдирилган қобикдаги электронни уйғотиш ҳисобигагина ҳосил қилиниши мумкин. Шу сабабли, бу ҳолатлар шунчалик юқори жойлашган бўладик, натижада уйғонган атом турғун молекула ҳосил қила олмайди.

Иккинчи группа элементларининг атомлари (1-жадвалдаги иккинчи устун, ишқорий-ер металллар группаси) нормал ҳолатда $S = 0$ спинга эга. Шунинг учун бу атомлар нормал ҳолатда химиявий бирикма бера олмайди. Лекин уларнинг тўлмаган қобикда s^2 ўрнига sp конфигурацияга эга бўлган уйғонган ҳолатлари асосий ҳолатга анча яқин жойлашган бўлади. Бу ҳолда тўла спин 1 га тенг бўлганидан, атомнинг бундай ҳолатдаги валентлиги 2 га тенг, худди шу сон иккинчи группа элементларининг асосий валентлигидир.

Учинчи группа элементлари асосий ҳолатда s^2p электрон конфигурация ва $S = \frac{1}{2}$ спинга эга. Лекин тўлган s -қобикдаги электронни уйғотиш йўли билан sp^2 конфигурацияли ва $S = \frac{3}{2}$ спинли, нормал ҳолатга яқин ётувчи уйғонган ҳолат ҳосил қилиш мумкин. Шунга мос ҳолда, бу группа элементлари ўзларини ҳам бир валентли, ҳам уч валентли элементлардек тутати. Бунда бу группанинг биринчи элементлари (B, Al) фақат уч валентлидир. Элементнинг 1 валентлиликка мойиллиги атом номери ортган сари кучлироқ намоён бўлади ва Ti да элементнинг бир валентлиликка ҳамда уч валентлиликка мойиллиги бир хил даражада эканини кўриш мумкин (масалан, $TiCl$ ва $TiCl_3$ бирикмаларида). Бу хосса группанинг биринчи элементларининг уч валентли элемент билан тузган бирикмаларида катта боғланиш энергиясининг энергетик афзаллиги (бир валентли элемент билан тузган бирикмаларига нисбатан) атомнинг уйғониш энергиясидан устун эканлиги билан боғлиқдир.

Тўртинчи группа элементлари асосий ҳолатда s^2p^2 конфигурация ва $S = 1$ спинга эга бўлиб, бу ҳолатга энг яқин ётувчи уйғонган ҳолат эса sp^3 конфигурация ва $S = 2$ спинга эга. Бу ҳолатларга 2 ва 4 валентлик мос келади. Учинчи группадаги каби, тўртинчи группада ҳам биринчи элементлар (C, Si) асосан юқори валентлиликка эга (CO бирикма бундан мустасно). Паст

валентликка мойиллик эса атом номерининг ортиши билан ортиб боради.

Бешинчи группа элементларида асосий ҳолат s^2p^3 конфигурацияга ва $S = \frac{3}{2}$ спинга эга, демак, мос валентлик 3 га тенг. Катта спинли уйғонган ҳолат фақат электронлардан биттасининг бош квант сони навбатдаги қийматга эга бўлган қобиққа ўтишидан ҳосил бўлиши мумкин. Энг яқин шундай ҳолат sp^3s' конфигурацияга ва $S = \frac{5}{2}$ спинга эга (бу ерда s' орқали, шартли равишда, бош квант сони биттага ортиқ бўлган қобиқнинг ҳолати белгиланган). Гарчи бу ҳолатнинг уйғониш энергияси анча катта бўлса-да, бу ҳолда уйғонган атом турғун бирикма туза олади, шу сабабли, бешинчи группа элементлари уч ва беш валентли (масалан, азот NH_3 бирикмада уч валентли, HNO_3 да эса беш валентлидир).

Олтинчи группа элементларининг асосий ҳолатида (s^2p^4 конфигурацияли) спин 1 га тенг бўлганидан, атом икки валентли. p -электронлардан биттасининг уйғониши спини 2 га тенг бўлган s^2p^3s' ҳолатга, яна битта s -электроннинг уйғониши эса спини 3 га тенг бўлган $sp^3s'p'$ ҳолатга олиб келади. Иккала уйғонган ҳолатда ҳам атом мос равишда 4 ёки 6 валентли атом сифатида турғун молекула ҳосил қилади. Бунда олтинчи группанинг биринчи элементи (кислород) фақат икки валентли бўлиб, группанинг кейинги элементлари эса юқори валентликка ҳам эга (масалан, олтингугурт H_2S , SO_2 , SO_3 бирикмаларида мос равишда икки, тўрт ва олти валентлидир).

Еттинчи группа (галлоидлар группаси) асосий ҳолатда (конфигурацияси s^2p^3 , спини $S = \frac{1}{2}$) атомлар бир валентли. Лекин улар ўзларининг уйғонган ҳолатларида (конфигурациялари s^2p^4s' , $s^2p^3s'p'$, $sp^3s'p'^2$ ва спинлари $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$, $\frac{7}{2}$ га тенг, валентликлари эса мос равишда 3, 5, 7) ҳам турғун бирикмалар ҳосил қилиши мумкин. Бунда группанинг биринчи элементи (F) доимо бир валентли бўлиб, кейинги элементлар эса шунингдек, юқори валентликларга ҳам эга (масалан, хлор HCl , HClO_2 , HClO_3 , HClO_4 бирикмаларида мос ҳолда бир, уч, беш ва етти валентлидир).

Ниҳоят, инерт газлар группасининг атомлари асосий ҳолатда батамом тўлган қобиқларга эга бўлиб (демак,

уларнинг спини $S=0$), уларнинг уйғониш энергиялари каттадир. Шу сабабли, валентлик нолга тенг ва бу элементлар химиявий инертдир.

Атомлар бирикиб молекула ҳосил қилганларида атомларнинг тўлган электрон қобиқлари кам ўзгаради. Лекин бунда тўлмаган қобиқлардаги электрон зичлик эса сезиларли ўзгаради. Бу ўзгариш энг кескин юз берадиган ва *гетерополяр боғланиш* деб аталувчи ҳолларда ҳамма валент электронлар бир атомдан иккинчисига ўтади. Шу сабабли, ушбу ҳолда молекула заряди валентлигига тенг бўлган (e бирликларда) ионлардан ташкил топади дейиш мумкин. Биринчи группа элементлари электрик мусбатдир, яъни улар гетерополяр бирикмаларда ўз электронларини бериб, мусбат ион ҳосил қилади. Бошқа группаларга ўтишда электрик мусбатлик тобора пасайиб, электрик манфийликка ўтади. Электрик манфийлик еттинчи группадан энг кучли намоён бўлади. Лекин гетерополярлик ҳақида қуйидаги мулоҳазани юритиш мумкин.

Молекуланинг гетерополяр боғланишга эга бўлиши, уни атомларга ажратганда албатта иккита ион ҳосил бўлади, деган сўз эмас. Масалан, CsF молекуладан биз ҳақиқатда ҳам Cs^+ ва F^- ионларни ҳосил қилган бўлур эдик, лекин NaF молекула эса нейтрал Na ва F атомларга ажралади (чунки, фторнинг электронга мойиллиги цезийнинг ионланиш потенциалига нисбатан катта, лекин натрийнинг ионланиш потенциалидан кичик).

Қарама-қарши чегаравий ҳолда, яъни *гомеополяр боғланишда* молекуладаги атомлар асосан нейтрал қолади. Гомеополяр молекулалар гетерополяр молекулалардан шу билан фарқ қиладики, у сезиларли дипол моментга эга эмас. Гетеро- ва гомеополяр боғланишлар орасидаги фарқ соф миқдорий бўлиб, ҳамма ўткинчи ҳоллар амалга ошиши мумкин.

Энди оралик группа элементларига ўтамиз. Палладий ва платина группасининг элементлари ўзларининг валент хоссаларининг характери бўйича бош группа элементларидан кам фарқ қилади. Фарқ шундан иборатки, бу атомларда d -электронлар нисбатан анча чуқур жойлашади, демак, улар молекуладаги бошқа атомлар билан заиф таъсирлашади. Мана шу сабабли, бу элементларнинг бирикмалари орасида спини нолдан фарқли (амалда $\frac{1}{2}$ дан ошмайдиган) молекулалар би-

лан бириккан „тўйинмаган“ бирикмалар анча кўп учрайди. Ҳар бир элемент ҳар хил валентликка эга бўлиши ва бунда бу валентликлар бир-биридан бош группа элементларидаги каби фақат иккитага эмас (бош группада валентлиkning ўзгариши спини компенсацияланган бирор электроннинг уйғониши билан боғлиқ, натижада бирданига бир жуфт электроннинг спини эркин бўлиб қолади), балки биттага ҳам фарқланиши мумкин.

Нодир-ер элементларининг группалари тўлмаган f -қобиқнинг бўлиши билан характерланади. f -электронлар d -электронларга нисбатан анча чуқур жойлашганидан, улар валентлик ҳосил қилишда умуман қатнашмайди. Шундай қилиб, нодир-ер элементларининг валентлиги фақат тўлмаган қобиқлардаги s - ва p -электронлар билангина аниқланади¹. Лекин шуни ҳам назарда тутиш керакки, атом уйғонганда f -электронлар s - ва p -ҳолатларга ўтиши ва натижада валентлики биттага ошириши мумкин. Ана шунинг учун ҳам нодир-ер элементлари бир-биридан биттага фарқланувчи валентликка эга бўлади (амалда уларнинг ҳаммаси уч ва тўрт валентли).

Темир группаси элементлари ўзларининг валент хоссалари бўйича нодир-ер элементлари билан палладий ва платина группалари элементлари орасидаги оралиқ ҳолатни эгаллайди. Уларнинг атомларида d -электронлар нисбатан чуқур жойлашган бўлиб, бир қатор бирикмаларда валент боғланишда умуман қатнашмайди. Бинобарин, бу бирикмаларда темир группаси элементлари ўзларини худди нодир-ер элементларидек тутати. Булар ион типдаги бирикмалар (масалан, FeCl_2 , FeCl_3) бўлиб, уларга металл атомлари катион сифатида киради. Нодир-ер элементларига ўхшаб, темир группаси элементлари бу бирикмаларда жуда хилма-хил валентликка эга бўлади.

Темир группаси элементларининг бошқа типдаги бирикмалари *комплекс бирикмалар* дейилади. Улар шу билан характерланадики, бунда оралиқ элементларнинг атомлари молекулага оддий ион кўринишида эмас, балки ионнинг мураккаб, комплекс қисми сифатида киради

¹ Баъзи нодир-ер элементлари атомларининг тўлмаган қобиқларидаги d -электронлар аҳамиятга эга эмас. Чунки амалда бу атомлар ҳамма вақт d -электронлар бўлмаган уйғонган ҳолатларда бирикма тўзади.

(масалан, MnO_4^- иони $KMnO_4$ молекулада, $Fe(CN)_6^-$ иони $K_4Fe(CN)_6$ молекулада шундай ионлардир). Бундай комплекс ионларда атомлар бир-бирига оддий ионли бирикмалардагига қараганда яқинроқ жойлашган бўлади ва уларда d -электронлар валент боғланишда қатнашади. Шу сабабли, темир группаси элементлари комплекс бирикмаларда ўзларини палладий ва платина группалари элементларидек тутади.

Ниҳоят, шуни изоҳлаб ўтиш зарурки, 52-§ да бош группага киритилган Cu , Ag , Au элементлар бир қатор бирикмаларда ўзларини оралиқ элементларга ўхшаш тутади. d -қобикдаги электронларнинг энергияси бўйича яқин бўлган p -қобикқа ўтиши ҳисобига (масалан, Cu да $3d$ дан $4p$ га ўтишда) бу элементлар бирдан ортиқ валентликка эга бўла олади. Бундай бирикмалардаги атомлар тўлмаган d -қобикқа эга бўлганидан, ўзларини оралиқ элементлар каби тутади (масалан, Cu ўзини темир группаси элементларидек, Ag ва Au эса Pd ва Pt группалар элементларидек тутади).

59-§. Икки атомли молекула термларининг тебранма ва айланма структуралари

Ушбу бобнинг бошида кўрсатилганидек, ядро ва электронлар массалари орасидаги катта фарқ молекуланинг энергия сатҳларини аниқлаш масаласини икки қисмга ажратиб қарашга имкон беради. Аввал электронлар системасининг энергия сатҳлари қўзғалмас ядролар орасидаги масофаларнинг функцияси сифатида аниқланади (электрон термлар). Сўнгра электронларнинг берилган ҳолатларида ядролар ҳаракати ўрганилади; бу энди ядроларни бир-бири билан $U_n(r)$ қонун бўйича таъсирлашувчи зарралар деб қарашга олиб келади. Бунда U_n — мос электрон терм. Молекула ҳаракати унинг бир бутунлигича илгариланма силжиши билан ядроларнинг ўз инерция марказига нисбатан ҳаракати йиғинди, сидан иборат. Илгариланма ҳаракат албатта, бу ерда аҳамиятга эга эмас ва биз инерция марказини ҳаракатсиз деб ҳисоблашимиз мумкин.

Биз молекуланинг тўла спини $S = 0$ бўлган ҳоллардаги электрон термларни ўрганиш билан чегараланамиз (синглет термлар). Мана шу содда ҳол ўзида икки атомли молекуланинг энергия сатҳлари структурасининг асосий сифатий белгиларини мужассамлантиради

Иккита зарра (ядро) нинг $U(r)$ ўзаро таъсири улар орасидаги r масофага боғлиқ бўлган нисбий ҳаракати масаласи M массали (иккала ядронинг келтирилган массаси) битта зарранинг $U(r)$ марказий майдондаги ҳаракати масаласига келтирилади. Бу масала эса ўз навбатида U билан марказдан қочма энергия йиғиндисига тенг бўлган эффектив потенциал майдондаги бир ўлчовли ҳаракат масаласига келтирилади (29- § билан солиштиринг).

Спин нолга тенг бўлганда, молекуланинг J тўла импульс моменти электронларнинг L орбитал моменти билан ядроларнинг айланиш моменти йиғиндисидан иборат бўлади. Демак, ядроларнинг айланиш моменти оператори $\hat{J} = \hat{L}$ бўлиб, марказдан қочма энергия оператори эса

$$\frac{\hbar^2}{2Mr^2} (\hat{J} - \hat{L})^2$$

кўринишга эга. Эффектив потенциал энергия ушбу

$$U_J(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} (\overline{J - L})^2 \quad (59. 1)$$

формула билан аниқланади. Бунда ўртачалаш r нинг белгиланган қийматида молекуланинг ҳолати бўйича олинади.

Ўртачалашни молекула тўла моменти квадратининг қиймати $J^2 = J(J+1)$ ва электрон моментнинг молекула ўқига (z ўқига) проекцияси $L_z = \Lambda$ бўлган ҳолат учун амалга оширамыз. (59. 1) даги қавсни очиб,

$$U_J(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} J(J+1) + \frac{\hbar^2}{Mr^2} \overline{LJ} + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} \overline{L}^2 \quad (59. 2)$$

га эга бўламиз. Охирги ҳад фақат электрон ҳолатигагина боғлиқ бўлиб, J квант сонини умуман ўз ичига элмайди; бу ҳадни $U(r)$ энергия таркибига киритиб қўйиш мумкин. Худди шу нарса учинчи ҳадга ҳам тааллуқли эканини кўрсатамыз.

Агар моментнинг бирор ўққа проекцияси аниқ қийматга эга бўлса, у ҳолда момент векторининг ўртача қиймати ҳам худди шу ўқ бўйлаб йўналган бўлишини асослатиб ўтамыз (15- § охиридаги изоҳга қаранг). Шу абабли, $\overline{L} = \Lambda n$ деб ёзиш мумкин, бунда n — z ўқи йўналишидаги бирлик вектор. Классик механикадан маълумки, иккита зарра (ядро) дан иборат системанинг

айланиш моменти $\{ \mathbf{r} \mathbf{p} \}$ га тенг; бунда $\mathbf{r} = r \mathbf{n}$ — иккала зарра орасидаги радиус-вектор, $\mathbf{p}$ — уларнинг нисбий ҳаракати импульси. Бу катталиқ $\mathbf{n}$ йўналишга перпендикуляр. Худди шу нарса квант механикасида ядроларнинг айланиш моменти оператори учун ўринли бўлади: $(\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{L}}) \mathbf{n} = 0$ ёки $\hat{\mathbf{J}} \mathbf{n} = \hat{\mathbf{L}} \mathbf{n}$. Операторларнинг тенглигидан, албатта, уларнинг хос қийматларининг ҳам тенглиги келиб чиқади. Лекин $\mathbf{nL} = \mathbf{L}_z = \Lambda$ бўлганидан,

$$J_z = \Lambda \quad (59. 3)$$

ҳосил бўлади.

Шундай қилиб, (59. 2) даги учинчи ҳадда $\bar{\mathbf{L}} \mathbf{J} = \mathbf{nJ} \Lambda = \Lambda^2$ катталиқ бўлиб, у J га боғлиқ эмас экан. $U(r)$ нинг янги таърифини қўллаб, эффектив потенциал энергияни

$$U_J(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{2Mr^2} J(J+1) \quad (59. 4)$$

кўринишда ёзиш мумкин.

Бир ўлчовли Шредингер тенгласини шу потенциал энергия билан ечиб, биз қатор энергия сатҳлари оламиз. Бу сатҳларни (ҳар қайси берилган J да) уларнинг ортиш тартиби бўйича v орқали номерлашга келишамиз; бунда $v = 0, 1, 2, \dots$ бўлиб, $v = 0$ энг қуйи сатҳга мос келади. Шундай қилиб, ядроларнинг ҳаракати электрон термларни иккита J ва v квант сонлари билан характерланувчи бир қатор сатҳларга ажратади.

Сатҳларнинг квант сонларига қандай боғлангани умумий кўринишда тўла ҳисобланиши мумкин эмас. Бундай ҳисоб нисбатан заиф уйғонган сатҳлар, яъни асосий сатҳдан унча юқори бўлмаган сатҳлар учунгина бажарилиши мумкин. Бу сатҳларга J ва v квант сонларининг кичик қийматлари мос келади. Молекула спектрларини ўрганаётганда худди шундай сатҳлар билан иш кўришга тўғри келади, шунинг учун ҳам улар алоҳида аҳамиятга эга.

Заиф уйғонган ҳолатларда ядро ҳаракатини мувозанат вазияти атрофидаги кичик тебранишлар сифатида характерлаш мумкин. Шунга мос ҳолда $U(r)$ ни $\xi = r - r_e$ айирманинг даражалари бўйича қаторга ёйиш мумкин; бунда r_e — потенциал энергия $U(r)$ га минимум берадиган қиймат. $U'(r_e) = 0$ бўлганидан, иккинчи тартибли ҳадларгача аниқлик билан

$$U(r) = U_e + \frac{M\omega^2}{2} \xi^2$$

ифодани ҳосил қиламиз; бунда $U_e = U(r_e)$, $\omega = \sqrt{U''(r_e)/M}$ — тебраниш частотаси (I, 17- § га қаранг). (59. 4) нинг иккинчи ҳадида, яъни марказдан қочма энергияда $r = r_e$ деб олиш кифоя. Шундай қилиб,

$$U_J(r) = U_e + BJ(J+1) + \frac{M\omega^2}{2} \xi^2 \quad (59. 5)$$

га эга бўламиз. Бунда $B = \frac{\hbar^2}{2Mr_e^2} = \frac{\hbar^2}{2I}$ — *ротацион доимий* ($I = Mr_e^2$ — молекуланинг инерция моменти).

(59. 5) даги биринчи икки ҳад ўзгармас бўлиб, учинчи ҳад гармоник бир ўлчовли осцилляторга мос келади. Шу сабабли, изланаётган энергия сатҳлари учун

$$E = U_e + BJ(J+1) + \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) \quad (59. 6)$$

ифодани ёзишимиз мумкин.

Шундай қилиб, кўрилаяётган яқинлашишда энергия сатҳлари учта мустақил қисм йиғиндисидан иборат бўлади:

$$E = E^{el} + E^r + E^v. \quad (59. 7)$$

Бу формулада биринчи ҳад ($E^{el} = U_e$) — электроннинг энергияси (ядронинг Кулон ўзаро таъсир энергиясини ўз ичига олган), иккинчи ҳад

$$E^r = BJ(J+1) \quad (59. 8)$$

эса молекуланинг айланиши билан боғлиқ бўлган *айланиш* (ёки ротацион) энергияси¹⁾. Момент проекцияси унинг J абсолют қийматидан катта бўла олмаслиги туфайли, (59. 3) дан J квант соннинг фақат

$$J = \Lambda, \Lambda + 1, \Lambda + 2, \dots \quad (59. 9)$$

қийматларнигина қабул қилиши келиб чиқади.

Ниҳоят, (59. 7) даги учинчи ҳад

$$E^v = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) \quad (59. 10)$$

ядроларнинг молекула ичидаги тебранма ҳаракатлари энергиясини беради. v сони юқорида қабул қилинган таърифга биноан, J квант сони берилган сатҳларни улар-

¹⁾ Бир-бирига қаттиқ маҳкамланган ва айланма ҳаракат қилувчи иккита зарррадан иборат системани кўп ҳолларда *ротатор* дейилади. (59. 8) формула ротатор энергиясининг квант сатҳларини аниқлайди.

нинг ортиш тартибида нумерлайди; бу сонни *тебраниш* (ёки *вибрацион*) квант сони дейилади.

$U(r)$ потенциал энергия эгри чизиги мазкур ҳолда кўриладиган шаклда бўлганда ω частота $\sqrt{M}$ га тескари пропорционал бўлади. Шу сабабли, тебранма ҳаракат энергия сатҳлари орасидаги ΔE^v интервал ҳам $\frac{1}{\sqrt{M}}$ га пропорционал бўлади. Айланма ҳаракат энергия сатҳлари орасидаги ΔE^r интервалларнинг маҳражиги I инерция моменти киради, яъни улар $\frac{1}{M}$ га пропорционал бўлади. Электронга тегишли энергия сатҳларининг ΔE^{el} интервалларига эса шу сатҳларнинг ўзига ўхшаб, умуман M кирмайди. $\frac{m}{M}$ нисбат (m — электрон массаси) икки атомли молекула назариясида кичик параметр бўлганидан, биз

$$\Delta E^{el} \gg \Delta E^v \gg \Delta E^r \quad (59.11)$$

бўлишини кўрамиз. Бу тенгсизлик молекула сатҳлари тақсимотининг ўзига хос характерга эга эканлигидан далолат беради. Ядронинг тебранма ҳаракати электрон термларни бир-бирига нисбатан яқин бўлган сатҳларга ажратади. Бу сатҳлар ўз навбатида, молекуланинг айланма ҳаракати таъсирида бир-бирига яна ҳам яқин бўлган сатҳларга ажралади.

Бир нечта типик молекулалар учун U_e , $\hbar\omega$ ва B катталикларнинг қийматларини (электронвольт ҳисобида) мисол сифатида келтирамиз:

	H ₂	N ₂	O ₂
$-U_e$	4,7	7,5	5,2
$\hbar\omega$	0,54	0,29	0,20
$10^3 B$	7,6	0,25	0,18

60- §. Параводород ва ортоводород

Биз 56- § да икки атомли молекула симметриясининг баъзи бир хоссаларини кўриб ўтган эдик. Бу хоссалар электрон термларга тааллуқли эди, яъни улар ядро координаталарига алоқаси бўлмаган алмаштиришларда электронлар тўлқин функцияларининг табиатини

характерлар эди. Молекула ҳолати тушунчасига, шунингдек, ядро ҳаракати (тебраниш ва айланиш) ҳам киритилса, бир бутунлигича молекуланинг ўзига тегишли бўлган янги симметрия хоссалари вужудга келади. Биз бу ерда бир хил атомлардан (бу атомлар фақат айна битта элементгагина эмас, балки унинг битта изотопига ҳам қарашли деб оламиз, демак, бу ядролар айнаан ўхшаш бўлади) ташкил топган икки атомли молекула ҳолатларининг симметриясига алоқадор бўлган қизиқ бир ҳодиса устида тўхтаб ўтамиз.

Аниқлик учун асосий электрон ҳолатида ($1\Sigma_g^+$ синглет ҳолат) ётган водород молекуласи ҳақида гапирамиз.

Бир хил атомлардан тузилган молекула гамилтониани ядроларнинг ўзаро ўрин алмаштиришларига нисбатан инвариантдир. Шу муносабат билан ҳолатлар симметриясининг янги хоссаси вужудга келади: молекуланинг тўлқин функцияси бир ядродан иккинчисига қараб йўналган $\mathbf{r}$ радиус-вектор ишорасининг ўзгаришига нисбатан симметрик ёки антисимметрик бўлиши мумкин.

Молекуланинг тўлқин функцияси электрон ва ядро тўлқин функцияларининг кўпайтмасидан иборат. Ядронинг тўлқин функцияси 59-§ га биноан, L орбитал моментли битта зарранинг $U(r)$ марказий-симметрик майдондаги ҳаракатини тавсирловчи тўлқин функцияга шаклан ўхшайди. Шу нуқтаи назардан, $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ алмаштириш майдон марказига нисбатан координата инверсиясини беради ва (19.5) га биноан бундай алмаштириш натижасида тўлқин функция $(-1)^J$ га кўпаяди. Электрон тўлқин функция ҳам ядро координаталарига параметр сифатида боғлиқ бўлади. Молекуланинг асосий электрон терми учун бу функция ядронинг ўрин алмаштиришларига нисбатан симметрикдир¹⁾. Шу сабабли, $(-1)^J$ кўпайтувчи тўлқин функциянинг фақат

1) Бу хосса 56-§ да келтирилган умумий эмпирик қоидага мос келади. Бу қоидага биноан, кўпчилик икки атомли молекулаларнинг нормал электрон ҳолатлари тўла симметрияга эга бўлади. Бевосита мулоҳазалар юритиб, ядронинг ўрин алмаштиришларига нисбатан симметриклик автоматик ҳолда $1\Sigma_g^+$ ҳолатининг бошқа хоссалари (молекула ўқидан ўтган текисликда акслантиришга ҳамда ядро координаталари ўзгармагани ҳолда ҳамма электронлар координаталари ишораларининг ўзгаришларига нисбатан симметриклик) дан келиб чиқишини кўрсатиш мумкин.

ядрога алоқадор қисмининггина эмас, балки бутун молекула тўлқин функциясининг бир бутунича симметриклигини ёки антисимметриклигини аниқлайди.

46- § да $i = \frac{1}{2}$ спинли иккита бир хил заррадан ташкил топган система учун симметрик ҳолатлар (зарралар координаталари бўйича) фақат зарраларнинг спинлари йиғиндиси I ноль бўлганда, антисимметрик ҳолатлар эса фақат $I = 1$ дагина амалга ошиши ҳақида умумий теорема келтирилган эди. Бу қондани водород молекуласининг иккита ядросига (спини $\frac{1}{2}$ бўлган иккита протон) қўлласак, қуйидаги натижага келамиз. Ядро спинлари параллел бўлганда ($I = 1$) молекула ўзининг нормал электрон ҳолатида фақат тоқ қийматли J айланиш моментида, ядро спинлари антипараллел бўлганда эса ($I = 0$) фақат жуфт J га эга бўлади. Бу — квантомеханикавий алмашилиш эффектининг ажойиб мисolidир: гарчи ядро спинларининг энергия катталигига бевосита таъсири (термларнинг ўта нозик структураси) бениҳоя кам бўлса-да, уларнинг молекула термларига билвосита таъсири кучлидир.

Протонларнинг магнит моментлари жуда кичик ва шу туфайли, молекуладаги электронлар билан протонлар спинларининг ўзаро таъсири кучсиз бўлганидан, I нинг ўзгариш эҳтимоли ҳатто молекулалар тўқнашганида ҳам жуда кичик бўлади. Шу сабабли, тўла спини бир ($I = 1$) ва ноль ($I = 0$) бўлган молекулалар амалда ўзларини модданинг ҳар хил модификацияси каби тутати, уларни мос ҳолда *ортоводород* ва *параводород* молекулалар дейилади.

Параводород молекуласининг асосий сатҳи айланиш квант сонининг $J = 0$ қийматига мос келади. J нинг тоқ қийматларига эга бўлган ортоводород молекулалари учун эса асосий сатҳда $J = 1$ бўлиб, у параводороднинг асосий сатҳидан юқорида жойлашган бўлади.

61- §. Ван-дер-Ваальс кучлари

Бир-биридан катта масофада (ўзларининг хусусий ўлчамларига нисбатан) ётган иккита атомни олиб, уларнинг ўзаро таъсир энергияларини аниқлаймиз. Бошқача айтганда, гап ядролар бир-биридан узоқ масофада ётган ҳол учун $U_n(r)$ электрон термларнинг кўринишини аниқлаш устида бормоқда.

Бу масалани ечиш учун ғалаёнланиш назариясини қўллаймиз. Бунда иккита изоляцияланган атомни ғалаёнланмаган система деб, уларнинг электрик ўзаро таъсир потенциал энергиясини эса ғалаёнланиш оператори деб қараймиз. Маълумки, (I, 64- § га қаранг), бир-биридан катта r масофада ётган иккита зарядлар системасининг ўзаро электрик таъсирини $\frac{1}{r}$ нинг даражалари бўйича қаторга ёйиш мумкин. Бунда ушбу ёйилманинг кетма-кет ҳадлари иккала система тўла зарядларининг, дипол, квадрупол ва ҳоказо моментларининг ўзаро таъсирига мос келади. Нейтрал атомларда тўла зарядлар нолга тенг. Шу сабабли ёйилма дипол-дипол ўзаро таъсир $\left(\sim \frac{1}{r^3}\right)$ дан бошланади, кейин дипол-квадрупол ҳадлар $\left(\sim \frac{1}{r^4}\right)$, ва квадрупол-квадрупол $\left(\sim 1/r^5\right)$ келади ва ҳоказо.

Аввал иккала атом S - ҳолатда ётибди деб фараз қиламиз. Бу ҳолда ғалаёнланиш назариясининг биринчи яқинлашишида атомларнинг ўзаро таъсир эффекти мавжуд бўлмаслигини кўриш осон. Ҳақиқатан ҳам, биринчи яқинлашишда ўзаро таъсир энергияси ғалаёнланиш операторининг системанинг ғалаёнланмаган тўлқин функциялари (икки атом тўлқин функцияларининг кўпайтмасига тенг бўлган) бўйича ҳисобланган диагонал матрица элементлари сифатида аниқланади. Лекин атомларда ўртача заряд зичлигининг тақсимооти сферик симметрияга эга бўлганидан, бевосита S - ҳолатларда диагонал матрица элементларнинг, яъни атомларнинг дипол, квадрупол ва ҳоказо моментларининг ўртача қиймати нолга тенглиги келиб чиқади.

Иккинчи яқинлашишда ғалаёнланиш операторидаги r ортиши билан энг секин камаядиган дипол ўзаро таъсир, яъни

$$V = \frac{-\mathbf{d}_1\mathbf{d}_2 + 3(\mathbf{d}_1\mathbf{n})(\mathbf{d}_2\mathbf{n})}{r^3} \quad (61. 1)$$

ҳад билан чегараланиш кифоя (бунда $\mathbf{n}$ — иккала атомни туташтирувчи чизиқдаги бирлик вектор). Умуман айтганда, дипол момент матрицасининг нодиagonal элементлари нолдан фарқли бўлганидан, биз ғалаёнланиш назариясининг иккинчи яқинлашишида V бўйича иккинчи даражали ва демак, $\frac{1}{r^3}$ га пролерционал бўлган на-

тижа оламиз. Иккинчи яқинлашишда энг қуйи хос қийматга киритиладиган тузатма ҳамма вақт манфий (32- §). Шу сабабли, биз нормал ҳолатда ётган атомларнинг ўзаро таъсир энергияси учун ушбу

$$U(r) = -\frac{\text{const}}{r^3} \quad (61. 2)$$

кўринишдаги ифодани топамиз: бунда const — мусбат доимий (Ф. Лондон, 1928),

Шундай қилиб, S - ҳолатларда (нормал ҳолатда)ги бир-биридан катта масофада ётувчи икки атом масофанинг еттинчи даражасига тескари пропорционал бўлган куч $\left(-\frac{dU}{dr}\right)$ билан ўзаро тортишади. Катта масофаларда

атомлар орасидаги тортишиш кучи *Ван-дер-Ваальс кучлари* дейилади. Бу кучлар турғун молекула туза олмайдиган атомлар электрон термларининг потенциал энергия эгри чизиқларида ҳам потенциал ўра ҳосил қилади. Лекин бу ўралар жуда саёз (уларнинг чуқурликлари электронвольтнинг ўндан ва ҳатто юздан бир улушларида ўлчанади) бўлиб, улар турғун молекуладаги атомлараро масофага нисбатан бир неча марта катта бўлган масофаларда жойлашади.

(61. 2) формуланинг муҳимлиги яна шундаки, бу қонунга исталган нормал ҳолатларда (фақат S - ҳолатдагина эмас) бир-биридан катта масофада ётувчи атомлар орасидаги ўзаро таъсир кучи ҳам бўйсунди. Бунда фақат, бу ўзаро таъсирни атомларнинг мумкин бўлган ҳамма ориентациялари бўйича ўртачалаш керак. Масаланинг шундай қўйилишига газлардаги атомларнинг ўзаро таъсири масаласи мос келади¹).

Дарҳақиқат, ҳар қандай стационар ҳолатда дипол моментнинг ўртача қиймати ноль бўлса ҳам, J моменти нолдан фарқли атом учун квадрупол моментнинг ўртача қиймати нолдан фарқли бўлиши мумкин (54- §). Шу сабабли, ўзаро таъсир операторидаги квадрупол—квадрупол ҳад ғалаёнланиш назариясининг биринчи яқинлашишидаёқ нолдан фарқли натижа бера олади.

¹ Лекин бу қонун норелятивистик назария асосида чиқарилганлигини таъкидлаб ўтамыз, шу сабабли, у электромагнит ўзаро таъсирнинг кечикиш эффекти аҳамиятга эга бўлмаган чегара ичидagina ўринлидир. Бунинг учун атомлар орасидаги r масофа $\frac{c}{\omega_{on}}$ дан кичик бўлиши керак; бунда ω_{on} — атомнинг асосий ва уйғонган ҳолатлари орасидаги ўтиш частотаси.

Лекин квадрупол моментнинг ўртача қиймати (анча юқори тартибли мультипол моментлар сингари) унинг J моментининг ориентацияларига боғлиқ ва бу ориентациялар бўйича ўртачаланганда симметрия хоссаларига биноан нолга айланиб кетади.

М а с а л а

S - ҳолатларда ётган иккита бир хил атом учун Ван-дер-Ваальс кучларини уларнинг дипол моментларининг матрица элементлари орқали аниқловчи формула чиқарилсин.

Е ч и л и ш и. Жавоб (61. 1) операторга ғалаёйланишнинг (32. 10) умумий формуласини қўллашдан келиб чиқади. S - ҳолатларда атомлар изотроп бўлгани туфайли, аввалдан маълумки, барча оралиқ ҳолатлар бўйича йиғинди олинганда $\mathbf{d}_1$ ва $\mathbf{d}_2$ векторлардан ҳар бирининг учта компоненти матрица элементларининг квадрати йиғиндига бир хил ҳисса қўшади. Лекин ҳар хил компонент қўпайтмалари кирган ҳадлар нолга айланади. Натижада

$$U(r) = -\frac{6}{r^6} \sum_{n,n'} \frac{(d_z)_{0n}^2 (d_z)_{0n'}^2}{2E_0 - E_n - E_{n'}}.$$

ифодани ҳосил қиламиз; бунда E_0 ва E_n — мос равишда атомнинг асосий ва уйғонган ҳолатлари энергияларининг ғалаёйланмаган қийматлари.

IX боб

ЭЛАСТИК ТЎҚНАШУВЛАР

62- §. Сочилиш амплитудаси

Классик механикада икки зарра тўқнашуви уларнинг тезликлари ва „нишон масофаси“ (яъни ўзаро таъсир бўлмаган вақтда бир зарра иккинчиси ёнидан ўтиб кета оладиган масофа) орқали тўла аниқланади. Квант механикасида масаланинг қўйилиши бошқача бўлади, чунки маълум тезликдаги ҳаракатда траектория тушунчаси, шунинг билан бирга „нишон масофаси“ тушунчаси ўз маъносини йўқотади. Бунда назариянинг мақсади тўқнашув натижасида зарраларнинг у ёки бу бурчакка оғиш (*сочилиш*) эҳтимоллигини ҳисоблашдангина иборат бўлади. Биз бу ерда ҳеч қандай зарралар ўзгариши ёки (агар бу зарралар мураккаб бўлса) уларнинг ички ҳолати ўзгариши юз бермайдиган *эластик* тўқнашувлар ҳақида гапирамыз.

Эластик тўқнашув тўғрисидаги масала ҳар қандай икки жисм масаласи каби келтирилган массали бир зарранинг қўзғалмас маркази кучнинг $U(r)$ майдонида сочилиши масаласига келтирилади¹. Буни амалга ошириш учун иккала зарранинг инерция маркази қўзғалмас бўлган координаталар системасига ўтказилади. Бу системада сочилиш бурчагини θ билан белгилаймиз. Бу бурчак иккала зарранинг зарралардан бири (масалан, иккинчиси) тўқнашувгача тинч ҳолда деб олинган координаталарнинг „лаборатория“ системасидаги θ_1 ва

¹ Биз бу ерда зарраларнинг (агар уларнинг спини бўлса) спин-орбитал ўзаро таъсирини ҳисобга олмаймиз. Майдонни марказий-симметрик деб фараз қилиб, электроннинг молекулаларда сочилиши каби процессларни ҳам эътибордан четда қолдирамыз.

ϑ_2 оғиш бурчаклари билан қуйидаги оддий формулалар орқали боғланган:

$$\operatorname{tg} \vartheta_1 = \frac{m_2 \sin \theta}{m_1 + m_2 \cos \theta}, \quad \vartheta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}, \quad (62.1)$$

бу ерда m_1, m_2 — зарраларнинг массалари (I, 14- § га қ.) Жумладан, агар иккала зарра массаси бир хил ($m_1 = m_2$) бўлса, у ҳолда

$$\vartheta_1 = \frac{\theta}{2}, \quad \vartheta_2 = \frac{\pi - \theta}{2}; \quad (62.2)$$

$\vartheta_1 + \vartheta_2 = \pi/2$, яъни зарралар тўғри бурчак остида сочилди.

Бу бобда биз ҳар доим (алоҳида эслатма берилмаган ҳолларда) инерция маркази билан боғланган координаталар системасидан фойдаланамиз, m орқали эса тўқнашувчи зарраларнинг келтирилган массаси белгиланади.

z ўқининг мусбат йўналишида ҳаракатланаётган эркин зарра $\psi = e^{ikz}$ кўринишдаги ясси тўлқин орқали берилади. Бу зарранинг v га тенг оқим зичлигига мос келади ((21.6) да келтирилган бирлик оқимни нормалаштирилиши билан таққосланг). Сочилган зарралар марказдан узоқда $f(\theta) e^{ikr}/r$ кўринишдаги ёйилувчи сферик тўлқин орқали ифодаланиши керак. Бу ерда $f(\theta)$ сочилиш бурчаги θ (z ўқи ва сочилган зарра йўналиши орасидаги бурчак) нинг бирор функцияси¹. Шундай қилиб, $U(r)$ майдонда сочилиш процессини ифодаловчи Шредингер тенгламасининг ечими катта масофаларда

$$\psi \approx e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \quad (62.3)$$

асимптотик кўринишга эга бўлиши лозим. $f(\theta)$ функция *сочилиш амплитудаси* дейилади.

Сочилган зарранинг вақт бирлигида $ds = r^2 d\phi$ ($d\phi$ — фазовий бурчак элементи) сирт элементидан ўтиш эҳтимоллиги $v r^{-2} |f|^2 ds = v |f|^2 d\phi$ га тенг².

¹Ёйилувчи сферик тўлқин 30- § да кўриб ўтилган „турғун“ сферик тўлқинлардаги тригонометрик кўпайтувчи ўрнига e^{ikr} экспоненциал кўпайтувчига эга (марказга йиғилувчи тўлқин эса, мос равишда, e^{-ikr} кўпайтувчига эга).

²Бу мулоҳазада, сочилиши бўйича реал тажрибаларда ўринли бўлганидек, тушувчи зарралар оқими кенг (дифракцион эффектлардан сақланиш учун), лекин чекли диафрагма билан чегараланган деб фараз қилинади. Шу сабабдан (62.3) ифодалаги иккала ҳад орасида интерференция йўқ; $|\psi|^2$ тушувчи тўлқин бўлмаган нуқталарда олинади.

Унинг тушаётган тўлқиндаги оқим зичлигига нисбати

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\sigma. \quad (62.4)$$

Бу катталиқ юза ўлчамлигига эга ва $d\sigma$ фазовий бурчакка сочилишнинг *эффектив кесими* (ёки оддий қилиб *кесими*) дейилади. $d\sigma = 2\pi \sin \theta d\theta$ деб θ ва $\theta + d\theta$ бурчаклар оралигида сочилиш кесимини оламиз:

$$d\sigma = 2\pi \sin \theta |f(\theta)|^2 d\theta. \quad (62.5)$$

Марказий майдонда сочилишни ифодаловчи Шредингер тенгламасининг ечими z ўқи атрофида аксиал-симметрикдир. Шундай ечимнинг умумий кўриниши

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r) \quad (62.6)$$

ёйилма кўринишда тасвирланиши мумкин, бу ерда R_{kl} — (29.8) тенгламани қаноатлантирувчи ($E \hbar^2 k^2 / 2m$ энергияли) радиал функциялар. Бу функцияларнинг узоқ масофалардаги асимптотик кўриниши — (30.10) турғун тўлқинлардир. Сочилиш амплитудаси шу функциянинг δ_l фазавий силжишлари орқали қандай қилиб ифоданиши мумкинлигини кўрсатамиз.

(30.10) ни (62.6) га қўйиб, тўлқин функциянинг умумий асимптотик кўринишини

$$\begin{aligned} \psi &\approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) = \\ &= \frac{i}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l \left\{ \exp \left[-i \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - \exp \left[i \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \right] \right\} \end{aligned}$$

шаклда ёзамиз. A_l коэффицентлар бу функция (62.3) кўринишда бўладиган қилиб танланиши лозим. Бунинг учун 30- § да олинган ясси тўлқиннинг сферик функциялар бўйича ёйилмасидан фойдаланамиз. r нинг катта қийматларида (30.16) га мувофиқ

$$\begin{aligned} e^{ikz} &\approx \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} i(2l+1) P_l \left\{ \exp \left[-i \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \exp \left[i \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned}$$

$\psi = e^{ikz}$ айирма ёйилувчи тўлқинни ифодалаши лозим, яъни таркибида e^{-ikr} бўлган барча ҳадлар тушириб қолдирилиши керак. Бунинг учун

$$A_l = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (2l+1) i^l e i \delta_l$$

деб фараз қилиш керак. Шундай қилиб,

$$\psi \approx \frac{1}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [(-1)^l e^{-ikr} - e i \delta_l k e^{ikr}]. \quad (62.7)$$

У ҳолда $\psi = e^{ikz}$ айирмада e^{ikr}/r нинг коэффиценти учун

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (62.8)$$

ифодани оламиз. Бу формула сочилиш амплитудаси δ_l фазалар билан ифодалаш масаласини ҳал қилади. (Г. Факсен, И. Хольтсмарк, 1927). Йиғиндининг ҳар бир ҳади l орбитал моментли зарралар сочилишининг *парциал амплитудаси* дейилади.

$d\sigma$ ни барча бурчаклар бўйича интеграллаш зарра сочилиши (вақт бирлигида) тўла эҳтимоллигининг оқим зичлигига нисбатини кўрсатувчи сочилишнинг σ тўла кесимини беради. (62.8) ни

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta$$

интегралга қўямиз. Турли $P_l(\cos \theta)$ полиномларнинг ўзаро ортогоналлигидан интегралда фақат (62.8) йиғинди ҳар бир ҳадининг квадратлари қолади ва (30.13) нормаловчи интегралнинг маълум қийматини ҳисобга олиб,

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (62.9)$$

га эга бўламиз.

63- §. Сочилишнинг квазиклассиклик шarti

Сочилиш назариясининг аввалги параграфда олинган аниқ квантомеханик формулаларидан классик формулаларга чегаравий ўтиш анча вақтни олади ва биз

бу ерда шундай ўтишни бажармаймиз. Фақат шу ўтиш ўринли бўлган шартлар тўғрисидаги баъзи мулоҳазалар билан чегараланамиз, холос.

Зарра p нишон масофада учиб ўтганда, θ бурчакка классик сочилиши тўғрисида гапириш учун бу иккала катталиқ қийматидаги квантомеханик ноаниқлик нисбатан кичик бўлиши зарур: $\Delta p \ll p$, $\Delta \theta \ll \theta$. Сочилиш бурчагининг ноаниқлиги $\Delta \theta \sim \Delta p/p$ катталиқ тартибига эга, бунда p — зарра импульси, Δp — унинг кўндаланг ташкил этувчисининг ноаниқлиги. $\Delta p \sim \hbar/\Delta r \gg \hbar/p$ эканлигидан $\Delta \theta \gg \hbar/pr$, шунинг учун ҳар ҳолда

$$\theta \gg \frac{\hbar}{pmv}. \quad (63.1)$$

mv импульс моментини $\hbar l$ га алмаштириб, $\theta l \gg 1$ эканини аниқлаймиз, бундан кўринадикки, $l \gg 1$ бўлиши керак. Бу тенгсизлик умумий ҳолада — квант сонларининг катта қийматлари квазиклассик ҳолга тўғри келишига (27- §) мос.

Зарранинг классик оғиш бурчагини импульсининг $\tau \sim p/v$ „тўқнашиш вақти“ давомида Δp кўндаланг орттирмасини бошланғич mv импульсга нисбати сифатида баҳолаш мумкин. Заррага $U(r)$ майдонда p масофада таъсир этувчи куч $F = -\frac{dU(p)}{dr}$; шунинг учун $\Delta p \sim Fp/v$, демак, $\theta \sim pF/mv^2$. Агар бурчак $\theta \ll 1$ бўлсагина, бу баҳолаш қатъий ўринлидир, лекин катталиқ тартиби бўйича уни $\theta \sim 1$ гача ҳам олиб бориш мумкин. Бу ифодани (63.1) га қўйиб, сочилишнинг квазиклассик шартини

$$Fp^2 \gg \hbar v \quad (63.2)$$

кўринишда оламиз.

Агар $U(r)$ майдон $1/r$ га қараганда тез камайса, у ҳолда (63.2) шарт етарлича катта p ларда бажарилмай қолади. Лекин катта p ларга кичик θ лар мос келади; шундай қилиб, етарлича кичик бурчакка сочилиш ҳар ҳолда классик бўлмайди. Кичик бурчакларга сочилишнинг квант характери, жумладан, сочилишнинг тўла кесими чекли бўлишлигига сабаб бўлади. Шунга кўра классик механикада фақат $r \rightarrow \infty$ да нолга айланадиган (яъни чекли, масофадан кескин узилмайдиган) ҳар қандай майдонда исталганча катта, лекин чекли нишон масофасида ўтаётган зарра барибир бирор кичик, лекин нолдан фарқли бурчакка оғади; шунинг учун

тўла кесим ҳар доим чексиз бўлади. Юқорида айтилгандан шу нарса ойдинлашдики, бундай мулоҳазани квант механикасида қўллаб бўлмайди, чунки сочилиш бурчаги зарра ҳаракати йўналишининг квант ноаниқлигидан кичик бўлганда сочилиш тушунчаси ўз маъносини йўқотади.

64- §. Дискрет энергия сатҳлари сочилиш амплитудасининг қутблари сифатида

Зарраларнинг (мусбат E энергияли) берилган майдонда сочилиш қонуни ва манфий энергия сатҳларининг ўша майдондаги дискрет спектри (агар улар мавжуд бўлса) ўртасида маълум боғланиш бор.

Формулаларни соддалаштириш мақсадида $l=0$ орбитал моментли зарралар ҳаракати тўғрисида гапирмиз. Мусбат энергияли тўлқин функциянинг майдон марказидан узоқдаги асимптотик ифодасини йиғилувчи ва ёйилувчи сферик тўлқинлар йиғиндиси кўринишида ёзамиз:

$$\psi = \frac{1}{r} \{ a(k) e^{ikr} + b(k) e^{-ikr} \}. \quad (64.1)$$

$a(k)$ ва $b(k)$ — Шредингер тенгламасини тўлқин функциянинг $r=0$ да чеклилигини назарда тутиб кичик масофаларда ечиш йўли билангина аниқланиши мумкин бўлган функциялар. Бунда иккала функция ҳам мустақил бўлмай, бир-бири билан содда ифодалар орқали боғланган. Улардан бири бевосита ψ функция айнинамаган ҳолатнинг тўлқин функцияси сифатида ҳақиқий бўлиши лозимлиги шартидан келиб чиқади:

$$b(k) = a^*(k). \quad (64.2)$$

Агар энди k нинг ихтиёрий, жумладан, комплекс қийматларини ҳам формал равишда кўриб чиқадиган бўлсак, у ҳолда $a(k)$ ва $b(k)$ илгаригидек (64.2) тенглик билан, шунингдек,

$$a(-k) = b(k) \quad (64.3)$$

тенглик билан боғланган комплекс ўзгарувчининг функциялари бўлади. (64.3) тенглик a ва b ларнинг (64.1) орқали ифодаланган таърифининг ўзидан келиб чиқади (k ни $-k$ га алмаштириш a ва b коэффицентлар ролини алмаштиради). Комплекс k ли ψ функция k ҳақиқий бўлган Шредингер тенгламаси ечими-

нинг аналитик давоми бўлгани ҳолда, у илгаригидек ўша тенгламанинг координаталар бошида чекли бўладиган ечимидир. Лекин у энди бутун фазода чеклиликл шартини қаноатлантирмайди: $r \rightarrow \infty$ да (64.1) нинг биринчи ёки иккинчи (k нинг мавҳум қисми ишорасига қараб) ҳади чексизга айланади.

Жумладан, k нинг бутунлай мавҳум қийматларида (64.1) ифода манфий E энергияли Шредингер тенгламаси ечимининг асимптотик кўринишини белгилайди. Лекин бу ечим дискрет спектрнинг турғун (стационар) ҳолатига мос келиши учун ψ функция $r \rightarrow \infty$ да чекли бўлиб қолиши зарур. E нинг ҳар бир манфий қийматига бутунлай мавҳум қийматлар жуфти $k = \pm i\sqrt{2m|E|/\hbar}$ мос келади. Юқориги ишора олинганда, (64.1) нинг иккинчи ҳади $r \rightarrow \infty$ да чеклиликл шартини қаноатлантирмайди: шунинг учун дискрет энергия сатҳига тўғри келувчи E нинг қиймати учун

$$b(i|k|) = 0 \quad (64.4)$$

бўлиши лозим (худди шунингдек, $k = -|ik|$ бўлганда $a(k)$ функция нолга айланиши керак).

Иккинчи томондан, (64.1) ни $E > 0$ энергияли зарранинг (30.10) кўринишда ёзилган тўлқин функциясининг

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2ir} (e^{i(kr + \delta_0)} - e^{-i(kr + \delta_0)}).$$

асимптотик ифодаси билан таққослаб, a/b нисбат δ фазога

$$e^{2i\delta_0(k)} = \frac{a(k)}{b(k)} \quad (64.5)$$

муносабат орқали боғланганлигини кўрамиз. Бу ифода $b(k)$ нолга айланадиган нуқтада қутбга эга. Энди s -сочилишнинг парциал амплитудаси

$$f_0 = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1)$$

эканлигини эслаб, қуйидаги хулосага келамиз: бу амплитуда k комплекс ўзгарувчининг аналитик функцияси сифатида k нинг мавҳум қийматларида (улар зарранинг майдондаги боғланган s -ҳолатлар энергия сатҳларига тўғри келади) шу ўзгарувчининг юқориги ярим текислигида қутбларга эга.

Моменти $l \neq 0$ бўлган боғланган ҳолатлар энергия сатҳлари ва мос парциал сочилиш амплитудаларининг қутблари ўртасида шунга ўхшаш боғланиш мавжуд.

65- §. Секин зарраларнинг сочилиши

Сочилувчи зарралар кичик тезликларининг чегаравий ҳолида эластик сочилиш хоссаларини кўриб ўтамиз. Яъни, тезлик шунчалик кичик деб фараз қилинадики, зарранинг де-Бройль тўлқин узунлиги сочувчи майдоннинг таъсир доираси радиуси a га нисбатан¹ катта, унинг энергияси эса шу радиус ичидаги майдон катталигига нисбатан кичик: $ak \ll 1$ ва $k^2 \hbar^2 / 2m \ll |U|$.

Заррани майдон маркази яқинида (унинг тўлқин узунлигига нисбатан кичик масофада) топилиш эҳтимоли l орбитал момент ортиши билан тез камаяди (29- § га қ.). Шунинг учун секин зарралар сочилишида асосий ролни $l=0$ бўлган сочилиш (s -сочилиш) ўйнайди. Бу ҳолда сочилиш хоссаларини аниқлаш δ_0 фазанинг k тўлқин векторига (k нинг кичик қийматларида) боғлиқлигининг чегаравий қонунини топишни талаб этади.

s - ҳолатнинг тўлқин функцияси фақат r га боғлиқ. $r \leq a$ (майдоннинг таъсир доирасида) бўлганда Шредингернинг

$$\Delta\psi + k^2\psi = \frac{2m}{\hbar^2} U(r)\psi \quad (65.1)$$

аниқ тенгламасида фақат k^2 ли ҳадни ҳисобга олмаса бўлади:

$$\Delta\psi \equiv \frac{1}{r} (r\psi)'' = \frac{2m}{\hbar^2} U(r)\psi \quad (r \leq a) \quad (65.2)$$

(бунда штрих r бўйича дифференциаллашни кўрсатади). Катта масофалар соҳаси $a \ll r \ll 1/k$ да эса $U(r)$ ли ҳадни ҳам ташлаб кетиш мумкин, у ҳолда

$$(r\psi)'' = 0 \quad (65.3)$$

қолади. Бу тенгламанинг умумий ечими қуйидагича:

$$\psi = c_1 + \frac{c_2}{r} \quad \left(a \ll r \ll \frac{1}{k} \right). \quad (65.4)$$

c_1, c_2 ҳақиқий ўзгармас сонларни принцип жиҳатидан фақат конкрет $U(r)$ функцияли (65.2) тенгламани ечиш йўли билан аниқлаш мумкин.

¹ a орқали U майдон нолдан анча фарқли бўлган фазо соҳасининг чизиқли ўлчами тушунилади. Масалан, нейтронларнинг ядроларда сочилишида a параметр вазифасини ядро радиуси бажаради; электронларнинг нейтрал атомда сочилишида эса—атом радиуси.

Янада катта масофаларда ($r \geq 1/k$ да) (65.1) тенгламада $U(r)$ ли ҳад ташлаб юборилиши мумкин, лекин k^2 ли ҳадни ҳисобга олиш керак, у ҳолда

$$\frac{1}{r} (r\psi)'' + k^2\psi = 0,$$

яъни эркин ҳаракат тенгламасига эга бўламиз. Бу тенгламанинг ечими:

$$\psi = \frac{c_1}{k} \frac{\sin kr}{r} + c_2 \frac{\cos kr}{r} \quad \left(r \geq \frac{1}{k}\right). \quad (65.5)$$

Бундаги коэффициентлар шундай танланганки, $kr \ll 1$ да бу ечим (65.4) га ўтади; шу тариқа $kr \ll 1$ ва $kr \sim 1$ соҳалардаги ечимларни бир-бирига „тикиш“ га эришилади:

(65.5) йиғиндини

$$\psi = \frac{c_1}{kr} \sin(kr + \delta_0)$$

кўринишда ифодалаб, δ_0 фаза учун

$$\operatorname{tg} \delta_0 \approx \delta_0 = \frac{c_2}{c_1} k \quad (65.6)$$

тенгликка эга бўламиз; k кичик бўлганидан δ_0 фаза ҳам кичик бўлади. Ниҳоят, (62.3) йиғиндида фақат биринчи ҳадни сақлаб, сочилиш амплитудаси учун қуйидагини топамиз:

$$f = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) \approx \frac{\delta_0}{k} = \frac{c_2}{c_1}. \quad (65.7)$$

Шундай қилиб, сочилиш амплитудаси сочилиш бурчагига ҳам, зарра тезлигига ҳам боғлиқ бўлмаган ўзгармас катталиқ экан. Бошқача қилиб айтганда, секин зарралар сочилиши барча йўналишларда изотроп, унинг кесими $\sigma = 4\pi(c_2/c_1)^2$ эса энергияга боғлиқ эмас¹.

¹ Баён этилган мулоҳазаларда $U(r)$ майдон катта ($r \gg a$) масофаларда етарлича тез камайиши фараз қилинган эди. Талаб этиладиган камайиш тезлиги қандай бўлиши кераклигини аниқлаш осон. r катта бўлганда (65.4) даги функциянинг иккинчи ҳади биринчисига нисбатан кичик. Шундай бўлса-да, унинг сақланиши, қонуний бўлиши учун (65.2) тенгламада қолдирилган кичик ҳад ($\sim c_2/r^3$) (65.2) дан (65.3) га ўтишда тушириб қолдирилган ҳад $U\psi \sim Uc_1$ га нисбатан ҳар қалай катта бўлиши керак. Бундан U нинг $1/r^3$ га нисбатан тезроқ камайиши кераклиги келиб чиқади.

Масалалар

1. Секин зарраларнинг чуқурлиги U_0 ва радиуси a бўлган сферик потенциал ўрадан сочилиш амплитудаси аниқлансин: $r < a$ да $U(r) = -U_0$, $r > a$ да $U = 0$.

Ечилиши. Зарраларнинг тўлқин вектори $ka \ll 1$ ва $k \ll \kappa$ (бу ерда $\kappa = \sqrt{2mU_0}/\hbar$) шартларни қаноатлантиради деб фарз қилинади. $\chi = r\psi$ функция учун (65.2) тенглама $r < a$ бўлганда

$$\chi'' + \kappa\chi = 0$$

кўринишни олади. Унинг $r = 0$ да ψ нинг чеклилиги шартини қаноатлантирувчи ечими

$$\chi = A \sin \kappa r, \quad r < a.$$

$r > a$ бўлганда, χ функция $\chi'' + k^2\chi = 0$ тенгламани қаноатлантиради, шунга кўра

$$\chi = B \sin (kr + \delta_0), \quad r > a.$$

$r = a$ да χ'/χ нинг узлуксизлик шартига асосан:

$$\kappa \operatorname{ctg} \kappa a = k \operatorname{ctg} (ka + \delta_0) \approx \frac{k}{ka + \delta_0},$$

шунга кўра δ_0 ни аниқлаймиз. Натижада сочилиш амплитудаси учун

$$f = \frac{\operatorname{tg} \kappa a - \kappa a}{\kappa} \quad (1)$$

ифодани оламиз. Агар $ka \ll 1$ бўлибгина қолмай, балки $\kappa a \ll 1$ (яъни $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$) бўлса, у ҳолда

$$f = \frac{1}{3} a(\kappa a)^2. \quad (2)$$

Агар U_0 ва a шундай бўлсаки, унда κa кўпайтма сонли $\pi/2$ нинг тоқ қарралисига яқин бўлса, у ҳолда (1) формулани қўллаб бўлмайди, κa нинг бундай қийматларига потенциал ўраaning мэнфий энергия сатҳлари дискрет спектри орасида нолга яқин сатҳ мавжуд¹ ва сочилиш навбатдаги параграфда олинadиган формулалар орқали ифодаланadi.

2. „Потенциал ўркач“ (дўнглик) дан сочилиш учун юқоридаги катталиклар аниқлансин: $r < a$ да $U(r) = -U_0$, $r > a$ да $U = 0$.

Ечилиши. Потенциал ўра ҳолидан бу ҳолга ўтиш $U_0 \rightarrow -U_0$, яъни $\kappa \rightarrow i\kappa$ алмаштириш йўли билан бажарилади. У ҳолда (1) дан қуйидаги олинади:

$$f = \frac{\operatorname{th} \kappa a - \kappa a}{\kappa}$$

¹ 30- § даги 1-масалага қаранг. Унда олинган (1) тенглама агар $\sin(a\sqrt{2mU_0}/\hbar) \approx \pm 1$ бўлса, энергия сатҳи $|E| \ll U_0$ бўлишини кўрсатади.

(бунда ҳам аввалгидек $\chi = \sqrt{2mU_0}/\hbar$). Хусусан, $\chi a \gg 1$ чегаравий ҳолда (U_0 нинг катта қийматлари)

$$f = -a, \quad \sigma = 4\pi a^2.$$

Бу натижа a радиусли ўтказмайдиган сферада сочилишга мос келади; классик механика эса кесим учун тўрт марта кичик ($\tau = \pi a^2$) катталикини берган бўлар эди.

66- §. Кичик энергияларда резонанс сочилиш

Манфий энергия сатҳларининг дискрет спектрида энергияси U майдоннинг a таъсир доирасидаги қийматига нисбатан кичик бўлган s -ҳолат мавжуд ҳолларда секин ($ka \ll 1$) зарраларнинг тортилиш майдонида сочилиши алоҳида қараб чиқишни талаб этади. Бу сатҳни $-\varepsilon$ ($\varepsilon > 0$) орқали белгилаймиз. Сочилувчи зарра энергияси E кичик қийматга эга, шу билан бирга $-\varepsilon$ сатҳга яқин, яъни у билан деярли резонансда турипти, дейилади. Бу ҳол сочилиш кесимининг анча катталашishiга олиб келади (буни қуйида кўрамиз).

Чуқур бўлмаган сатҳнинг мавжудлиги сочилиш назариясида формал усулда ҳисобга олиниши мумкин. Бу усул қуйидаги мулоҳазаларга асосланади.

Яна, 65- § дагидек, турли майдон соҳалари учун Шредингер тенгламасини кўриб ўтамиз. $\chi = r\psi$ функция (ψ ўрнига) учун ёзилган аниқ тенглама қуйидагича:

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \chi = 0.$$

Майдоннинг „ички“ ($r \leq a$) соҳасида $(2mE/\hbar^2) \chi = -k^2 \chi$ ҳадни χ'' га нисбатан ҳисобга олмаса ҳам бўлади:

$$\chi'' - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \chi = 0, \quad r \sim a. \quad (66.1)$$

„Ташқи“ ($r \gg a$) соҳада эса, аксинча, U ни ҳисобга олмаса бўлади:

$$\chi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E \chi = 0, \quad r \gg a. \quad (66.2)$$

(66.2) тенглама ечимини (66.1) тенгламанинг $\chi(0) = 0$ чегаравий шартни қанотлантирувчи ечими билан бирор r_1 да (фақат $1/k \gg r_1 \ll a$ да) „тикиш“ керак; тикиш шarti тўлқин функциянинг умумий нормалаштириш кўпайтувчисига боғлиқ бўлмаган χ'/χ нисбатнинг узлуксизлигидан иборат.

Лекин $r \sim a$ соҳадаги ҳаракатни кўриш учун биз ташқи соҳадаги ечимга χ'/χ учун (кичик r ларда) тегишли йўл билан танланган чегаравий шартни қўямиз; ташқи ечим $r \rightarrow 0$ да секин ўзгарганидан бу шартни формал равишда $r = 0$ нуқтага қўйиш мумкин. (66.1) тенгламага $r \sim a$ соҳада E кирмайди; шунинг учун тенглама ўрнидаги чегаравий шарт ҳам зарра энергиясига боғлиқ бўлмаслиги керак. Бошқача қилиб айтганда, у

$$\left. \frac{\chi'}{\chi} \right|_{r \rightarrow 0} = -\kappa \quad (66.3)$$

кўринишда бўлиши лозим, бу ерда κ — бирор ўзгармас катталиқ. Модомики, κ ўзгармас катталиқ E га боғлиқ эмас экан, у ҳолда шу (66.3) шарт кичик манфий $E = -\epsilon$ энергия учун Шредингер тенгламасининг ечимига, яъни зарранинг мос стационар ҳолатининг тўлқин функциясига ҳам тегишли бўлиши керак. $E = -\epsilon$ бўлганда, (66.2) га кўра

$$\chi = \text{const} \cdot e^{-r\sqrt{2m\epsilon}/\hbar},$$

бу функцияни (66.3) га қўйиб,

$$\kappa = \sqrt{2m\epsilon}/\hbar \quad (66.4)$$

эканини (κ — мусбат) кўрамиз.

Энди (66.3) чегаравий шартни $E > 0$ да (66.2) тенгламанинг аниқ умумий ечими бўлган эркин ҳаракатнинг тўлқин функциясига татбиқ этамиз:

$$\chi = \text{const} \cdot \sin(kr + \delta_0).$$

Натижада изланаётган δ_0 фаза учун қуйидагини оламиз:

$$\text{ctg} \delta_0 = -\frac{\kappa}{k} = -\sqrt{\frac{\epsilon}{E}}. \quad (66.5)$$

Бу ерда E энергия фақат $ka \ll 1$ шарт билан чегараланганлиги, лекин у ϵ га нисбатан кичик бўлмаслиги кераклиги сабабли δ_0 фаза ва у билан бирга s -сочилиш амплитудаси ҳам кичик бўлмаслиги мумкин. $l \neq 0$ бўлган парциал сочилиш амплитудалари эса дастлабки ҳолдагидек, кичиклигича қолади. Шунинг учун тўла амплитудани s -сочилиш амплитудаси билан мос тушадиган деб ҳисоблаш мумкин:

$$f = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) = \frac{1}{k(\text{ctg} \delta_0 - i)}.$$

Бунга (66.5) ни қуйиб,

$$f = - \frac{1}{x + ik} \quad (66.6)$$

ифодани оламиз. У $k = ix$ да қутбга эга, яъни 64- § да олинган умумий натижага мос келишини қайд қилиб ўтамиз.

Тўла $\sigma = 4\pi |f|^2$ кесим учун

$$\sigma = \frac{4\pi}{x^2 + k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{E + \epsilon} \quad (66.7)$$

ни топамиз Шундай қилиб, сочилиш илгаригидек изотроп (амплитуда (66.6) йўналишга боғлиқ эмас), лекин унинг кесими энергияга боғлиқ ва резонанс соҳасида ($E \sim \epsilon$) майдон таъсир радиуси (доираси) квадрати a^2 га нисбатан катта (чунки $1/k \gg a$). (66.7) формулаларнинг кўриниши зарраларнинг (улар орасидаги масофа кичиклигида) ўзаро таъсир тафсилотига боғлиқ бўлмай, резонанс сатҳ қиймати орқали тўла аниқланади¹.

Олинган формула уни келтириб чиқаришдаги фарзга қараганда бир оз умумийроқ характерга эга. $U(r)$ функцияни бир оз ўзгартирамиз; бунда (66.3) чегаравий шартдаги доимийнинг катталиги ҳам ўзгаради. $U(r)$ ни тегишли ўзгартириш йўли билан x ни нолга айлантириш, сўнгра кичик манфий катталikka ўтказиш мумкин. Бу ҳолда биз сочилиш амплитудаси учун ўша (66.6) формулани ва кесим учун ўша (66.7) формулани оламиз. Лекин кейинги формулада $\epsilon = \hbar^2 x^2 / 2m$ катталик энди $U(r)$ майдонга хос доимий катталик бўлади, аммо шу майдондаги энергия сатҳи бўла олмайди. Бундай ҳолларда майдонда *виртуал сатҳ* бор дейишади. Чунки, ҳақиқатда, нолга яқин сатҳ бўлмасада, лекин шундай сатҳ пайдо бўлиши учун майдоннинг бир оз ўзгариши кифоя².

¹ (66.7) формула биринчи марта *Е. Вигнер* (1933) томонидан топилган; баён этилган хулоса идеяси *Г. Бете* ва *Р. Пайерлсга* (1935) тегишли.

² Мисол сифатида нейтронларнинг протонларда сочилишида иккала резонанс ҳол (ҳақиқий ва виртуал сатҳларда) ўринли эканини кўрсатамиз. Параллел спинли нейтрон ва протоннинг ўзаро таъсири учун $\epsilon = 2,23$ Мэв энергияли ҳақиқий сатҳ (нейтроннинг асосий ҳолати) мавжуд. Антипараллел спинли нейтрон ва протоннинг ўзаро таъсири эса виртуал сатҳ ($\epsilon = 0,067$ Мэв) нинг борлиги билан характерланади.

67- §. Борн формуласи

Сочувчи майдон сочиловчи зарра ҳаракатига таъсирига нисбатан кучсиз ғалаёнланиш сифатида қаралиши мумкин бўлган муҳим ҳолда сочилиш кесимини умумий кўринишда ҳисоблаб топиш мумкин. Бундай яқинлашишни сочилиш назариясига қўллаш шarti ҳақидаги масалага мазкур параграф охирида қайтамыз.

Сочувчи марказга $p = \hbar k$ импульсда тушадиган зарранинг ғалаёнланмаган ҳаракати

$$\Delta\psi^{(0)} + k^2\psi^{(0)} = 0.$$

Шредингер тенгламасини қаноатлантирадиган $\psi^{(0)} = e^{ikr}$ ясси тўлқин билан ифодаланади.

$$\Delta\psi + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U\right) \psi = 0$$

аниқ тенглама ечимини $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$ кўринишда излаймиз, бунда сочилган тўлқинни ифодаловчи $\psi^{(1)}$ кичик тузатма бир жинсли бўлмаган ($\psi^{(1)}$ бўйича) қуйидаги

$$\Delta\psi^{(1)} + k^2\psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2}\psi^{(0)} = \frac{2m}{\hbar^2}e^{ikr} \quad (67.1)$$

тенгламани қаноатлантириши керак. (67.1) да иккинчи тартибли кичик ($\sim \psi^{(1)}U$) ҳад ташлаб кетилган.

Бу тенглама ечими электродинамикадан маълум бўлган

$$\Delta\varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi\rho$$

кечикувчи потенциаллар тенгламасига ўхшаш ҳолда бевосита ёзилиши мумкин; бу ерда ρ — координата ва вақтнинг бирор функцияси (I, 77- § га қ.). Унинг ечими

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{1}{R} \rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{R}{c}\right) dV', \quad dV' = dx' dy' dz',$$

бу ерда $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ҳажм элементи dV' дан φ нинг қиймати изланаётган $\mathbf{r}$ „кузатиш нуқтаси“ гача бўлган радиус-вектор. Агар ρ функциянинг вақтга боғлиқлиги e^{-ikct} кўпайтувчи орқали берилса, у ҳолда

$$\rho = \rho_0(\mathbf{r})e^{-ikct}, \quad \varphi = \varphi_0(\mathbf{r})e^{ikct}$$

деб ёзиб, φ_0 учун

$$\Delta\varphi_0 + k^2\varphi = -4\pi\rho_0 \quad (67.2)$$

тенглама ва унинг

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \int \rho_0(\mathbf{r}') e^{ikR} \frac{dV'}{R} \quad (67.3)$$

ечимига эга бўламиз.

(67.2) ва (67.1) тенгламаларнинг яққол ўхшашлигидан, кейингисининг ечими

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}') e^{i(kr' + kR)} \frac{dV'}{R}. \quad (67.4)$$

кўринишда берилиши мумкин.

Энди бу функциянинг сочувчи марказдан катта r масофалардаги асимптотик ифодасини ёзиш осон. $r \gg r'$ да $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{r}'\mathbf{n}'$, бу ерда $\mathbf{n}'$ — маълум $\mathbf{k}'$ йўналишдаги бирлик вектор; (67.4) даги интеграл ости ифодадаги $1/R$ кўпайтувчида эса, оддийгина $R \approx r$ деб олиш kifoya. У ҳолда

$$\psi^{(1)} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int U(\mathbf{r}') e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{r}'} dV'$$

бўлади, бу ерда $\mathbf{k}' = k\mathbf{n}'$ — зарранинг сочилгандан кейинги тўлқин вектори. (62.3) таърифга кўра бу функциядаги e^{ikr}/r нинг олдидаги коэффициент изланаётган сочилиш амплитудасини беради; интеграллаш ўзгарувчиларида штрихни тушириб қолдириб, уни

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \quad (67.5)$$

кўринишда ёзамиз. Бунда

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad (67.6)$$

вектор киритилди, унинг абсолют қиймати

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}, \quad (67.7)$$

бу ерда θ бурчак — $\mathbf{k}$ ва $\mathbf{k}'$ орасидаги бурчак, яъни сочилиш бурчаги. Зарра импульси $\hbar\mathbf{q}$ га $\mathbf{q}$ ўзгарадиган сочилиш амплитудаси $U(\mathbf{r})$ майдоннинг мос Фурье компонентаси орқали аниқланишини кўрамиз. Фазовий бурчак элементи ($d\omega'$) га сочилиш кесими эса

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int U e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} dV \right|^2 d\omega'. \quad (67.8)$$

Бу формула биринчи бўлиб *Макс Борн* томонидан олинган (1926); тўқнашишлар назариясидаги тегишли яқинлашишни *Борн яқинлашиши* дейилади.

(67.8) формула, шунингдек, бошқа йўл билан — узлуксиз спектрнинг икки ҳолати орасидаги ўтиш эҳтимоллигини аниқловчи ғалаёнланиш назарияси умумий формуласи (35.6)дан тўғридан-тўғри олинishi мумкин. Мазкур ҳолда гап p ва p' импульс билан эркин ҳаракатланаётган зарра ҳолатлари орасидаги ўтиш тўғрисида бормоқда, ғалаёнланиш оператори ролини эса $U(r)$ функция ўйнайди. $d\psi$ ҳолатлар „интервали“ сифатида импульс фазосининг $dp'_x dp'_y dp'_z$ ҳажм элементини ола-миз. У ҳолда (35.6) формула

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{p',p}|^2 \delta\left(\frac{p'^2}{2m} - \frac{p^2}{2m}\right) dp'_x dp'_y dp'_z \quad (67.9)$$

кўринишни олади. Бунда сўнгги ҳолатнинг тўлқин функцияси импульс фазосида δ - функцияга нормалаштирилган бўлиши керак ((35.1) дан олдинги текстдан қаранг); (12.10)га мувофиқ шу тарзда нормалаштирилган ясси тўлқин қуйидагича бўлади:

$$\psi_{p'} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{ip'r/\hbar} \quad (67.10)$$

Бошланғич ҳолат функциясини эса, бирлик оқим зичлигига нормалаштирамиз:

$$\psi_p = V \sqrt{\frac{m}{p}} e^{iprc/\hbar} \quad (67.11)$$

((21.6) га таққосланг). У ҳолда (67.9) „эҳтимоллик“ юза ўлчамлигига эга бўлади ва дифференциал сочилиш кесимини ифодалайди.

(67.9) нинг таркибига кирган кўнайтувчи кўрнишидаги δ -функция эластик сочилишда энергиянинг сақланишини ифодалайди, шу асосда импульс катталиги ўзгармайди: $p' = p$. Импульс фазосида „сферик координаталарга“ ўтиб (яъни $dp'_x dp'_y dp'_z$ ни $p'^2 dp' d\phi' = (p'/2) d(p'^2) d\phi'$ га алмаштириб) ва $d(p')^2$ бўйича интеграллаб бу δ -функцияни чиқариб ташлаш мумкин. Интеграллаш p' нинг абсолют қийматини p га алмаштиришга (ва бутун ифодани $2m$ га кўпайтиришга) келтирилади ва биз

$$d\sigma = \frac{2\pi mp}{\hbar} \left| \int \psi_{p'}^* U \psi_p dV \right|^2 d\phi' \quad (67.12)$$

ифодани оламиз. Бунга (67.10) ва (67.11) функцияларни қўйиб, биз яна (67.8) натижага қайтамыз. Лекин бирдан сочилиш кесимига олиб келувчи бу ҳисоблаш усули унинг амплитуда фазасини ноаниқ қолдиради.

$U(r)$ сочувчи майдон (67.5) ва (67.8) формулаларда марказий-симметрик деб фараз этилмайди. Агар $U = U(r)$ бўлса, бу интеграллаш умумий ҳолда бир оз узоққа сурилиши мумкин. Бунинг учун q вектор йўналишида қутб ўқиға эга бўлган r , ϑ , φ сферик фазовий координаталардан (ϑ сочилиш бурчагидан фарқли равишда қутб бурчагини ϑ билан белгилаймиз) фойдаланамиз. У ҳолда

$$\int U(r) e^{-iqr} dV = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi U(r) e^{-iqr \cos \vartheta} r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi dr$$

бўлади. ϑ ва φ бўйича интеграллаш мумкин ва натижада марказий-симметрик майдондаги сочилиш амплитудаси учун қуйидаги формулани оламиз:

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty U(r) \sin qr \cdot r dr. \quad (67.13)$$

a — майдоннинг таъсир радиуси бўлсин; (67.13) формулани ka кўпайтма кичик ва катта қийматларининг чегаравий ҳолларида кўриб ўтамыз.

$ka \ll 1$ (кичик тезликлар) бўлганда, $\sin qr \approx qr$ дейиш мумкин, шунинг учун

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) r^2 dr. \quad (67.14)$$

Бу ҳолда сочилиш ҳамма йўналиш бўйича изотроп ва 65- § да олинган умумий натижага мувофиқ зарра тезлигига боғлиқ эмас.

$ka \gg 1$ бўлганда (катта тезликлар) сочилиш кескин анизотроп ва очилиш бурчаги $\Delta\vartheta \sim 1/ka$ бўлган тор конус ичида олдинга йўналган. Ҳақиқатан ҳам, бу конус ташқарисида q нинг қиймати катта ($q \gg 1/a$), $\sin qr$ кўпайтувчи майдон таъсири соҳасида ($r \leq a$) тез осцилланувчи ўзгарувчан ишорали функция бўлиб, унинг секин ўзгарувчи U функцияга кўпайтмасидан олинган интеграл нолга яқин.

Энди кўриб ўтилган яқинлашишнинг қўлланиш шартини аниқлаймиз. (67.5) формула Шредингер тенгла-

масини $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$ кўринишда ва шу билан бирга $\psi^{(1)} \ll \psi^{(0)}$ деб фараз қилиб, тақрибан ечиш асосида чиқарилган эди. Бу шартнинг сочувчи марказ ($r=0$) яқинидаги энг „хавфли“ соҳада бажарилишини талаб этиш кифоя, $|\psi^{(0)}| = 1$ бўлганлигидан эса $\psi^{(1)} \ll 1$ ни талаб этиш лозим. Иккинчи томондан, $r=0$ да (67.4) интегралда $R=r'$ бўлади, шунинг учун

$$\psi^{(1)}(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r') e^{i(kr' + \hbar r')} \frac{dV'}{r'}. \quad (67.15)$$

Бу интегрални ka кичик ва катта қийматли бўлган ҳолларда баҳолаймиз.

$ka \ll 1$ бўлганда, интеграл ости ифодада экспоненциал кўпайтувчини бирга алмаштириш мумкин ва у ҳолда интегрални баҳолаш

$$\psi^{(1)}(0) \sim \frac{m|U|}{\hbar^2 a} a^3$$

ни беради, бу ерда $|U|$ — таъсир радиуси оралиғида майдон катталигининг тартиби. Натижада

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad ka \ll 1 \quad (67.16)$$

шартни оламир.

Интегрални $ka \gg 1$ бўлган ҳолда баҳолаш учун эса аввал $\mathbf{r}'$ йўналишлар бўйича интеграллаймиз (майдон марказий деб фараз қилинади). (67.13) формулани келтириб чиқаришга ўхшаш ҳолда қуйидагига эга бўламиз:

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(0) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty \int_0^\pi U(r') e^{ikr'(\cos\vartheta+1)} 2\pi \sin\vartheta d\vartheta \cdot r' dr' = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2 ik} \int_0^\infty U(r') (e^{2ikr'} - 1) dr'. \end{aligned}$$

$ka \gg 1$ ҳолда осцилланувчи $\exp(2ikr')$ кўпайтувчи ҳаддан олинган интеграл нолга яқин, иккинчи ҳад интеграллари эса $\sim |U|a$. Натижада

$$|U| \ll \frac{\hbar^2 ka}{ma^2} = \frac{\hbar v}{a}, \quad ka \gg 1 \quad (67.17)$$

шартни оламир.

Равшанки, агар майдон (67.16) шартни қаноатлантирса, у ҳолда у $ka \gg 1$ бўлганда, кучсизроқ (67.17)

шартни ҳам қаноатлантиради; шундай қилиб, мазкур ҳолда Борн яқинлашиши кичик тезликларда ҳам, катта тезликларда ҳам ўринлидир. Лекин етарлича катта тезликларда Борн яқинлашиши, ҳар ҳолда, (67.17) га кўра ёки агар (67.16) шарт бажарилмаса, унинг кичик тезликларда ўринли бўлишига кўра қўлланилиши мумкин.

Масалалар

1. Сферик потенциал ўрнининг сочилиш кесими Борн яқинлашишида аниқлансин: $r < 0$ да $U = -U_0$, $r > a$ да $U = 0$.

Ечилиши. (67.13) интегрални ҳисоблаб,

$$d\sigma = 4a^2 \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{(\sin qa - qa \cos qa)^2}{(qa)^6} dq$$

натижани оламиз. Барча бурчаклар бўйича интеграллаш (уни $q = 2k \sin(\theta/2)$ ўзгарувчига ўтиб ва $d\sigma$ ни $2\pi q dq/k^2$ га алмаштириб бажариш қулай) сочилишининг тўла кесимини беради:

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \left[1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin 4ka}{(2ka)^2} - \frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4} \right].$$

Чегаравий ҳолларда бу формула қуйидагини беради:

$$ka \ll 1 \text{ да } \sigma = \frac{16\pi a^2}{9} \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2, \quad ka \gg 1 \text{ да } \sigma = \frac{2\pi}{k^2} \left(\frac{mU_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2.$$

Буларнинг биринчиси 65- § даги 1- масалада бошқа йўл билан топилган (2) амплитудага мос келади.

2. Юқоридаги масала $U = (\alpha/r)e^{-r/a}$ майдон учун ечилсин.

Ечилиши. (67.13) даги интегрални ечасак,

$$d\sigma = 4a^2 \left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2} \right)^2 \frac{d\sigma}{(q^2 a^2 + 1)^2} \quad (1)$$

чиқади, Тўла кесим

$$\sigma = 16\pi a^2 \left(\frac{\alpha m a}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{4k^2 a^2 + 1}.$$

Бу формулаларнинг қўлланиш шarti U сифатида α/a олинган (67.16—17) лардан келиб чиқади: $\alpha m a/\hbar^2 \ll 1$ ёки $\alpha/\hbar v \ll 1$.

Кўриб ўтилган потенциал „экранлаш“ радиуси a га тенг бўлган „экранланган“ Кулон майдонидир. $a \rightarrow \infty$ да соф Кулон майдони ҳосил бўлади ва (1) дифференциал кесим Резерфорд формуласига ўтади (68- §).

68- §. Резерфорд формуласи

Борн формуласини Кулон майдонидаги сочилишга қўллаймиз. Аниқлик учун e зарядли зарранинг Ze зарядли ядроларда сочилиши ҳақида гапирамиз; у ҳолда $U = Ze^2/r$.

(67.5) га кўра масала $1/r$ функциянинг Фурье компонентасини ҳисоблашга келтирилади. Тўғридан-тўғри ҳисоблаш ўрнига буни $1/r$ функция қаноатлантирувчи

$$\Delta^* \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r) \quad (68.1)$$

дифференциал тенглама асосида бажариш қулайроқ (I, (59.10) га қ)¹.

Лекин баъзи бир бошқа қўлланишларни ҳам назарда тутиб, аввал ўнг қисми $4\pi\rho(r)$ бўлган;

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho(r) \quad (68.2)$$

тенгламани қаноатлантирувчи $\varphi(r)$ функциянинг умумийроқ ҳолини кўриб ўтамиз.

$\varphi(r)$ функцияни Фурье интегралига ёямиз:

$$\varphi(r) = \int e^{iqr} \varphi_q \frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \quad d^3q = dq_x dq_y dq_z. \quad (68.3)$$

Бунда

$$\varphi_q = \int \varphi(r) e^{-iqr} dV. \quad (68.4)$$

(68.3) тенгликнинг икки томонига Лаплас операторини қўллаб ва интеграл остида дифференциаллаш ўтказиб

$$\Delta\varphi = - \int q^2 e^{iqr} \varphi_q \frac{d^3q}{(2\pi)^3}$$

ифодани оламиз. Демак, $\Delta\varphi$ ифоданинг Фурье компонентаси $(\Delta\varphi)_q = -q^2\varphi_q$. Иккинчи томондан, (68.2) тенгламанинг икки қисмидан Фурье компонентаси олиб, $(\Delta\varphi)_q$ ни топиш мумкин: $(\Delta\varphi)_q = -4\pi\rho_q$. Иккала ифодани гаққослаб, қуйидагини топамиз:

$$\varphi_q = \frac{4\pi}{q^2} \rho_q = \frac{4\pi}{q^2} \int \rho(r) e^{-iqr} dV. \quad (68.5)$$

$\rho = 1/r$ функция учун қўлланилса, $\rho = \delta(r)$ бўлади, (68.5) нинг ўнг томонидagi интеграл эса 1 га айланади, демак,

$$(1/r)_q = \frac{4\pi}{q^2}. \quad (68.6)$$

¹ Ҳисоблашнинг бошқача усулидастлаб Кулон майдонини „экранлаш“ни киритиш ва кейинчалик экранлаш радиусини чексизликка интилтиришдан иборат (67- § даги 2- масалага қ.).

Кулон майдонида сочилиш амплитудаси (67.5) ва (67.7) га кўра

$$f(\theta) = -\frac{mZe^2}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi}{q^2} = -\frac{Ze^2}{2mv^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}. \quad (68.7)$$

бу ерда сочилувчи зарралар тезлиги (v) киритилди: $\hbar k = mv$. Бундан сочилиш кесими учун Резерфорднинг классик формуласига мос келувчи

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2 \frac{d\sigma}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (68.8)$$

формулани топамиз.

Кулон майдони секин камайиши сабабли, U нинг қиймати ичида ташқарисидагига қараганда анча катта бўладиган чекли фазо соҳасини ажратиш мумкин эмас. Борн яқинлашишини шу майдонда сочилишга қўлла-ниш шартини (67.17) дан оламиз (унда a параметр ўрнига ўзгарувчан r масофа ёзилади) натижада

$$\frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1 \quad (68.9)$$

тенгсизлик чиқади.

Худди шунга тескари тенгсизлик Кулон майдонида сочилишнинг квазиклассиклик шarti сифатида (63.2) дан олинади: $Ze^2/\hbar v \gg 1$. Бу ҳолда сочилиш Резерфорд формуласи орқали ифодаланиши зарур. Демак, бу формула ҳам катта, ҳам кичик тезликларнинг чегаравий ҳолларида олинишини кўрамыз. Бу ҳол Кулон майдони учун олинган Шредингер тенгламасининг аниқ ечимига асосланган сочилишнинг квант назариясидан келиб чиқадиган натижани табиийлаштиради: сочилиш кесимининг аниқ квантомеханик формуласи Резерфорднинг классик формуласига мос тушади (*Н. Мотт, В. Гордон, 1928*)¹.

69- §. Бир хил зарралар тўқнашуви

Иккита бир хил зарра тўқнашган ҳол алоҳида кўриб ўтишни талаб этади. Зарраларнинг айнан ўхшашлиги квант механикасида улар ўртасида ўзига хос ал-

¹ Тушунмовчилик бўлмаслиги учун шунни таъкидлаймизки, бу сочилиш амплитудаси учун ёзилган (68.7) ифодага алоқадор эмас $f(\theta)$ нинг аниқ ифодаси (68.7) дан θ ва v га боғлиқ бўлган ва фақат (68. 9) шарт бажарилганда 1 га айланадиган фазовий кўпайтувчиси билан фарқ қилади.

машинувчи ўзаро таъсирнинг пайдо бўлишига олиб келишини биз кўрган эдик (46- §). У сочилишга ҳам таъсир кўрсатади (*H Mott*, 1930).

Аниқлик учун $1/2$ спинли иккита бир хил зарра (иккита электрон, иккита нуклон) тўқнашуви ҳақида гапирамиз. Иккита шундай заррадан тузилган системанинг орбитал тўлқин функцияси зарралар ўрнини алмаштиришга нисбатан, агар системанинг тўла спини $S=0$ бўлса, симметрик ва агар $S=1$ бўлса, антисимметрик бўлиши керак (46- §). Шунинг учун одатдаги Шредингер тенгламасини ечиш йўли билан олинадиган, сочилишни ифодаловчи тўлқин функция зарралар бўйича симметрикланган ёки антисимметрикланган бўлиши керак. Зарралар ўрнини алмаштириш уларни бирлаштирувчи радиус-вектор йўналишини тескарисига ўзгартиришга эквивалентдир. Бу инерция маркази тинч турган координаталар системасида r ўзгармай қолади, θ бурчак эса $\pi - \theta$ га алмашади (шунга кўра, $z = r \cdot \cos \theta$ ўрнига $-z$ олинади) деган сўздир. Шунинг учун тўлқин функциянинг (62.3) асимптотик ифодаси ўрнига биз қуйидагини ёзишимиз лозим:

$$\psi = e^{ikz} \pm e^{-ikz} + \frac{1}{r} e^{ikr} [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)]. \quad (69.1)$$

Зарраларнинг айнан ўхшашлиги сабабли, уларнинг қайси бири сочилувчи, қайси бири сочувчи эканини кўрсатиб бўлмайди, албатта. Инерция маркази системасида биз иккита бир хил, бир-бирига томон тарқалаётган тушувчи ясси тўлқинларга ((69.1) да e^{ikz} ва e^{-ikz}) эгамиз. (69.1) даги тарқалувчи сферик тўлқин эса ҳар икки зарра сочилишини ҳисобга олади ва унинг ёрдамида ҳисобланган эҳтимоллик оқими фазовий бурчакнинг берилган $d\Omega$ элементида зарралардан бирортасининг сочилиш эҳтимолини белгилайди. Сочилиш кесими шу оқимнинг тушувчи ясси тўлқинларнинг ҳар биридаги оқим зичлигига нисбатидан иборат, яъни илгаригидек, (69.1) тўлқин функциядаги e^{ikr}/r олдидаги коэффициент модулининг квадрати орқали аниқланади.

Шундай қилиб, агар тўқнашувчи зарралар йиғинди спини $S=0$ бўлса, у ҳолда сочилиш кесими

$$d\sigma_0 = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 d\Omega \quad (69.2)$$

кўринишига эга, агар $S=1$ бўлса, у ҳолда

$$d\sigma_1 = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 d\Omega. \quad (69.3)$$

„Интерференцион“ ҳад $f(\theta)f^*(\pi-\theta) + f^*(\theta)f(\pi-\theta)$ нинг пайдо бўлиши алмашинувчи ўзаро таъсирга хосдир. Агар зарралар, классик механикадагидек, бир-биридан фарқ қилганида эди, у ҳолда улардан бирортасининг берилган $d\sigma$ фазовий бурчак элементига сочилиш эҳтимоллиги улардан бирининг θ бурчакка, қарама-қарши ҳаракатланаётганининг $\pi - \theta$ бурчакка бурилиш эҳтимоллари йиғиндисига тенг бўлган бўлар эди; бошқача қилиб айтганда, кесим

$$\{|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2\} d\sigma \quad (69.4)$$

ифодага тенг бўлар эди.

(69.2—3) формулаларда тўқнашувчи зарраларнинг йиғинди спини аниқ қийматга эга деб фараз қилинади. Агар система маълум спин ҳолатда бўлмаса, у ҳолда сочилиш кесимини аниқлаш учун барча мумкин бўлган шундай ҳолатлар бўйича (уларнинг ҳаммасини тенг эҳтимолли деб) ўртачалаштириш лозим. $1/2$ спинли икки зарра системасининг $2 \cdot 2 = 4$ та турли спин ҳолатларидан бири $S=0$ тўла спинга (зарраларнинг спин проекциялари $1/2, -1/2$) ва учтаси $S=1$ спинга (зарраларнинг спин проекциялари $1/2, 1/2; -1/2, -1/2; -1/2, 1/2$) мос келади. Шунинг учун системанинг $S=0$ ёки $S=1$ спинга эга бўлиш эҳтимоли мос равишда $1/4$ ёки $3/4$ га тенг, шунга кўра

$$d\sigma = \frac{1}{4} d\sigma_0 + \frac{3}{4} d\sigma_1 = \left\{ |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \frac{1}{2} [f(\theta)f^*(\pi - \theta) + f^*(\theta)f(\pi - \theta)] \right\} d\sigma_0. \quad (69.5)$$

Мисол сифатида Кулон қонуни ($U = e^2/r$) бўйича ўзаро таъсирлашувчи иккита тез электроннинг тўқнашувини кўриб ўтамиз. (68.9) шарт бажарилганда — $e^2/\hbar v \ll 1$ (v — зарраларнинг нисбий ҳаракат тезлиги), амплитуда учун унинг Борн яқинлашишидаги (68.7) ифодасидан фойдаланиш мумкин. Бунда формуладаги m иккала зарранинг келтирилган массаси эканини эсда сақлаш лозим ($m = m_e/2$, бу ерда m_e — электроннинг массаси). (68.7) ни (69.5) га қўйиб,

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{m_e v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\theta}{2}} - \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}} \right] d\sigma_0 \quad (69.6)$$

ифодани оламиз.

Бу формула икки электроннинг инерция маркази системасига тааллуқли. Тўқнашишгача электронлардан бири тинч туради деб фарз қилинадиган лаборатория системасига ўтиш, (62. 2) га биноан, θ ни 2θ га алмаштириш билан амалга оширилади. У ҳолда

$$d\sigma = \left(\frac{2e^2}{m_e v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \theta} + \frac{1}{\cos^4 \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta \cos^2 \theta} \right] \cos \theta d\theta, \quad (69. 7)$$

бу ерда $d\theta$ — янги координата системасидаги фазовий бурчак элементи (θ ни 2θ га алмаштиришда $d\theta$ ни $4\cos \theta d\theta$ га алмаштириш лозим, чунки $\sin \theta d\theta d\varphi = 4\cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi$). (69. 6—7) даги охириги ҳадлар бу формулаларни классик формулалардан фарқ қилдиради (1, 16- § га қаранг).

Масала

Бир-бири билан α бурчак ташкил этган йўналишларда қутбланган $1/2$ спинли иккита бир хил зарранинг сочилиш кесими аниқлансин.

Ечилиши. σ кесимнинг зарралар қутбланишига боғлиқлиги $\vec{s}_1 \vec{s}_2$ скаляр — ҳар икки зарра спинлари векторининг ўртача қийматлари кўпайтмасига пропорционал бўлган ҳад орқали ифодаланиши керак; бир-бирига нисбатан α бурчак остида қутбланган зарралар учун $\vec{s}_1 \vec{s}_2 = 1/4 \cos \alpha$, σ ни $\sigma = a + 4b \vec{s}_1 \vec{s}_2$ кўринишда қилирамиз. Қутбланган зарралар учун иккинчи ҳад бўлмайди ($\vec{s}_1 = \vec{s}_2 = 0$) ва (69. 5) га кўра, $\sigma = a = 1/4 (\sigma_0 + 3\sigma_1)$. Агар зарралар бир йўналишда қутбланган бўлса ($\alpha = 0$), яъни аynи бир йўналишдаги спин проекциялари бир хил бўлса, у ҳолда система $S = 1$ ҳолатда бўлади, демак, бу ҳолда $\sigma = a + b = \sigma_1$. Олинган икки тенгликдан a ва b ни топиб, кесимни аниқлаймиз:

$$\sigma = \frac{1}{4} \{ (\sigma_0 + 3\sigma_1) + (\sigma_1 - \sigma_0) \cos \alpha \}.$$

70- §. Тез электронларнинг атомлар билан эластик тўқнашуви

Агар тушувчи электрон тезлиги атом электронлари тезлигидан катта бўлса, у ҳолда тез электронларнинг атомлар билан эластик тўқнашуви Борн яқинлашишида ўрилиши мумкин.

Электрон ва атом массалари орасидаги фарқнинг катталигидан атомни тўқнашиш вақтида қўзғалмас деб ҳисоблаш мумкин ва у ҳолда атом ва электроннинг инерция маркази системаси атомни қўзғалмас деб олиш мумкин бўлган лаборатория координаталар системасига дос тушади. У ҳолда 67- § даги формулаларда p ва p'

электроннинг тўқнашишгача ва тўқнашишдан кейинги импульсларини ифодалайди, m — электрон массаси, θ бурчак эса электроннинг θ бурилиш бурчаги билан мос тушади.

67- § да биз ўзаро таъсир энергиясининг $U_{p,p}$ матрица элементини эркин зарранинг тўқнашишгача ва ундан кейинги тўлқин функцияларига нисбатан ҳисоблаган эдик. Атом билан тўқнашишда эса унинг ички ҳолатини ифодаловчи тўлқин функцияларни ҳам ҳисобга олиш зарур. Шунинг учун (67.8) формуладаги $U_{p,p}$ ўрнида электроннинг атом билан ўзаро таъсир энергиясининг матрица элементи U бўлиши керак; U электроннинг ва атомнинг тўлқин функцияларига нисбатан олинади. Эластик тўқнашувда атом ҳолати ўзгармаганлигидан, матрица элементни атомга нисбатан диагонал бўлади. Шундай қилиб, кесим формуласи қуйидаги кўринишда ёзилиши мумкин:

$$dz = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar} \left| \int \int \psi_0^* U e^{-iqr} \psi_0 d\tau dV \right|^2 d\omega, \quad (1)$$

бу ерда ψ_0 — атомдаги барча Z та электроннинг координаталарига боғлиқ бўлган атом тўлқин функцияси, $d\tau = dV_1 \dots dV_Z$ эса атом электронлари конфигурация фазосининг элементи.

$$\int \psi_0^* U \psi_0 d\tau$$

интеграл электроннинг атом билан ўзаро таъсир энергиясининг атом ҳолатлари бўйича ўртачалаштирилган катталигини кўрсатади. Уни $e\varphi(r)$ кўринишда ҳам ифодалаш мумкин (бу ерда $\varphi(r)$ — зарядларнинг атомдаги ўртача тақсимооти вужудга келтирган электр майдон потенциалли).

Шу тақсимот зичлигини $\rho(r)$ орқали белгилаб, φ потенциал учун

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho(r)$$

Пуассон тенгламасига эга бўламиз. (70.1) да изланаётган матрица элементи $e\varphi_q$ Фурье компонентиدير. (68.5) га кўра уни аниқлаш учун ρ заряд зичлигининг Фурье компонентаси ҳисобланади. Заряд зичлиги электрон зарядлари ва ядро зарядидан иборат:

$$\rho = -|e|n(r) + Z|e|\delta(r),$$

бунда $n(r)$ — атомдаги электронлар сони зичлиги. e^{-iqr} га кўпайтириб ва интеграллаб, қуйидагини оламиз:

$$\int \rho e^{-iqr} dV = -|e| \int n e^{-iqr} dV + Z|e|.$$

Шундай қилиб, бизга керакли матрица элементи учун

$$\iint \psi_0^* U e^{-iqr} \psi_0 d\tau dV = -\frac{4\pi e^2}{q^2} [Z - F(q)] \quad (70.2)$$

ифодани оламиз, бу ерда $F(q)$ катталики

$$F(q) = \int n e^{-iqr} dV \quad (70.3)$$

формуладан аниқланади ва *атом форм-фактори* дейилади. У сочилиш бурчаги ва тушувчи электрон тезлигининг функциясиدير.

Ниҳоят, (70.2) ни (70.1) га қўйиб, тез электронларнинг атомдан эластик сочилиш кесими учун қуйидаги ифодани оламиз¹.

$$d\sigma = \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4 q^4} [Z - F(q)]^2 d\phi, \quad (70.4)$$

$\hbar q$ ўзгарувчи электроннинг атомга берадиган импульс катталигини ифодалайди. У электрон тезлиги v ва сочилиш бурчаги ϕ билан

$$q = \frac{2mv}{\hbar} \sin \frac{\phi}{2} \quad (70.5)$$

формула орқали боғланган ((67.7) га таққосланг).

q нинг қийматлари $1/a$ га нисбатан кичик бўлган чегаравий ҳолни кўрамиз, бу ерда a — атом ўлчамининг катталики тартиби ($qa \ll 1$). Кичик q ларга кичик сочилиш бурчаклари мос келади: $\phi \ll v_0/v$, бу ерда $v_0 \sim \hbar/ma$ — атом электронлари тезлигининг катталики тартиби.

¹ Биз сочилувчи электронлар ва атом электронлари ўртасидаги алмашилиш эффектларини ҳисобга олмаймиз, яъни система тўлқин функциясини симметриклаштирмаймиз. Бундай тақрибийликнинг тўғрилиги шундаки, тушувчи электрон тўлқин функциясининг атом ҳажми (унда атом электронларининг секин ўзгарувчи тўлқин функцияси ёйилган) бўйлаб тезда осцилляцionaliши сабабли, кесимдаги интерференцион ҳадлар йўқолади.

$F(q)$ ни q даражалари бўйича қаторга ёямиз. Нолинчи тартибли ҳад $\int n dV$ га, яъни атомдаги электронларнинг Z тўла сонига тенг.

Биринчи тартибли ҳад $\int r n(r) dr$ га, яъни атом дипол моментининг ўртача қийматига пропорционал; бу қиймат айнан нолга айланади (54- §): Шунинг учун ёйишни иккинчи тартибли ҳадгача бажариш керак, у ҳолда

$$Z - F(q) = \frac{1}{2} \int (qr)^2 n dV = \frac{q^2}{6} \int nr^2 dV;$$

(70.4) га қўйиб, қуйидагини оламиз:

$$d\sigma = \left| \frac{me^2}{3\hbar^2} \int nr^2 dV \right|^2 d\phi. \quad (70.6)$$

Шундай қилиб, кесим кичик бурчаклар соҳасида сочилиш бурчагига боғлиқ эмас ва атом электронлари ҳамда ядро орасидаги масофанинг ўртача квадрати билан аниқланади.

q катта бўлган тескари чегаравий ҳолда ($qa \gg 1$) (70.3) нинг интегралости ифодасидаги e^{-iqr} кўпайтувчи тез осцилляцияувчи функциядир ва шунга кўра интеграл нолга яқин. Демак, Z га нисбатан $F(q)$ ни ҳисобга олмаса бўлади; у ҳолда

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{2m\upsilon^2} \right)^2 \frac{d\phi}{\sin^2 \frac{\theta}{2}}, \quad (70.7)$$

яъни атом ядросида сочилишнинг Резерфорд кесими қолади.

Масала

Тез электронларнинг нормал ҳолатдаги водород атоmidан эластик сочилиш кесими ҳисоблансин.

Ечилиши. Водород атомининг нормал ҳолат тўлқин функцияси (одатдаги бирликларда) $\psi = \pi^{-1/2} e^{-r/a_0}$, бу ерда $a_0 = \hbar^2/me^2$ — Бор радиуси ((31. 15) га қ.). Электрон зичлиги $n = |\psi|^2$. (70.3) да бурчаклар бўйича интеграллаш (67.13) формулани келтириб чиқариш каби бажарилади ва

$$F = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty n(r) \sin qr \cdot r dr = \left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{4} \right)^{-2}$$

ифода олинади. (70. 4) га қўйсак,

$$d\sigma = 4a_B^2 \frac{(8 + a_B^2 q^2)^2}{(4 + a_B^2 q^2)^4} d\sigma$$

чиқади. Тўла кесимни

$$d\sigma = 2\pi \sin\vartheta \, d\vartheta = 2\pi \left(\frac{\hbar}{mv} \right)^2 q \, dq$$

деб олиб ва dq бўйича интеграллаб ҳисоблаш қулай; бунда, албатта, фақат $1/v$ бўйича энг қуйи даражадаги ҳадни сақлаш дозим (Бори яқинлашиши!). Натижада қуйидагини оламиз:

$$\sigma = \frac{7\pi}{3} \left(\frac{\hbar}{mv} \right)^2.$$

НОЭЛАСТИК ТЎҚНАШИШЛАР

71- §. Мукаммал мувозанат принципи

Тўқнашувчи зарралар ички ҳолатининг ўзгариши билан бўладиган тўқнашувлар *ноэластик тўқнашишлар* дейилади. Бу ерда биз бу ўзгаришларни энг кенг маънода тушунамиз, хусусан, зарралар тури ва уларнинг сони ўзгариши мумкин. Масалан, гап атомлар уйғониши ёки ионланиши ҳақида, ядролар уйғониши ёки емирилиши ҳақида (ва ҳ. к.) бориши мумкин. Тўқнашиш (масалан, ядро реакцияси) турли физикавий процесслар билан бўладиган ҳолларда турли *реакция каналлари* ҳақида сўз юритилади.

Назариянинг вақтни ўгиришга нисбатан симметрияси асосида турли ноэластик процесслар эҳтимолликларини ва кесимларини боғловчи умумий муносабатни ўрнатиш мумкин. Аниқлик учун, бу ерда бошланғич ҳолатда ҳам, охириги ҳолатда ҳам иккитадан зарра бўлган $a + b \rightarrow c + d$ кўринишдаги реакциялар тўғрисида гапирамиз.

Мулоҳаза юритиш қулай бўлсин учун аввал зарралар бирор катта, лекин чекли Ω ҳажмда (кейинчалик $\Omega \rightarrow \infty$ лимитга ўтишни назарда тутиб) ҳаракатланади деб ҳисоблаймиз. U ҳолда зарралар эркин ҳаракатининг узлуксиз спектри дискрет спектрга айланади, энергия сатҳлари орасидаги интерваллар жуда кичик бўлиб, улар $\Omega \rightarrow \infty$ да нолга интилади (27- § охирига қ.).

Айтайлик w_i тўқнашувчи зарралар системасининг бирор i ҳолатдан f ҳолатга ўтиш эҳтимоллиги бўлсин¹.

¹ Ўтишларнинг матрица элементларида индексларнинг умумий қабул этилган жойлашиш тартибига мос бўлсин учун охириги ҳолат индексини биз бошланғич ҳолат индексидан чапга қўямиз.

Шу ҳолатларнинг ҳар бири зарралар туридан ташқари, шунингдек, уларнинг маълум тезлик векторлари ва спин проекцияларининг маълум қийматлари билан ҳам характерланади.¹ Вақтни ўгириш энг аввал тезликларнинг ва спин проекцияларининг ишорасини ўзгартиради²; шу ўзгаришлари билан i ва f ҳолатларда фарқ қилувчи ҳолатларни i^* ва f^* орқали белгилаймиз; улар i ва f ҳолатларга нисбатан вақт бўйича ўгирилган ҳолатлар деб юритилади. Бундан ташқари, бошланғич ҳолат охириги ҳолат бўлиб, охириги ҳолат эса бошланғич ҳолат бўлиб қолади. Квант механикаси тенгламаларининг вақтни ўгиришга нисбатан симметриклигидан $i \rightarrow f$ ва $f^* \rightarrow i^*$ ўтишларнинг эҳтимолликлари бир хил бўлиши керак:

$$w_{fi} = w_{i^*f^*}. \quad (71.1)$$

Бу хулоса мукаммал мувозанат принципини ифодалайди.

Эҳтимолликлардан реакция кесимларига ўтамыз. Иккита бошланғич ва иккита охириги зарра нисбий ҳаракатининг импульслари ва тезликларини p_i, v_i ва p_f, v_f орқали белгилаймиз. Тўқнашув натижасида v_f тезлик $d\sigma_f$ фазовий бурчаклар элементида йўналган бўлсин (ҳар икки зарра инерция маркази системасида): шу тўқнашув кесимини $d\sigma_{fi}$ дейлик. Зарраларнинг тўқнашишгача ва ундан кейинги энергиялари йиғиндиси, албатта, бир хил ($E_i = E_f$). Лекин формал равишда охириги ҳолатдаги энергия (ўзгарувчан катталиқ) қийматининг dE_f интервалига тегишли кесим киритамиз. Бундай кесимни

$$d\sigma_{fi} \delta(E_f - E_i) dE_f \quad (71.2)$$

кўринишда ёзиш керак. Бу ердаги δ - функция энергия сақланиши қонунининг бажарилишини таъминлайди.

Тўқнашиш кесими тушунчасининг таърифига кўра, у мазкур процесс эҳтимоллигини тушувчи зарралар

¹ „Мураккаб“ зарралар (атом, атом ядроси) учун „спин“ орқали тўла хусусий момент (у спинлардан ва таркибий қисмлар, масалан, электронлар ва нуклонлар, ички ҳаракатининг орбитал моментларидан иборат) тушунилади.

² Вақтни ўгиргандаги аниқ хатти-ҳаракат ҳар бир физикавий катталиқнинг у ёки бу механиканинг қўлланилишига боғлиқ бўлмаган хоссасидир. Импульс моментининг қандай ўзгариши (хатти-ҳаракати) унинг классик ифодаси $[p] = m[rv]$ дан кўриниб турипти; у тезлик билан бирга ишорасини ўзгартиради.

оқимининг зичлигига бўлиб топилади. Зарралар оқимининг зичлиги v_i/Ω га тенг ($1/\Omega$ кўпайтувчи зарралар сонининг зичлигини кўрсатади — Ω ҳажмда бир зарра). Бундан ташқари (71.2) кесим $d\sigma_f$ ва dE_f интервалларга тегишли эканини назарда тутиш лозим, ҳолбуки, w_{fi} эҳтимоллик v_f ва E_f ларнинг қатъий аниқ қийматларига тегишлидир. Шу сабабдан $d\sigma_{fi}$ кесимни топиш учун w_{fi} ни v_f тезлик (ёки p_f импульс) йўналишлари ва катталигининг берилган интервалига тўғри келадиган квант ҳолатлари сонига ҳам кўпайтириш керак. Бу, сон

$$\frac{\Omega p_f^2 dp_f d\sigma_f}{(2\pi\hbar)^3}$$

га тенг ((27.8) билан таққосланг).

Ушбу мулоҳазаларга яқун ясаб, кесим ва эҳтимоллик ўртасидаги қуйидаги муносабатни ёзиш мумкин:

$$d\sigma_{fi} = \delta(E_f - E_i) dE_f = \frac{w_{fi}}{v_i/\Omega} \frac{\Omega p_f^2 dp_f d\sigma_f}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Бундан

$$w_{fi} = \frac{(2\pi\hbar)^3}{\Omega^2} \frac{v_i d\sigma_{fi} \delta(E_f - E_i) dE_f}{p_f^2 dp_f d\sigma_f} = \delta(E_f - E_i) \frac{(2\pi\hbar)^3 v_i \cdot v_f}{\Omega^2} \frac{d\sigma_{fi}}{p_f^2 d\sigma_f}$$

(бунда $dE_f/dp_f = v_f$ тенгликка кўра v_f тезлик киритилади, чунки нисбий ҳаракат кинетик энергияси E_f энергияга қўшилувчи сифатида киради). Ниҳоят, худди шундай кўринишда w_{fi^*} эҳтимолликни ёзиб, ҳар икки ифодани тенглаштириб ва умумий кўпайтувчиларни қисқартириб, қуйидаги тенгликни оламиз:

$$\frac{d\sigma_{fi}}{p_f^2 d\sigma_f} = \frac{d\sigma_{fi^*}}{p_i^2 d\sigma_i}. \quad (71.3)$$

Бу муносабат мукамал мувозанат принципини кесим терминларида ифодалайди. Ω ҳажм муносабатдан тушиб қолди; шунинг учун (71.3) шу кўринишда $\Omega \rightarrow \infty$ лимитда ҳам сақланади.

(71.1) ёки (71.3) тенгликлар икки процесс $i \rightarrow f$ ва $f^* \rightarrow i^*$ нинг эҳтимолликлари ёки кесимларини ўзаро боғлайди: бу икки процесс сўзма-сўз маънода тўғри ва тескари ($i \rightarrow f$ ва $f \rightarrow i$) процесслар бўлмасалар-да,

лекин ўзларининг физикавий маъноларига кўра уларга жуда яқиндир.

Агар p_f нинг барча йўналишлари бўйича интегралланган, охириги зарраларнинг s_{1f} , s_{2f} спинлари йўналиши бўйича қўшилган ва бошланғич зарралар p_i импульсининг ва s_{1i} , s_{2i} спинларининг йўналишлари бўйича ўртачалаштирилган интеграл кесимларни кўрилса, у ҳолда $i \rightarrow f$ ва $i^* \rightarrow f^*$ ўтишлар орасидаги фарқ бутунлай йўқолади. Бундай кесимни $\bar{\sigma}_{fi}$ орқали белгилаймиз:

$$\bar{\sigma}_{fi} = \frac{1}{4\pi (2s_{1i}+1)(2s_{2i}+1)} \sum_{(m_s)} \iint d\sigma_{fi} d\sigma_i; \quad (71.4)$$

йиғинди барча зарралар спинларининг проекциялари бўйича олинади; йиғиндилар ва интеграллар белгиси олдидаги кўпайтувчи эса бошланғич зарраларга тегишли катталиклар бўйича йиғинди эмас, балки ўртачалаштириш олинishiга алоқадор. (71.3) ни

$$p_i^2 d\sigma_{fi} d\sigma_i = p_f^2 d\sigma_{i^*f^*} d\sigma_f$$

кўринишда ёзиб ва кўрсатилган амалларни бажариб, изланаётган муносабатни оламиз:

$$g_i p_i^2 \bar{\sigma}_{fi} = g_f p_f^2 \bar{\sigma}_{i^*f^*}. \quad (71.5)$$

Бу ерда g_i ва g_f орқали қуйидагилар белгиланган:

$$\begin{aligned} g_i &= (2s_{1i}+1)(2s_{2i}+1), \\ g_f &= (2s_{1f}+1)(2s_{2f}+1). \end{aligned} \quad (71.6)$$

Бу катталиклар бошланғич ва охириги зарралар жуфти спинларининг ориентация сонини билдиради; бу сонларни i ва f ҳолатларнинг *спин статистик оғирлиги* дейилади.

Масалалар¹.

1. Фотоэффект ($\Lambda\omega$ фотонни ютишдаги атом ионизацияси) кесими σ_f ва радиация рекомбинацияси (эркин электроннинг ион томонидан тутилиши: натижада нейтрал атом ҳосил бўлади ва айни вақтда фотон чиқарилади) кесими $\sigma_{рек}$ ўртасидаги муносабат топилсин.

¹ Бу масалаларда фотонга тегишли баъзи бир тушунчалар ишлатилган: улар ҳақида XI бобда маълумот берилади.

Ечилиши. Мазкур ҳолда нон + электрон ва атом + фотон система ҳолатлари (71. 5) даги l ва f ҳолатларига мос келади. Изланаётган муносабат қуйидаги кўринишга эга:

$$(2J_n + 1) p^2 \bar{\sigma}_{\text{рек}} = 2(2J_{\text{ат}} + 1) \left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2 \bar{\sigma}_{\text{ф}}.$$

Бу ерда J_n ва $J_{\text{ат}}$ — нон ва атом моментлари, $p = mv$ қўзғалмас ионга тушувчи электрон импульси, $\hbar\omega/c$ — фотон импульси; кўпайтувчи „2“ — фотоннинг статистик оғирлиги (қутбланишнинг икки йўналиши).

2. Дейтроннинг фотопарчаланиш кесими ва протоннинг нейтрон томонидан радиацион тутилиш ўртасидаги боғланиш топилсин.

Ечилиши. Нейтрон + протон системасининг спин статистик оғирлиги $2 \cdot 2 = 4$ га тенг, дейтроннинг (асосий ҳолатда $S = 1$) ва фотоннинг статистик оғирлиги эса $3 \cdot 2 = 6$ га тенг. Шунинг учун $4p^2 \bar{\sigma}_{\text{тут}} = 6(\hbar\omega/c)^2 \bar{\sigma}_{\text{ф}}$, бу ерда p — тўқнашувчи протон ва нуклон нисбий ҳаракати импульси. Бу импульс дейтроннинг боғланиш энергияси I ва $\hbar\omega$ гамма-квантни тутишда чиқариладиган энергия билан энергиянинг сақланиш қонуни орқали боғланган: $I + p^2/M = \hbar\omega$ (келтирилган масса $M/2$ га тенг, бу ерда M — нуклон масса-си). Демак,

$$2Mc^2(\hbar\omega - I) \bar{\sigma}_{\text{тут}} = 3c(\hbar\omega)^2 \bar{\sigma}_{\text{ф}}.$$

72- §. Ноэластик процесслар мавжудлигида эластик сочилиш

Ноэластик каналлар мавжудлиги эластик сочилиш хоссаларига ҳам маълум даражада таъсир кўрсатади.

Эластик сочилиш процессини ифодаловчи ψ тўлқин функция тушувчи ясси тўлқин ва ёйилувчи сферик тўлқиндан иборат. Уни, 62- § да қилингани каби, йиғилувчи ва ёйилувчи „парциал“ (яъни l орбитал моментнинг маълум қийматларига жавоб берувчи) тўлқинлар йиғиндиси кўринишида ҳам тасвирлаш мумкин. Лекин у ерда олинган (62.7) формулада йиғилувчи ва ёйилувчи парциал тўлқинлар ҳар бир жуфтининг амплитудалари бир хил эди: (62.7) даги йиғиндининг ҳар бир ҳадида квадрат қавсдаги e^{-ikr} ва e^{ikr} кўпайтувчилар модули бўйича бир хил (1 га тенг) коэффицентга эга. Соф эластик сочилишда бу ҳол масаланинг физикавий маъносига мос келади, лекин ноэластик каналлар мавжудлигида ёйилувчи тўлқинлар амплитудалари йиғилувчи тўлқинлар амплитудаларидан кичик бўлиши керак. Шунинг учун ψ нинг асимптотик ифодаси

$$\psi = \frac{1}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [(-1)^l e^{-ikr} - S_l e^{ikr}] \quad (72.1)$$

кўринишда бўлади. Бунда, (62.7) дан фарқли равишда e^{ikr} нинг коэффициентлари сифатида ($\exp(2i\delta_l)$) ўрнида) модули бирдан кичик бўлган бирор комплекс S_l катталиклар турипти. Мос равишда эластик сочилиш амплитудаси ҳам (62.8) дан шундай ўзгаришга фарқ қилувчи ифода билан олинқланади:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l-1) P_l(\cos \theta). \quad (72.2)$$

Эластик сочилишнинг тўла кесими δ_l учун (62.9) ўрнига

$$\sigma_e = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |1-S_l|^2 \quad (72.3)$$

формулани оламиз.

Ноэластик сочилишнинг тўла кесимини ёки, айтишларича, барча мумкин бўлган каналлар бўйича *реакциялар кесимини* ҳам S_l катталиклар орқали ифодалаш мумкин. Бунинг учун l нинг ҳар бир қийматида ёйилувчи тўлқин интенсивлигининг $|S_l|^2$ га нисбатан йиғилувчи тўлқин интенсивлигига қараганда сусайганлигини назарда тутиш кифоя. Бу сусайиш ноэластик сочилиш ҳисобига содир бўлади. Шунинг учун

$$\sigma_r = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1) (1-|S_l|^2), \quad (72.4)$$

тўла кесим эса,

$$\sigma_t = \sigma_e + \sigma_r = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\pi}{k^2} (2l+1) (2-|S_l-S_l^*|). \quad (72.5)$$

(72.3) ва (72.4) даги йиғинди ҳадларнинг ҳар бири l орбитал моментли зарраларнинг мос равишда эластик ва ноэластик сочилишнинг парциал кесимини кўрсатади. $S_l = 1$ қиймат қандай бўлмасин, бирор (муайян l га эга бўлган) сочилишнинг бутунлай йўқлигини ифодалайди. $S_l = 0$ ҳол эса муайян l га эга бўлган зарраларнинг тўла „ютилишига“ тўғри келади (шундай l лик парциал ёйилувчи тўлқин (72.1) да йўқ); бунда эластик ва ноэластик сочилиш кесимлари бир хил. Шунингдек, шуни таъкидлаймизки, гарчи эластик сочилиш ноэластик сочилиш йўқлигида ҳам $|S_l| = 1$ да мавжуд бўлиши мумкин бўлса-да, бунинг акси бўлиши мумкин

эмас: ноэластик сочилишнинг рўй бериши сўзсиз бир вақтнинг ўзида эластик сочилишни пайдо қилади.

$\theta \rightarrow 0$ бўлганда, эластик сочилиш амплитудаси (72.2)

$$f(0) = \frac{2}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i (1 - S_l)$$

қийматга интилади. Бу ифодани (72.5) га таққослаб, нолинчи бурчакка эластик сочилиш амплитудасининг мавҳум қисми ва барча каналлар бўйича сочилишнинг тўла кесими ўртасидаги қуйидаги муносабатни топамиз:

$$\text{Im } f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_1, \quad (72.6)$$

бу сочилишнинг *оптикавий теоремаси* дейилади.

73- §. Секин зарраларнинг ноэластик сочилиши

65- § да баён этилган кичик энергиялардаги эластик сочилишнинг чегаравий қонуни ноэластик процесслар бўлган ҳол учун осонгина умумлаштирилади.

Илгаригидек, кичик энергияларда асосий ролни s -сочилиш ($l=0$) ўйнайди. Маълумки, 65- § натижасига кўра $S_0 = \exp(2i\delta_0)$ катталики кичик k ларда

$$S_0 \approx 1 + 2i\delta_0 = 1 + 2ik\beta \quad (73.1)$$

га тенг, бу ерда $\beta = c_2/c_1$ — ҳақиқий доимий сон ((65.6) га қ.). c_1, c_2 ларнинг ҳақиқийлиги шундаки, улар ҳақиқий тенглама (Шредингер тенгламаси) нинг ψ тўлқин функциясини топишда коэффициентларни ифодалайди, ҳақиқий чегаравий ҳолларда эса турғун тўлқиннинг асимптотик кўринишини ($r \rightarrow \infty$ да) ифодалайди. Ноэластик процесслар мавжудлигида тўлқин функция хоссаларининг ўзгариши шу маънодаки, бунда унга қўйиладиган шарт чексизликда ҳақиқий турғун тўлқин бўлмай, энди йиғилувчи ва ёйилувчи тўлқинларнинг турли амплитудалари бўлган комплекс — (72.1) асимптотик ифодадан иборат бўлади.

Шу сабабли, β доимий ҳам комплекс бўлади: $\beta = \beta' + i\beta''$, бунда $|S_0|$ модуль энди 1 га тенг эмас; $|S_0| < 1$ шарт эса, β катталикининг мавҳум қисми манфий бўлишини билдиради: $\beta'' < 0$.

(72.3 — 4) йиғиндиларда фақат биринчи ҳадларни

қолдириб ва уларга (73.1) ни қўйиб, эластик ва ноэластик сочилиш кесимларини топамиз:

$$\sigma_e = 4\pi |\beta|^2, \quad (73.2)$$

$$\sigma_r = \frac{4\pi}{k} |\beta''|. \quad (73.3)$$

Шундай қилиб, эластик сочилиш кесими аввалгидек тезликка боғлиқ эмас. Ноэластик процесслар кесими эса зарралар тезлигига тескари пропорционал экан — буни $1/v$ қонуни дейилади (Г. Бете, 1935). Демак, тезлик камайганда ноэластик процесслар роли эластик сочилишга нисбатан ортади.

$1/v$ қонунини яна бошқа, жуда қатъий бўлмаса-да, лекин яққолроқ йўл билан асослаш мумкин. Масалан, реакциянинг тўқнашишда юз бериш эҳтимоллигини тушувчи тўлқиннинг ($r=0$) тўлқин функциясининг модули квадратига пропорционал деб ҳисоблаймиз. Бу тахмин физикавий жиҳатдан, масалан, ядрога тушувчи секин нейтрон фақат ядро ичига „кириб“ реакцияни юзага келтириш мумкинлигини ифодалайди. $|\psi_{\text{туш}}(0)|^2$ ни тушувчи оқим зичлигига бўлиб (ёки $\psi_{\text{туш}}$ ни бирлик оқимга нормалаштирилган ҳолда олиб), реакция кесимини топамиз. Бирлик оқимга нормалаштирилган ясси тўлқин учун $|\psi_{\text{туш}}|^2 \sim 1/v$, яъни изланаётган натижа олинади.

Мазкур мулоҳазада $\psi_{\text{туш}}(0)$ нинг қийматини майдон ғалаёйлантирмаган тўлқин функция (ясси тўлқин) бўйича ҳисоблаш мумкин деб фараз қилинади. Бунинг учун ($1/v$ қонунининг ўринли бўлиши учун) тушувчи заррага таъсир этувчи $U(r)$ майдон масофа ортиши билан етарлича тез камайиши зарур¹. Хусусан, $1/v$ қонун Кулон қонуни бўйича ўзаро таъсирлашаётган зарядланган зарралар ўртасидаги реакциялар учун тўғри эмас.

74-§. Тез зарраларнинг атомлар билан ноэластик тўқнашиши

Тез зарра атом билан тўқнашганда, эластик сочилиш билан бир қаторда, турли ноэластик процесслар — атомнинг уйғониши ёки унинг ионланиши ҳам мумкин. Бу процесслар, худди 70-§ да тез электронларнинг

¹ U катталики $1/r^2$ га қараганда тезроқ камайиши кераклигини кўрсатиш мумкин.

эластик сочилиши учун қилинганидек, Борн яқинлашишида кўриб ўтилиши мумкин. Бунда тез зарра тезлиги атом электронлари тезликларига қараганда катта деб фараз қилинади.

70- § да айтилганидек, электроннинг атом билан тўқнашишида инерция маркази системаси атом тинч ҳолда турган лаборатория координаталар системасига мос тушади деб ҳисоблаш мумкин. Яна p ва p' — электроннинг бошланғич ва охириги импульслари, m — унинг массаси бўлсин. Шунингдек, импульснинг электрондан атомга узатилиш векторини киритамиз: $\hbar q = p' - p$. q катталики маълум даражада тўқнашиш характерини белгилаб, процессда муҳим роль ўйнайди. Биз иккита чегаравий ҳолни кўриб ўтамиз: $\hbar/a$ га нисбатан (бу ерда a — атом ўлчамлари) катта ёки кичик импульс бериб тўқнашиш.

$qa \gg 1$ тенгсизлик атом электронларининг хусусий бошланғич импульсидан катта бўлган импульснинг атомга берилишини билдиради. Физика нуқтаи назаридан равшанки, бу ҳолда атом электронларини эркин электронлар деб, тез электронларнинг атом билан тўқнашишини эса, дастлаб тинч ҳолда турган атом электронларининг бири билан эластик тўқнашиш деб қараш мумкин. Ҳар бир Z та электронда сочилиш кесими Резерфорд формуласи орқали берилади (агар бу ҳолда ҳар иккала — тушувчи ва атом электрони тўқнашиш натижасида катталики жиҳатидан бир-бирига яқин тезлик олса, у ҳолда алмашиш эффектлари муҳим бўлиб қолади ва кесим (69. 7) формуладан аниқланади).

Энди кичик импульс бериладиган ($qa \ll 1$) тескари ҳолни кўриб ўтамиз. Яъни, электрон фақат жуда кичик бурчакка бурилади, унинг атомга берадиган энергияси ўзининг бошланғич энергиясидан кичик. Бу хоссаларга кўра $p \approx p'$ дейиш мумкин: у ҳолда q вектор p нинг (катталиги ўзгармаган ҳолда) бурилиш натижасидир ва кичик θ сочилиш бурчакларида

$$\hbar q \approx p\theta. \quad (74. 1)$$

Бу ифода жуда кичик бурчаклардагина яроқсиздир; $\theta \rightarrow 0$ чегарада q катталики кичик $p - p'$ айирмадан аниқланадиган $q_{\min} = (p - p')/\hbar$ га интилади. Тўқнашишда энергиянинг сақланиш шартига кўра

$$E_n - E_0 = \frac{1}{2m} (p^2 - p'^2) \approx \frac{p}{m} (p - p') = v (p - p'),$$

бу ерда ($E_n - E_0$) — атомнинг асосий сатҳдан n -сатҳга ўтишда уйғониш энергияси, v — тўқнашувчи электрон тезлиги. Шунинг учун импульс беришнинг минимал қиймати

$$\hbar q_{\min} = \frac{E_n - E_0}{v}. \quad (74.2)$$

Бундай соддалаштиришдан сўнг кўрилатган процесснинг эластик сочилишдан ягона фарқи шундан иборатки, атомнинг бошланғич ва охири ҳолатлари ўзаро мос тушмайди. Шу сабабдан кесим учун илгариги (70.1) формулага эга бўламиз, лекин фақат ψ_0 ва ψ_0^* ўрнига интегралда турли ψ_0 ва ψ_n^* тўлқин функцияларни ёзиш керак:

$$d\sigma = \frac{\hbar^2 m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int \int U e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \psi_n^* \psi_0 d\tau dV \right|^2. \quad (74.3)$$

Тушувчи электроннинг атом ядроси билан ҳам, барча Z та атом электронлари билан ҳам ўзаро таъсирлари U энергия таркибига қиради:

$$U = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{a=1}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} \quad (74.4)$$

($\mathbf{r}$ — тушувчи зарра радиус-вектори, $\mathbf{r}_a$ — атом электронларининг радиус-вектори; координаталар боши атом ядроси жойлашган нуқтада).

Ноэластик процесслар учун (74.4) ни (74.3) га қўйилганда, ядро билан ўзаро таъсирни кўрсатувчи Ze^2/r ҳад йўқолади; бу ҳадда $d\tau$ бўйича интеграллаш $\int \psi_n^* \psi_0 d\tau$ кўринишда ажралади, бу интеграл ψ_0 ва ψ_n функцияларнинг ўзаро ортогоналлигига асосан нолга айланади. Қолган ҳадларда эса dV бўйича интеграллаш

$$\int \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} dV = \frac{4\pi}{q^2} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} \quad (74.5)$$

формула ёрдамида бажарилади (буни исботлаш қийин эмас: $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a + \mathbf{r}'$ алмаштиришдан сўнг интеграл

$$e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} \frac{dV'}{r'} \equiv e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a} \left(\frac{1}{r} \right)_q$$

кўринишга келтирилади, $1/r$ нинг Фурье компонентаси эса (68.6) формула орқали берилади). Натижада қуйидагини оламиз:

$$d\sigma_n = \left(\frac{2me^2}{\hbar^2} \right)^2 \left| \left(\sum_a e^{-iqr_a} \right)_{n_0} \right|^2 \frac{d\omega'}{q^4},$$

бу ерда матрица элементи атом тўлқин функциялари бўйича олинади:

$$\left(\sum_a e^{-iqr_a} \right)_{n_0} = \sum_a \int e^{-iqr_a} \psi_n^* \psi_0 d\tau. \quad (74.6)$$

Энди q нинг кичиклигидан фойдаланиш мумкин. (74.6) интегралдаги r_a ўзгарувчилар чизиqli ўлчамини $\sim a$ бўлган ҳажмдаги қийматларни қабул қилади. Шунинг учун $qa \ll 1$ ҳолда шу соҳанинг ҳамма ерида qr_a катталиклари ҳам кичик ва

$$e^{-iqr_a} \approx 1 - iqr_a = 1 - iqx_a \quad (74.7)$$

дейиш мумкин (q вектор йўналиши x ўқи сифатида олинган). У ҳолда

$$\left(\sum_a e^{-iqr_a} \right)_{n_0} = -iq \left(\sum_a x_a \right)_{n_0} = -i \frac{q}{e} (d_x)_{n_0},$$

бу ерда $d_x = \sum_a ex_a$ — атом диполь моментининг декарт компонентаси („1“ лик ҳад эса ψ_0 ва ψ_n функцияларнинг ортогоналлигидан нолга айланади). Шунингдек,

$$d\omega' = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta \approx 2\pi \vartheta d\vartheta = 2\pi \left(\frac{\hbar}{mv} \right)^2 q dq$$

деб, процесс кесими учун

$$d\sigma_n = 8\pi \left(\frac{e}{\hbar v} \right)^2 (d_0)_{n_0}^2 \frac{dq}{q} \quad (74.8)$$

ифодани оламиз. Демак, процесс кесими атом диполь моментининг матрица элементи квадрати билан аниқланади¹.

¹ Албатта, бу ерда матрица элементи бирдан фарқли деб фараз қилинади. Акс ҳолда, (74.7) ёйилма юқориноқ тартибли ҳадларгача давом эттирилиши керак эди.

РЕЛЯТИВИСТИК НАЗАРИЯ

XI боб

ФОТОН

75- §. Релятивистик соҳада ноаниқлик муносабатлари

Биринчи қисмда баён этилган квант назарияси норелятивистик характерда бўлиб, уни ёруғлик тезлигига нисбатан кичик бўлмаган тезликдаги ҳаракат ҳодисаларига қўллаб бўлмайди. Юзаки қараганда норелятивистик квант механикаси апаратини у ёки бу даражада бевосита умумлаштириш йўли билан релятивистик назарияга ўтиш мумкинлиги кутилган бўлар эди. Лекин диққат билан қараб чиқилса, бундай эмаслиги кўринади.

Биз кўрдикки, квант механикаси электронга¹ тегишли турли динамик ўзгарувчиларнинг бир вақтда мавжуд бўлиш имкониятини кескин чегаралайди. Хусусан, координата ва импульснинг бир вақтда мавжуд бўлиш ноаниқлиги Δq ва Δp ўзаро $\Delta p \Delta q \sim \hbar$ муносабат билан боғланган; бу катталиклардан бири қанчалик катта аниқликда ўлчанса, унинг иккинчиси бир вақтда шунчалик кичик аниқликда ўлчаниши мумкин.

Лекин электроннинг динамик ўзгарувчиларининг ҳар бири исталганча катта аниқликда, унинг устига исталганча қисқа вақт оралиғида ўлчаниши мумкинлиги муҳимдир. Бу ҳол бутун норелятивистик квант механикаси учун фундаментал роль ўйнайди. Худди шу руфайли $\psi(q)$ тўлқин функция тўғрисида тушунча қилиш мумкин бўлди; бу функция модулининг квадрати электрон координатасининг у ёки бу қийматини олиш берилган вақт моментида ўтказилган ўлчаш натижасида)

¹ 1- § даги каби, биз қисқа бўлсин учун электрон тўғрисида аниқликда, исталган квант объектини назарда тутамиз.

эҳтимоллигини белгилайди. Координатани исталганча аниқ ва тез ўлчашнинг принципиал мумкинлиги шундай эҳтимоллик тўғрисидаги тушунчани киритиш учун зарурий шарт-шароитдир; акс ҳолда бу тушунча предметсиз бўлиб қолган ва ўзининг физикавий маъносини йўқотган бўлар эди.

Чегаравий тезликнинг (ёруғлик тезлиги c нинг) мавжудлиги турли физикавий катталикларни ўлчаш имкониятларининг янги принципиал чегараланишларига олиб келади. (*Л. Д. Ландау, Р. Пайерлс, 1930*).

37- § да электрон импульсини ўлчаш ноаниқлиги Δp билан ўлчаш процессининг давом этиш вақти Δt ни боғловчи

$$(\nu' - \nu) \Delta p \Delta t \sim \hbar \quad (75. 1)$$

муносабат олинган эди; ν ва ν' — электроннинг ўлчаш-гача бўлган ва ундан кейинги тезлиги. Бу муносабатга кўра, фақат ўлчаш процесси натижасида тезликни етарлича катта ўзгартириш билан импульсни айтирлича қисқа вақт давомида етарлича аниқ ўлчашга (яъни кичик Δt да кичик Δp) эришиш мумкин. Нерелятивистик назарияда бу ҳол қисқа вақт оралиқларида импульсни ўлчаш қайтмаслигининг пайдо бўлиш ҳоли бўлиб ҳисобланар эди, лекин импульсни исталганча аниқ бир марта ўлчашнинг принципиал имкониятига ҳеч бир даҳлсиздир, чунки $\nu' - \nu$ айирма керагича катта қилиб олинishi мумкин эди.

Чегаравий тезликнинг мавжудлиги эса, нарсалар вазиятини тубдан ўзгартиради. $\nu' - \nu$ айирма, тезликларнинг ўзи каби, энди c дан (аниқроғи $2c$ дан) катта бўлиши мумкин эмас. (75. 1) да $\nu' - \nu$ ни c га алмаштириб, берилган Δt вақт давомида импульс ўлчашда принцип жиҳатдан эришиладиган энг яхши аниқликни кўрсатувчи

$$\Delta p \Delta t \sim \frac{\hbar}{c} \quad (75. 2)$$

муносабатини оламиз. Шундай қилиб, релятивистик назарияда импульсни исталганча аниқ ва тез ўлчаш принцип жиҳатдан мумкин эмас. Аниқ ўлчаш ($\Delta p \rightarrow 0$) фақат чексиз катта ўлчаш вақти оралиғида мумкин.

Шунингдек, координатанинг ўлчанувчанлиги ҳам катта ўзгаришга дуч келади: релятивистик назарияда у фақат маълум минимал чегарадан юқори бўлмаган

аниқликда ўлчанади. Шунга кўра электрон локализацияси ҳақидаги тушунча физикавий маъно жаҳатдан маълум даражада чегараланади.

Назариянинг математикавий фармализмида бу вазият координатани аниқ ўлчаш билан эркин зарра энергиясининг мусбатлиги ҳақидаги фикрнинг мос келмаслигида намоён бўлади. Эркин зарра учун релятивистик тўлқин тенглама хусусий функцияларининг тўла системаси вақтга „тўғри“ боғланишли ечимлар билан бир қаторда, шунингдек, „манфий частотали“ ечимларни ҳам ўз ичига олишлигини биз кейинчалик кўрамирмиз. Бу функциялар, умумий ҳолда, кичик соҳада локализацияланган электронга тегишли тўлқин пакетининг ёйилмасига ҳам киради.

„Манфий частотали“ тўлқин функциялар антизарралар—позитронларнинг мавжудлигига алоқадор. Бу функцияларнинг тўлқин пакети ёйилмасида пайдо бўлиши электрон координаталарини ўлчаш процессида электрон-позитрон жуфтларининг умумий ҳолда сўзсиз вужудга келишини ифодалайди. Янги зарраларнинг пайдо бўлиши (процесснинг ўзи томонидан контроль қилинмай) электрон координаталарини ўлчаш маъносини йўқотади.

Электрон тинч ҳолда бўлган системада унинг координаталарини ўлчашдаги минимал хатолик

$$\Delta q \sim \frac{\hbar}{mc}. \quad (75.3)$$

Ўлчамлик маъносида ўринли бўлган бу ягона қийматга $\Delta p \sim mc$ импульс ноаниқлиги тўғри келади. Бу ноаниқлик, ўз навбатида, жуфт ҳосил бўлишининг минимал бўсаға энергиясига мос келади.

Электрон ϵ энергияда ҳаракатланадиган санок системасида (75.3) ўрнига

$$\Delta q \sim \frac{\hbar c}{\epsilon} \quad (75.4)$$

ҳосил бўлади. Хусусан, чегаравий ультрарелятивистик ҳолда энергия ва импульс $\epsilon = cp$ муносабат орқали боғланган ва шунга кўра

$$\Delta q \sim \frac{\hbar}{p}, \quad (75.5)$$

яъни Δq хатолик зарранинг де-Бройль тўлқин узунлигига мос тушади.

Айтилганлардан аниқки, изчил релятивистик квант механикасида зарралар координаталари динамик ўзгарувчилар (улар ўзларининг моҳиятларига кўра аниқ маънога эга бўлишлари керак эди) сифатида қатнашиши мумкин эмас. Зарра импульси ҳам ўзининг дастлабки маъносида қола олмайди. Импульсни аниқ ўлчаш етарлича узоқ вақтни талаб этганлигидан, унинг ўзгаришини кузатиш мумкин эмас.

Мазкур параграф бошида айтилганларни эслаб, хулоса чиқариш мумкинки, норелятивистик квант механикасининг барча аппарати релятивистик соҳага ўтишда ноадекват бўлиб қолади. Дастлабки маънода тушуниладиган $\psi(q)$ тўлқин функциялар кузатилмайдиган маълумот ташийдиган функциялар каби изчил релятивистик назария аппаратида қатнашмайди деб ўйлаш мумкин.

Импульс фақат эркин зарраларга (импульс сақланадиган) қўлланганда, изчил назарияда қатнашиши мумкин ва шунинг учун у исталган аниқликда ўлчаниши мумкин. Шу сабабдан, бўлажак назария зарралар ўзаро таъсир процессларининг вақтга боғлиқ ўтишини кўриб чиқишдан умуман бош тортади деб ўйлаш мумкин. Ягона кузатиладиган катталиклар эркин зарралар (ўзаро таъсирга киришувчи бошланғич зарралар ва процесс натижасида юзага келган охириги зарралар) характеристикалари (импульслари, қутбланиши)дир.

Релятивистик квант назариясида масалани қўйилишининг ўзига хослиги зарра системасининг берилган бошланғич ва охириги ҳолатларини боғлайдиган ўтишлар эҳтимоллигининг амплитудаларини аниқлашдан иборат. Мумкин бўлган барча ҳолатлар орасидаги шу амплитудалар тўплами *сочилиш матрицасини* ёки *S-матрицани*¹ ташкил этади. Бу матрица зарраларнинг ўзаро таъсири процесслари ҳақидаги барча маълумотларни (кузатиш мумкин бўлган физикавий маънога эга маълумотларни) ўзида мужассамлантиради (*В. Гейзенберг, 1938*).

Шунингдек, бундай назарияда зарраларнинг „элементарлиги“ ва „мураккаблиги“ тўғрисидаги тушунча — нимадан ташкил топганлиги ҳақидаги масала дастлабки маъносини йўқотиши керак. Бу масала зарралар ўрта-

¹ Инглизча scattering ёки немисча Streuung сўзидан олинган ва „сочилиш“ деган маънони англатади.

сидаги ўзаро таъсир процессини кўриб ўтмасдан таърифланиши мумкин эмас ва бу усулни рад этиш масалани предметсиз қилиб қўйиш демакдир. Бирор физикавий тўқнашиш ҳодисасида бошланғич ёки охириги зарралар сифатида қатнашувчи барча зарралар назарияда тенг ҳуқуқли бўлиб чиқиши керак. Шу маънода, одатда, „мураккаб“ ёки „элементар“ зарралар деб қараладиган зарралар орасидаги фарқ фақат миқдорий характерга эга ва масса дефектининг у ёки бу „таркибий“ қисмга емирилишга нисбатан нисбий катталигига келтирилади. Масалан, дейтроннинг мураккаблиги (унинг боғланиш энергияси протон ва нейтронга емирилишга нисбатан кичик) ҳақидаги фикр нейтрон протон ва π -мезондан „ташқил топган“ деган фикрдан фақат миқдор жиҳатдан фарқ қилади.

Ҳозирги вақтда тўла, мантиқан тугал релятивистик квант механикаси ҳали йўқ. Биз кўрамизки, мавжуд назария зарралар ҳолатини ифодалаш характерига (у майдон назариясининг баъзи бир хусусиятларини олмоқда) янги физикавий аспект киритади. Лекин у кўп даражада намуна бўйича ва одатдаги квант механикаси тушунчалари ёрдамида яратилади. Назарияни бундай яратиш квант электродинамикаси соҳасида муваффақиятга олиб келди. Бу назарияда тўла мантиқан тугалликнинг йўқлиги назариянинг математик аппаратини тўғридан-тўғри қўлланишда узоқлашувчи ифодаларнинг келиб чиқишида намоён бўлади, лекин бу узоқлашишларни йўқотиш учун деярли бир қийматли усуллар бор. Шундай бўлса-да, бу усуллар кўп даражада ярим эмпирик рецептлар характерини сақлайди ва шундай йўл билан олинадиган натижаларнинг тўғрилигига ишончимизнинг комиллиги назариянинг асосий принципларининг ички келишуви ва мантиқан изчиллигига эмас, балки натижаларнинг тажрибага аниқ мос келишига асосланади.

Зарраларнинг кучли ўзаро таъсири (ядро кучлари) га алоқадор бўлган ҳодисалар назарияси соҳасидаги заъият бутунлай бошқача характерга эга. Бу ерда маъқур усулларга асосланиб назария яратишга уринишлар мунотазам равишда реал физикавий натижалар олиш имкониятини ҳозирча бермади. Кучли ўзаро таъсирларни ўз ичига оладиган тўла назария яратиш, эҳтиёж, принципно янги физикавий тасаввурлар талаб қилади.

76- §. Эркин электромагнит майдонни квантлаш¹

Электромагнит майдонни классик баён этишдан квант нуқтаи назаридан баён этишга ўтишнинг табиий йўли майдонни осцилляторларга классик ёнишдан иборат. Бу ёйилманинг моҳияти нимадан иборатлигини эслатиб ўтамиз (I, 76- § га қ.).

Эркин электромагнит майдонни калибрлашда танланган (унда скаляр потенциал нолга тенг, шунга кўра фақат $\mathbf{A}$ вектор потенциал қолади) потенциаллар орқали ифодалаймиз. Майдонни бирор қатта, лекин фазонинг чекли Ω ҳажмида олиб, уни югурувчи ясси тўлқинларга ёйиш мумкин; у ҳолда потенциал

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} (\mathbf{c}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \mathbf{c}_{\mathbf{k}}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \quad (76.1)$$

кўринишдаги қатор орқали ифодаланади, бу ерда $\mathbf{c}_{\mathbf{k}}$ коэффициентлар

$$\mathbf{c}_{\mathbf{k}} \sim e^{-i\omega t}, \quad \omega = |\mathbf{k}| \quad (76.2)$$

қонун бўйича вақтга боғлиқ, шу билан бирга уларнинг ҳар бири ўзига тегишли тўлқин векторига ортогоналдир: $\mathbf{c}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} = 0$. (76. 1) да йиғинди тўлқин векторнинг (унинг уч компоненти k_x, k_y, k_z) бир-бирига яқин қийматларининг чексиз, лекин дискрет тўплами бўйича олинади. Йиғиндидан узлуксиз тақсимот бўйича интеграллашга ўтиш кейинчалик $\mathbf{k}$ нинг мумкин бўлган қийматлар сони ($\mathbf{k}$ - фазонинг ҳажм элементига тўғри келадиган) учун олинган

$$\Omega \frac{dk_x dk_y dk_z}{(2\pi)^3} \quad (76. 3)$$

¹ Шу ердан бошлаб, XI—XVI бобларда (алоҳида эслатиладиган ҳоллардан ташқари) биз бирликларнинг релятивистик системаси деб аталадиган ва ундан ёруғлик тезлиги c ва квант доимийси $\hbar$ 1 га тенг деб олинadиган системадан фойдаланамиз; шу йўл билан формулалар ёзишда анча соддалаштиришга эришилади. Бу системада энергия, импульс ва масса узунликка тесқари бўлган ўлчамликка мос келувчи бир хил ўлчамликка эга. Бу бирликларда элементар заряд квадрати ўлчамсиз (одатдаги бирликларда) доимий $e^2/\hbar c$ нинг қийматига мос тушади, яъни $1/137$ га тенг.

² (76. 1) даги $\mathbf{c}_{\mathbf{k}}$ коэффициентлар 1 том, (76. 1) даги $\mathbf{a}_{\mathbf{k}}$ коэффициентлардан. $\mathbf{c}_{\mathbf{k}} = \mathbf{a}_{\mathbf{k}} \sqrt{\omega\Omega/2\pi}$ кўпайтувчига фарқ қилади. Квант на зариясига ўтишда бундай белгилашнинг мақсадга мувофиқлиги қуйида кўрилади.

ифода ёрдамида амалга оширилиши мумкин. Майдон c_k векторларнинг берилиши билан кўрилатган ҳажмда тўла аниқланади. Шундай қилиб, бу катталиклар классик „майдон ўзгарувчилари“нинг дискрет тўпламидан иборат. Бироқ квант назариясига ўтиш усулини аниқлаш учун шу ўзгарувчилар устида яна баъзи бир алмаштиришлар ўтказиш лозим. Бунинг натижасида майдон тенгламалари классик механикадаги каноник тенгламалар (Гамильтон тенгламалари) га ўхшаш кўринишни олади. Чунончи майдоннинг каноник ўзгарувчилари ҳақиқий катталиклар

$$Q_k = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (c_k + \dot{c}_k), \quad (76. 4)$$

$$P_k = -\frac{i\omega}{\sqrt{2\omega}} (c_k - \dot{c}_k) = \dot{Q}_k$$

каби аниқланади.

Майдоннинг Гамильтон функцияси (энергияси) бу ўзгарувчилар орқали

$$H = \frac{1}{2} \sum_k (P_k^2 + \omega^2 Q_k^2)$$

ҳолда ифодаланади. P_k ва Q_k векторларнинг ҳар бири k тўлқин векторга перпендикуляр, яъни иккита мустақил компонентга эга. Бу векторлар йўналиши тегишли тўлқиннинг қутбланиш йўналишини белгилайди. P_k , Q_k векторларнинг компонентларини (k га перпендикуляр текисликдаги) $P_{k\sigma}$, $Q_{k\sigma}$ ($\sigma = 1, 2$) деб белгилаб, Гамильтон функциясини

$$H = \sum_{k\sigma} H_{k\sigma}, \quad H_{k\sigma} = \frac{1}{2} (P_{k\sigma}^2 + \omega^2 Q_{k\sigma}^2) \quad (76. 5)$$

кўринишда қайта ёзамиз.

Шундай қилиб, Гамильтон функцияси ҳар бирида фақат бир жуфтдан $P_{k\sigma}$, $Q_{k\sigma}$ ўзгарувчилар бўлган мустақил ҳадлар йиғиндисига ажралади. Ҳар бир шундай ҳад маълум тўлқин вектори ва қутбланишга эга бўлган югурувчи тўлқинга мос тушади, шу билан бирга бир ўлчамли гармоник осциляторнинг Гамильтон функцияси кўринишига эга бўлади.

Майдоннинг классик тавсифининг бундай усули квант назариясига ўтиш йўлини ойдинлаштиради. Энди

биз каноник ўзгарувчилар — умумлашган координаталар $Q_{k\sigma}$ ва умумлашган импульслар $P_{k\sigma}$ ни координата ҳамда импульслар учун одатдаги

$$\hat{P}_{k\sigma} \hat{Q}_{k\sigma} - \hat{Q}_{k\sigma} \hat{P}_{k\sigma} = -i \quad (76.6)$$

коммутация қоидаларига эга бўлган операторлар сифатида қарашимиз керак (турли $k\sigma$ индексли операторлар эса бир-бирларига коммутатив). Улар билан бирга майдон потенциали A ҳам оператор бўлиб қолади.

Майдон гамильтониани (76.5) даги каноник ўзгарувчиларни тегишли операторларга алмаштириш йўли билан ҳосил қилинади:

$$\hat{H} \sum_{k\sigma} \hat{H}_{k\sigma}, \quad \hat{H}_{k\sigma} = \frac{1}{2} (P_{k\sigma}^2 + \omega^2 \hat{Q}_{k\sigma}^2). \quad (76.7)$$

Бу гамильтонианинг хусусий қийматларини аниқлаш махсус ҳисоблашни талаб этмайди, чунки у ечилиши бизга маълум бўлган (25- §) чизиқли осцилляторларнинг энергия сатҳлари ҳақидаги масалага келтирилади. Шунга кўра майдон энергия сатҳлари учун

$$E = \sum_{k\sigma} \left(N_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right) \omega \quad (76.8)$$

деб бирданга ёзишимиз мумкин, бу ерда $N_{k\sigma}$ — бутун сонлар.

Майдон импульси учун классик ифода қуйидагича:

$$P = \sum_{k\sigma} n H_{k\sigma},$$

бу ерда $n = k/k$ (I том, (76.12) га қ.). Тегишли операторлар $H_{k\sigma}$ ни $\hat{H}_{k\sigma}$ га алмаштириш йўли билан олинди, унинг хос қийматлари тенг, демак,

$$P = \sum_{k\sigma} k \left(N_{k\sigma} + \frac{1}{2} \right). \quad (76.9)$$

(76.8 — 9) формулаларни биз кейинги параграфда таҳлил қиламиз, ҳозир эса $Q_{k\sigma}$ катталикларнинг матрица элементларини ёзамиз. Бу ишни осциллятор координатасининг матрица элементлари учун ёзилган (25.4)

формулалар ёрдамида дарҳол бажариш мумкин. Нолдан фарқли матрица элементлари қуйидагича:

$$\langle N_{k\sigma} | Q_{k\sigma} | N_{k\sigma} - 1 \rangle = \langle N_{k\sigma} - 1 | Q_{k\sigma} | N_{k\sigma} \rangle = \sqrt{\frac{N_{k\sigma}}{2\omega}}. \quad (76.10)$$

$P_{k\sigma} = Q_{k\sigma}$ катталикларнинг матрица элементлари эса $Q_{k\sigma}$ нинг матрица элементларидан (умумий (11. 8) қоидага мувофиқ) фақат $\pm i\omega$ кўпайтувчига фарқ қилади:

$$\begin{aligned} \langle N_{k\sigma} | P_{k\sigma} | N_{k\sigma} - 1 \rangle &= - \langle N_{k\sigma} - 1 | P_{k\sigma} | N_{k\sigma} \rangle = \\ &= i\omega \sqrt{\frac{N_{k\sigma}}{2\omega}}. \end{aligned}$$

Лекин $\hat{O}_{k\sigma}$ ва $\hat{P}_{k\sigma}$ операторларнинг ўзи эмас, балки уларнинг чизиқли комбинациялари чуқурроқ маънога эга (бу кейинчалик ойдинлашади)

$$\begin{aligned} c_{k\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega Q_{k\sigma} + iP_{k\sigma}), \\ c_{k\sigma}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega Q_{k\sigma} - iP_{k\sigma}). \end{aligned} \quad (76.11)$$

(76.11) ифода классик ёйилма (76. 1) даги $\hat{c}_{k\sigma}$ коэффициентларнинг таърифига мос тушади. Бу операторларнинг фарқли бўлган биргина матрица элементлари қуйидагича:

$$\langle N_{k\sigma} - 1 | c_{k\sigma} | N_{k\sigma} \rangle = \langle N_{k\sigma} | c_{k\sigma}^+ | N_{k\sigma} - 1 \rangle = \sqrt{N_{k\sigma}}. \quad (76.12)$$

(76.11) ифода ва (76.6) қоида ёрдамида $\hat{c}_{k\sigma}$ ва $\hat{c}_{k\sigma}^+$ операторлар орасидаги коммутация қоидасини топиш осон:

$$c_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ - c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} = 1. \quad (76.13)$$

Шундай қилиб, биз электромагнит майдон операторининг

$$A = \sum_{k\sigma} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} (c_{k\sigma} e^{(s)} e^{ikr} + c_{k\sigma}^+ e^{(s)*} e^{-ikr}) \quad (76.14)$$

ўринишдаги ифодасига келамиз. Бу ерда осциллятор қутбланишини аниқловчи бирлик векторлар учун $e^{(s)}$

белгилаш киритилади; $e^{(a)}$ векторлар k тўлқин векторларга перпендикуляр, шу билан бирга ҳар бир k учун $\sigma = 1, 2$ индекс билан белгиланувчи иккитадан мустақил қутбланиш бор¹.

(76.14) ифода операторларнинг норелятивистик квант назариясидаги одатдаги (мазкур китобнинг биринчи қисмида доимо назарда тутилган) тасаввурига мос келади. Бу тасаввурда (уни *Шредингер тасаввури* дейилади) турли физикавий катталиқ операторлари ўзларича вақтга ошкора боғлиқ эмас. Системанинг вақт иштирокидаги эволюцияси эса тўлқин функциянинг вақтга боғлиқлиги орқали тасвирланади. Бироқ квант механикаси аппарати бир оз бошқача, эквивалент кўринишда ҳам таърифлаш мумкин. Бунда вақтга ошкора боғлиқлик тўлқин функциялардан операторларга кўчирилади; операторларни бундай тасвирлаш *Гейзенберг тасаввури* дейилади. Аппаратни бундай ифодалаш, айниқса, релятивистик квант назариясида майдонларни баён этишда мақсадга мувофиқ бўлади; операторларнинг координаталар ва вақтга тенг ҳуқуқли боғлиқлиги назариянинг релятивистик фазо-вақт инвариантлиги янада ошкора юзага чиқаради (ҳолбуки, Шредингер ифодалашиде фазовий координаталар ва вақт жуда носимметрик ҳолда киради).

$\hat{A}$ оператор учун Гейзенберг тасаввурига ўтиш (76.14) йиғиндининг ҳар бир ҳадида „майдон осцилляторлари турғун ҳолатлари“нинг вақтга боғлиқлигига мос келадиган $e^{-i\omega t}$ кўпайтувчини (ёки унга қўшма бўлганини) қўшиш орқали бажарилади. $\hat{A}$ операторнинг охириги ифодасини

$$A(r, t) = \sum_{\mathbf{p}\sigma} (c_{\mathbf{k}\sigma} A_{\mathbf{k}\sigma} + c_{\mathbf{k}\sigma}^+ A_{\mathbf{k}\sigma}^*) \quad (76.15)$$

кўринишда ёзамиз, бу ерда

$$A_{\mathbf{k}\sigma} = e^{(a)} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega Q}} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \quad (76.16)$$

¹ Маълумки (I том, 70- § га қ.), чизиқли қутбланиш учун e бирлик вектор ҳақиқий ва безосита қутбланиш йўналишини кўрсатади. Доиравий (ва умумий ҳолда — эллиптик) қутбланиш учун e вектор ҳақиқий ва мавҳум қисмлари маълум нисбатда бўлган комплекс сондир; бунда векторнинг бирликлгини $ee^* = 1$ тенглик деътушуниш керак.

Кейинчалик (электромагнит майдонни ҳам, зарралар майдонларини ҳам кўриб чиқаётганда) биз доимо майдон операторларининг Гейзенберг тасаввурини назарда тутамиз.

77- §. Фотонлар

Майдонни квантлаш формулаларини муҳокама қилишга қайтамиз.

Аввало, майдон энергияси учун олинган (76.8) формуладан қуйидаги қийинчилик маълум бўлади. Майдон энергиясининг энг пастки сатҳига барча осцилляторларнинг $N_{k\sigma}$ квант сонлари нолга тенглиги мос келади (бу ҳолатни *электромагнит майдон вакуумининг* ҳолати дейилади). Лекин, ҳатто шу ҳолатда ҳам ҳар бир осциллятор нолдан фарқ қилган „ноль энергия“га эга. Чексиз сондаги барча осцилляторлар бўйича йиғганда эса чексиз натижа оламиз. Шундай қилиб, мавжуд назарияда тўла мантиқан тугалликнинг йўқлигидан келиб чиқадиган „узоқлашувчанлик“лардан бирига дуч келамиз.

Ҳозирча гап фақат майдон энергиясининг хусусий қийматлари ҳақида борар экан, биз нолиничи тебранишлар энергияларини оддий йўқотиш йўли билан, яъни майдон энергияси ва импульси учун (одатдаги бирликларда)

$$E = \sum_{k\sigma} N_{k\sigma} \hbar\omega, \quad P = \sum_{k\sigma} N_{k\sigma} \hbar k \quad (77.1)$$

деб ёзиб, юқоридаги қийинчиликларни бартараф этишимиз мумкин.

Бу формулалар бутун квант электродинамикаси учун асосий бўлган *ёруғлик квантлари ёки фотонлар*¹ ҳақидаги тушунча киритишга имкон беради. Хусусан, эркин электромагнит майдонли ҳар бири $\hbar\omega$ энергияга ва $\hbar k = \hbar\omega/c$ импульсга эга бўлган зарралар тўплами деб қараш мумкин. Импульс ва энергия орасидаги муносабат худди релятивистик механикада ёруғлик тезлигида ҳаракатланадиган, тинч ҳолдаги массаси нолга тенг

¹ Фотонлар ҳақидаги тасаввурни биринчи бўлиб *Альберт Эйнштейн* 1905 йилда фотоэффект назарияси муносабати билан берган эди.

бўлган зарралар учун олинган ифода кабидир. $N_{k\sigma}$ сонлар берилган k импульслар ва $e^{(\sigma)}$ қутбланишларга эга бўлган фотонлар сони маъносини олади. Фотон қутбланишининг хоссаси бошқа зарралардаги спин тушунчасига айнандир (шу маънода фотоннинг ўзига хос хусусиятлари кейинги параграфда кўриб ўтилади).

Ўтган параграфда келтирилган математикавий формализмлар тўплами сифатида олинган эркин электромагнит майдон ҳақидаги тасаввурга тўла мос келишини кўриш осон; бу фотонлар системасига татбиқ этилган иккиламчи квантлаш аппаратининг ўзидир. Бу усулда (47-§) мустақил ўзгарувчанлар ролини ҳолатларни тўлдириш сони (мазкур ҳолда $N_{k\sigma}$ сонлари) ўйнайди, операторлар эса шу сонлар функцияларига таъсир этади. Бунда асосий ролни тўлдириш сонини бирга камайтирувчи ёки орттирувчи зарраларнинг „йўқотиш“ ва „ҳосил қилиш“ операторлари ўйнайди. $\hat{c}_{k\sigma}$, $\hat{c}_{k\sigma}^+$ операторлар худди шундай оператордир: $\hat{c}_{k\sigma}$ оператор $k\sigma$ ҳолатда фотонни йўқ қилади (у фақат $N_{k\sigma} \rightarrow N_{k\sigma} - 1$ ўтишлар учун матрица элементига эга — (76.12) га қаранг); $\hat{c}_{k\sigma}^+$ оператор эса шу ҳолатда фотон ҳосил қилади — унинг матрица элементлари фақат $N_{k\sigma} \rightarrow N_{k\sigma} + 1$ ўтишлар учунгина нолдан фарқли.

(76.15) операторда фотонларни йўқ қилиш операторлари олдидаги коэффициентлар сифатида келган (76.16) ясси тўлқинларни маълум k импульслар ва $e^{(\sigma)}$ қутбланишларга эга бўлган фотонларнинг тўлқин функциялари каби талқин қилиш мумкин: бу функциялар „ Ω ҳажмда 1 фотон“га нормалаштирилган. Бундай талқин қилиш иккиламчи квантлашнинг норелятивистик аппаратида ψ -операторни зарраларнинг тургун ҳолатларининг тўлқин функциялари бўйича ёйилмаси (47.22) га мос келади¹.

Шу муносабат билан яна бир бор шуни таъкидлаемизки, фотоннинг „тўлқин функцияси“ни унинг фазовий локализация эҳтимоллигининг амплитудаси деб (тўлқин

¹ (47.22) дан фарқли равишда, (76.15) ёйилмага бир вақтда йўқотиш операторлари ҳам, зарраларни ҳосил қилиш операторлари ҳам киради. Бу фарқнинг маъноси XIII бобда ойдинлашади.

функциянинг норелятивистик квант механикасидаги асосий маъносига қарама-қарши) қараш ҳеч мумкин эмас. Айниқса фотон учун бу вазият аниқ кўринади. Фотон учун ҳар доим ультрарелятивистик ҳол мавжуд, шунинг учун унинг координатасидаги минимал хатолик (75.5) га кўра, $\Delta q \sim 1/k \sim \lambda$ дан иборат. Демак, фотон координаталари ҳақида гапириш фақат масаланинг хараakterистик ўлчамлари тўлқин узунлигига қараганда катта бўлган ҳоллардагина маънога эга бўлади. Лекин бу ёруғликнинг маълум траектория (нурлар) бўйича тарқалиши ҳақида гапириш мумкин бўлган геометрик оптикага мос келадиган „классик“ чегаравий ҳолнинг ўзидир. Тўлқин узунлигини кичик деб қараш мумкин бўлмаган квант механикасида эса фотон координаталари тушунчаси предметсиз бўлиб қолади.

Фотонларни ҳосил қилиш ва йўқотиш операторларининг коммутация қондаси (76.13) Бозе статистикасига бўйсинувчи зарралар учунгина мос келади ((47.11) га таққосланг). Шундай қилиб, фотонлар — бозонлардир. Шу статистика хоссаларига кўра бир вақтда ишгалган ҳолатда турган фотонлар сони ихтиёрий бўлиш мумкин.

Майдоннинг фотонлар тўплами сифатида тавсифлаш эркин электромагнит майдоннинг квант назариясидаги физикавий маъносига тамоман адекват бўлган бирдан-бир баёндр. У майдон потенциаллари (улар билан бирга кучланганликлари) ёрдамидаги классик баён ўринини олади. Майдон потенциаллари фотон тасвирининг математик аппаратида иккиламчи квантлаш оператори сифатида қатнашади.

Системанинг квант хоссалари система турғун ҳолатларини аниқловчи квант сонлари катта бўлган ҳолларда классик хоссаларга яқинлашади (27-§). Бу эркин электромагнит майдон (берилган ҳажмда) учун осцилляторларнинг квант сонлари, яъни фотон сонлари катта бўлиши керак деган маънони англатади. Шу маънода фотонларнинг Бозе статистикасига бўйсинишлари чуқур аҳамиятга эга. Назариянинг математикавий формализмида (шаклида) Бозе статистикасининг классик майдон

хоссаларига алоқаси $\hat{c}_{k\sigma}$, $\hat{c}_{k\sigma}^+$ операторларнинг коммутация қоидаларида акс этади. $N_{k\sigma}$ сони катта (шу операторларнинг матрица элементлари катта) бўлганда ўрин алмаштириш ифодаси (76.13) нинг ўнг тарафидаги

бирни ҳисобга олмаслик мумкин, натижада $\hat{c}_{k\sigma} \hat{c}_{k\sigma}^+ = \hat{c}_{k\sigma}^+ \hat{c}_{k\sigma}$ бўлади, яъни бу операторлар майдоннинг классик потенциални кўрсатувчи ўзаро коммутатив классик $c_{k\sigma} c_{k\sigma}^*$ катталикларга ўтади.

78- §. Фотоннинг моменти ва жуфтлиги

Ҳар қандай зарра каби фотон ҳам маълум импульс моментиға эга бўлиши мумкин. Лекин фотоннинг импульс моменти ўз хоссалари жиҳатдан одатдаги зарраларникидан бир оз фарқ қилади. Бу фарқнинг пайдо бўлишини аниқлаш учун квант механикасининг математикавий формализмида (шаклида) зарранинг тўлқин функция хоссалари унинг моменти билан қандай боғланганлигини эслатиб ўтамиз.

Зарранинг импульс моменти $\mathbf{j}$ унинг l орбитал моменти ва хусусий моменти — s спинидан ташкил топади. s спинли зарранинг тўлқин функцияси $2s$ рангли симметрик спинордир, яъни $(2s + 1)$ та компонент тўпламидан иборат. Бу компонентлар координаталар системасининг бурилишларида бири иккинчиси орқали маълум қонун бўйича алмашинади (41- §). Орбитал момент тўлқин функцияларнинг координатали боғланишиға алоқадор: l орбитал моментли ҳолатларға l - тартибли шар функциялари орқали (чизиқли) ифодаланган тўлқин функциялар мос келади.

Фотоннинг тўлқин функцияси ролини $\mathbf{A}$ вектор ўтайди. Вектор 2- ранг спинорға эквивалент ва шу маънода фотон спинини 1 га тенг дейиш мумкин. Бу бутун сон бўлганлигидан, ўз навбатида, фотоннинг тўла моменти ҳам фақат бутун сонли $j = 1, 2, 3, \dots$ қийматларни қабул қилиши мумкин. Фотон учун $j = 0$ қиймат мавжуд эмас: нолға тенг моментли ҳолат тўлқин функцияси сферик-симметрик бўлиши керак, бу эса кўндаланг тўлқин учун олдиндан маълумки, мумкин эмас.

Фотоннинг тўла моменти ҳақидаги тушунча тамоман аниқ маъноға эга бўлгани ҳолда, фотон спини тўғрисидаги фикр маъноси фақат шартлидир: фотон учун спин ва орбитал моментни унинг тўла моментининг таркибий қисми сифатида кетма-кет ҳолда фарқ қилиш имконияти йўқ. Гап шундаки, бундай имконият тўлқин

функцияларнинг — „спинга оид“ ва „координатага оид“ хоссаларининг мустақиллигини назарда тутди: спинор компоненти (мазкур ҳолда — вектор)нинг координатага боғлиқлиги ҳеч қандай қўшимча шартлар билан чегараланмаслиги керак. Шу билан бирга фотоннинг $\mathbf{A}$ вектор тўлқин функцияси қўшимча кўндаланглик шартига бўйсунган, бунинг натижасида координатага боғлиқлиги энди унинг барча компонентларига бир вақтда ихтиёрий равишда берилиши мумкин эмас. Шунингдек, спини тинч ҳолатдаги зарра моменти сифатида аниқлашни фотонга тадбиқ қилиб бўлмайди, чунки ёруғлик тезлигида ҳаракатланаётган фотон учун тинч ҳолат системаси умуман мавжуд эмас.

Ҳар қандай зарра учун бўлганидек, фотон ҳолати ҳам, шунингдек, унинг координата системаси инверсиясида тўлқин функциясининг ўзгаришига боғлиқ бўлган жуфтлиги билан характерланиши мумкин: агар $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ вектор тўлқин функцияси инверсияда ўзгармаса жуфт ҳолат дейилади ва агар $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ишорасини ўзгартирса, тоқ ҳолат дейилади¹. Маълум момент ва жуфтликларга эга бўлган фотоннинг турли ҳолатлари учун маълум терминология қабул этилган:

j моментли ва $(-1)^j$ жуфтликли ҳолатдаги фотон *электрик 2^j -поль* фотон (ёки Ej -фотон) дейилади, $(-1)^{j+1}$ жуфтликка эга бўлганда эса *магнит 2^j -поль* фотон (ёки Mj -фотон) дейилади². Зарранинг моменти ва жуфтлигини кўпинча умумий символ билан белгиланади; ундаги рақам j нинг қийматини кўрсатади, юқориги $+$ ёки — индекс эса $P = +1$ ёки -1 жуфтликка тўғри келади. Шундай қилиб, электр типидagi

¹ Инверсия операциясининг $\varphi(\mathbf{r})$ скаляр функцияга таъсирида функция аргументининг ишораси ўзгаради: $\hat{P}\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(-\mathbf{r})$. Вектор функция $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ га таъсирида эса координата ўқлари йўналишининг тескарига ўзгариши барча вектор (қутбий) компонентларининг ишорасини ўзгартиришини ҳам назарда тутиш лозим. Бошқача қилиб айтганда, инверсия операциясининг таъсири $\hat{P}\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\mathbf{A}(-\mathbf{r})$ кўринишда ёзилади. Шу сабабдан масалан, жуфт ҳолат учун $\mathbf{A}(-\mathbf{r}) = -\mathbf{A}(\mathbf{r})$ бўлиши керак, шундай бўлганда, $\hat{P}\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r})$ юлинади.

² Бу номлар нурланиш назариясининг терминологиясига мос келади: электр ва магнит типидagi фотонларни чиқариш заряд системасининг тегишли электр ва магнит мультиполь моментлари орқали аниқланади (98- § га қараңг).

фотонларга 1^- , 2^+ , 3^- , 4^+ ва ҳ. к. ҳолатлар мос келади, магнит типидagi фотонларга эса 1^+ , 2^- , 3^+ , 4^- ва ҳ. к. ҳолатлар тўғри келади. Хусусан, электрик диполь фотонга 1^- ҳолат, магнит диполь фотонга эса 1^+ ҳолат тўғри келади.

Маълум j қийматли фотон ҳолати бирор аниқ ҳаракат йўналишига эга бўлмаган сферик тўлқиндан иборат. Аксинча, агар фотон аниқ ҳаракат йўналишига (яъни аниқ k импульс векторига) эга бўлса, у ҳолда у ҳеч қандай аниқ j қийматига эга бўлмайди. Лекин маълум k йўналишдаги фотон, шунингдек, моментнинг ана шу йўналишга проекциясининг аниқ қийматига эга бўлиши мумкин; моментнинг импульс йўналишига проекцияси зарранинг *спираллиги* (уни λ ҳарфи билан белгилаймиз)¹ дейилади.

Моментнинг умуман ҳар қандай проекциясининг сақланиши каби спиралликнинг сақланиши ҳам фазонинг эркин заррага нисбатан маълум симметриклик хоссалари билан алоқадордир. k импульс фазода танланган йўналишни ажратади. Бу йўналишнинг бўлиши координаталар системасининг ихтиёрий бурилишига нисбатан тўла симметрикликни бузади (бунинг натижасида момент вектори сақланмай қолади). Лекин танланган ўқ — k йўналиши атрофида айланишга нисбатан аксиал симметрия қолади. Спиралликнинг сақланиши шу симметриклик ифодаси бўлади.

Орбитал момент операторининг таърифига кўра $\hat{l} = [\hat{r}\hat{p}]$ бўлади. Шу моментнинг импульс йўналишига проекциясининг оператори (ва демак, шу проекциянинг хусусий қийматлари ҳам) айнан нолга тенг. Шунинг учун спираллик зарра спинининг унинг ҳаракат йўналишига проекциясига мос тушади. Демак, спираллик спини l бўлган одатдаги зарра учун $0, \pm 1$ қийматларга эга бўлиши мумкин эди. Фотон учун эса қуйида кўрсатиладиганидек, фақат $\lambda = \pm 1$ қиймат бўлиши мумкин; бу ерда фотон спини тушунчасининг шартлилиги яна намоён бўлади.

Маълум спиралликка эга бўлган фотоннинг ҳолат-

¹ Уни m моментнинг фазода аниқ олинган йўналиш (z ўқи) га проекцияси билан чалкаштирмам.

лари унинг доиравий қутбланиш ҳолатлари билан мос тушишини кўриш осон. Айтайлик, ξ , η , ζ — фотон импульси йўналиши бўйлаб ζ ўққа эга бўлган (z ўқидан фарқли равишда унинг ўрни зарра ҳаракатига боғланмаган) координаталар системаси бўлсин. Масалан, $\lambda = +1$ спиралликка эга бўлган фотон ҳолатини кўриб ўтамиз. Вектор тўлқин функция компонентлари (1 спинли зарралар) ва 2-ранг спинор компонентлари ўртасида мувофиқлик ўрнатадиган (41.9) формулаларга кўра бундай ҳолатга A тўлқин функция (унинг компонентлари $A_\eta = iA_\xi$, $A_\zeta = 0$ муносабатларда боғланган функция) тўғри келади; ҳақиқатан, бу ҳолда спинорнинг учта компонентидан фақат ψ^{11} ($+1$ га тенг бўлган ζ спин проекциясига мос келувчи компонент) нолдан фарқли бўлади. Худди шунингдек, $A_\eta = -iA_\xi$, $A_\zeta = 0$ компонентли тўлқин функция $\lambda = -1$ қийматга мос келади. (76.16) ифодага кўпайтувчи бўлиб кирадиган e қутбланиш вектори A вектор билан биргаликда юқоридаги муносабатларни қаноатлантиради. Лекин $e_\eta = \pm ie_\zeta$ қийматлар доиравий қутбланишга тўғри келади (I, 70-§ га қ.)

$\lambda = 0$ қийматнинг мумкин эмаслиги шундан кўринадики, ζ -спин проекциясининг бундай қийматига ψ^{12} спинор компонентга эквивалент ((41.9) га кўра) $A_\xi = A_\eta = 0$, $A_\zeta = 0$ ташкил этувчиси бўлган тўлқин функция тўғри келиши керак эди; лекин A векторнинг k йўналишга нисбатан кўндаланг бўлиш шартига кўра бундай функция йўқ.

ХИ БОБ

ДИРАК ТЕНГЛАМАСИ

79- §. Клейн — Фок тенгламаси

Зарраларнинг релятивистик квант назарияси баёнини зарраларни тасвирлайдиган тўлқин функцияларнинг хоссаларини ўрганиш ва шу функциялар қаноатлантирадиган тўлқин тенгламани тузишдан бошлаймиз. Норелятивистик назарияда турлича спинга эга бўлган зарраларнинг тўлқин функцияси турли хил даражали спинорлар бўлишини, эркин зарраларнинг тўлқин функциялари эса фақат битта тенгламани — эркин ҳаракат учун Шредингер тенгламасини қаноатлантиришини эслатиб ўтамиз. Релятивистик назарияда эса эркин ҳаракат тўлқин функциясининг кўриниши спини билан муҳим боғланишга эга эканлигини кўрамыз.

Табиийки, энг содда ҳол спини 0 бўлган зарралардир. Норелятивистик назарияда улар скаляр тўлқин функциялар орқали тасвирланади. Релятивистик назарияда уч ўлчовли скаляр ўрнини тўрт ўлчовли скаляр эгаллайди, бу скаляр фазовий координаталарни алмаштиришга нисбатангина эмас, балки Лоренц алмаштиришларига нисбатан ҳам инвариантдир.

Релятивистик механикада зарранинг энергияси ϵ ва унинг импульси $\mathbf{p}$ 4- вектор $p^\mu = (\epsilon, \mathbf{p})$ ни ташкил этади.¹ Бу катталикларга тўғри келадиган операторлар ҳам 4- вектор $\hat{p}^\mu$ ни ташкил этадилар. Уч ўлчовли $\mathbf{p}$ импульсга $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ оператор тўғри келади, тўлқин функция-

¹ Биз XII—XVI бобларда алоҳида зарранинг релятивистик энергиясини (тинч ҳолат энергияси билан бирга) ϵ ҳарфи билан белгилаймиз.

лардаги энергияларга (Гамильтон функциялари) эса вақт бўйича дифференциаллаш оператори солиштирилади ((8.1) билан солиштиринг.)

Шундай қилиб, 4- импульс оператори

$$\hat{p}^\mu = \left(i \frac{\partial}{\partial t}, -i\nabla \right), \quad \hat{p}_\mu = \left(i \frac{\partial}{\partial t}, i\nabla \right) \quad (79.1)$$

ёки (тўрт ўлчовли белгилашларда)

$$\hat{\psi}_\mu = i \frac{\partial}{\partial x^\mu}. \quad (79.2)$$

ψ тўлқин функцияга $\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu$ скаляр операторлар — 4- вектор $\hat{p}^\mu$ нинг квадрати билан таъсир қилайлик. Аммо, 4-импульснинг квадрати доимий катталиқка—зарра массасининг квадратага келтирилади. Шунинг учун кўрсатилган операторнинг ихтиёрий ψ тўлқин функцияга таъсирининг натижаси шу функцияни m^2 га кўпайтиришга келтирилади.

$$\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu \psi = m^2 \psi \quad (79.3)$$

ёки (ёйиб ёзганда)

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Delta \right) \psi = m^2 \psi \quad (79.4)$$

(О. Клейн, В. А. Фок, 1926).

Шуни таъкидлаб ўтаемизки, спини 0 бўлган релятивистик зарра учун норелятивистик назарияда аниқланган маънодаги гамильтоннан мавжуд эмас. Ҳақиқатан ҳам, (79.4) тенглама вақт бўйича иккинчи

тартибли, гамильтоннан $\hat{H}$ эса маъносига кўра $i\partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$ га мувофиқ, тўлқин функциянинг биринчи ҳосиласини англатиши керак эди.

Яна қайд қиламизки, спини 0 бўлган зарра учун унинг фазодаги турлича локализацияларининг эҳтимоллиги ҳатто формал тасаввурлар бўйича $|\psi|^2$ — модул квадрати билан аниқланмайди (75- § да баён этилган умумий физикавий тасаввурлар ҳақида гапирилганда ҳам; чунки бу тасаввурлар тўлқин функцияни зарранинг фазовий локализацияси ҳақида маълумот беради деб қарашга умуман тўсқинлик қилади). Ҳамма гап шундаки, релятивистик назарияда зарралар тақсимланишининг

зичлиги ва улар оқимининг зичлиги 4- векторни ташкил қилади (54- § даги ток зичлигининг 4- вектори ҳақида айтилганлар билан солиштиринг). Зарраларнинг зичлиги скаляр бўлмасдан, шу 4- векторнинг вақт компонентаси бўлади. Шунинг учун у ҳар қандай ҳолда ҳам скаляр функция модулининг квадрати каби скаляр катталиқ билан аниқлана олмайди.

Бундан кейин (92- §) кўрсатиладиган сабабларга кўра зарраларни (79.4) скаляр тўлқин функция ёрдамида баён этиш тор маънода бўлади. Шунинг учун биз бу ерда шу тенглама учун зарралар оқимининг зичлиги ва энергияси зичлигининг 4- вектори ролини ўйнайдиган катталиқларнинг математик тузилишини аниқлашга тўхталиб ўтирмаймиз.

80- §. Тўрт ўлчовли спинорлар

Норелятивистик квант назариясида s спинли зарралар $2s$ рангли симметрик спинор — координата системасининг бурилишида маълум қонун бўйича бир-бири орқали алмашинадиган $2s + 1$ та катталиқ тўплами билан тасвирланади. Бу қонун фазонинг изотроплиги билан боғлиқ бўлган зарралар симметриясининг хоссаларини ифодалайди.

Релятивистик назарияда эса фазовий координата системасининг бурилишлари тўрт ўлчовли айланишлар — тўрт ўлчовли фазовий-вақт координата системаси бурилишининг хусусий ҳоли сифатида кўринади. Шундай барча мумкин бўлган алмаштиришлар тўпламини *Лоренц группаси* деб аталади. Уч ўлчовли айланишлар (вақт ўқи йўналишини ўзгартирмайдиган бурилишлар) билан бирга бунга оддий Лоренц алмаштиришлари — xt , yt ёки zt текисликларидан биридаги бурилишлар ҳам киради (I, 36- § га қаранг). Умумий ҳолда эса тўрт ўлчовли бурилиш Лоренц алмаштириши билан фазовий координаталар системасининг бурилишидан иборат.

Спинга эга бўлган зарраларни тасвирлаш учун релятивистик квант назариясида тўрт ўлчовли спинорлар (4- спинорлар) назариясини тузиш зарурати туғилади. Бу назария оддий (уч ўлчовли) спинорлар фазовий айланишлар группасига нисбатан қандай рол ўйнаса

Лоренц группаси алмаштиришларига нисбатан худди шундай рол ўйнайди¹.

Биринчи ранг 4- спинор

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} \quad (80.1)$$

икки компонентли катталик бўлиб, у Лоренц группасининг ҳар қандай алмаштиришларида (41.3) формулага ўхшаш равишда алмаштирилади:

$$\xi' = \alpha \xi^1 + \beta \xi^2, \quad \xi'' = \gamma \xi^1 + \delta \xi^2. \quad (80.2)$$

Энди $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ комплекс коэффициентлар 4- координаталар системаси бурилиш бурчакларининг маълум функциялари бўлади (умумий ҳолда 6 та шундай бурчак мавжуд — xu, xz, uz, tx, ty, tz координата текисликлари бўйича бурилишлар сони). Спини 1/2 бўлган зарралар тўлқин функциясининг компонентлари сифатида ξ^1 ва ξ^2 спиннинг z -проекцияси хусусий қийматларига (мас равишда $+1/2$ ва $-1/2$ га тенг) тўғри келади.

Уч ўлчовли спинорлар ҳоли учун бўладиган сабабларга мувофиқ, (80.2) алмаштириш коэффициентлари 3ир-бири билан (41.5) муносабат орқали боғланган, ularни бу ерда яна келтирамиз:

$$\alpha\delta - \gamma\beta = 1. \quad (80.3)$$

Бу тенглик орқали иккита ҳар қандай ξ ва Ξ спинор компонентларининг бичизиқ антисимметрик комбинацияси:

$$[\xi^1 \Xi^2 - \xi^2 \Xi^1] \quad (80.4)$$

нинг инвариантлиги таъминланади. Уч ўлчовли спинорлардаги каби, (80.4) ифода иккита спинорни скаляр ўлчайтириш қондасини ифодалайди.

Комплекс қўшма спинорларни қараб чиқилгандагина уч ўлчовли ҳолдан фарқи сезилади. Уч ўлчовли спинорлар назариясида (41- §) комплекс қўшма спинорни алмаштириш қонуни зарранинг фазовий локализацияси ҳатимоллиги зичлигини аниқлайдиган

$$\xi^1 \xi^{1*} + \xi^2 \xi^{2*} \quad (80.5)$$

¹ Бошқа сўз билан айтганда, худди уч ўлчовли спинорлар айланиш группаларининг келтирилмайдиган тасаввурини амалга оширишгани каби, 4- спинорлар Лоренц группасининг келтирилмайдиган тасаввурини амалга оширади.

йиғинди скаляр бўлиш шартидан топилади; бу ердан $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ коэффициентлари орасида (41.6) муносабат пайдо бўлади. Лекин релятивистик назарияда зарралар зичлиги скаляр бўлмайди; у 4-векторнинг вақт компонентаси бўлади (бу ўтган параграфда қайд қилиб ўтилган эди). Шу сабабли юқорида кўрсатилган шарт ўз-ўзидан тушиб қолади ва (80.2) алмаштириш коэффициентларига ҳеч қандай ((80.3) дан бошқа) қўшимча шартлар қўйилмайди.

Фақат биттагина (80.3) шарт билан боғланган тўртта комплекс катталик Лоренц группаларини алмаштириш параметрларининг сонига мувофиқ $8 - 2 = 6$ та ҳақиқий параметрларга эквивалент бўлади. Бу эса релятивистик назарияда икки хил спинор мавжудлигини билдиради. Бу икки хил спинорни бир-биридан ажратиш учун махсус белгилар қабул қилинган; (80.2) билан комплекс қўшма формулалар бўйича алмаштириладиган спинорнинг компоненталари индекслари устига нуқта қўйилган рақамлар билан берилади (*пунктир индекслар*):

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix}. \quad (80.6)$$

Бунда шу спинорни алмаштириш қонунлари билан ξ^* спинор орасидаги муносабат қуйидаги қоида ёрдамида топилади:

$$\eta^1 \sim \xi^{2*}, \quad \eta^2 \sim -\xi^{1*} \quad (80.7)$$

(бу ерда ва шу параграф давомида $\sim$ белги „... сифатида алмаштирилади“ деган маънони билдиради).

Айтиб ўтилганидек, Лоренц группасига ҳақиқий фазовий айланишлар ҳам — уч ўлчовли координаталай системасининг бурилишлари ҳам киради. Бу алмаштиришларга нисбатан 4-спинорлар худди уч ўлчовли спинорлар каби бўлади. Бунда табиийки, пунктир в пунктирсиз 4-спинорлар орасидаги фарқ йўқолади уларнинг иккаласи ҳам бир хил алмашинади. Пункти 4-спинорларнинг фақат (80.7) қоида билан аниқланишининг маъноси ҳам шундан иборатдир. Ҳақиқатан комплекс-қўшма уч ўлчовли спинор (41-§ дан биламиз $\xi^{1*} \sim \xi^2, \xi^{2*} \sim -\xi^1$ қондасига мувофиқ алмаштирилади

(80.7) билан солиштиришдан кўринишича, фазовий айланишларга нисбатан

$$\eta^i \sim \xi^1, \quad \eta^j \sim \xi^2 \quad (80.8)$$

ҳам бўлади.

Юқори ранг 4- спинорлар бир нечта 1- ранг спинорлар компоненталарининг кўпайтмаси каби алмашинадиган катталиклар тўплами сифатида аниқланади. Бунда юқори ранг спинорлар индекси орасида пунктир индекслар ҳам, пунктирсиз индекслар ҳам бўлиши мумкин. Шундай қилиб, 2- ранг спинорларнинг икки тури мавжуд¹:

$$\xi^{a\beta} \sim \xi^a \Xi^\beta, \quad \zeta^{a\beta} \sim \xi^a \eta^\beta, \quad \eta^{a\beta} \sim \eta^a \mathbf{H}^\beta \quad (80.9)$$

2- ранг спинор $2 \cdot 2 = 4$ та компонентага эга. Агар унинг иккала индекси ҳам бир хил бўлса (иккаласи ҳам пунктир ёки иккаласи ҳам пунктирсиз), унда спинорни симметрик ва антисимметрик қисмларга ажратиш мумкин: $1/2(\xi^{a\beta} + \xi^{\beta a})$ ва $1/2(\xi^{a\beta} - \xi^{\beta a})$. Кейингиси фақат биттагина скаляр $1/2(\xi^{12} - \xi^{21})$ компонентага эга (скаляр (80.4) билан солиштиринг). Симметрик қисм эса Лоренц группасининг алмаштиришларида бир-бири орқали алмашинадиган учта эркин катталиклардан иборат: $(\xi^{11}, \xi^{22}, 1/2(\xi^{12} + \xi^{21}))$.

„Аралаш“ характерли $\zeta^{a\beta}$ спинор учун эса индексларнинг жойлашиши умуман шартли, чунки бу индексларга турлича алмаштириш қонунлари мос келади. Бундай спинорнинг тўртта компонентининг ҳаммаси бир-бири орқали алмашинади ва уларнинг чизиқли комбинацияларини қандай танлашдан қатъи назар, бу сонни камайтириб бўлмайди. Тўртта компоненти ҳам 4- векторга эга ва бу компоненталар ҳам Лоренц группасининг алмаштиришларида бир-бири орқали алмашинадилар. Шунинг учун аралаш 2- ранг 4- спинор компоненталари билан 4- вектор компоненталари орасида маълум бир мувофиқлик қуйидаги формулалар ёрдамида белгиланади:

$$\left\{ \begin{array}{l} \zeta^{12} = a^3 + a^0, \quad \zeta^{21} = a^3 - a^0, \\ \zeta^{11} = -a^1 + ia^2, \quad \zeta^{22} = a^1 + ia^2, \end{array} \right. \quad (80.10)$$

¹) 80—82- § ларда грек алфавитининг биринчи ҳарфлари ($\alpha, \beta, \dots$) билан 1, 2 қийматларининг оладиган спинор индексларини белгилаймиз.

бу ерда a^μ (a^0 , $\mathbf{a}$) — бирор 4-вектор. Бу формулаларнинг тўғрилиги қуйидаги тасаввурлардан кўринади.

Юқорида қайд қилиб ўтилгандек, фазовий айланишларга нисбатан пунктир ва пунктирсиз спинорлар орасидаги фарқ йўқолади ва уларнинг иккаласи ҳам худди уч ўлчовли спинорлар сифатида бўлади. Шунинг учун

$$\zeta^{11} = -a^1 + ia^2, \quad \zeta^{22} = a^1 + ia^2, \quad \frac{1}{2} (\zeta^{12} + \zeta^{21}) + a^3$$

учта катталиклар тўплами 2- ранг уч ўлчовли симметрик спинор каби бўлиши лозим ва келтирилган формулалар 41- § да белгиланган шундай спинор компоненталари билан уч ўлчовли вектор компоненталари орасидаги мувофиқликка мос келиши керак; (41. 9) формулалар билан солиштириш бу шартнинг ҳақиқатда ҳам бажарилишини кўрсатади.

Антисимметрик комбинация $\zeta^{12} - \zeta^{21}$ эса $\xi^1 \eta^2 - \xi^2 \eta^1$ айирма сифатида алмаштирилади (Лоренц группасининг ҳар қандай алмаштиришларида); (80.7) га кўра бу қуйидаги мувофиқликка эквивалентдир:

$$\zeta^{12} - \zeta^{21} \sim \xi^1 \xi^{1*} + \xi^2 \xi^{2*}.$$

Аммо бундай йиғинди, юқорида (80.5) га кўра кўрсатилганидек, 4- векторнинг вақт компонентаси бўлиши керак. Бу шарт ҳам бажарилади: (80.10) га мувофиқ

$$\frac{1}{2} (\zeta^{12} - \zeta^{21}) = a^0.$$

81- §. Спинорлар инверсияси

Уч ўлчовли спинорлар назариясини баён қилганда (41- §), биз уларнинг фазовий инверсия операциясига нисбатан ўзини тутишини кўриб чиқмаган эдик, чунки бу норелятивистик назария бирор янги физикавий натижага олиб келмасди. Аммо энди биз 4- спинорларнинг инверсия хоссаларини келажакда яхшироқ тушуниш учун бу масалага тўхталиб ўтамиз.

Инверсия фазовий x, y, z координата ўқлари йўналишларининг тескарисига ўзгартиришидир. Икки марта инверсияни амалга ошириб, биз яна бошланғич координата системасига келамиз. Спинорлар ҳолида эса бошланғич ҳолга қайтишни икки хил маънода: системанинг 0° ёки 360° га бурилиши маъносида тушуниш

мумкин. Спинорлар учун бу икки ҳол эквивалент эмас, чунки $\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix}$ спинор 360° га бурилишда ўз ишорасини ўзгартиради. Шунинг учун спинорлар инверсиясининг иккита альтернатив концепцияси мавжуд бўлиши мумкин: икки каррали инверсия спинорни ўзгармас ҳолда қолдириши ёки ишорасини ўзгартиши лозим. Бу икки таърифдан бирини танлаш қуйида баён этиладиган физикавий натижаларга таъсир қилмайди; аниқлик учун улардан биринчисини оламиз. Шундай қилиб, фараз қилайлик,

$$\hat{P}^2 = +1. \quad (81.1)$$

Координаталар инверсияси қутбий векторлар ишорасини ўзгартиради, лекин аксиал векторларни ўзгартирмас қолдиради. Кейингисига момент векторлари, жумладан, спин вектори киради. Шунинг учун спиннинг z -проекциясининг қиймати ҳам ўзгармайди. Бундан уч ўлчовли спинорнинг ψ^1 , ψ^2 компонентларидан ҳар бири (s_z нинг аниқ қийматига тўғри келадиган) фақат ўзи орқали алмашилиши мумкин деган хулоса келиб чиқади. (81.1) белгилашга мувофиқ

$$\hat{P}\psi^a = \pm \psi^a \quad (a = 1, 2). \quad (81.2)$$

Лекин қайд қилиб ўтамызки, спинорга у ёки бу маълум жуфтликни ($+1$ ёки -1) ёзиб қўйиш абсолют маънога эга эмас, чунки спинорлар ўз ишорасини 2π га бурилишда ўзгартиради. Бу бурилишни ҳамма вақт инверсия билан бир вақтда амалга ошириш мумкин. Аммо иккита ψ ва φ спинорларнинг „нисбий жуфтлиги“ абсолют характерга эга ва бу — „нисбий жуфтлик“ улардан тузилган скаляр $\psi^1 \varphi^2 - \psi^2 \varphi^1$ жуфтлиги каби аниқланади; 2π га бурилишда бир вақтда ҳамма спинорлар ўз ишорасини ўзгартирганлиги учун у билан боғлиқ бўлган ноаниқлик кўрсатилган скалярнинг жуфтлигига (-1 ёки $+1$) таъсир қилмайди.

Энди тўрт ўлчовли спинорларга мурожаат қиламиз. ψ нинг бир хил қийматларига тегишли ҳамма катталиклар бир-бири орқали алмашилиши тўғрисидаги талаб бу ерда ҳам ўз кучини сақлайди. Лекин бу оддий (81.2) алмаштириш бўла олмайди (ва пунктир спинорлар учун ҳам шундай). Бу қуйидаги тасаввурлардан кўринади. (81.2) дан хулоса сифатида юқори ранг 4-спинорлар компоненталари ҳам фақат ўз-ўзлари орқали

алмашинишлари лозим. Лекин бу эса (80.10) формулага тўғри келмайди: фазовий координаталар инверсиясида a қутбий векторнинг a^1, a^2, a^3 компонентлари ишораларини ўзгартиради, a^0 эса ўзгармасдан қолади; шунинг учун ξ^{i2} ва ξ^{2i} ўз-ўзлари орқали алмашина олмайдилар.

Шундай қилиб, инверсия 4-спинорнинг ξ^a компонентларини бошқа катталиклар орқали алмаштириши керак. Бундай катталиклар сифатида ўзининг трансформация хоссалари билан ξ^a га мос келмайдиган бирор бошқа η^a спинорнинг компонентларигина бўлиши мумкин. Инверсия дея, яна (81.1) шартни қаноатлантирадиган операцияни тушуниб, унинг таъсирини қуйидаги формулалар орқали аниқлаш мумкин:

$$\hat{P}\xi^a = \eta^a, \quad \hat{P}\eta^a = \xi^a. \quad (81.3)$$

Бу операцияни икки карра такрорлашда ξ^a ва η^a ўз-ўзларига (81.1) таърифга мувофиқ ўтади.

Шундай қилиб, инверсияни симметриянинг йўл қўйилган алмаштиришлар сонига киритиш (ξ^a, η^a) спинорлар жуфтини бир вақтда қараб чиқишни талаб қилади; бундай жуфтни *биспинор* деб аталади.

82- §. Дирак тенгламаси

Кўпгина элементар зарраларга тегишли спин $1/2$ бўлган ҳол энг муҳимдир. Юқорида айтилганлардан тушунарлики, релятивистик назарияда бундай зарраларни тасвирлайдиган тўлқин функция биспинор бўлади; у норелятивистик назариядаги спинор тўлқин функциянинг иккита компонента ўрнига тўрт компонента тўпламидан иборат. Эркин зарранинг биспинор тўлқин функцияси қаноатлантирадиган тўлқин тенгламани тузади.

79- § да баён этилган тасаввурлардан кўриниб турибдики, $\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu$ оператор таъсир қилганда тўлқин функциянинг ҳар бир компоненти m^2 га кўпайтирилиши керак, яъни у Клейн—Фок тенгламасини қаноатлантириши керак. Лекин кўриниб турибдики, бу тенглама етарли эмас. Ҳақиқатан ҳам, биспинор тўлқин функциянинг тўртта компонентида фақат иккитаси ($1/2$ спин

проекцияси қабул қиладиган қийматлар сонига мувофиқ) чизиқли мустақил бўлиши мумкин. Шунинг учун тўлқин функцияларнинг тўла системаси биспинор компонентлари орасидаги $\hat{p}_\mu = i\partial/\partial x^\mu$ оператор орқали амалга ошириладиган чизиқли дифференциал боғланишдан иборат бўлиши керак. Бу боғланиш релятивистик инвариант муносабатлар орқали ифодаланиши керак, албатта.

Тўлқин функция иккита спинорлар (уларни ξ^a ва η^a деб белгилаймиз) тўпламидан иборат бўлганлиги сабабли қўйилган мақсадга эришиш учун 4- вектор $\hat{p}^\mu$ ўрнига ҳам унга эквивалент бўлган ((80, 10) га мувофиқ) 2- ранг оператор спинор $\hat{p}^{ab}$ ни

$$\begin{aligned}\hat{p}^{12} &= \hat{p}^3 + \hat{p}^0, & \hat{p}^{21} &= \hat{p}^3 - \hat{p}^0, \\ \hat{p}^{11} &= -\hat{p}^1 + i\hat{p}^2, & \hat{p}^{22} &= \hat{p}^1 + i\hat{p}^2\end{aligned}\quad (82. 1)$$

компоненталари билан киритамиз.

Оператор $\hat{p}^{ab}$ билан ξ^a спинорга таъсир қилиб нопунктир индекслар жуфти бўйича скаляр кўпайтма ((80, 4) қоидага мувофиқ) ҳосил қиламиз:

$$\hat{p}^{12}\xi^2 - \hat{p}^{21}\xi^1.$$

Бу кўпайтма пунктир индекс бўйича яна 1- ранг спинорлигича қолади; шунинг учун у фақат пунктир спинор η^b орқали ифодаланиши мумкин. Шундай қилиб, қуйидаги тенгламани ҳосил қиламиз:

$$\hat{p}^{12}\xi^2 - \hat{p}^{21}\xi^1 = m\eta^3, \quad (82. 2a)$$

бу ерда m — доимий катталиқ (келгусида у зарра массаси бўлади). Худди шундай йўл билан η^b спинорга $\hat{p}^{ab}$ оператор билан таъсир қилиб ва пунктир индекслар жуфти бўйича скаляр кўпайтма тузиб,

$$\hat{p}^{a2}\eta^1 - \hat{p}^{a1}\eta^2 = m\xi^a. \quad (82. 2b)$$

Тенгламани оламиз. Бу тенгламаларнинг релятивистик инвариантлиги уларнинг ёзилишининг спинор формаси орқали ўз-ўзидан таъминланади: ҳар бир тенгламанинг

иккала томонида ҳам Лоренц алмаштиришларида бир хил қонунлар бўйича алмаштириладиган бир хил характерли (пунктир ёки пунктирсиз) спинорлар турибди.

(82.2) система билан тасвирланадиган релятивистик тўлқин тенглама эркин зарра учун *Дирак тенгламаси* деб аталади. (*У Пол Дирак* томонидан 1928 йилда аниқланган эди.)

(82.2) тенгламаларга $\hat{p}^{\alpha\beta}$ оператор компоненталари учун олинган (82.1) ифодани қўйиб, уни очсак, қуйидагини оламиз:

$$\left. \begin{aligned} \hat{p}_0 \xi^1 - \hat{p}_x \xi^2 + i \hat{p}_y \xi^2 &= \hat{p}_z \xi^1 = m \eta^1, \\ \hat{p}_0 \xi^2 - \hat{p}_x \xi^1 - i \hat{p}_y \xi^1 + \hat{p}_z \xi^2 &= m \eta^2, \\ \hat{p}_0 \eta^1 + \hat{p}_x \eta^2 - i \hat{p}_y \eta^2 + \hat{p}_z \eta^1 &= m \xi^1, \\ \hat{p}_0 \eta^2 + \hat{p}_x \eta^1 + i \hat{p}_y \eta^1 - \hat{p}_z \eta^2 &= m \xi^2, \end{aligned} \right\} \quad (82.3)$$

бу ерда $\hat{p}_0 = i\partial/\partial t$; $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ —вектор оператор $\hat{\mathbf{p}} = i\nabla$ нинг уч компоненти.

Маълум $\mathbf{p}$ импульс ва ϵ энергия билан ҳаракат қилаётган эркин зарра учун тўлқин функциянинг ҳамма компонентлари $e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - \epsilon t)}$ кўпайтувчига пропорционал бўлади (ясси тўлқин). $\hat{p}_0$ операторнинг таъсири бундай функцияни ϵ га кўпайтиради, $\hat{\mathbf{p}}$ операторники эса $-\mathbf{p}$ га кўпайтиради. Натижада (82.3) дифференциал тенгламалар системаси бир жинсли чизикли алгебраик тенгламаларга келтирилади:

$$\left. \begin{aligned} (\epsilon - p_z) \xi^1 - (p_x - i p_y) \xi^2 &= m \eta^1, \\ -(p_x + i p_y) \xi^1 + (\epsilon + p_z) \xi^2 &= m \eta^2, \\ (\epsilon + p_z) \eta^1 + (p_x - i p_y) \eta^2 &= m \xi^1, \\ (p_x + i p_y) \eta^1 + (\epsilon - p_z) \eta^2 &= m \xi^2. \end{aligned} \right\} \quad (82.4)$$

Бу тенгламаларнинг ҳар икки жуфти биспинорнинг иккита компонентини берилган бошқа иккита компонента бўйича аниқлайди.

Тенгламаларнинг икки жуфти бир-бирига мос келиши учун, масалан, η^1 ва η^2 ни биринчи жуфтдан ик-

кинчисига қўйиш натижаси айнийликка келтириши керак. Бунинг учун

$$\varepsilon^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = \varepsilon^2 - p^2 = m^2,$$

бўлиши лозимлигига осонгина ишониш мумкин. Агар m зарранинг массаси бўлса, бу тенглик зарра энергиясини унинг импульси орқали релятивистик ифодасига тўғри келади. Демак, бу билан (82.2) тенгламага киритилган m доимийнинг маъноси аниқланди.

Эркин зарранинг биспинор тўлқин функциясининг тўртта компонентидан фақат икkitаси ихтиёрий берилиши мумкинлиги берилган импульсда зарранинг ҳолатлари фақат иккита турли хил қийматларни қабул қиладиган спин проекцияси билан фарқ қилишига мос келади.

Норелятивистик чегаравий кичик тезликлар ҳолида зарра фақат биттагина икки компонентали катталик—уч ўлчовли спинор ёрдамида тасвирланиши керак. Тезлик $v \rightarrow 0$ бўлганда, p импульс ҳам нолга интилади, ε энергия эса m нинг тинч ҳолдаги энергиясига интилади (mc^2 нинг одатдаги бирликларида). Бунда (82.4) тенгламалардан $\xi^z = \eta^z$ га эга бўламиз, яъни биспинор ташкил этувчи иккита спинор ҳақиқатда ҳам бир хил бўлиб қолади.

Паули матрицалари ёрдамида (82.3) тенгламаларнинг икки жуфттини янада қисқароқ кўринишда ёзиш мумкин:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (82.5)$$

(булар 40- § да киритилган эди). Агар бу учта матрицани „матрицли вектор“ σ га бирлаштирсак, (82. 3) тенгламанинг иккита жуфтнинг қисқача ёзилиши қуйидагича бўлади:

$$(\hat{p}_0 - \hat{p}\sigma)\xi = m\eta, \quad (\hat{p}_0 + \hat{p}\sigma)\eta = m\xi. \quad (82.6)$$

Паули матрицаларини икки компонентли ξ ёки η катталиклар билан кўпайтиришда, одатдаги, матрица қондаси назарда тутилади, яъни матрицанинг қатори ξ ёки η устун билан кўпайтирилади; масалан,

$$\sigma_y \xi = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\xi^2 \\ i\xi^1 \end{pmatrix} \text{ ва ҳ. к.}$$

83- §. Дирак матрицалари

Дирак тенгламаси ёзилишининг спинор формаси, у тенгламанинг релятивистик инвариантлигини бевосита аниқлайди деган маънода табийдир. Аммо шундай йўл билан тенгламанинг кўриниши аниқлангандан кейин тенг ҳуқуқ билан тўлқин функциянинг тўртта мустақил компоненталари сифатида бошланғич компоненталарни қандайдир бошқа чиқиқли мустақил комбинацияларини танлаш мумкин. Дирак тенгламасини ишлатишда одатда уни ёзишнинг умумий формасидан фойдаланиш қулайроқ, чунки бунда тўлқин функция компоненталарини танлаш олдиндан белгиланмайди.

Тўрт компонентали тўлқин функцияни $i = 1, 2, \dots$ индекс билан номерладиган Ψ_i компоненталарга эга бўлган Ψ симболи билан белгилаймиз; уни қуйидаги устун тарзида тасвирлаш мумкин¹:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \quad (83. 1)$$

Дирак тенгламалари системасини

$$\hat{p}_\mu \gamma_{ik}^\mu \Psi_k = m \Psi_i \quad (83. 2)$$

кўринишда ёзамиз; бу ерда, γ^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) — элементлари γ_{ik}^μ ($i, k = 1, 2, 3, 4$) бўлган бирор тўрт қаторли матрицалар; (83. 2) нинг чап томонида йиғиш матрицали (биспинор) индекс K бўйича ҳам, 4- вектор индекс μ бўйича ҳам амалга оширилиши мумкин². Тенг-

¹ Қулайлик учун Ψ тўрт компонентали катталикини унинг спинор тасвирида ва ихтиёрий тасвирда, шартли равишда, биспинор деб атаймиз. Тегишли равишда унинг компоненталарини номерладиган индексни ҳам биспинор индекс деб атаймиз.

² Мисол тариқасида тўлқин функциянинг спинор тасвирига тўғри келадиган γ^μ матрицаларнинг ифодасини келтирамиз. Агар $\Psi_1 = \xi^1$, $\Psi_2 = \xi^2$, $\Psi_3 = \eta^1$, $\Psi_4 = \eta^2$ бўлса, у ҳолда

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

ламани қуйидаги символик кўринишда ёзганда, матрицали индекслар тушириб қолдирилади:

$$[\gamma^\mu \hat{p}_\mu - m] \Psi = 0, \quad (83.3)$$

бу ерда

$$\gamma^\mu \hat{p}_\mu = \hat{p}_0 \gamma^0 - \mathbf{p} \boldsymbol{\gamma} = i \left(\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{\gamma} \Delta \right), \quad (83.4)$$

γ эса $\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$ компонентли уч ўлчовли „матрицали вектор“ни белгилайди. Ψ ни (83. 1) устун кўринишида ёзиш (83. 3) да матрица γ^μ ни Ψ билан кўпайтириш одатдаги матрицавий қоида асосида амалга оширилади, яъни γ^μ матрицадаги ҳар бир қатор Ψ даги устунга кўпайтирилади:

$$(\gamma^\mu \Psi)_i = \gamma^\mu_{ik} \Psi_k. \quad (83.5)$$

γ^μ матрицаларни *Дирак матрицалари* деб аталади. Тўлқин функциянинг ихтиёрий тасаввурининг умумий ҳолида улар фақат

$$(\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu) \Psi = m^2 \Psi,$$

тенгликни таъминлайдиган шартларнигина қаноатлантириши керак, яъни Ψ нинг ҳар бир компоненти Клейн—Фок тенгламасини қаноатлатириши керак.

Шу шартларни аниқлаш учун (83. 3) тенгламанинг чап томонини $\gamma^\nu \hat{p}_\nu$ га кўпайтирамиз:

$$(\gamma^\nu \hat{p}_\nu) (\gamma^\mu \hat{p}_\mu) \Psi = (\gamma^\nu \hat{p}_\nu) m \Psi = m^2 \Psi.$$

Ҳамма $\hat{p}_\mu$ операторлар коммутатив бўлганлигидан $\hat{p}_\mu \hat{p}_\nu$ кўпайтма симметрик тензор бўлади: $\hat{p}_\mu \hat{p}_\nu = \hat{p}_\nu \hat{p}_\mu$. $\gamma^\nu \gamma^\mu$ кўпайтмани эса симметрик ва антисимметрик қисмларга ёямиз:

$$\gamma^\nu \gamma^\mu = \frac{1}{2} (\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu) + \frac{1}{2} (\gamma^\nu \gamma^\mu - \gamma^\mu \gamma^\nu).$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$\hat{p}_\nu \hat{p}_\mu$ га кўпайтирганда бунинг охирги қисми нолга айланади ва қуйидаги қолади:

$$\frac{1}{2} (\gamma^\nu \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^\nu) \hat{p}_\nu \hat{p}_\mu \Psi = m^2 \Psi.$$

Тенгликнинг чап томони $\hat{p}_\mu \hat{p}^\mu$ га келтирилиши учун $\mu \neq \nu$ бўлган матрицаларнинг ҳамма жуфти антикоммутатив ($\gamma^\mu \gamma^\nu = -\gamma^\nu \gamma^\mu$) бўлиши керак, матрицаларнинг квадрати эса қуйидагига тенг бўлиши керак:

$$(\gamma^1)^2 = (\gamma^2)^2 = (\gamma^3)^2 = 1, (\gamma^0)^2 = -1 \quad (83.6)$$

(тенгликнинг ўнг томонидаги бирни бирлик матрица деб тушуниш керак). Бу шартларнинг ҳаммасини биргаликда қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \quad (83.7)$$

бу ерда $g^{\mu\nu}$ — метрик тензор деб аталади, у қуйидаги компонентга эга:

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (83.8)$$

(83.7) тенгликлар Дирак матрицаларини, улар билан ўтказиладиган операциялар учун зарур бўлган ҳамма хусусиятларни белгилайди. Одатда, у ёки бу тасаввурларда бу матрицаларнинг аниқ ифодаларига мурожаат қилиш лозим бўлмайди.

Дирак тенгламасини вақт бўйича ҳосилага нисбатан ажратилган кўринишда келтириш мумкин. Демак, бу билан спини 1/2 бўлган зарралар учун гамильтониан ҳақидаги тушунчани киритиш мумкин. Ҳақиқатда

$$(\gamma^\mu \hat{p}_\mu - m) \Psi = i\gamma^0 \frac{d\Psi}{dt} - \hat{\gamma} \mathbf{p} \Psi - m\Psi = 0$$

тенгламанинг чап томонини γ^0 га кўпайтириб, $i\partial\Psi/\partial t$ олдидаги коэффициентни бирга айлантирамыз (аниқроғи — бирлик матрицага). Шундай қилиб,

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\gamma^0 \hat{\gamma} \mathbf{p} + m\gamma^0) \Psi.$$

Бу тенгламанинг ўнг томонидаги Ψ га таъсир этаётган оператор зарранинг гамильтониани бўлади. Уни, одатда, матрицалар учун махсус $\alpha = \gamma^0 \gamma$, $\beta = \gamma^0$ белгилар киритиб, қуйидаги кўринишда ёзилади:

$$\hat{H} = \hat{\alpha} \hat{p} + m\beta, \quad (83.9)$$

(83.9) операторнинг квадрати

$$\hat{H}^2 = \hat{p}^2 + m^2.$$

эканлигига ишониш ((83.7) муносабатлар ёрдамида)

осон. Шу маънода (83.9) ифодани $\hat{p}^2 + m^2$ йиғиндидан олинган квадрат илдиз деб айтиш мумкин.

Ўтган параграфнинг охирида қайд қилиб ўтилган эдики, кичик тезликларнинг чегаравий ҳолида Ψ биспинорни ташкил қиладиган иккита ξ ва η спинорлар бир хил бўлиб қолади. Аммо бу ерда Дирак тенгламасини спинор шаклда ёзилишининг камчилиги кўринади: чегаравий ўтишда тўлқин функция тўртта компонентасининг ҳаммаси нолдан фарқ қилади (ҳақиқатда эса уларнинг фақат иккитасигина мустақилдир). Шунинг учун тўлқин функциянинг компоненталаридан иккитаси учун чегарада нолга айланадиган тасаввур қулайроқ бўлиши мумкин.

Бу мақсадга эришиш учун ξ ва η ўрнига уларнинг чизиқли комбинациялари

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi + \eta), \quad \chi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi - \eta) \quad (83.10)$$

киритилади; тўлароқ кўринишда ёзсак,

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \xi^1 + \eta^1 \\ \xi^2 + \eta^2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \xi^1 - \eta^1 \\ \xi^2 - \eta^2 \end{pmatrix}.$$

Тинч турган зарра учун $\chi = 0$. Тўртта компонентаси $\varphi_1, \varphi_2, \chi_1, \chi_2$ бўлган Ψ тасаввурни *стандарт* тасаввур деб аталади. Биз бундан 93- § да ташқи майдонда электронлар ҳаракатини ўрганаётганда фойдаланамиз, ҳозир эса Дирак тенгламасини шу тасаввурда эркин зарра учун ёзамиз. (82.6) тенгламаларни ҳадма-ҳад қўшиш ва айириш натижасида қуйидагини оламиз:

$$\begin{aligned} \hat{p}_0 \varphi - \hat{p} \sigma \chi &= m\varphi, \\ -\hat{p}_0 \chi + \hat{p} \sigma \varphi &= m\chi. \end{aligned} \quad (83.11)$$

84- §. Дирак тенгламасида ток зичлиги

Дирак тенгламаси учун зарралар зичлиги ρ ва улар оқимининг зичлиги $\mathbf{j}$ ролини ўйнайдиган катталикларни тузамиз. Релятивистик назарияда бу катталиклар 4- вектор $j^\mu = (\rho, \mathbf{j})$ ни ҳисил қилади. Улар узлуксизлик тенгламасини қаноатлантиради; узлуксизлик тенгламаси

$$\frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} = 0 \quad (84.1)$$

тўрт ўлчовли кўринишда ёзилади (I том, 55- § га солиштиринг). Бу тенглама

$$Q = \int \rho dV. \quad (84.2)$$

катталиклнинг сақланиш қонунини ифодалайди. Бу нонрелятивистик назарияда зарралар сонининг сақланиш қонунидан иборат, релятивистик назарияда эса (84.1) тенглама билан ифодаланадиган қонуннинг маъноси ўзгаради (буни 86- § да аниқлаймиз).

j^μ катталиклар Ψ тўлқин функция ва унинг комплекс қўшма Ψ^* функцияси бўйича бичизиқ ифодаларни тасвирлайди. Шунинг учун бу ифодаларни топишда аввал Ψ^* функция бўйсунадиган тенгламанинг тури аниқланади. Тўлқин функциянинг ўзи Дирак тенгламасини қаноатлантиради:

$$(p_\mu \gamma^\mu - m) \Psi = (i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\boldsymbol{\gamma} \nabla - m) \Psi = 0. \quad (84.3)$$

Комплекс қўшмалик қуйидаги тенгламани беради:

$$(-i\gamma^{0*} \frac{\partial}{\partial t} - i\boldsymbol{\gamma}^* \Delta - m) \Psi^* = 0.$$

302—303- бетдаги эслатмада келтирилган γ^μ матрицалар ифодасидан кўринадики,

$$\gamma^{0+} \equiv \tilde{\gamma}^{0*} = \gamma^0, \quad \boldsymbol{\gamma}^+ = -\boldsymbol{\gamma}, \quad (84.4)$$

яъни γ^0 матрица — Эрмит матрицаси ва $\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3$ матрицалар эса, „антиэрмит“ матрицаларидир (эслатиб ўтамизки, $\sim$ белги транспонирлашни билдиради, яъни матрицанинг устунлари ва қаторларининг жойларини

алмаштириш демакдир)¹. Шунинг учун $\gamma^{0*} = \widetilde{\gamma^0}$, $\gamma^* = -\widetilde{\gamma}$, демак,

$$(-i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\gamma\nabla - m)\Psi^* = 0.$$

Бошланғич (транспонирланмаган) матрицаларга қайтиш учун

$$\widetilde{\gamma^\mu} \Psi^* \equiv \widetilde{\gamma^\mu} \Psi^* = \Psi^* \gamma^\mu_{ki} \equiv \Psi^* \gamma^\mu;$$

бўлишини қайд қиламиз; $\Psi^* \gamma^\mu$ нинг символик (матрица индексларисиз) ёзмасида Ψ^* ни γ^μ матрицанинг устунларига кўпайтириладиган

$$\Psi^* = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, \Psi_3^*, \Psi_4^*),$$

қатор сифатида тушуниш керак. Шундай қилиб,

$$\Psi^* (-i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\gamma\nabla - m) = 0,$$

бу ерда, шартли равишда дифференциаллаш операторлари улардан чапда турган Ψ^* функцияга таъсир қилади деб тушунилади. Қавс ичидаги биринчи ва иккинчи ҳадларнинг ишоралари бўйича фарқ қилиши туфайли улар тўрт ўлчовли кўринишга келтирилиши ҳам мумкин. Бу камчиликни йўқотиш учун ҳамма тенгламаларнинг чап томонини γ^0 га кўпайтирамиз, ва $\gamma\gamma^0 = -\gamma^0\gamma$ алмашлаб қуйидагини оламиз:

$$\Psi^* \gamma^0 (-i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} + i\gamma\nabla + m) = 0.$$

$\Psi^* \gamma^0$ функция Ψ функцияга нисбатан *Диракча қўшма-ланган* деб аталадиган ва устида чизиқчаси бўлган ҳарф билан белгиланади:

$$\overline{\Psi} = \Psi^* \gamma^0, \quad \Psi^* = \overline{\Psi} \gamma^3. \quad (84.5)$$

Шундай қилиб, пиравардида:

$$\overline{\Psi} (\hat{p}_\mu \gamma^\mu + m) = 0. \quad (84.6)$$

Энди (84.1) узлуксизлик тенгламасини қаноатлантирадиган ток зичлигининг 4-вектор сифатидаги ифодасини топиш қийин эмас. Бунинг учун (84.6) тенг-

¹ 302—303- бетдаги ифодалар матрицаларнинг конкрет (спинор) тасаввурига тааллуқли, лекин ҳақиқатда (84.4) хоссалар бу тасавурларга боғлиқ эмас.

ламанинг ўнг томонини Ψ га, (84.3) тенгламанинг чап томонини Ψ^* га кўпайтириб, уларни ҳадма-ҳад қўшамиз. Бунда $\pm m \Psi^* \Psi$ ҳадлар ўзаро қисқаради ва

$$i \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x^\mu} \gamma^\mu \Psi + i \bar{\Psi} \gamma^\mu \frac{\partial \Psi}{\partial x^\mu} = i \frac{\partial}{\partial x^\mu} (\bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi) = 0$$

қолади. Бу тенглик ҳақиқатдан ҳам узлуксизлик тенгламасига ўхшайди, унда 4- вектор

$$j^\mu = \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi \quad (84.7)$$

ток зичлиги ролини ўйнайди, (матрица индекслари билан тўла ёзилганда:

$$j^\mu = \bar{\Psi}_i \gamma_{ik}^\mu \Psi_k).$$

4- вектор (84.7) нинг вақтга боғлиқ компонентаси зарраларнинг

$$p = \Psi \gamma_0 \Psi = \Psi^* \Psi \equiv |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2 + |\phi_4|^2 \quad (84.8)$$

зичлигидир, учта фазовий компонента эса токнинг уч ўлчовли векторини ташкил қилади:

$$\mathbf{j} = \Psi \boldsymbol{\gamma} \Psi = \Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi, \quad (84.9)$$

бу ерда $\boldsymbol{\alpha} = \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} - (83.9)$ да киритилган „матрицали вектор“дир. Бунда $\boldsymbol{\alpha}$ зарранинг тезлик оператори ролини ўйнашига диққатни жалб қиламиз. Импульс $\mathbf{p}$ ва энергия ϵ нинг маълум қийматларига эга бўлган эркин зарранинг тўлқин функцияси — ясси тўлқинни нормалаш учун (84.7) ни қўллаймиз. „ Ω ҳажмда битта зарра“га нормалашни амалга оширишни назарда тутиб, тўлқинни қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} u(p) e^{-i(\epsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}, \quad (84.10)$$

тўлқин амплитудаси $u(p) \equiv u(\epsilon, \mathbf{p})$ зарранинг 4- импульсига боғлиқ доимий биспинордир. Бу биспинорнинг компоненталари қуйидаги алгебраик тенгламалар системасини қаноатлантиради:

$$(\gamma^\mu p_\mu - m) u = 0, \quad (84.11)$$

бу система Дирак тенгламаси (84.3) га (84.10) ни қўйиш натижасида олинади (яъни, ундаги $\hat{p}_\mu$ операторларни p_μ катталиклар билан алмаштиришга келтири-

лади). (84.10) функцияни талаб қилинадиган нормалашга фақат $u(p)$ амплитудани

$$\overline{uu} = \frac{m}{\varepsilon} \quad (84.12)$$

шарт орқали нормалаштирилгандагина эришиш мумкинлигини кўрсатамиз. Ҳақиқатан ҳам, (84.11) тенгламанинг чап томонини $\overline{u}$ га кўпайтириб, қуйидагини оламиз:

$$(\overline{u} \gamma^\mu u) p_\mu = m (\overline{uu}) = \frac{m^2}{\varepsilon}.$$

Бундан кўринадики, $\overline{u} \gamma^\mu u = p^\mu / \varepsilon$, демак, токнинг 4- вектори

$$j^\mu = \overline{\psi} \gamma^\mu \psi = \frac{1}{\Omega} \overline{u} \gamma^\mu u = \frac{p^\mu}{\Omega \varepsilon}. \quad (84.13)$$

Бунда зарраларнинг зичлиги $\rho = p^0 / \varepsilon \Omega = 1 / \Omega$, яъни бу талаб қилинган нормалашга мувофиқ келади. Оқимнинг уч ўлчовли зичлиги эса, $\mathbf{j} = \mathbf{p} / \varepsilon \Omega = \mathbf{V} / \Omega$ бу ерда $\mathbf{v}$ — зарралар тезлиги.

XIII б о б

ЗАРРАЛАР ВА АНТИЗАРРАЛАР

85- §. Ψ - операторлар

Майдоннинг классик чегарадаги маълум хоссалари ва одатдаги квант механикаси тасаввурларига таянган ҳолда эркин электромагнит майдоннинг квант нуқтаи назардан тавсифини қандай тузиш мумкинлиги XI бобда кўрсатилган эди. Шундай тарзда олинадиган майдонни фотонлар системаси сифатида тасвирлаш схемаси зарраларни квант назариясида релятивистик баён қилишга ҳам ўтказиладиган кўпгина хусусиятларга эга.

Электромагнит майдон чексиз сонли эркинлик даражасига эга бўлган системадан иборат. Унинг учун зарралар (фотонлар) сонининг сақланиш қонуни мавжуд эмас, унинг мумкин бўлган ҳолатлари қаторида ихтиёрий сондаги зарралари бўлган ҳолатлари бор¹. Умуман айтганда, релятивистик назарияга кўра ҳар қандай зарралар системаси ҳам шундай хусусиятларга эга бўлиши керак. Нерелятивистик назарияда зарралар сонининг сақланиши массанинг сақланиш қонуни билан боғланган: зарраларнинг ўзаро таъсирлашишида массаларининг (тинч ҳолдаги массаларининг) йиғиндиси ўзгармайди; зарралар системасида массалар йиғиндисининг сақланиши зарралар сонининг ҳам ўзгармаслигини англатади. Релятивистик назарияда эса массанинг сақланиши мавжуд эмас; фақат системанинг тўла энергияси (унинг бир қисми сифатида зарраларнинг тинч ҳолдаги энергияси ҳам) сақланиши лозим. Шунинг учун зарра-

¹ Ҳақиқатан ҳам, зарралар, сонининг фақат турли хил ўзаро таъсир жараёнларида ўзгариши тушунарлидир.

лар сони энди сақланмаслиги керак, демак, зарраларнинг ҳар қандай релятивистик назарияси чексиз эркинлик даражасига эга бўлган назария бўлиши керак. Бошқача қилиб айтганда, зарраларнинг бундай назарияси майдон назарияси характерига эга.

Ўзгарувчан сонли зарралар системасини баён қилиш учун адекват бўлган математик аппарат сифатида иккиламчи квантлаш аппарати хизмат қилади. Бунда зарранинг турли ҳолатларини тўлдириш сонлари эркин ўзгарувчилардир. Электромагнит майдон квант назариясида майдон потенциални $\hat{A}$ иккиламчи квантлаш оператори ролини бажаради. У алоҳида фотонларнинг тўлқин функциялари ва уларнинг ҳосил бўлиш ва йўқотиш операторлари орқали ифодаланади. Зарралар системасининг баёнида шунга ўхшаш ролни квантланган тўлқин функция оператори ўйнайди.

Бу параграфда баён этилаётган фикрлар ҳар қандай спинли зарраларга ҳам тааллуқлидир. Шунинг учун биз тўлқин функцияларнинг математик табиатини аниқламаймиз. Масалан, ясси тўлқинларни қуйидагича ёзамиз:

$$\Psi_p = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} u(p) e^{-i(\omega t - pr)} \quad (85. 1)$$

бу ерда $u(p)$ тўлқин амплитудаси (4- импульс функцияси) скаляр (0 спинли зарралар учун), биспинор (спини 1/2 бўлган зарралар учун) ва ҳ. к. бўлиши мумкинлиги назарда тутилади.

Иккиламчи квантлаш ўтказишнинг умумий қоидаларига амал қилиб, биз ихтиёрий тўлқин функцияни эркин зарранинг мавжуд бўлган ҳолатлари тўла тўпламининг хусусий функциялари бўйича — ψ_p ясси тўлқинлар бўйича ёйишни кўриб чиқишимиз керак¹:

$$\Psi = \sum_p a_p \Psi_p, \quad \Psi^* = \sum_p a_p^* \Psi_p^*.$$

Бундан кейин a_p , a_p^* коэффициентларни тегишли ҳолатларда зарраларнинг йўқотилиши ва ҳосил бўлиш операторлари $\hat{a}_p$, $\hat{a}_p^+$ деб тушуниш керак бўлар эди.

¹ Спинга эга бўлган зарралар учун йиғиш зарранинг қутбланиши бўйича ҳам бажарилиши лозим; қисқалик учун тегишли индексни ёзмаймиз.

Аммо бунда биз тезда қуйидаги янги (норелятивистик назарияга нисбатан) принципиал вазиятга дуч келамиз. Ясси тўлқин (85.1) тўлқин тенгламани қаноатлантириши учун фақат $\varepsilon^2 = \mathbf{p}^2 + m^2$ шартга (энергиянинг квадрати учун) амал қилиниши лозим, бунда ε иккита қийматга эга: $\varepsilon = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$. Лекин эркин зарра энергиясининг физикавий маъносига фақат ε нинг мусбат қийматлари эга бўлиши мумкин. Шу билан бирга манфий қийматларни шундайгина тушириб қолдириш мумкин эмас, чунки тўлқин тенгламанинг ечимини фақат унинг барча эркин хусусий ечимларининг суперпозицияси ташкил этади. Бу ҳол иккиламчи квантлашда Ψ ва Ψ^* нинг ёйилмасидан коэффициентларини бир оз ўзгартириш зарурлигини кўрсатади.

Бу ёйилмани қуйидагича ёзамиз:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)} u(\varepsilon, \mathbf{p}) e^{-i(\varepsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(-)} u(-\varepsilon, \mathbf{p}) e^{i(\varepsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}, \quad (85.2)$$

бу ерда ясси тўлқинлар биринчи йиғиндида мусбат „частоталар“ билан, иккинчисидан манфий „частоталар“ билан турибди; ε ҳамма ерда мусбат катталики билдиради: $\varepsilon = + \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$. Иккиламчи квантлашда биринчи йиғиндидаги $a_{\mathbf{p}}^{(+)}$ коэффициентни оддий йўл билан

зарраларни йўқотиш оператори $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ га алмаштирамиз.

Иккинчи йиғиндида, аввало, йиғиш ўзгарувчисининг белгиси $\mathbf{p}$ ни $-\mathbf{p}$ га алмаштирамиз; йиғиш $\mathbf{p}$ нинг барча мумкин бўлган қийматлари бўйича ўтказилаётганлиги сабабли, тушунарлики, бундай алмаштириш натижасида йиғиш соҳаси ҳам, йиғиндининг катталиги ҳам ўзгармайди. Алмаштиришдан сўнг йиғинди белгиси остидаги экспоненциал кўпайтувчи „мусбат“ частотали комплекс-қўшма $\Psi_{\mathbf{p}}^*$ тўлқин функцияларининг хилига мос келувчи $e^{i(\varepsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}$ кўринишга эга бўлади. Иккиламчи квантлашда бундай функциялар зарраларнинг ҳосил бўлиш операторларига кўпайтирилиши керак. Бунга

мос ҳолча, $a_{\mathbf{p}}^{(-)}$ коэффициентларни $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ бошқа баъзи зарраларнинг ҳосил бўлиш оператори билан алмаштирамиз (бу зарралар $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ операторларга тегишли бўлган зар-

ралардан фарқ қилади). Натижада Ψ - операторларни қуйидаги кўринишда оламиз:

$$\hat{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} \{ \hat{a}_{\mathbf{p}} u(\mathbf{p}) e^{-i(\epsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} + \hat{b}_{\mathbf{p}}^+ u(-\mathbf{p}) e^{i(\epsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \}, \quad (85.3)$$

$$\hat{\Psi}^+ = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} \{ \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ u^*(\mathbf{p}) e^{i(\epsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} + \hat{b}_{\mathbf{p}} u^*(-\mathbf{p}) e^{-i(\epsilon t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \}$$

($u(-\mathbf{p}) \equiv u(-\epsilon, -\mathbf{p})$ деб белгиланган).

Шундай қилиб, ҳамма $\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}}$ операторлар вақтга „тўғри“ боғланишли ($\sim e^{-i\epsilon t}$) функцияга $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+, \hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ операторлар эса уларга комплекс-қўшма бўлган функцияларга кўпайтирилган бўлар экан. Бу эса умумий қондаларга мувофиқ, $\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}}$ операторларни йўқотиш операторлари деб, $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+, \hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ операторларни $\mathbf{p}$ импульсли ва ϵ энергияли зарраларнинг ҳосил бўлиш операторлари деб талқин қилишга имкон беради.

Биз биргаликда ва тенг ҳуқуқда қатнашувчи икки турдаги зарралар ҳақидаги тасаввурга келдик. Улар *зарралар ва антизарралар* деб аталади (бундай аталишининг маъноси келгуси параграфда аниқланади).

Иккиламчи квантлаш аппаратида уларнинг бирига $\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}}^+$ бошқасига эса $\hat{b}_{\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ операторлар мосдир. Операторлари фақат битта Ψ - операторга кирадиган, битта тўлқин тенгламани қаноатлантирадиган бу зарраларнинг ҳар икки тури ҳам бир хил массага эга.

86- §. Зарралар ва антизарралар

Зарралар ва антизарраларнинг хоссалари ва ўзаро муносабатларини янада аниқлашда тўла энергия операторлари ва системадаги зарраларнинг тўла сони учун ифодалар тузиш лозим. Бу ифодаларни келтириб чиқариш зарраларнинг спинига боғлиқ; спини $1/2$ бўлган зарралар майдонини (бошқача-айтганда *спинор майдонни*) кўриб чиқамиз.

Бу ҳолда изланаётган ифодани чиқаришда Дирак тенгламаси билан ифодаланадиган зарралар учун гамилтон ан мавжудлиги ва $\Psi^* \Psi$ кўпайтма зарралар зичлиги ролини ўйнашини билиш етарли. Бу эса норелятивистик назария доирасида 47, 48- параграфларда

олинган натижалардан фойдаланишга имкон беради (бу назарияда иккала хосса ҳам ҳар қандай спинли зарраларга тўғри келади)¹.

Маълумки, иккиламчи квантлаш математик аппаратада зарралар системасининг гамильтониани $\hat{H}$ битта зарранинг $\hat{H}^{(1)}$ гамильтонианидан интеграл тарзида олинади².

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^+ \hat{H}^{(1)} \hat{\Psi} dV. \quad (86.1)$$

Релятивистик назарияда бу тривиал натижага олиб келади. Ψ — операторларни қўйилса,

$$\hat{\Psi} = \sum_p \hat{a}_p \Psi_p, \quad \hat{\Psi}^+ = \sum_p \hat{a}_p^+ \Psi_p^*, \quad (86.2)$$

$\hat{a}_p, \hat{a}_p^+$ операторларнинг коммутация қоидаларидан қатъи назар,

$$\hat{H} = \sum_p \epsilon_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p \quad (86.3)$$

олинади, бу еуда ϵ_p — гамильтониан $\hat{H}^{(1)}$ нинг хусусий қийматлари, яъни эркин зарра энергияси. $\hat{a}_p^+ \hat{a}_p$ операторлар кўпайтмасининг хусусий қийматлари эса ҳолатларни тўлдириш сони N_p ни беради; шунинг учун система тўла энергиясининг хусусий қийматлари ўз-ўзидан маълум бўлган ифодага тенг бўлади;

$$E = \sum_p \epsilon_p N_p.$$

Шунга ўхшаш йўл билан оператори

$$\hat{N} = \int \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} dV \quad (86.4)$$

интеграл билан бериладиган системадаги зарраларнинг тўла сони учун тривиал натижа олинган. Бу формулага Ψ - операторлар (86.2) ни қўйсак,

$$\hat{N} = \sum_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p \quad (86.5)$$

¹ Шу билан бирга (79- §) Клейн—Фок скаляр тенгламаси билан баён қилинадиган, спини 0 бўлган релятивистик зарралар учун бу хоссаларнинг биттаси ҳам тўғри келмаслигини эслатиб ўтамиз.

² Бу ерда зарра гамильтонианидаги (1) индекс уни бутун система гамильтонианидан фарқ қилиш мақсадида киритилди.

ҳосил бўлади, шундай қилиб, хусусий қийматлар

$$N = \sum N_p.$$

Релятивистик назарияда эса зарранинг $\hat{H}^{(1)}$ гамильтонианида манфий хусусий қийматларнинг мавжудлиги вазиятни радикал равишда ўзгартиради. Энди (86.3) ўрнига қуйидагини олиш мумкин:

$$\hat{H} = \sum_p \varepsilon_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p - \sum_p \varepsilon_p \hat{b}_p \hat{b}_p^+. \quad (86.6)$$

Биринчи йиғинди $\varepsilon_p = +\sqrt{p^2 + m^2}$ нинг мусбат хусусий қийматларига жавоб беради; у (86.3) йиғинди кўринишига эга. Иккинчи йиғинди эса $-\varepsilon_p$ га тенг манфий хусусий қийматларга жавоб беради; шунга кўра йиғинди олдида минус ишораси қўйилади. Иккинчи йиғиндидаги $\hat{b}_p$ ва $\hat{b}_p^+$ кўпайтувчилар тартибининг ўзгариши (биринчи йиғиндидагига нисбатан) Ψ -операторлар (85.3) да $\hat{a}_p$ ва $\hat{a}_p^+$ билан бирга мос ҳолда $\hat{b}_p^+$ ва $\hat{b}_p$ мавжудлигига боғлиқ. Худди шундай йўл билан (86.4) оператор учун (уни энди $\hat{Q}$ билан белгилаймиз) (86.5) ўрнига қуйидагини оламиз:

$$\hat{Q} = \sum_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \sum_p \hat{b}_p \hat{b}_p^+. \quad (86.7)$$

(86.6) ва (86.7) операторларнинг хусусий қийматларини аниқлаш учун дастлаб иккинчи йиғиндиларидаги кўпайтувчилар тартибини $\hat{b}_p^+ \hat{b}_p$ стандарт кўринишга келтириш зарур; худди шундай кўпайтмаларнинг хусусий қийматлари тўлдириш сонларига тенгдир. Аммо, бу ерда зарраларнинг ҳосил бўлиш ва йўқотиш операторлари қаноатлантирадиган коммутация қоидалари муҳим бўлиб қолади.

Операторлар фақат қуйидаги Ферми коммутацияси қоидаларини қаноатлантиргандагина (86.6) гамильтонианинг хусусий қийматлари учун оқилона натижа олиш мумкинлигини кўриш осон:

$$\begin{aligned} a_p a_p^+ + a_p^+ a_p &= 1, \\ b_p b_p^+ + b_p^+ b_p &= 1. \end{aligned} \quad (86.8)$$

Ҳақиқатан ҳам, бу ҳолда (86.6) гамильтониан қуйидаги кўринишни олади:

$$\hat{H} = \sum_p \epsilon_p (\hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \hat{b}_p^+ \hat{b}_p - 1).$$

$a_p^+ a_p$ ва $b_p^+ b_p$ кўпайтмаларнинг хусусий қийматлари N_p ва $\bar{N}_p$ — мусбат бутун сонларга, яъни тегишли ҳолатлардаги зарра ва антизарралар сонига тенг. Чексиз аддитив доимий $\sum \epsilon_p$ ни („вакуум энергияси“) тушириб қолдириш мумкин — бу худди шундай сабабга кўра 77- § да фотонлар учун бажарилган эди. У ҳолда система энергияси учун муҳим мусбат ифода олинади:

$$E = \sum_p \epsilon_p (N_p + \bar{N}_p), \quad (86.9)$$

бу реал мавжуд зарраларнинг икки тури тўғрисидаги тасаввурга мос келади: системанинг тўла энергияси уни ташкил этувчи барча зарра ва антизарралар энергияларининг йиғиндисига тенг.

Агар биз (86.8) ўрнига Бозе коммутацияси қоидаларини (антикоммутаторлар ўрнига коммутаторлар) қабул қилсак,

$$\hat{H} = \sum_p \epsilon_p (\hat{a}_p^+ \hat{a}_p - \hat{b}_p^+ \hat{b}_p + 1)$$

ифодага эга бўлар эдик ва (86.9) ўрнига — физика жиҳатидан маъносиз ифода $\sum \epsilon_p (N_p - \bar{N}_p)$ ни олган бўлар эдик: у номусбат аниқланган ва шунинг учун эркин зарралар системасининг энергиясини тасвирлай олмайд.

Шундай қилиб, зарраларнинг йўқотиш ва ҳосил қилиш операторлари коммутацияси қоидаларини аниқлаб, энди (86.7) операторга мурожаат қиламиз. (86.8) ёрдамида иккинчи йиғиндидаги кўпайтувчилар таркибини ўзгартириб қуйидагини оламиз:

$$\hat{Q} = \sum_p (\hat{a}_p^+ a_p - \hat{b}_p^+ \hat{b}_p + 1).$$

Бу операторнинг хусусий қийматлари (яна муҳим бўлмаган аддитив $\sum^1$ доимийни ҳисобга олмаган ҳолда)

$$Q = \sum_p (N_p - \bar{N}_p), \quad (86.10)$$

яъни зарра ва антизарраларнинг тўла сонлари айирмасига тенг.

Бу жуда муҳим натижа. Оператор $\hat{Q}$ сақланиш қонуни (84.1) узлуксизлик тенгламаси билан ифодаланадиган (86.2) катталиikka жавоб беради. Кўриниб турибдики, бу қонун зарра ва антизарралар сони ёки улар йиғиндисининг сақланишини талаб қилмайди. Ҳақат бу сонларнинг айирмаси сақланиши керак. Бошқача қилиб айтганда, турли ўзаро таъсир жараёнларида „зарра-антизарра“ жуфти пайдо бўлиши ва йўқолиши мумкин². Барча шундай жараёнлар ўзаро таъсир этувчи зарралар системасининг, энергиянинг ва импульсининг сақланиш қонунларига бўйсунган ҳолда юзага келади. Масалан, зарранинг антизарра билан тўқнашишида жуфтнинг йўқолиши энергия ва импульсининг сақланишини таъминлайдиган қандайдир бошқа зарраларнинг пайдо бўлиши билан бирга амалга ошади. Бундай зарралар фотонлар бўлиши мумкин, бундай ҳолда жуфтнинг *аннигиляцияси* ҳақида гапирадилар.

Агар зарра электр зарядига эга бўлса, у ҳолда унинг антизарраси қарама-қарши ишорали зарядга эга бўлиши лозим: чунки иккала зарра ҳам бир хил зарядга эга бўлганда, улар жуфтининг ҳосил бўлиши ва йўқотилиши табиатнинг қатъий қонунига—тўла электр зарядининг сақланиш қонунига қарши бўлар эди.

Айрим ҳолларда Q катталикини берилган зарраларнинг *майдон заряди* деб аталади. Электр зарядига эга бўлган зарралар учун Q катталик системанинг тўла зарядини (элементар заряд (e) бирликларида ўлчанган) аниқлайди. Аммо, шуни таъкидлаб ўтиш керакки, зар-

¹ Бу ҳолда ўзаро таъсир Q катталикининг сақланишини бузмайди деб тушунилади, албатта. Табиатдаги ҳамма маълум ўзаро таъсирлар бу шартни қаноатлантиради.

² Фермионлар орасида нейтронлар ва нейтринолар (спини $1/2$) худди шундай бўлади. Бозонлар орасида нейтрал K -мезонлар (спини 0) худди шундай бўлади.

ралар ва антизарралар электр жиҳатидан нейтрал бўлиши ҳам мумкин¹.

Шундай қилиб, квант назариясида энергиянинг импульсга боғлиқлигининг релятивистик характери ($\epsilon^2 = p^2 + m^2$ тенглама илдизининг икки қийматлилиги) релятивистик инвариантлик талаблари билан бирга зарралар учун янги классификация принципининг пайдо бўлишига, яъни бир-бири билан юқорида баён этилганидек муносабатда бўлган турли хил зарралар (зарра-антизарра) жуфтининг мавжуд бўлиш имкониятига олиб келади. Бу ажойиб кашфиёт Дирак томонидан 1930 йилда, яъни биринчи антизарра—позитрон (антиэлектрон) очилганига қадар қилинган эди¹.

87- §. Спиннинг статистикага алоқаси

Юқорида баён этилган натижалар яна бир муҳим аспектга эга: биз табиий физикавий талаблар спинлари $1/2$ бўлган зарраларнинг Ферми статистикасига бўйсунishiга автоматик равишда олиб келишини кўрдик.

Бундан ўз навбатида, яна умумий хулоса келиб чиқади: ярим бутун сонли спинга эга бўлган зарралар—фермионлар ва бутун сонли спинга (шу жумладан спини 0 бўлган) эга бўлган зарралар бозонлар деб аталади².

Бу яна тушунарли бўлиши учун шуни қайд қилиб ўтиш керакки, нолдан фарқли s спинли ҳар қандай заррани унинг спин хоссасига қараб параллел $1/2$ спинли иккита $2s$ заррадан (спини 0 бўлган заррани—иккита антипараллел $1/2$ спинли заррадан) „тузилган“ деб тасаввур қилиш мумкин. s ярим бутун бўлганда $2s$ сонли тоқ ва s бутун бўлганда—жуфт бўлади. Шу билан бирга тоқ сонли фермионлардан тузилган „мураккаб“ зарра фермион бўлади, жуфт сонли фермионлардан тузилганда эса бозон бўлади (бу ҳақда 45- § да айтиб ўтилган эди). Ҳақиқатан ҳам, зарраларнинг ҳар қандай жуф-

¹ Диракнинг ўзи позитронлар ҳақида электронлар билан банд қилинган манфий энергияли ҳолатлар континуумидаги „тешик“ тўғрисидаги тасаввурга келган эди. Аммо бундай тасаввур аниқ маънога эга бўлмасдангина қолмасдан, балки зарра ва антизарра тушунчаси ҳақиқатда ҳар қандай спинли (фақат Паули принципі тўғри келадиган ярим бутун сонли зарраларгина эмас) зарраларга қаратилган деган маънода ҳам адекват эмас.

² Бутун сон спинли зарраларга фотонлар ҳам киради. Фотонларнинг бозонлар эканини осцилляторлар билан қиёслашдан, яъни классик чегарадаги электромагнит майдон хусусиятидан аниқланишини 77- § да кўргандик.

тининг ўрнини алмаштириш натижасида зарралар системасининг тўлқин функцияси ўзгариши у ёки бу статистиканинг критерийси бўлади: фермионлар ўрнини алмаштирилганда тўлқин функция ўз ишорасини ўзгартиради, бозонлар ўрнини алмаштирилганда эса ўзгармайди. Айтилганларга мувофиқ, ярим бутун спинли иккита зарранинг ўрнини алмаштириш $1/2$ спинли тоқ сонли фермионлар жуфтнинг бир вақтда ўрин алмаштирилишига эквивалентдир ва шунинг учун тўлқин функция ишорасини ўзгартиради. Бутун спинли иккита зарранинг ўрнини алмаштириш эса жуфт сонли фермионлар жуфтнинг ўрин алмаштирилишига эквивалентдир.

Ўтган параграфда баён этилган хулосада фойдаланилган $1/2$ спинли зарралар спецификаси зарралар зичлиги учун олинган $\Psi^*\Psi$ ифодада ҳам улар учун гамильтонианнинг мавжудлигидан иборат эди. Буларнинг иккаласи ҳам шундай зарралар тўлқин функцияларининг спинор хоссалари ва функциялар бўйсунадиган Дирак тенгламасининг хоссалари билан боғланган. Ўз навбатида бу хоссалар релятивистик инвариантлик ва фазонинг изотроплиги натижасидир (яъни Лоренц алмаштириши группаларига нисбатан симметриклик натижасидир). Шу маънода спиннинг зарралар бўйсунадиган статистика билан боғланиши ҳам бевожуба шу алмаштириш натижаси дейиш мумкин¹. Бундай боғланишнинг келиб чиқишини биринчи марта Паули (1940) аниқлаган эди.

88- §. Чин нейтрал зарралар

Тўлқин функция (85.2) ни иккиламчи квантлашда $\alpha_r^{(+)}$ ва $\alpha_r^{(-)}$ коэффициентлар турли хил зарраларнинг йўқотиш ва ҳосил бўлиш операторлари билан алмаштирилган эди. Аммо, бундай қилиш шарт эмас, хусусий ҳол сифатида $\hat{\Psi}$ га кирувчи йўқотиш ва ҳосил қилиш операторлари фақат биргина заррага мансуб

¹ Спиннинг статистика билан боғланишини спини $1/2$ бўлган қолдан ихтиёрий спинли зарраларга ҳам умумлаштириш юқорида кўрилган „таркибий“ зарралар воситасида асослаб берилган. Лекин, релятивистик инвариантлик талабларига мувофиқ тузилган ва шу зарралар майдонининг операторлари $\hat{H}$ ва $\hat{Q}$ родини ўйнайдиган ифодаларнинг математик структурасини ўрганиш йўли билан ҳам судди шундай натижага келиш мумкин.

бўлиши мумкин; бу ерда фақат „мусбат частота“ли тўлқин функциялар олдида йўқотиш операторлари ва „манфий частота“ли тўлқин функция олдида эса ҳосил қилиш операторлари туриши зарур. Бу ҳолда кўрсатилган операторларни $\hat{c}_p$ ва $\hat{c}_p^+$ билан белгилаб, Ψ -операторини қуйидагича ёзамиз:

$$\hat{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_p \{ \hat{c}_p u(p) e^{-i(st-pr)} + \hat{c}_p^+ u^*(-p) e^{i(st-pr)} \}. \quad (88.1)$$

Шундай Ψ -оператор орқали тасвирланадиган майдон „ўз антизарралари билан мос келади“ дейиш мумкин бўлган бир хил зарралар системасига мос келади.

Кўриниб турибдики, бундай зарраларнинг электр заряди ҳар қандай ҳолда ҳам нолга тенг бўлиши керак. Уларни антизарралари мавжуд бўлган электр жиҳатдан нейтрал зарралардан фарқли равишда *чин нейтрал* зарралар деб аталади.

Чин нейтрал зарралар учун майдон „заряди“ Q нинг сақланиш қонуни мавжуд эмас, чунки зарра ва антизарранинг айнийлигига $N_p \bar{N}_p$ сонларнинг айнан мос келиши жавоб беради. Демак, (86.10) катталиқ айний равишда нолга тенг. Бу тақиқнинг йўқлиги сабабли ҳақиқий нейтрал зарраларнинг ҳосил бўлиши ва аннигиляцияланиши (фотонга айланиб) якка ҳолда содир бўлиши мумкин (жуфт ҳолда бўлиши шарт эмас).

Спини 0 бўлган „элементар“ зарралар орасида π^0 -мезонлар чин нейтрал зарралардир. Чин нейтрал „таркибий“ (мураккаб) системага позитрон ва электрондан турилган водородсимон система—*позитроний* мисол бўла олади; позитронийнинг спини 0 ёки 1 га тенг бўлиши мумкин. Ярим бутун спинга эга бўлган чин нейтрал зарраларнинг табиатда мавжудлиги маълум эмас.

Ψ -операторнинг (88.1) структураси электромагнит майдон операторининг (76.15) структурасига ўхшашдир: иккала ҳолда ҳам зарраларнинг йўқотиш ва ҳосил бўлиш операторлари биргина майдон операторига киради. Шу маънода, фотонлар ҳам чин нейтрал зарралардир дейиш мумкин. Уларнинг ҳосил бўлиши ёки йўқотилиши фотонни зарядланган зарралар системаси томонидан одатдаги чиқарилиши ёки ютилишидан иборат.

Симметриянинг янги хоссаси борлиги зарранинг норелятивистик назарияда аналогии бўлмаган янги специфический характеристикасини пайдо бўлишига олиб келади. Бу ерда гап заряд қўшмалиги деб аталадиган алмаштириш—зарра ва антизарранинг ўзаро алмашиши ҳақида бормоқда. Бу алмаштиришнинг операторини $\hat{C}$ ҳарфи билан белгиланади. Агар зарра (ёки зарралар системаси) чин нейтрал бўлмаса, у ҳолда заряд қўшмалиги уни бошқа физикавий система билан алмаштиришни билдиради, масалан, электронлар системаси позитронлар системаси билан алмаштирилади; бу ердан зарранинг бошқа ҳеч қандай янги характеристикаси келиб чиқмайди. Агар зарра чин нейтрал бўлса, у ҳолда заряд қўшмалиги уни ўзгаришсиз қолдиради. Шу сабабли бундай алмаштиришда системанинг тўлқин

функцияси ва у билан бирга $\hat{C}$ операторнинг хусусий қийматлари ҳақида гапириш мумкин. Заряд қўшмалигини икки марта такрорлаш айний алмаштириш бўлади:

$\hat{C}^2 = 1$. Шундай хоссали ҳар қандай операторлардаги каби унинг ҳам хусусий қиймати $C = \pm 1$; бу қийматлар *заряд жуфтлиги* деб аталади. Агар система маълум заряд жуфтлигига эга бўлса, у ҳолда бу заряд қўшмалигида унинг тўлқин функциялари ўзгармасдан қолиши ёки ишораси ўзгаришини билдиради (биринчи ҳолда гап заряд жуфтлиги ва иккинчи ҳолда—заряд тоқлиги системаси ҳақида бормоқда).

Мисол тариқасида юқорида эслатиб ўтилган позитронийнинг заряд жуфтлигини аниқлаймиз. Системанинг заряд симметриясини баён этишда зарра ва антизаррани (мазкур ҳолда электрон ва позитронни) ягона биттагина зарранинг „заряд квант сонларининг“ қиймати $Q = \pm 1$ билан фарқ қилувчи иккита ҳар хил „заряд ҳолатлари“ деб қараш керак. Системанинг тўлқин функциясини орбитал (яъни зарралар координаталарига боғлиқ), спин ва „заряд“ кўпайтувчилар кўпайтмаси кўринишида ифодалаймиз: $\Psi = \Psi_{\text{орб}} \cdot \Psi_{\text{спин}} \cdot \Psi_{\text{зар}}$.

Бу ҳолда заряд қўшмалиги иккالا зарранинг ўрин алмаштиришига эквивалентдир. Ўз навбатида, икки зарра координаталарининг ўрнини алмаштириш инверсияга (зарралар орасидаги масофани тенг иккига бўладиган нуқтага нисбатан) эквивалент. Бу ҳолда $\Psi_{\text{орб}}$

катталиқ $(-1)^l$ га кўпайтирилади, бу ерда l —позитронийнинг орбитал моменти ((19. 5) га қаранг). Агар зарраларнинг спинлари параллел (тўла спин $S=1$) бўлса, спин функция уларнинг ўрин алмаштиришига нисбатан симметрик ва агар спинлари антипараллел ($S=0$) бўлса, функция антисимметрик бўлади (46- § га қаранг); шундай қилиб $\Psi_{\text{спин}}$ катталиқ $(-1)^{S+1}$ га кўпайтирилади ва ниҳоят, $\Psi_{\text{зар}}$ изланаётган C га кўпайтирилади.

Бошқа томондан, иккита фермионнинг ўрин алмашинишидан тўла Ψ тўлқин функциянинг ишораси ўзгаради. Бошқача қилиб айтганда $(-1)^l \cdot (-1)^{S+1} C = -1$ бўлиши керак, бундан

$$C = (-1)^{l+S}. \quad (88.2)$$

Спини $S=0$ бўлган сатҳларни *парапозитроний* сатҳлари ва спини $S=1$ бўлган сатҳларни *ортопозитроний* сатҳлари дейилади. Асосий ҳолатда орбитал момент $l=0$, шунинг учун парапозитронийнинг асосий ҳолати заряд жиҳатдан жуфт ($C=1$) ва ортопозитронийнинг асосий ҳолати заряди жиҳатдан тоқ ($C=-1$) бўлади.

Позитроний турғун эмас, уни ташкил этувчи электрон ва позитрон оқибатда бир-бири билан аннигиляцияланади. Позитронийнинг заряд жуфтлиги бундай аннигиляциянинг мумкин бўлган усуллари маълум даражада чеклайди.

Фотоннинг заряд жиҳатдан тоқ зарра эканлигини қуйида кўрамиз (юқоридаги эслатмага қаранг). Шунинг учун, масалан, позитронийнинг асосий ҳолатида иккита фотон лайдо бўладиган аннигиляцияга имконият бор (иккита фотон системасининг заряд жуфтлиги $C = (-1)(-1)=1$). Аксинча, ортопозитронийнинг асосий ҳолатида ($C=-1$) иккита фотонга емирилишга имкон йўқ, позитроний эса учта фотон ҳосил қилиб аннигиляцияланади¹.

Юқорида эслатиб ўтилган зарра — π^0 - мезон ҳам турғун эмас ва у иккита фотонга емирилади. Демак, у заряд жиҳатдан жуфт; шу сабабли унинг тоқ сонли фотонларга емирилиши тақиқланган².

¹ Парапозитронийнинг яшаш вақти (яъни унинг емирилиш эҳтимоллигига тескари бўлган катталиқ) $1,2 \cdot 10^{-10}$ сек ни ташкил этади. Кўп сондаги фотонларга емирилиш эҳтимоллигининг камлиги сабабли ортопозитронийнинг яшаш вақти анча катта ($1,4 \cdot 10^{-7}$ сек).

² Бу муҳокамаларда системанинг заряд жуфтлиги сақланади деб тушунилади. Бу масалага 90- § да қайтамиз.

89- §. Зарраларнинг ички жуфтлиги

Биз норелятивистик квант назариясини баён қилишда фазовий координаталар инверсиясига нисбатан симметриянинг қандай йўл билан зарра ҳолатининг янги характеристикаси — унинг жуфтлигига олиб келишини кўрдик. Релятивистик назария бу тушунчага янги аспект киритади.

Аввало спини 0 бўлган, скаляр тўлқин функциялар орқали тасвирланадиган зарралар ҳақида гапирамиз.

Лекин скалярлар икки турли бўлиши мумкин ва улар орасидаги фарқ уларнинг инверсиядаги ҳолига боғлиқ. Инверсия функция аргументларидаги координаталар ишорасини ўзгартиради ва бундан ташқари умумий ишорани ўзгартириши ёки ўзгартирмаслиги мумкин:

$$\hat{P}\Psi(t, \mathbf{r}) = \pm \Psi(t, -\mathbf{r}); \quad (89.1)$$

ўнг томондаги $+$ ёки $-$ ишора мос равишда ҳақиқий скаляр ёки псевдоскалярга тўғри келади.

Кўришиб турибдики, инверсия натижасида тўлқин функциянинг табиатида иккита аспекти фарқ қилиш лозим. Уларнинг бири тўлқин функциянинг координатага боғлиқлигига алоқадор. Норелятивистик квант механикасида фақат шу аспект кўрилган эди — у зарралар ҳаракати симметриясининг хоссаларини характерлайдиган ҳолат жуфтлиги тушунчасига олиб келади (энди биз уни *орбитал жуфтлик* деб атаймиз). Агар ҳолат аниқ орбитал жуфтлик $+1$ ёки -1 га эга бўлса, у ҳолда

$$\Psi(t, -\mathbf{r}) = \pm \Psi(t, \mathbf{r}).$$

Бошқа аспект — координата ўқларининг инверсиясида тўлқин функциянинг фазонинг берилган нуқтасидаги (уни координата боши сифатида тасаввур қилиш қулай) табиати зарранинг *ички жуфтлиги* тушунчасига олиб келади. $+1$ ёки -1 ички жуфтликка (спини 0 бўлган зарралар учун) (89.1) ифодадаги икки ишора тўғри келади. Зарралар системасининг тўла жуфтлиги уларнинг ички жуфтликлари ва нисбий ҳаракатларининг орбитал жуфтликлари кўпайтмаси орқали берилади.

Турли зарралар симметриясининг „ички“ хоссалари фақат уларнинг ўзаро ўзгариш процессларидагина кў-

ринади. Норелятивистик квант механикасидаги мураккаб системанинг (масалан, ядронинг) боғланган ҳолатининг жуфтлиги ички жуфтликнинг аналогиси бўлади.

Таркибий мураккаб ва элементар зарралар орасида принципиал фарқ қилмайдиган релятивистик назария нуқтаи назаридан бундай ички жуфтлик норелятивистик назарияда элементар ҳисобланган зарраларнинг ички жуфтлигидан фарқ қилмайди. Ўзларини ўзгармас ҳолда тутадиган норелятивистик соҳада зарралар симметриясининг ички хоссаларини кузатиш мумкин эмас. Шунинг учун уларни қараб чиқиш физикавий маънога эга бўлмайди.

Ички жуфтлик тушунчасини зарраларнинг тинч ҳолдаги системасида таърифлаш табиий. Бу системада тўлқин функция координатага боғлиқ бўлган катталikka келтирилади ((85. 1) функциялардаги u тўлқин амплитудаси). Спини 0 бўлган зарралар учун бу катталики — скаляр ёки псевдоскаляр бўлиши мумкин. Уларни инверсияда алмаштириш фақат $+1$ ёки -1 га кўпайтиришга келтирилади.

Спини $1/2$ бўлган зарра учун тўлқин функция зарра тинч ҳолдаги системада битта уч ўлчовли спинорга келтирилади (82- § нинг охирига қ.). Зарранинг ички жуфтлиги ҳақидаги тушунча шу спинорнинг инверсиядаги ҳолига боғлиқ. Лекин 81- § да кўрсатилганича, уч ўлчовли спинорлар мумкин бўлган иккита алмаштириш қонунига ((81. 2) да икки ишора) эга ва бири-бирига эквивалент эмас, лекин спинорга маълум жуфтлик бериш абсолют маънога эга эмас. Шунинг учун спини $1/2$ бўлган зарранинг ички жуфтлиги ҳақида гапиришнинг ҳам маъноси йўқ. Лекин, фақат иккита шу хилдаги зарранинг нисбий ички жуфтлиги ҳақида гапириш мумкин.

Шу нуқтаи назардан зарра ва антизарранинг нисбий ички жуфтлиги масаласини кўриб чиқамиз. Спини 0 бўлган зарралар учун бу масала тривиалдир: бундай зарра ва антизарралар битта (скаляр ёки псевдоскаляр) тўлқин функция билан ифодаланади ва шу сабабли уларнинг ички жуфтлиги бир хил.

Спини $1/2$ бўлган заррани (масалан, электронни) ифодалайдиган $\Psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$ биспинорни ташкил этувчи иккита

$\xi = \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix}$ ва $\eta = \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix}$ спинор зарра тинч ҳолдаги систе-

мада биргина уч ўлчовли спинорга келтирилади, уни $\Phi^{(3)} = \begin{pmatrix} \Phi^1 \\ \Phi^2 \end{pmatrix}$ орқали белгилаймиз:

$$\xi = \eta = \Phi^{(3)}. \quad (89.2)$$

(81. 3) га мувофиқ аниқланган инверсия операцияси ξ ни η га алмаштиради; (89. 2) дан кўринадики, бу таърифга уч ўлчовли $\Phi^{(3)}$ спинорни

$$\hat{P} \Phi^{(3)} = \Phi^{(3)} \quad (89.3)$$

ифодага мувофиқ алмаштириш мос келади.

Позитрон учун эса, Дирак тенгламасида 4- импульс p^μ ишорасини ўзгартишдан пайдо бўладиган „манфий частота“ли тўлқин функциялар тўғри келади ($\hat{b}_p$, $\hat{b}_p^+$ позитрон операторлари и $(-p)$ амплитудали тўлқин функциялар олдидаги коэффицентлар сифатида Ψ - операторлар (85.3) га киришини эслатиб ўтамиз). Электрон тинч ҳолда бўлган система учун (89.2) тенглик $p=0$ ва $\epsilon=m$ ҳол учун Дирак тенгламаси (82.4) дан келиб чиқади. Агар шу тенгламаларда (ϵ, p) ни $(-\epsilon, -p)$ га алмаштирсак ва кейин $p=0$, $\epsilon=m$ десак, у ҳолда

$$\xi = -\eta \equiv \Phi^{(1)}. \quad (89.4)$$

ξ ни η га алмаштирадиган инверсия операцияси энди уч ўлчовли $\Phi^{(1)}$ спинор учун ишораси (89.3) дагига қарама-қарши бўлган

$$\hat{P} \Phi^{(1)} = -\Phi^{(1)} \quad (89.5)$$

алмаштиришни билдиради. Шу сабабдан $\Phi^{(3)}$ ва $\Phi^{(1)}$ компонентлари кўпайтмасидан тузилган скаляр инверсияда ишорасини ўзгартиради. Шундай қилиб, биз спини 1/2 бўлган зарра ва антизарранинг ички жуфтлиги ўзаро қарама-қаршидир деган хулосага келамиз (В. Б. Берестецкий, 1948).

10- §. CPT- теорема

Физикавий ҳодисалар симметриясининг фазо-вақт оқсалари уларни тавсифлайдиган тенгламаларнинг тўрт ўлчовли координаталар системасининг қандайдир алмаштиришларга нисбатан инвариантлиги орқали ифодаланади.

Релятивистик инвариантлик — Лоренц группаларини алмаштиришга нисбатан инвариантлик¹ табиий универсал қонундир. 80- § да тушунтириб ўтилганидек, оддий уч ўлчовли айланишлар ҳам, Лоренц алмаштиришлари — вақт ўқининг йўналишини ўзгартирадиган тўрт ўлчовли координата системасининг бурилишлари ҳам улар қаторига киради.

Булар қаторида яна ҳеч қандай бурилишларга келтирилмайдиган бошқа алмаштиришлар ҳам мавжуд: фазовий инверсия — учала фазовий ўқларнинг йўналишини тескарига ўзгартириш ва вақтнинг ўгирилиши — вақт ўқи йўналишини тескарига ўзгартириш. Фазовий инверсияга нисбатан инвариантлик (P -инвариантлик) фазонинг кўзгу симметриясини ифодалайди. Вақтнинг ўгирилишига нисбатан инвариантлик (T -инвариантлик) эса вақтнинг иккала йўналишларининг эквивалентлилигини ифодалайди. Нерелятивистик назария таърифлайдиган ҳодисалар доирасида бу иккала қонунга амал қилинади.

Релятивистик соҳага доир ҳодисаларда эса фазовий инверсияга нисбатан симметрия (ва у билан боғлиқ бўлган фазовий жуфтликнинг сақланиш қонуни) ўзининг универсаллигини йўқотади. Мавжуд тажриба натижалари электромагнит ўзаро таъсир ва кучли ўзаро таъсирларда (ядро кучлари) симметриянинг сақланишини кўрсатади. Симметрия кучсиз ўзаро таъсир деб аталадиган ўзаро таъсирларда (кўпчилик ҳолда суст юз берадиган элементар зарраларнинг емирилишига, масалан, β -емирилишга олиб келадиغان ўзаро таъсир) сақланмаслиги мумкин².

Заряд қўшмалиги (C -инвариантлик) нинг алмаштирилиши орқали ифодаланадиган зарра ва антизарралар орасидаги симметрия ҳам кучсиз ўзаро таъсирда сақланмайди. Электромагнит ва кучли ўзаро таъсирларда бу симметриянинг бузилишини тасдиқлайдиган ҳеч қандай тажриба маълумотлари мавжуд эмас.

У ёки бу ўзаро таъсир жараёнларида фазовий инверсияга нисбатан симметриянинг бузилиши ўз-ўзидан

¹ Англашилмовчилик бўлмаслиги учун бу ерда гап гравитацион майдонларга боғланмаган ҳодисалар ҳақида бораётганини таъкидлаб ўтамиз.

² Кучсиз ўзаро таъсирларда жуфтликнинг сақланмаслиги мумкинлиги ҳақидаги фикрни биринчи бўлиб 1956 йилда Цзян-дау Ли ва Чжинь-нин Янг айтган эди.

фазонинг кўзгу симметриясини билдирмаслиги мумкин. Агар инверсия ва заряд қўшмалигидан (*PC*- алмаштириш ёки *комбинацияланган инверсия*) иборат алмаштиришга нисбатан инвариантлик табиатнинг универсал қонуни бўлганда эди, фазо симметрияси „қутқарилган“ бўлар эди¹. Бу алмаштиришда фазовий инверсия билан бир вақтда зарраларни антизарралар билан алмаштириш юз беради. *CP*- инвариантлик сақланганда, зарра ва антизарралар билан юз берадиган жараёнлар бири-биридан фазодаги инверсияси билан фарқ қилар эди. Бундай концепсияда фазо тўла симметрик бўлиб қолади, зарядланган зарралар эса ассиметрик бўлади.

Аммо тажриба бу тасаввурларни тўла тасдиқламайди. Кўпчилик кучсиз ўзаро таъсир жараёнлари ҳақиқатан ҳам *CP*- инвариантдир, лекин бу инвариантликни бузадиган ҳодисалар ҳам мавжуд.

Бу бузилишларнинг келажак назарияда қандай ўрин олиши ҳозирги вақтда аниқ эмас.

Шундай қилиб *C*, *P* (ҳамда *T*) алмаштиришларнинг ҳар бирига нисбатан симметриянинг алоҳида талаби табиий универсал қонун эмас. Уларнинг универсаллиги тажрибада тасдиқланмасдангина қолмасдан, балки мавжуд назария асосий принципларининг мантиқан муҳим хулосаси ҳам бўла олмайди. Бу учала алмаштиришни биргаликда қўллашга нисбатан инвариантлик эса шу принципларнинг хулосаси бўлади. Бу симметрия релятивистик инвариантликнинг табиий хулосаси сифатида юзага келишини кўрсатамиз.

Бундан кейинги муҳокамаларни яхшироқ тушуниш учун дастлаб уч ўлчовли фазонинг алмаштиришларига тааллуқли айрим тушунчаларни эслатиб ўтамиз.

Координаталарнинг *x*, *y*, *z* ўқларидан бири йўналишининг ўгирилиши бирор текисликдаги кўзгули аксланиш бўлади; масалан, $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow y$, $z \rightarrow z$ алмаштириш *yz* текисликка акслантириш бўлади. Бу алмаштиришни координаталар системасининг ҳеч қандай бурилишига келтириб бўлмайди. Аксинча, иккита ўқ йўналишининг ўгирилиши тайин бир бурилишга эквивалентдир; масалан, $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow z$ алмаштириш *z* ўқи атрофида 180° га буришни англатади. Ниҳоят учала ўқни ўгириш (координаталар системасининг инверсияси) бурилишларга келтириб бўлмайдиган

¹ Бу ғояни *Л. Д. Ландау* (1957) илгари сурган.

алмаштиришдир; текисликда инверсия ва акслантириш ўзаро фақат ўқларнинг бир оз бурилиши билан фарқ қиладилар, деган маънода бир-бирига келтирилиши мумкин¹.

Худди шундай ҳол тўрт ўлчовли фазо-вақт координаталар системасида ҳам мавжуд. Аммо бу ерда битта, иккита ёки учта ўқ йўналишининг ўзгаришига қўшимча равишда бир вақтда тўрттала ўқ ўгирилиши мумкин (*тўрт ўлчовли инверсия*). Математика нуқтаи назаридан бу алмаштириш 4- координаталар системасининг бурилишидир. Дарҳақиқат, 4- инверсия билан Лоренц группасини ташкил қилувчи бурилишлар орасида тўрт ўлчовли фазо-вақт геометриясининг псевдо-скалярлиги билан боғланган специфик фарқ мавжуд. Шу хосса туфайли саноқ системасининг ҳеч қандай физикавий алмаштирилиши (Лоренц алмаштирилиши) вақт ўқини ёруғлик конусининг ички бўшлиғидан ташқарига чиқара олмайди (ёруғлик конуси тушунчаси I том, 34- § да киритилган эди); бу фикр физика нуқтаи назаридан иккита саноқ системасининг нисбий ҳаракат тезлиги ёруғлик тезлигидан катта бўлишига имкон йўқлигини ифодалайди. Шу билан бирга, 4- инверсияда вақт ўқи (аниқроғи унинг икки ярим ўқларининг ҳар бири) ёруғлик конусининг бир бўшлиғидан иккинчисига ўтказилади.

Бу ҳол 4- инверсияни физикавий саноқ системасининг алмаштирилиши сифатида физика нуқтаи назаридан амалга оширишнинг мумкин эмаслигини билдирса ҳам, лекин у ёки бу тенгламаларнинг математик инвариант-лиги ҳақида гапирилганда бошқа тўрт ўлчовли бурилишларга (Лоренц алмаштиришлари) нисбатан бу фарқни аҳамиятсиз деб ҳисоблаш табиийдир. Шундай қилиб, биз табиатдаги ҳар қандай релятивистик инвариант қонун 4- инверсияга нисбатан ҳам инвариант бўлиши керак деган ҳулосага келамиз. Бу фикр зарралар майдонининг квант назарияси нуқтаи назаридан нимани англатишини аниқлаб олишимиз керак. Буни спини 0 бўлган зарралар майдони мисолида кўриб чиқамиз.

¹ Математикада $x'_i = \sum a_{ik} x_k$ (бу ерда $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$) координаталарнинг чизикли алмашишларининг икки тури орасидаги фарқ уларнинг коэффициентларидан тузилган детерминантнинг қиймати орқали кўринади. Координаталар системасининг ҳар қандай бурилиши учун детерминант $|a_{ik}| = 1$. Келтирилмайдиган аксланиш бурилишлари учун эса $|a_{ik}| = -1$.

Бу ҳолда (85.3) Ψ -операторларида $u(p)$ тўлқин амплитудалар скаляр бўлиб, скаляр катталиқ каби уларнинг аргументи — 4-импульс p^μ нинг ишорасига боғлиқ эмас. Шунинг учун уларни қавсдан ташқарига чиқариб, содда қилиб ёзиш мумкин:

$$\Psi(t, r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_p u \left\{ \hat{a}_p e^{-i(st - pr)} + \hat{b}_p^+ e^{i(st - pr)} \right\}. \quad (90.1)$$

4-инверсияда t ва r лар — t ва $-r$ га алмаштирилади, у ҳолда юқоридаги ифода бошқа кўринишда ёзилади:

$$\Psi(-t, -r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_p u \left\{ \hat{a}_p e^{i(st - pr)} + \hat{b}_p^+ e^{-i(st - pr)} \right\}. \quad (90.2)$$

Лекин иккиламчи квантлаш аппаратида (90.1) дан (90.2) га ўтиш ҳосил бўлиш ва йўқотиш операторларининг маълум алмаштиришлари терминларида ифодаланган бўлиши керак. (90.1) ва (90.2) ни таққослашдан кўринадики, бу алмаштириш $\hat{a}_p$ ва $\hat{b}_p^+$ операторнинг ўринларини ўзаро алмаштиришдан ёки унга тенг равишда

$$\hat{a}_p \rightarrow \hat{b}_p^+, \quad \hat{b}_p \rightarrow \hat{a}_p^+ \quad (90.3)$$

алмаштиришлардан иборат. Бу (90.3) алмаштиришнинг маъноси равшан. Инверсия p импульс векторининг ишорасини ўзгартиради, лекин унинг ишорасини вақтнинг айланиши ҳам ўзгартиради (зарра тезлигининг йўналиши тескарига ўзгаради). Шунинг учун P ва T алмаштиришларининг биргаликда таъсири зарра импульсини ўзгартирмайди ва унга мувофиқ равишда бир хил p га эга бўлган ҳолатларга тааллуқли операторлар бири-бири орқали алмашинади. Вақтнинг айланиши келажакни ўтмиш билан алмаштириб, зарраларнинг ҳосил бўлишини уларнинг йўқотилишига айлантиради — бунга мувофиқ ҳолда зарраларнинг ҳосил бўлиш ва йўқотилиш операторлари ўзаро алмаштирилади. Аммо, биз (90.3) да a -операторлар ва b -операторлар ўзаро алмашинишини кўрамиз, бу эса зарра ва антизарралар-

нинг ўзаро алмашишлари ҳам шу формулага киришини англатади.

Шундай қилиб, релятивистик назарияда фазовий инверсия ва вақтнинг айланиши билан бир вақтда заряд жиҳатдан қўшмалик ҳам амалга ошириладиган алмаштиришга нисбатан инвариантлик талаби табиий равишда келиб чиқади; буни *CPT-теорема* деб аталади¹.

Яна шуни қайд қилиб ўтамизки, бу теоремага мувофиқ, бирор ҳодисада *CP*-инвариантликнинг бузилиши автоматик равишда *T*-инвариантликнинг ҳам бузилишини англатади.

91- §. Нейтрино

Дирак тенгламаси инверсияга нисбатан инвариантдир. Бу инвариантлик биспинорли тўлқин функция таркибида инверсияда бир-бирига ўтадиган иккала спинорнинг бўлиши билан таъминланади. Ўз навбатида, заррани ифодалашда иккита спинорни киритиш зарурати зарранинг массасига боғлиқ: (82.2) ва (82.6) дан кўринишича, тўлқин тенгламада бу спинорларнинг ўзаро „уланиши“ фақат *m* катталиқ орқали амалга оширилади.

Агар зарранинг массаси нолга тенг бўлса, бундай зарурат йўқолади. Спини 1/2 бўлган бундай зарра *нейтринодир*. Бундай заррани тасвирлайдиган тўлқин тенгламани фақат биттагина 4-спинор ёрдамида, айтийлик,

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix}$$

пунктирсиз спинор ёрдамида тузиш мумкин.

У қуйидаги кўринишга эга:

$$(\hat{p}_0 - \hat{p}\sigma)\xi = 0 \quad (91.1)$$

((82.6) тенгламаларнинг $m=0$ бўлган биринчи тенгламаси). Ясси тўлқин учун ($\mathbf{p}$ импульсли ва ϵ энергияли зарра) (91.1) тенглама

$$(\epsilon - \mathbf{p}\sigma)\xi = 0$$

алгебраик системага келтирилади. Аммо массаси нолга тенг бўлган зарранинг энергияси импульс билан $\epsilon = |\mathbf{p}|$

¹ Бу теорема 1955 йилда Г. Людвигс, В. Паули ва Ю. Швингерлар томонидан таърифланган эди.

тенглик орқали боғланган. Ҳаракат йўналишига бирлик $\mathbf{n}$ векторини киритиб қуйидагини оламиз:

$$(\mathbf{n}\sigma)\xi = \xi. \quad (91.2)$$

Бу тенглик оддий маънога эга. Икки компоненти тўлқин функция учун $\hat{\mathbf{s}} = 1/2\sigma$ матрица зарра спинининг оператори эканини эслайлик (40- §). Демак, $1/2\mathbf{n}\sigma$ кўпайтма зарра спираллигининг оператори λ (спиннинг импульс йўналишига проекцияси) бўлади. Шунинг учун (91. 2) тенглик зарра аниқ $\lambda = +1/2$ (спин ҳаракат йўналиши бўйича йўналган) спиралликка эга эканлигини билдиради.

Шундай қилиб, биз фақат биттагина (пунктирсиз) спинор орқали ифодаланадиган зарра ҳамма вақт аниқ $\lambda = +1/2$ спиралликка эга бўлиши керак, деган хулосага келамиз. Худди шундай йўл билан пунктир спинор

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta^1 \\ \eta^2 \end{pmatrix}$$

билан ифодаланадиган зарра учун (91.2) тенглама ўрнига

$$(\mathbf{n}\sigma)\eta = -\eta \quad (91.3)$$

тенглама олинади, яъни бундай зарра ҳамма вақт $\lambda = -1/2$ спиралликка эга — унинг спини импульсга қарама-қарши йўналган. Иккала ҳолда ҳам зарранинг бўйлама қутбланишга эга бўлиши шартлигини айтиш мумкин.

Зарра ва антизарра қарама-қарши спиралликка эга бўлишлари кераклигини осонгина тушуниш мумкин. Ҳақиқатан, уларнинг бири ξ спинор орқали тасвирланса, иккинчиси эса комплекс қўшма ξ^* спинорлар орқали тасвирланиши керак — бу (85.3) Ψ -операторлар кўринишидан маълумдир. Бу операторларга зарралар ва антизарраларнинг йўқотиш операторлари $\hat{a}_p$ ва $\hat{b}_p$ комплекс қўшма функцияларга кўпайтирилган ҳолда киради. Лекин спинор (пунктирсиз ξ спинорга қўшма) пунктирли спинорга эквивалент — бу эса айтиб ўтилган фикрларни тасдиқлайди.

Спираллиги — $1/2$ бўлган заррани, нейтрино деб, спираллиги $1/2$ бўлган заррани эса антинейтрино деб аташ қабул қилинган¹.

Инверсия спираллик ишорасини ўзгартиради. Ҳақиқатан, спиннинг ҳаракат йўналишидаги проекцияси зарра моменти ва импульси векторларини скаляр кўпайтириш натижасида олинади; уларнинг бири аксиал вектор бўлиб, инверсияда ўзгармайди, иккинчиси (қутбий вектор) эса ишорасини ўзгартиради. Бундан нейтринонинг инверсияга нисбатан симметриясизлиги аниқ кўринади: инверсия нейтринони табиатда мавжуд бўлмаган зарра — бошқа ишорали спиралликка эга бўлган нейтринога „айлантиради“. Симметрия фақат комбинацияланган инверсияга — нейтринони антинейтринога алмаштириш билан биргаликда бўладиган инверсияга нисбатан сақланади. Шунинг учун нейтрино иштирокида бўладиган жараёнларда кўзгули симметриянинг бузилиши табиийдир (масалан, нейтроннинг β -емирилиш натижасида протон, электрон ва антинейтринога айланиш жараёнида: $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}$).

¹ Нейтринонинг (электр жиҳатдан нейтрал, массасиз ва спини $1/2$ бўлган зарралар) мавжудлиги назарий равишда Паули томонидан 1931 йилда β -емирилиш хоссаларини тушунтириш учун баён қилинган эди. Икки компоненти 4-спинор ёрдамида тасвирландиган нейтрино назарияси 1957 йилда *Л. Д. Ландау, А. Салам, Ли ва Янг* томонидан таърифланган эди.

XIV боб

ТАШҚИ МАЙДОНДАГИ ЭЛЕКТРОН

92- §. Ташқи майдондаги электрон учун Дирак тенгламаси

Эркин зарраларнинг тўлқин функциялари ўз моҳиятига кўра фақат фазо-вақт симметриясининг умумий талабларига боғлиқ бўлган хоссаларнигина ифодалайди. Зарралар билан ўтаётган физикавий процесслар эса уларнинг ўзаро таъсир хоссаларига боғлиқ.

Релятивистик назарияда кучли ўзаро таъсирга қодир бўлган зарраларнинг тўлқин тенгламаларни қандайдир оддий умумлаштиришга асосланган баёни (эркин зарралар тенгламаларидан келиб чиқадиган маълумотлар доирасидан ташқарига чиқувчи баён) бўлиши мумкин эмас экан.

Лекин тўлқин тенгламалар методи кучли ўзаро таъсирга қодир бўлмаган зарраларнинг электромагнит ўзаро таъсирини ифодалаш учун қўлланилади. Бунга электронлар (ва позитронлар) киради ва шундай қилиб, мазкур назария электронлар квант электродинамикасининг улкан соҳаси учун қўл келади¹.

Бу бобда биз бир зарра назарияси доирасидаги квант электродинамикасининг баъзи масалаларини кўриб ўтамиз. Бу шундай масалаки, унда зарралар сони ўзгармайди, ўзаро таъсир эса процесс давомида ҳолати ўзгармас қоладиган манбалар ҳосил қиладиган ташқи электромагнит майдон терминларида ифодаланиши мумкин.

¹ Беқарор зарралар — μ -мезонлар ҳам кучли ўзаро таъсирга одир эмас; улар электрон каби $1/2$ спинга эга ва ўзларининг яшаш ақтиларига (кучсиз ўзаро таъсирга боғлиқ) нисбатан кичик вақтларда ўтувчи ҳодисалар соҳасидаги квант электродинамикаси орали ифодаланади.

Берилган ташқи майдондаги электрон учун тўлқин тенгламани норелятивистик назарияда (43-§) қилингани каби олиш мумкин. Айтайлик, Φ — майдоннинг скаляр потенциали, $\mathbf{A}$ эса вектор потенциали бўлсин. (83.9)

Дирак тенгламасининг гамильтонианида $\hat{\mathbf{p}} = -i\boldsymbol{\nabla}$ импульс операторини $\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$ айирмага алмаштириб ва шунингдек, гамильтонианга зарранинг $e\Phi^2$ потенциал энергиясини киритиб, изланаётган тенгламани оламиз:

$$\hat{H} = \alpha(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) + \beta m + e\Phi. \quad (92.1)$$

Барча зарурий ўзгартиришлар шу билан ҳал қилинади; бу ерда ҳеч қандай сунъий киритиладиган қўшимча ҳадлар (худди (43.4) да киритилганидек) талаб этилмайди: қуйида биз электроннинг магнит моменти бу ерда ўз-ўзидан пайдо бўлишини кўрамиз.

(83.9) дан (92.1) га ўтиш тўрт ўлчовли ёзувда 4- импульс $\hat{p}_\mu = i\partial/\partial x^\mu$ ни

$$\hat{p}_\mu \rightarrow \hat{p}_\mu - eA_\mu \quad (92.2)$$

га кўра алмаштиришни билдиради, бу ерда $A^\mu = (\Phi, \mathbf{A})$, $A_\mu = (\Phi, -\mathbf{A})$ майдоннинг 4- потенциали. Шунга кўра майдондаги зарра учун Дирак тенгламасини

$$[\gamma^\mu (\hat{p}_\mu - eA_\mu) - m] \Psi = 0 \quad (92.3)$$

кўринишда ҳам ёзиш мумкин. (92. 3) ифода (83.3) дан (92.2) асосида олинади.

Тўлқин функция орқали ифодаланган ток зичлиги, ташқи майдон бўлмаган ҳолдаги ўша (84.7) формула билан берилади. (84.7) ни чиқаришда амалга оширилган ҳисоблашни (92.3) тенгламада қайтарилса, 4- потенциал A_μ нинг тушиб қолишини ва аввалги ток ифодаси учун узлуксизлик тенгламаси олинишини кўриш осон.

1

¹ e ҳарфи билан заряд (ўз ишораси билан) белгиланади, масалан, электрон учун $e = -|e|$, позитрон учун $e = +|e|$.

93- §. Электроннинг магнит моменти¹

43- § да спинли зарранинг ташқи магнит майдондаги ҳаракати учун норелятивистик гамильтониан кўриниши аниқланган эди. Лекин бу ифодага зарранинг магнит моменти эмпирик параметр (унинг катталиги назарий ҳисобланиши мумкин эмас эди) ҳолида кирган эди. Электромагнит майдондаги хатти-ҳаракати (92.3) Дирак тенгламасига бўйсунувчи зарра учун (айтайлик, электрон учун) магнит момент қиймати шу тенгламанинг ўзи орқали топилади.

Шу мақсадни назарда тутиб, Дирак тенгламасини (43.4) норелятивистик гамильтонианга мос келувчи тақрибий кўринишга қандай қилиб келтириш мумкинлигини кўрсатамиз. $v \ll c$ тезликлардаги зарра ҳаракати тўғрисида гапирилаётганлиги учун компонентининг бир жуфти бошқасига қараганда $\chi \ll \varphi$ бўлган Ψ биспинор функциянинг стандарт кўринишини асос қилиб олиш табиийдир (83- § охирига қаранг).

83- § да тўлқин функция стандарт кўринишда бўлган Дирак тенгламаси эркин зарра учун ёзилган эди — (83.11). Бу тенгламаларга ташқи электромагнит майдон киритиш операторларни (92.2) га мувофиқ алмаштириш йўли билан амалга оширилади; шундай қилиб, қуйидигиларни оламиз:

$$\begin{aligned} (\hat{p}_0 - e\Phi) \varphi - \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi &= mc\varphi, \\ - (\hat{p}_0 - e\Phi) \chi + \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi &= mc\chi, \end{aligned} \quad (93.1)$$

бу ерда

$$\hat{p}_0 = \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla.$$

Лекин норелятивистик яқинлашишга ўтиш учун тўлқин функциясида яна маълум алмаштириш ўтказиш зарур. Гап шундаки, зарра энергиясининг релятивистик ифодасида (у билан бирга релятивистик гамильтонианда) ортиқча (норелятивистик ифодага қараганда) ҳад — гинч ҳолатдаги энергия mc^2 бор. Бу ҳол вақт иштирок этган тўлқин функцияда ортиқча кўпайтувчи $\exp(-imc^2 t/\hbar)$ нинг пайдо бўлишига олиб келади. Шу

¹ Мазкур параграфда ва кейингиларида одатдаги бирликлардан фойдаланамиз.

қўпайтувчини йўқотиш учун Ψ ўрнига янги Ψ' тўлқин функция киритамиз:

$$\Psi = \Psi' e^{-imc^2 t/\hbar}. \quad (93.2)$$

(93. 2) ни (93. 1) га қўйиб, тўрт компонентали Ψ' ни ташкил этувчи икки компонентали φ' ва χ' катталиклар учун қуйидаги тенгламаларни оламиз:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \varphi' = c\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi', \quad (93.3)$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi + 2mc^2 \right) \chi' = c\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi' \quad (93.4)$$

(кейинчалик биз φ' ва χ' лардаги штрих белгисини тушириб қолдирамиз; бунда тушунмовчилик юзага келмайди, чунки бу параграфда биз фақат алмаштирилган янги Ψ' функциядан фойдаланамиз).

Биринчи яқинлашишда (93. 4) тенгламанинг чап томонидаги қавсда фақат энг катта ҳад $-2mc^2$ ни қолдирамиз. У ҳолда бу тенглама χ ни тўғридан-тўғри φ орқали ифодалашга имкон беради:

$$\chi = \frac{1}{2mc} \sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi. \quad (93.5)$$

Тенгликнинг ўнг томонидаги $1/c$ қўпайтувчи χ нинг φ га қараганда кичиклигини кўрсатади. Энди (93. 5) ни (93. 3) га қўйиб, фақат φ қатнашган тенгламани оламиз:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\Phi \right) \varphi = \frac{1}{2m} \left(\sigma \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 \varphi.$$

Бу тенгламанинг ўнг томонидаги ифодани очиб чиқамиз. Бунда (82. 5) таърифдан бевосита келиб чиқувчи Паули матрицаларининг қуйидаги хоссаларидан фойдаланамиз:

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 &= 1. \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y, \\ \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z. \end{aligned} \quad (93.6)$$

Вақтинча $\hat{\mathbf{f}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ ҳолда белгилаб,

$$\begin{aligned} (\sigma \hat{\mathbf{f}})^2 &= (\sigma_x \hat{f}_x + \sigma_y \hat{f}_y + \sigma_z \hat{f}_z) (\sigma_x \hat{f}_x + \sigma_y \hat{f}_y + \sigma_z \hat{f}_z) = \\ &= \hat{f}_x^2 + \hat{f}_y^2 + \hat{f}_z^2 + i\sigma_z (\hat{f}_x \hat{f}_y - \hat{f}_y \hat{f}_x) + \dots \end{aligned}$$

деб ёзамиз. Агар $\hat{f}_x, \hat{f}_y, \hat{f}_z$ лар коммутатив бўлганларида эди, биз $\hat{f}^2$ нинг ўзини олган бўлар эдик. Лекин мазкур ҳолда

$$\begin{aligned}\hat{f}_x \hat{f}_y - \hat{f}_y \hat{f}_x &= \\ &= \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) - \\ &- \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) = \\ &= \frac{ie\hbar}{c} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \frac{ie\hbar}{c} H_z \text{ ва җ. к.}\end{aligned}$$

бу ерда $\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}$ — магнит майдон. Шундай қилиб,

$$\left(\boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 = \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{c} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}$$

ва натижада биз икки компонентли φ тўлқин функцияси учун қуйидаги тенгламага келамиз:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H} + e\Phi \right] \varphi \equiv \hat{H} \varphi. \quad (93.7)$$

Бу тенглама *Паули тенгламаси* деб аталади. Ундаги гамильтонианни (43.4) билан таққослаш электроннинг магнит моментга эга эканини кўрсатади: бу моментга

$$\hat{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} = \frac{e\hbar}{mc} \hat{\mathbf{s}} \quad (93.8)$$

оператор тўғри келади, бу ерда $\hat{\mathbf{s}} = 1/2 \boldsymbol{\sigma}$ — электрон спинининг оператори. Бу моментнинг (43. 1) га кўра аниқланган катталиги

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}. \quad (93.9)$$

43- § да эслатиб ўтилганидек, электроннинг хусусий магнит моменти учун (e/mc) гиромангнит нисбати орбитал ҳаракатга алоқадор бўлган магнит момент учун олинган нисбатга қараганда икки марта катта экан¹.

¹ Бу натижа 1928 йилда *Дирак* томонидан олинган (93. 7) тенгламани қаноатлантирувчи икки компонентли тўлқин функцияни Дирак тенгламаси кашф қилинишдан илгари *Паули* (1927) киритган.

(93.9) формула μ - мезон магнит моменти учун ҳам (формуладаги махражда m ўрнида унинг массаси оли-
нади) ўринлидир. Лекин у протонлар ва нейтронлар (бу
зарралар ҳам $1/2$ спинга эга бўлса-да) учун бутунлай
ярамайди; нейтрон учун олинган ҳолдаги зиддият ай-
ниқса ғалатидир: электр жиҳатдан нейтрал бўлган ней-
трон (93.9) га мувофиқ умуман магнит моментига эга
бўлмаслиги керак эди. Бу ерда мавжуд квант электро-
динамикасининг кучли ўзаро таъсирга қодир бўлган
зарраларга қўллаб бўлмаслиги ошкор бўлади.

94- §. Спин-орбитал ўзаро таъсир

Ўтган параграфда ўтказилган ҳисоблашлар моҳия-
тига кўра, Дирак тенгламасининг аниқ ечимини кичик
 v/c нисбат даражалари бўйича ёйилмасининг бошла-
нишидир. (93.7) тенглама шундай ёйилмадаги фақат
биринчи тартибли кичик ҳадлар ҳисобга олинган ҳолга
тўғри келади (гамильтонианда пайдо бўлган қўшимча
ҳад — $\hat{\mu}\mathbf{H}$ даги $1/c$ кўпайтувчи бундан дарак беради).

Навбатдаги, иккинчи яқинлашишда гамильтонианга
яна янги ҳадлар қўшилади. Лекин тегишли ҳисоблаш-
лар жуда катталашиб кетади ва биз уни бу ерда кел-
тирмаймиз. Фақат ташқи электр майдонидаги электрон
гамильтониани учун $1/c^2$ тартибдаги ҳадларгача аниқ-
ликда сўнгги натижани келтираемиз:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\Phi - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} [\hat{\mathbf{E}}\mathbf{p}] - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \text{div } \mathbf{E}, \quad (94.1)$$

бу ерда Φ — потенциал, $\mathbf{E} = -\text{grad } \Phi$ — майдон куч-
ланганлиги. (93.7) дагидек, бу гамильтониан икки
компонентали тўлқин функцияга таъсир қилади.

(94.1) даги охириги учта ҳад — бизни қизиқтиради-
ган $1/c^2$ тартибдаги тузатма. Улардан биринчиси зарра
кинетик энергиясининг классик ифодасига киритилади-
ган релятивистик тузатмага мувофиқ келади:

$$\sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + m^2c^4} - mc^2 \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \dots$$

(94.1) да навбатдаги тузатма ҳад *спин-орбитал*
ўзаро таъсир энергияси деб аталиши мумкин — у ҳара-
катланаётган магнит моментнинг электр майдон би-

лан ўзаро таъсир энергияси. Агар электр майдон марказий-симметрик бўлса, у ҳолда

$$E = - \frac{r}{r} \frac{d\Phi}{dr}$$

ва спин-орбитал ўзаро таъсир оператори

$$\hat{V}_{sl} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2r} \sigma [\hat{r}\hat{p}] \frac{d\Phi}{dr} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2r} \frac{dU}{dr} \hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}} \quad (94.2)$$

кўринишни олади. Бу ерда $\hbar \hat{\mathbf{l}} = [\hat{r}\hat{p}]$ — электроннинг орбитал момент оператори, $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \sigma$ — унинг спин оператори, $U = e\Phi$ — электроннинг майдондаги потенциал энергияси. Шу хилдаги ўзаро таъсир илгари 51- § да атом энергия сатҳлари нозик структурасининг манбаларидан бири сифатида кўрилган эди¹.

(94.1) даги сўнгги тузатма ҳад фақат майдонни юзага келтирувчи зарядлар жойлашган нуқталардагина нолдан фарқли: фақат шу нуқталардагина $\text{div } E$ нолдан фарқли.

Водород атомининг, яъни қўзғалмас ядро — протон (+|e| зарядли) нинг Кулон майдонидаги электроннинг энергия сатҳларига релятивистик тузатмани ҳисоблаш учун (94.1) гамильтониандан фойдаланиш мумкин.

+|e| заряд майдон потенциали $\Phi = |e|/r$ дан иборат, унинг кучланганлиги дивергенцияси эса: $\text{div } E = -\Delta\Phi = 4\pi|e|\delta(\mathbf{r})$, (1 том, (59.10) га қаранг). Шунинг учун водород атоми гамильтонианидаги тузатма ҳадлар (улар тўпламини $\hat{V}^{(2)}$ орқали белгилаймиз)

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta^2 + \frac{\hbar^2e^2}{2m^2c^2r^3} \hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}} + \frac{\pi e^2\hbar^2}{2m^2c^2} \delta(\mathbf{r}) \quad (94.3)$$

кўринишни олади.

Маълумки, водород атомининг энергия сатҳлари учун норелятивистик ифода (31- §)

$$E_{\text{норел.}} = - \frac{me^4}{2\hbar^2n^2}. \quad (94.4)$$

У фақат бош квант сон n га боғлиқ ва электроннинг $l=0, 1, \dots, n-1$ қийматларни олувчи (берилган n да) орбитал моментига боғлиқ эмас. (94.4) норелятивистик

¹ Релятивистик ўзаро таъсирнинг бошқа хил — спин-спинли ўзаро таъсир, албатта, фақат бир нечта заррадан иборат системада юзага келади ва ташқи майдондаги битта электрон учун бўлмайди.

сатҳлар, шунингдек, электрон спинининг орбитал моментига нисбатан йўналишига ҳам боғлиқ эмас, яъни иккита $j = l \pm 1/2$ (берилган $l \neq 0$ да) қийматга эга бўладиган тўла қийматга боғлиқ эмас.

(94.4) сатҳларга киритиладиган ΔE тузатма ғалаёнланиш назариясининг умумий қондаларига (32-§) асосан топилиши мумкин: (94.3) ни кичик ғалаёнланиш оператори сифатида қўрилганда водород атомининг ғалаёнланмаган тўлқин функцияларига (яъни водород атомининг одатдаги норелятивистик тўлқин функцияларига) нисбатан унинг ўртача қийматини (диагонал матрица элементини) ҳисоблаш лозим. Ҳисоблаш қуйидаги натижани беради:

$$\Delta E = - \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) \frac{me^4 \alpha^2}{2\pi^2 n^3}, \quad (94.5)$$

бу ерда

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,04} \quad (94.6)$$

(α катталикни *нозик структура доимийси* дейилади)¹. (94.5) тузатманинг (94.4) га қараганда кичиклиги α^2 кўпайтувчи орқали ифодаланади.

(94.5) сатҳ силжиши энди фақат n га эмас, балки j га боғлиқ. Бу боғланиш (94.4) сатҳларнинг нозик структура компоненталарига ажралишини билдиради; бошқача қилиб айтганда, норелятивистик яқинлашишда мавжуд бўлган айниш йўқотилади. Лекин бу айниш тўла олиб ташланмас экан; бир хил n ва j қийматли, аммо ҳар хил $l = j \pm 1/2$ қийматли икки карра ўзаро айниган сатҳлар қолади (бунда мураккаброқ атомларга қараганда ядронинг Кулон майдонига эга бўлган водород атомининг спецификаси яна намоён бўлади). Шундай қилиб, водород сатҳларининг юпқа структурани ҳисобга олгандаги кетма-кетлиги қуйидагича:

$$\begin{array}{ccccccc} 1s_{1/2} & & & & & & \\ \underbrace{2s_{1/2}, 2p_{1/2}} & & 2p_{3/2} & & & & \\ \underbrace{3s_{1/2}, 3p_{1/2}} & & \underbrace{3p_{3/2}, 3d_{3/2}} & & 3d_{5/2} & & \\ . & . & . & . & . & . & . \end{array}$$

¹ Бу формула биринчи марта Арнольд Зоммерфельд томонидан Борнинг эски назарияси асосида квант механикаси юзга келгунга қадар олинган.

бу ерда ўзаро айланиш ҳолатлар катта қавслар билан бирлаштирилган. Фақат энг катта мумкин бўлган (берилган n да) j қийматли сатҳлар айланимаган бўлади.

Бу ерда қолган айланиш бир электронли масаланинг Дирак тенгламаларида назарда тутилмаган радиация тузатмалари ёрдамида олиб ташланади (*Лэмб сил-жиши*); бу тузатмалар ҳақида 106- § да сўз юритамиз.

XV боб

НУРЛАНИШ

95- §. Электромагнит ўзаро таъсир оператори

Электромагнит майдон зарралар ҳаракати учун пассив ташқи шароит ролида қатнашадиган масалалардан шу майдон ҳолатининг ўзгариши билан ўтадиган электродинamik ҳодисаларнинг анча кенгроқ категориясига ўтамиз. Бунда гап фотонларни зарядланган зарралар системалари томонидан чиқарилиши, ютилиши ёки сочилиши ҳодисалари устида боради.

Электронларнинг электромагнит нурланиш майдони билан ўзаро таъсири, одатда, ғалаёнланиш назарияси ёрдамида кўрилиши мумкин. Бу ҳол электромагнит ўзаро таъсирнинг нисбатан кучсизлигига боғлиқ. Электроннинг майдон билан ўзаро таъсири унинг e заряди орқали аниқланади. Бунда ўзаро таъсир масштабини берувчи „боғланиш доимийси“ ролини e, c ва $\hbar$ дан тузилган ўлчамсиз катталиқ $\alpha = e^2/\hbar c$ (94- § да қабул қилинган нозик структура доимийси) бажаради. Электромагнит ўзаро таъсирнинг кучсизлиги шу доимийнинг кичиклигида $\alpha \approx 1/137$ ифодаланади. Бу кичиклик квант электродинамикасида фундаментал роль ўйнайди.

Аввало ғалаёнланиш оператори ролини бажарувчи электроннинг нурланиш майдони билан ўзаро таъсир операторининг кўринишини аниқлаймиз. Майдон потенциаллари скаляр потенциал $\Phi = 0$ бўлган калибровка бўйича танлаб олинган, шунга кўра майдон фақат биргина $\mathbf{A}$ вектор потенциал билан ифодаланади деб ҳисоблашни (XI бобдагидек) шартлашиб оламиз. (92.1) га кўра электроннинг берилган электромагнит майдон билан ўзаро таъсири гамильтониандаги $\hat{V} = -e\mathbf{A}$ ҳад

орқали кўрсатилади. Энг умумий майдон ҳолати ўзгарадиган процесслар ҳолига ўтиш учун $\hat{A}$ потенциал тегишли иккиламчи квантланган $\hat{A}$ оператор билан алмаштирилиши керак; у ҳолда

$$\hat{V} = -e\alpha\hat{A} \quad (95.1)$$

ўзаро таъсир оператори бўлади¹. $\hat{A}$ оператор

$$\hat{A}(t, \mathbf{r}) = \sum_n [\hat{c}_n A_n(t, \mathbf{r}) + \hat{c}_n^+ A_n^*(t, \mathbf{r})] \quad (95.2)$$

йиғиндидан иборат. Унда фотонларни турли ҳолатларда (n индекс билан номерланадиган) йўқотиш ва ҳосил қилиш операторлари қатнашади; $A_n(t, \mathbf{r})$ коэффицентлар шу ҳолатларнинг тўлқин функциялари ролини ўйнайди. Майдон барча фотон ҳолатларини тўлдириш сонлари (N_n) нинг мажмуаси орқали берилади. Бунда фотон ҳолатларининг ўзи турли йўл билан, у ёки бу конкрет масаланинг қўйилишига боғлиқ ҳолда бурилиши мумкин. Масалан, агар бизни маълум $\mathbf{k}$ тўлқин векторли ва e қутбланишли фотонларнинг нурланиши ёки ютилиши қизиқтирса, у ҳолда $A_n(t, \mathbf{r})$ тўлқин функциялари ясси тўлқинлардир (76.16). Агар маълум j момент қийматларига эга бўлган фотонлар нурланишига оид масала қўйилган бўлса, у ҳолда A_n — сферик тўлқин (бу ҳақда 78-§ да баён этилган).

Ғалаёнланиш назариясининг биринчи яқинлашишида у ёки бу процесс эҳтимоллиги $|V_{fi}|^2$ билан аниқланади, бу ерда V_{fi} — зарядлар ва майдон системасининг бошланғич (индекс i) ва охириги (индекс f) ҳолатлари орасидаги ўтиш учун ғалаёнланиш операторининг матрица элементи. $\hat{c}_n, \hat{c}_n^+$ операторларининг ҳар бири фақат

¹) Заряд бўйича қўшмалик оператори — заррани антизарра билан алмаштириш — ўзаро таъсир оператори кўринишини ўзгартирмаслиги керак. Мусбат зарядланган заррани манфий зарядлангани билан алмаштирган бу алмаштириш, хусусан $e \rightarrow -e$ ўзгаришни билдиради. $\hat{V}$ нинг инвариантлиги бир вақтда фотон майдони операторининг $\hat{A} \rightarrow -\hat{A}$ алмашинишини талаб этади. Демак, фотонлар — заряди тоқ зарралар.

тегишли N_n тўлдириш сонини 1 га (бошқа тўлдириш сонлари ўзгармагани ҳолда) орттириш ёки камайтириш учун нолдан фарқли матрица элементларига эга. Шунинг учун $\hat{A}$ оператор фақат фотонлар сони 1 га ўзгарадиган ўтишлар учун матрица элементига эга. Бошқача қилиб айтганда, ғалаёнланиш назариясининг биринчи яқинлашишида фотоннинг фақат бир каррали нурланиш ёки ютилиш процесслари вужудга келади.

(76.12) га мувофиқ матрица элементлари

$$\langle N_n - 1 | c_n | N_n \rangle = \sqrt{N_n}, \quad (95.3)$$

$$\langle N_n + 1 | c_n^+ | N_n \rangle = \sqrt{N_n + 1}. \quad (95.4)$$

Булардан биринчиси битта фотон (n тип) ютилишига тўғри келади — тўлдириш сони 1 га камаяди; иккинчиси эса бир фотон чиқарилишига — тўлдириш сони 1 га ортишига мос келади. Агар майдоннинг бошланғич ҳолатида фотонлар (n тип) бўлмаса, у ҳолда

$\langle 1 | c_n^+ | 0 \rangle = 1$; $\hat{A}$ операторнинг матрица elementi эса бундан ташқари яна (95.2) йиғиндида $\hat{c}_n^+$ олдидаги коэффициент сифатида турадиган A_n^* кўпайтувчига ҳам эга. Шундай қилиб, фотон чиқарилиши учун (95.1) операторнинг тўла матрица elementi

$$V_{fi}(t) = -e \int (\Psi_f^* \alpha \Psi_i) A_n^* dV, \quad (95.5)$$

бу ерда Ψ_i ва Ψ_f — нурлатувчи (электрон) нинг бошланғич ва охири ҳолатлари тўлқин функциялари¹. Шу тарзда фотон ютилиши учун матрица elementi олинади:

$$V_{fi}(t) = -e \int (\Psi_f^* \alpha \Psi_i) A_n dV. \quad (95.6)$$

У (95.5) дан фақат A_n^* ўрнида A_n турганлиги билан фарқ қилади.

V_{fi} да t аргументни кўрсатиш билан вақтга боғлиқ бўлган матрица elementi ҳақида гап кетаётгани таъ-

¹ Англашилмовчилик бўлмаслиги учун шунини таъкидлаймизки, битта электрон фақат ташқи майдонда ҳаракатлангандагина нур чиқариш мумкин. Агар эркин (ўзгармас тезликда ҳаракатланган) электронни у тинч ҳолда турган санок системасида кўрилса, у ҳолда унинг фотон чиқариши мумкин эмаслиги айниқса равшан бўлади; бу системада электрон энергияси m га тенг ва у, худди фотон чиқариладиган ҳолда бўлганидек, камайтириш мумкин эмас.

кидланади. Тўлқин функцияларда вақт иштирок этган кўпайтувчиларни ажратиб, одатдагича, [(11. 4) қоидага мос ҳолда] вақтга боғлиқ бўлмаган матрица элементларига ўтиш мумкин:

$$V_{fi}(t) = V_{fi} e^{-i(E_i - E_f \pm \omega)t}, \quad (95.7)$$

бу ерда E_i , E_f — нурланувчи системанинг бошланғич ва охириги энергиялари, даражадаги юқори ва пастки ишоралар эса, мос ҳолда, ω энергияли фотон чиқарилиши ва ютилишини кўрсатади.

(95.5) ёки (95.6) даги интегралости ифодада келган

$$j_{fi} = \Psi_f^* \alpha \Psi_i \quad (95.8)$$

кўпайтма Дирак тенгламасида ток учун олинган $j = \Psi^* \alpha \Psi$ (84.9) ифодага ўхшаб тузилган: унда иккита бир хил тўлқин функция ўрнида ҳар хил (бошланғич ва охириги) тўлқин функция жойлашган. (95.8) катталикини *ўтиш токи* дейилади.

Агар гап маълум йўналишдаги k тўлқин векторига ва маълум e қутбланишга эга бўлган фотоннинг чиқарилиши (ёки ютилиши) тўғрисида борса, у ҳолда $A_n(r)$ сифатида

$$A_n(r) = e \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} e^{ikr} \quad (95.9)$$

функцияни олиш керак ($e^{-i\omega t}$ кўпайтувчисиз ясси тўлқин (76.16)). Шундай фотон нурланиши билан бўлади-ган ўтишнинг матрица элементи учун

$$V_{fi} = -e \sqrt{\frac{2\pi}{\omega\Omega}} e^* j_{fi}(k) \quad (95.10)$$

ифодага эга бўламиз, бу ерда

$$j_{fi}(k) = \int j_{fi}(r) e^{-ikr} dV. \quad (95.11)$$

(95.11) интеграл $j_{fi}(r)$ функциянинг Фурье компоненти-дир. У *импульс тасаввур*идаги *ўтиш токи*дир.

Фотон чиқариш эҳтимоллигини бевосита 35- § да чиқарилган ғалаёиланиш назариясининг умумий формуласи ёрдамида (95.10) матрица элементига кўра топиш мумкин. Нурлаткичнинг бошланғич ва охириги ҳолатлари унинг энергия сатҳларининг дискрет спектрига тааллуқли деб ҳисоблаймиз. Лекин бутун электрон + майдон системасининг охириги ҳолати чиқарилган фотон ҳисобига узлуксиз спектрга тегишлидир (фотон энергиясининг мумкин бўлган қийматлар спектри — узлуксиз).

Шундай қилиб, бу ерда биз 35-§ да кўриб ўтилган масалага дуч келдик. (35.6) га мувофиқ фотон нурланиши билан $i \rightarrow f$ ўтиш эҳтимоллиги (1 секундда)

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) d\nu, \quad (95.12)$$

бу ерда $d\nu$ фотон ҳолатини характерловчи ва узлуксиз қатор қийматларини қабул этувчи катталиклар тўпламининг шартли белгиси. Тўлқин вектори маълум қийматларга эга бўлган фотонлар учун $\mathbf{k}$ нинг компонента-лари ν катталиклардир, шунга кўра $d\nu = dk_x dk_y dk_z = \omega^2 d\omega d\phi$ (бу ерда $d\phi = \mathbf{k}$ йўналиш учун фазовий бурчак элементи). ν катталикларни бундай танлашда (95.12) формулада фотоннинг тўлқин функцияси $\delta(\mathbf{k})$ га нормалаштирилган деб фараз қилинган бўлар эди. Шу билан бирга (95.9) функция $\mathcal{Q}$ ҳажмда 1 фотонга нормалаштирилган; бу нормаланишда тўлқин функция $\delta(\mathbf{k})$ га нормаланишдаги $(2\pi)^{-3}$ кўпайтувчи ўрнига $1/\sqrt{\mathcal{Q}}$ кўпайтувчига эга ((27.9) ва (12.10) ни таққосланг). Шунинг учун (95.12) формулани энди

$$d\omega = 2\pi |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \omega) \frac{\mathcal{Q} \omega^2 d\omega d\phi}{(2\pi)^3} \quad (95.13)$$

кўринишда ёзиш керак.

Бундаги δ -функция энергия сақланиш қонунини ифодалайди: чиқарилаётган фотон энергияси нурлаткич энергиясининг камайишига тенг, $\omega = E_i - E_f$. (95.13) формулани $d\omega$ бўйича интеграллаш шу δ -функцияни йўқотади ва $\omega = E_i - E_f$ энергияли фотонни $d\phi$ фазовий бурчакдаги йўналишда нурлатиш эҳтимоллиги учун қуйидаги охирги ифодага келтиради:

$$d\omega = \frac{\mathcal{Q}}{4\pi^2} |V_{fi}|^2 \omega^2 d\phi. \quad (95.14)$$

Бу ерга (95.10) матрица элементи қўйилган бўлиши керак.

96-§. Спонтан (ўз-ўзидан) ва мажбурий нурланиш¹

Юқорида олинган формулалар навбатдаги параграфларда қатор конкрет ҳолларда ўтишлар эҳтимоллигини ҳисоблашда ишлатилади. Бу ерда эса биз радиация процессларининг ҳар хил турлари орасидаги баъзи бир умумий муносабатларни кўриб чиқамиз.

¹ Мазкур параграфда одатдаги бирликлардан фойдаланамиз.

(95. 5) матрица элементи майдоннинг бошланғич ҳолатида фотоннинг мазкур хилидан йўқ бўлган ҳолдаги фотон чиқариш процессига тегишлидир. Агар бошланғич ҳолатда N_n та шундай фотонлар бўлган бўлса, у ҳолда ўтишнинг матрица элементи яна $\sqrt{N_n + 1}$ га кўпайтирилади ((95.4) га мувофиқ.) Ўтиш эҳтимоллиги эса мос ҳолда $N_n + 1$ га кўпайтирилади. Бу кўпайтувчидаги 1 рақами $N = 0$ бўлганда ҳам юз берадиган спонтан нурланишга тўғри келади. N_n ҳад эса *мажбурий* (ёки *индукцияланган*) нурланишга тегишли: биз майдоннинг бошланғич ҳолатида фотонларнинг бўлишлиги шундай фотонларнинг қўшимча чиқарилишига ёрдам беришини кўрамыз.

Агар $i \rightarrow f$ ўтиш бирор E_i сатҳдан пастрок E_f сатҳга ўтаётган система томонидан фотон чиқарилишини ифодаласа, у ҳолда тескари $f \rightarrow i$ ўтиш шундай фотоннинг E_f сатҳдан E_i сатҳга ўтувчи система томонидан ютилишини кўрсатади. Шу тескари ўтишнинг матрица элементи тўғри ўтиш матрица элементидан (95.4) кўпайтувчини (95.3) га, яъни $\sqrt{N_n + 1}$ ни $\sqrt{N_n}$ га ўзгартиришга фарқ қилади. Демак, фотон чиқариш ва ютиш (нурлатувчи системанинг берилган сатҳлар жуфти орасидаги ўтишларда) эҳтимолликлари ўртасида

$$\frac{w_{\text{чик}}}{w_{\text{ют}}} = \frac{N_n + 1}{N_n} \quad (96.1)$$

муносабат бор (У биринчи марта 1916 йилда *Эйнштейн* томонидан аниқланган. Шу тариқа Эйнштейн мажбурий чиқариш ҳодисасини олдиндан айтиб берди).

Фотонлар сонини системага ташқаридан тушаётган нурланиш интенсивлиги билан боғлайлик. Айтайлик,

$$I_{\text{ке}} d\omega d\phi \quad (96.2)$$

катталиқ 1 сек. да 1 см² юзга тушаётган ва ϵ қутбланишга эга бўлган нурланиш энергияси бўлсин. Унинг частоталари $d\omega$ интервалда ва тўлқин вектор йўналиши $d\phi$ фазовий бурчак элементида жойлашади. Кўрсатилган интервалларда $\Omega k^2 dk d\phi / (2\pi)^3$ та майдон осцилляторлари бўлиб (Ω ҳажмда), осцилляторнинг ҳар бирига эса $N_{\text{ке}}$ тадан қутбланган фотонлар тўғри келади. Шунинг учун (96.2) энергияни кўпайтма тузиб топамиз:

$$\frac{c}{\Omega} \frac{\Omega k^2 dk d\phi}{(2\pi)^3} N_{\text{ке}} \cdot \hbar\omega = \frac{\hbar\omega^3}{8\pi^3 c^2} N_{\text{ке}} d\omega d\phi.$$

Бу ердан изланаётган муносабатни аниқлаймиз.

$$N_{\text{ке}} = \frac{8\pi^3 c^2}{h\omega^3} I_{\text{ке}}. \quad (96.3)$$

Айталик, $d\omega_{\text{ке}}^{(\text{сп})}$ катталиқ $d\omega$ фазовий бурчакка е қутбланишли фотонни спонтан чиқариш эҳтимоллиги бўлсин; (ин) ва (ют) индекслари орқали индукцияланган чиқариш учун ва ютиш учун мос эҳтимолликларни кўрсатамиз. (96.1) ва (96.3) га кўра бу эҳтимолликлар ўзаро қуйидагича боғланган:

$$d\omega_{\text{ке}}^{(\text{ют})} = d\omega_{\text{ке}}^{(\text{ин})} = d\omega_{\text{ке}}^{(\text{сп})} \frac{8\pi^3 c^2}{h\omega^3} I_{\text{ке}}. \quad (96.4)$$

Агар тушувчи нурланиш изотроп ва қутбланмаган бўлса ($I_{\text{ке}}$ нурланиш $\mathbf{k}$ ва $\mathbf{e}$ йўналишларга боғлиқ эмас), (96.4) ни $d\omega$ бўйича интеграллаш ва қутбланиш бўйича йиғиш радиация ўтишларининг тўла эҳтимолликлари орасидаги (зарядлар системасининг берилган ҳолатлари орасидаги) муносабатни беради:

$$w^{(\text{ют})} = w^{(\text{ин})} = w^{(\text{сп})} \frac{\pi^2 c^2}{h\omega^3} I, \quad (96.5)$$

бу ерда $I = 2 \cdot 4\pi I_{\text{ке}}$ — тушувчи нурланишнинг тўла спектрал интенсивлиги.

Агар нурланувчи (ёки ютувчи) системанинг i ва f ҳолатлари айниган бўлса¹, у ҳолда шу фотонларнинг тўла нурланиш (ёки ютилиш) эҳтимоллиги барча ўзаро айниган охириги ҳолатлар бўйича йиғиш ва барча мумкин бўлган бошланғич ҳолатлар бўйича ўртачалаштириш йўли билан топилади. i ва f ҳолатларнинг айниш карралигини (статистик оғирликларини) g_i ва g_f деб белгилаймиз. Спонтан ва индукцияланган чиқариш процесслари учун i ҳолатлар бошланғич ҳолатлар ҳисобланади, ютиш учун эса f ҳолат бошланғичдир. Бошланғич ҳолатларнинг барча g_i ёки g_f ларини ҳар бир ҳолда тенг эҳтимоллик деб ҳисоблаб, (96.5) ўрнига, албатта, қуйидаги муносабатларни оламиз:

$$g_f w^{(\text{ют})} = g_i w^{(\text{ин})} = g_i w^{(\text{сп})} \frac{\pi^2 c^2}{h\omega^3} I. \quad (96.6)$$

¹ Масалан, нурланувчи атом моментининг йўналишлари бўйича айниш бўлиши мумкин.

97- §. Дипол нурланиш

Фотоннинг тўлқин узунлиги λ нурлантирувчи система ўлчами (a) га қараганда катта бўлган ҳол муҳимдир. Бундай вазият одатда зарралар тезликларининг ёруғлик тезлигига қараганда кичиклигига алоқадор (1. 80- § га таққосланг).

Кичик a/λ нисбат бўйича биринчи яқинлашишда (95.10) интегралда система ўлчамлари оралигида (ψ_i ва ψ_f функциялар сезиларли даражада нолдан фарқли бўлган соҳада) кам ўзгарувчи $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ кўпайтувчини бирга тенглаш мумкин. Бундай ўзгартириш бошқача қилиб айтганда, фотон импульсини системадаги зарралар импульсларига нисбатан назарга олмаслик мумкинлигини билдиради (одатдаги birlikларда биринчи катталиқ $\hbar\mathbf{k}$ га тенг, иккинчиси эса, $\hbar/a$ катталиқ тартибида бўлади). Бу яқинлашиш классик нурланиш назариясидаги диполь ҳолига мос келади.

Ўша яқинлашишда

$$\mathbf{j}_{fi}(0) = \int \psi_f^* \mathbf{x} \psi_i dV$$

интеграл ўзининг норелятивистик ифодаси билан, яъни Шредингер (норелятивистик) тўлқин функцияларига нисбатан электрон тезлиги ($\mathbf{v}$) нинг матрица элементи билан алмаштирилиши мумкин. Ўз навбатида $\mathbf{v}_{fi}$ матрица элементи электрон радиус-векторининг худди шундай элементи орқали ифодаланиши мумкин: $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$ эканлигидан (11.8) га мувофиқ $\mathbf{v}_{fi} = i(E_f - E_i)\mathbf{r}_{fi}$ бўлади; $E_i - E_f$ айирма чиқариладиган фотоннинг ω частотасига мос тушади, демак,

$$\mathbf{j}_{fi} = \mathbf{v}_{fi} = -i\omega\mathbf{r}_{fi} = -\frac{i\omega}{e}\mathbf{d}_{fi}, \quad (97.1)$$

бу ерда $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$ — электроннинг (унинг орбитал ҳаракатида) дипол моменти, (97.1) ни (95.10) га қўйиб,

$$V_{fi} = i\sqrt{\frac{2\pi\omega}{\Omega}}\mathbf{e}^*\mathbf{d}_{fi} \quad (97.2)$$

ифодани¹, сўнгра (95.14) га мувофиқ дипол нурланиш эҳтимоллиги учун қуйидаги формулани топамиз:

$$d\omega = \frac{\omega^3}{2\pi} |\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fi}|^2 d\phi \quad (97.3)$$

(фотоннинг $\mathbf{k}$ тўлқин вектор йўналиши бу ерда ошкора кўринмайди: $\mathbf{e}$ қутбланиш вектори $\mathbf{k}$ га перпендикуляр бўлиши керак).

Чиқаришнинг тўла эҳтимоллигини (97.3) ни фотоннинг барча йўналишлари бўйича интеграллаш ва унинг иккита мумкин бўлган мустақил қутбланиши бўйича йиғиш орқали олиш мумкин. Айтайлик, $\mathbf{e}$ чиқиқли қутбланишга тўғри келсин; унда $\mathbf{e}$ — моддий бирлик вектор ва $\mathbf{e}^* \mathbf{d}_{fi}$ кўпайтма $\mathbf{d}_{fi}$ векторнинг Декарт компонентларидан бири бўлади. $|(d_{fi})_x|^2$ ни унинг $1/3 |\mathbf{d}_{fi}|^2$ га тенг бўлган ўртача қиймати билан алмаштириб, биз $d\phi$ бўйича бундан кейинги интеграллашни оддий 4π га кўпайтиришга, қутбланиш бўйича йиғишни эса 2 га кўпайтиришга келтирамиз. Шундай қилиб, фотонни чиқаришнинг тўла эҳтимоллиги $\omega = \frac{4\omega}{3} |\mathbf{d}_{fi}|^2$ бўлади ёки одатдаги бирликларда

$$\omega = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (97.4)$$

Нурланишнинг I интенсивлигини эҳтимолликни $\hbar\omega$ га кўпайтириш натижасида олинади:

$$I = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 \quad (97.5)$$

Диққатни шу нарсага жалб қиламизки, матрица элементи (97.2) тақрибий ифодаси

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{E}}\mathbf{d} \quad (97.6)$$

операторнинг матрица элементидан иборат, бу ерда $\hat{\mathbf{E}} = -\partial\hat{\mathbf{A}}/\partial t$ электр майдон кучланганлигининг опера-

¹ Фотон ютиш билан рўй берадиган ўтишнинг матрица элементи учун ўхшаш ифода қуйидагича:

$$V_{fi} = -i \sqrt{\frac{2\pi\omega}{\Omega}} \mathbf{e} \mathbf{d}_{fi}. \quad (97.2 \text{ a})$$

Бу (95.6) дан олинади (худди (97.2) ифода (95.5) дан олингани каби).

тори; $\mathbf{d}$ — электроннинг дипол момент оператори; (97. 2) ифода (97. 6) дан (худди (95. 5) ифода (95.1) дан олинганидек) ҳосил қилинади. Ўзаро таъсирнинг (97. 6) тақрибий оператори квазибиржинсли электр майдондаги зарядлар системаси потенциал энергиясининг классик норелятивистик ифодасига тўғри келади (I, 64- § га қаранг). Бу ҳолат шу сабабли муҳимки, у шу параграфда олинган формулаларни қўллаш соҳасини жуда кенгайтиришга имкон беради: улар фақат бир электронли нурлатувчигина эмас, балки ҳар қандай норелятивистик зарралар системасининг нурланишига ҳам тааллуқлидир.

(97. 5) формула даврий ҳаракат қилувчи зарралар системасининг диполь нурланиш интенсивлигининг формуласига (I, (80. 12) га қаранг) бевосита аналог бўлади: $\omega = n\omega_0$ частотали нурланишнинг интенсивлиги (бу ерда ω_0 — зарралар ҳаракатининг частотаси, n — бутун сон):

$$I_n = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_n|^2 \quad (97.7)$$

бўлади, бу ерда $\mathbf{d}_n$ — система дипол моментининг Фурье қаторидаги ёйиш компонентлари:

$$\mathbf{d}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{d}_n e^{-i n \omega t} \quad (97.8)$$

Квант назарияси асосида олинган (97.5) формула шу Фурье компонентларини тегишли ўтишларнинг матрица элементлари билан алмаштириш орқали (97. 7) дан ҳосил қилинади. Бу қоида (Борнинг *мувофиқлик принципи*) классик катталикларнинг Фурье компонентлари ва квазиклассик ҳолдаги (27- §) квант ҳолат матрица элементлари орасидаги умумий мувофиқликнинг хусусий ҳолидир. Катта квант сонларига эга бўлган ҳолатлар орасидаги ўтишлар учун нурланиш квазиклассикдир; бунда фотон энергияси $\hbar\omega = E_i - E_f$ нурлатувчининг E_i ва E_f энергияларига нисбатан кам. Лекин (97.5) аниқ формула (квазиклассиклик фаразига боғланмаган) ω нинг кичик қийматларида ҳам, ихтиёрий қийматларида ҳам бир хил кўринишга эга. Бу билан мувофиқлик принципи фақат квазиклассик ҳолатдагина эмас, балки умумий квант ҳолат учун ҳам ўринлидир.

98- §. Мультипол нурланиш

Берилган импульсли (яъни берилган йўналишда) фотонларни чиқариш ҳақида гапириш ўрнига, энди, j моментнинг маълум қийматларига эга бўлган фотонларни чиқаришни кўриб чиқамиз. Бу билан дипол яқинлашишнинг квантомеханикавий маъноси янада чуқурроқ аниқланади.

Бундай фотонларни чиқаришда моментнинг сақланиш қонуни натижаси бўлган қатъий *танлаш қоидалари* мавжуд: нурлатувчи системанинг бошланғич momenti охириги система ва фотоннинг умумий моментига мос келиши керак. Моментларни қўшишнинг квантомеханикавий қоидасига мувофиқ бунинг маъноси: агар бошланғич системанинг momenti J_i га тенг бўлса, j моментли фотон чиқарилгандан сўнг система momenti фақат

$$J_f = J_i + j, \quad J_i + j - 1, \quad \dots, \quad |J_i - j| \quad (98.1)$$

қийматларни қабул қилиши мумкин.

Системанинг бошланғич ва охириги ҳолатларининг P_i ва P_f жуфтликлари ҳам маълум шартни қаноатлантириши керак: бошланғич жуфтлик охириги система ва фотоннинг умумий жуфтлигига мос келиши керак, яъни $P_i P_\phi = P_f$ бўлиши лозим, бу ерда P_ϕ — фотоннинг жуфтлиги. Ҳамма жуфтликлар фақатгина ± 1 қийматга эга бўлишлари мумкинлиги сабабли бу шартни

$$P_i P_f = P_\phi \quad (98.2)$$

кўринишда ёзиш мумкин¹.

Фотон momenti 1 дан бошлаб бутун сон қийматларни қабул қилади ($j=0$ қиймат бўлмайди). Ҳар қандай шу каби қийматларда (98.1) қоида системи иккита $J=0$ ҳолатлари орасида ўтишида ($0 \rightarrow 0$ ўтиш) якка фотоннинг чиқарилишини тақиқлайди. Бундай ҳолатлар орасида радиацион ўтиш фақат антипараллел моментли иккита фотоннинг бир вақтда чиқарилиши орқали бўлиши мумкин (аммо бу жараён ғалаёнланиш назариясининг юқорироқ яқинлашишларида вужудга келиши мумкин ва шу сабабли унинг содир бўлиш эҳтимоли нисбатан кам).

¹ Жуфтлик бўйича танлаш қоидасини биринчи бўлиб 1924 йилда О. Лапорт аниқлаган.

1-ҳолатдаги фотонни (78- § да киритилган терминология бўйича $E1$ фотон) чиқаришда (98.1 — 2) танлаш қондаси фақат қарама-қарши жуфтликларга эга бўлган ҳолатлар орасидаги ўтишларга йўл қўяди. Бунда нурлатувчи моменти J нинг мумкин бўлган ўзгаришлари қуйидагича:

$$J \rightarrow J + 1, J, J - 1 \quad (J \geq 1 \text{ бўлганда}): \quad (98.3)$$

$$1/2 \rightarrow 3/2, 1/2; 0 \rightarrow 1.$$

Бу қоидалар қутбий векторнинг матрица элементларини танлаш қондаси билан мос келади (18, 19- §). Матрица элементлари (94.4) эҳтимолликни белгилайдиган системанинг d электр дипол моменти худди шундай вектордир. Бундан тушунарлики, дипол яқинлашиш 1^- фотонни чиқаришга жавоб беради.

1^+ фотонни ($M1$ фотон) чиқариш учун танлаш қондаси электр диполдидан фақат жуфтлик қондаси бўйича фарқ қилади: бошланғич ва охириги ҳолатлар бир хил жуфтликка эга бўлиши керак. Бу аксиал вектор матрица элементларини танлаш қондасига мувофиқ келади. Системанинг магнит дипол моменти вектори ана шундай вектор бўлади бу ҳолда унинг матрица элементлари фотон чиқариш эҳтимоллигини белгилайди. Бундай нурланишнинг номи — магнит дипол нурланиш ҳам шундан келиб чиқади.

Худди шундай йўл билан ҳар қандай EJ -фотоннинг чиқарилиши системанинг $2J$ -поль электрон моменти матрица элементлари билан, MJ -фотонни чиқариш эса $2J$ -поль магнит моментнинг матрица элементлари билан белгиланади.

99- §. Атомларнинг нурланиши¹

Атомнинг ташқи электронлари (оптикавий радиация ўтишларида иштирок этадиганлари) энергияси тахминий баҳолашда $E \sim me^4/\hbar^2$ катталиқ тартибига эга бўлади, демак, нурлатувчи тўлқинлар узунлиги $\lambda \sim \hbar c/E \sim \hbar^2/me^2$. Атомларнинг ўлчами эса: $a \sim \hbar^2/me^2$. Шунинг учун атомларнинг оптикавий спектрларида $a/\lambda \sim a \ll 1$ тенгсизлик бажарилади. $v/c \sim a$ муносабат худди шундай тартибли катталиқка эга, бу ерда v — оптикавий электронлар тезлиги.

¹ Бу параграфда одатдаги бирликлар билан иш кўраимиз.

Шундай қилиб, атомларнинг оптикавий спектрларида электр дипол нурланишнинг (агар унга танлаш қоидалари йўл берса) эҳтимоллиги юқори ранг мультитипол ўтишлар эҳтимоллигидан анча катта бўладиган шарт бажарилади. Шу сабабли атомлар спектрларида $E1$ -ўтишлар энг муҳим ролни ўйнайди¹.

Ўтган параграфда кўрсатилган атом электрон қобилининг тўла моменти ва жуптлиги бўйича танлаш қоидалари қатъийдир². Бу қоидалар билан бир қаторда бошқа тақрибий танлаш қоидалари ҳам мавжуд бўлиши мумкин. Уларнинг тўғрилиги атом ҳолатларининг айрим категорияларини тақрибий характерлайдиган аниқ хоссалари билан боғланган.

Масалан, LS -боғланиш (51-§) типи бўйича тузилган ҳолатлар шулар жумласидандир. Бундай ҳолатлар тўла моментдан ташқари атомнинг S спини ва L орбитал моментининг бу ҳолда сақланадиган маълум қийматлари билан ҳам характерланади. Электр дипол момент фақат орбитал катталикини тасвирлаганлиги учун унинг оператори спин оператори билан коммутатив бўлади, яъни унинг матрицаси S сонга нисбатан диагональ бўлади. Ҳар қандай орбитал вектор (18-§) учун бўлганидек, электронларнинг орбитал ҳаракати тўлқин функцияларига нисбатан дипол моментининг матрица элементи учун ҳам худди шундай L сони бўйича танлаш қоидалари мавжуд бўлади. Шундай қилиб, LS -боғланиш типи бўйича тузилган ҳолатлар орасидаги ўтишлар қўшимча танлаш қоидаларига бўйсунадилар:

$$S_f = S_i,$$

$$L_f = L_i + 1, L_i, L_i - 1. \quad (99. 1)$$

Яна шуни қайд қиламизки, бу қоидалар — тақрибий ва улар фақат орбитал момент ва спинни ажратилган ҳол-

¹ Атом спектрларининг оптикавий соҳасидаги диполь ўтишлар эҳтимолликларининг типик қиймати 10^8 сек^{-1} тартибга эга.

² Англашилмовчиликни бартараф қилиш учун қайд қилиб ўта-мизки, атомнинг тўла моменти унинг электрон қобили моменти ва ядроси спинининг қўшилишидан ҳосил бўлади (51-§ да бу тўла момент F билан белгиланган эди). Энг қатъий танлаш қоидалари шу моментга тааллуқли бўлиши керак. Лекин электронларнинг ядро спини билан ўзаро таъсири жуда ҳам суст бўлганлиги сабабли унинг электрон ўтишлар эҳтимоллигига бўлган таъсирини эътиборга олмаса ҳам бўлади, унда танлаш қоидалари фақат атом ҳолатларининг электрон характеристикасига тааллуқли бўлади.

да сақланишини бузадиган спин-орбитал ўзаро таъсирни эътиборга олмаган ҳолдагина тўғри бўлади.

Классик назарияда система магнит моменти катталигининг тартиби (I, (66, 2) бўйича аниқланган) унинг дипол моменти катталигининг тартиби билан $\mu \sim (v/c) d$ орқали боғланган. Атом учун бундай муносабат квант назариясида ҳам қолади. Ҳақиқатан, атомнинг магнит моменти катталик тартиби бўйича Бор магнетони $\mu \sim e\hbar/mc$ билан берилади. Бу баҳо дипол моменти $d \sim ea \sim \hbar^2/me$ катталигининг тартибидан α кўпайтувчи билан фарқ қилади, $v/c \sim \alpha$ бўлганлиги учун бундан μ ва d орасидаги кўрсатилган муносабат олинади.

Магнит дипол ($M1$) нурланиш эҳтимоллиги магнит моментининг квадратига пропорционал ва, демак, электр дипол нурланиш (ўша частотали) эҳтимоллигидан тахминан α^2 марта кичик. Шунинг учун магнит нурланиш фақат танлаш қоидалари томонидан тақиқланган электр ҳолдаги ўтишлардагина маълум роль ўйнайди.

Бу электр квадрупол ($E2$) нурланишга ҳам тааллуқлидир. Атомнинг электр квадрупол моменти катталигининг тартиби: ea^2 . У $d \sim ea$ дипол моментига нисбатан ортиқча a кўпайтувчига эга. Тегишли равишда квадрупол радиацион ўтишнинг матрица элементи дипол ўтишнинг матрица элементига нисбатан ортиқча $ka \sim a/\lambda$ кўпайтувчига эга; юқорида кўрсатилган катталиклар тартиби билан a ва λ — яна ўша кичик кўпайтувчи $\sim \alpha$ бўлади.

Лекин бу кўпайтувчининг $M1$ ва $E2$ нурланиш ҳолларида турлича келиб чиқишга (биринчисидан v/c дан ва иккинчисидан a/λ дан) эга бўлганлиги маълум шароитларда $M1$ нурланишнинг $E2$ нурланишга нисбатан эҳтимоллироқ бўлишига олиб келади (албатта, ҳар иккала нурланишга ҳам танлаш қоидалари томонидан рухсат этилган шароитда).

Ҳақиқатан, уларнинг эҳтимоллари нисбати:

$$\frac{w(E2)}{w(M1)} \sim \frac{(a/\lambda)^2}{(v/c)^2} \sim \left(\frac{a\omega}{v}\right)^2 \sim \left(\frac{\Delta E}{E}\right)^2,$$

бу ерда $E \sim v\hbar/a$ — атом энергияси, $\Delta E = \hbar\omega$ — атом энергиясининг ўтишдаги ўзгариши. Биз кўрамизки, агар $\Delta E \sim E$ бўлса, бу нисбат ~ 1 бўлади, аммо агар $\Delta E \ll E$ бўлса, у жуда кичик бўлиши мумкин.

Хусусан, бундай ҳол битта сатҳнинг ўта юпқа структурасининг кампонентлари орасидаги ўтишларда

бўлади (уларнинг частотаси радиотўлқин соҳада ётади). Бу ўтишлар умуман электр диполь сифатида бўлиши мумкин эмас, чунки ўта юпқа структуранинг ҳамма компонентлари фақат электрон ва ядро моментлари йиғиндиси билан фарқ қилиб, бир хил жуфтликка эга. $E2$ ва $M1$ ўтишлар жуфтлик ўзгармаган ҳолда юз беради. Лекин ўта юпқа структура интервалларининг катталиги нисбатан жуда кичик бўлганлиги учун $M1$ нурланишга нисбатан $E2$ нинг эҳтимоллиги кам, демак, кўрсатилган ўтишлар магнит диполь сифатда амалга ошади.

100- §. Инфрақизил ҳалокат

Иккита зарядланган зарранинг тўқнашиши, умуман айтганда, фотонлар чиқариш билан амалга ошади (*тормозланиш нурланиши*). Фотон частотасининг мумкин бўлган қийматлари нолдан тўқнашувчи зарралар нисбий ҳаракатларининг ҳамма кинетик энергиясигача бўлган интервалдаги узлуксиз қаторни қабул қилади. Паст частотали чегаравий ҳолдаги бу нурланишнинг баъзи хоссаларини кўриб чиқамиз.

Фотоннинг энергияси $\hbar\omega \rightarrow 0$ бўлганда квантомеханикавий формулалар классик формулаларга ўтиши керак. Бунда, албатта, гап нурланиш жараёнининг фотон тушунчасидан мустақил равишда таърифланадиган характеристикаларини ҳисоблаш ҳақида бориши керак. Бундай характеристика сифатида нурланишнинг тўла интенсивлиги — тўқнашувчи зарралар томонидан нурланишга сарфланадиган тўла энергия бўлиши мумкин.

Классик назарияга мувофиқ, тормозланиш нурланиши энергиясининг спектрал тақсимланиши $\omega \rightarrow 0$ ҳолда

$$d\mathcal{E} = \text{const} \cdot d\omega \quad (100.1)$$

кўринишдаги ифодага интилади, бу ерда const ω га боғлиқ бўлмаган катталик (1, 80- § даги 4- масалага қаранг, унда заряднинг массага нисбати турлича қийматга эга бўлган иккита зарранинг норелятивистик тўқнашиши кўрилган).

Юқорида айтилганга мувофиқ, бу чегаравий қонун квант назариясида ҳам ўз кучини сақлаб қолса- да, лекин бу ерда у яна бошқа аспектга ҳам эга. Чунончи, нурланиш ўзининг тўла энергияси билангина эмас, балки чиқарилган фотонлар сони билан ҳам характерланади. Частоталари $d\omega$ интервалда бўлган фотонлар сонини

$d\mathcal{E}$ ни $\hbar\omega$ га бўлиш орқали топиш мумкин, демак, ўша чегарада у

$$dN = \text{const} \frac{d\omega}{\omega} \quad (100. 2)$$

кўринишга эга.

Чиқарилган фотонларнинг тўла сони $dN/d\omega$ ни $d\omega$ бўйича интеграллаш йўли билан олинади. Қуйи чегара ($\omega = 0$) да интегралнинг узоқлашишини (логарифмик) кўрамиз. Бошқача қилиб айтганда, чексиз кичик энергияли чексиз кўп фотонлар чиқарилади. Бу ҳолни *инфракүизил ҳалокат* деб аталади.

Қайд қилиб ўтамизки, бу тарқалиш реал физикавий ситуацияни акс эттиради ва у мавжуд назариянинг мукамал эмаслиги натижасида ҳосил бўладиган фиктив тарқалишларга ҳеч қандай алоқадор эмас. Инфракүизил тарқалишнинг келиб чиқиши фотон массасининг нолга тенг бўлиши ва, демак, унинг энергияси исталганича кичик бўлиши мумкинлиги билан боғлиқ.

Исталганча кичик частотали фотонларни амалда кузатиб бўлмаса ҳам, лекин инфракүизил тарқалиш принципал аҳамиятга эга. Қатъий қилиб айтганда, зарядланган зарраларнинг ҳар қандай тўқнашиши чексиз сонли юмшоқ квантларни чиқариш билан бирга амалга ошади, фотонларни бутунлай чиқармасдан ёки уларнинг чекланган миқдорини чиқариш билан юз берадиган тўқнашишларнинг эҳтимоллиги нолга тенг. Шу маънода зарядланган зарраларнинг тўқнашиши қатъий равишда эластик бўлиши мумкин эмас деб айтиш мумкин. Бундай тўқнашишларнинг тўла эҳтимоллигини ҳисоблашда чиқариладиган фотонлар спектрини „көсиш“ зарур: частоталари бирор кичик, лекин чекланган чегарадан ошмайдиган фотонлар чиқариладиган ҳамма ҳолларни „эластик“ деб ҳисоблашни шартлашиб олиш керак.

М а с а л а¹.

+ Ze зарядли ядро майдонидан учиб ўтадиган электроннинг тормозланиш нурланишининг кесими топилиши. $v \ll c$ деб фарз қилинади, лекин шу билан бирга $Ze^2/\hbar v \ll 1$, $Ze^2/\hbar v' \ll 1$, бу ерда v ва v' — электроннинг бошланғич ва охириги тезлиги (кейинги тенгсизликлар — Борн яқинлашишини қўллаш шарт; унда майдоннинг электрон тўлқин функцияларига тўқнашувгача ва ундан кейинги таъсири эътиборга олинмайди).

¹ Одатдаги бирликлардан фойдаланамиз.

Ечилиши. (97, 4) га мувофиқ $\hbar\omega$ энергияли фотон чиқарилиши ва электрон $d\phi'$ фазовий бурчак элементига йўналтирилган $p' = mv'$ импульсга эга бўладиган тўқнашишлар кесими

$$d\sigma = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |d_{fi}|^2 p'^2 dp' d\phi' \quad (1)$$

Формула билан аниқланади. $d^3p' = p'^2 dp' d\phi'$ қўшимча кўпайтувчи охириги ҳолат (p' импульсли эркин электрон) узлуксиз спектрга тааллуқли эканлигига боғлиқ. Эҳтимолликдан (97, 4 да) кесимга ўтиш бошлангич электрон тўлқин функциясини тегишлича нормалаш (оқимнинг бирлик зичлигига) йўли билан амалга оширилади:

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2)$$

бу ерда $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ ((21, 6) билан солиштиринг). Охириги электроннинг тўлқин функцияси—импульсли фазодаги δ - функцияга нормаланган ясси тўлқин:

$$\psi_f = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}}. \quad (3)$$

Чиқариладиган фотоннинг частотаси ω ва p' билан энергиянинг сақланиш тенгламаси орқали боғланган:

$$\hbar\omega = \frac{1}{2m} (p^2 - p'^2). \quad (4)$$

Электроннинг $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$ дипол моменти матрица элементини (унинг майдон марказига нисбатан ҳаракатида) ҳисоблашни бирданига (2) ва (3) функциялар бўйича эмас, балки шу майдондаги ҳаракатнинг

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \nabla \frac{Ze^2}{r}$$

тенгламасини ҳисобга олгандан сўнг амалга ошириш керак.

Квант механикасида бу тенгламани тегишли операторлар орасидаги боғланиш деб тушуниш керак ((21, 2) билан солиштиринг). Шу операторларнинг матрица элементларини олиб, қуйидагини топамиз:

$$m(\ddot{\mathbf{r}})_{fi} = -m\omega^2 \mathbf{r}_{fi} = Ze^2 \left(\nabla \frac{1}{r} \right)_{fi}.$$

$\left(\nabla \frac{1}{r} \right)_{fi}$ матрица элементи (2), (3) функциялар бўйича

$$\left(\nabla \frac{1}{r} \right)_{fi} = \int \left(\nabla \frac{1}{r} \right) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} dV = i\mathbf{q} \left(\frac{1}{r} \right)_{fi} = \frac{4\pi i \mathbf{q}}{q^2}$$

Фурье компонентига келтирилади, бу ерда $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$ ва (68, 6) формула қўлланилган. Натижада (1) формула қуйидагини беради:

$$d\sigma = \frac{8}{3\pi} Z^2 \alpha \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{v' c^2 d\phi'}{v(v-v')^2} \frac{d\omega}{\omega}.$$

v' йўналишлар бўйича интеграллаш учун

$$(v - v')^2 = v^2 + v'^2 - 2vv' \cos \theta, \quad d\sigma' = 2\pi \sin \theta d\theta$$

ни ёзамиз ва $d\theta$ бўйича интеграллашдан сўнг натижада

$$d\sigma = \frac{16}{3} Z^2 \alpha \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{c^2}{v^2} \ln \frac{v+v'}{v-v'} \frac{d\omega}{\omega}$$

бўлади. Шу ифоданинг $\omega \rightarrow 0$ даги узоқлашиши инфрақизил ҳалокатга тўғри келади.

101- §. Ёруғликнинг сочилиши

Атом томонидан фотоннинг сочилиши бошланғич фотонни (k импульс билан) ютиш билан бир вақтда бошқа k' фотонни чиқаришдан иборат. Бунда атом энергиянинг бошланғич ёки бирор бошқа сатҳида қолиши мумкин. Биринчи ҳолда фотоннинг частотаси ўзгармайди (*Релей* сочилиши ёки *силжисмаган* сочилиш), иккинчи ҳолда эса

$$\omega' - \omega = E_i - E_f \quad (101.1)$$

катталиққа ўзгаради, бу ерда E_i ва E_f — атомнинг бошланғич ва охири энергияси (*комбинацион ёки силжисмаган сочилиш*). Агар бошланғич ҳолда атом асосий сатҳда бўлса, унда частота фақат камайиш томонга ўзгариши мумкин. Қўзғотилган атомда сочилганда эса охириги сатҳ бошланғич сатҳдан юқорида ҳам, пастда ҳам ётиши мумкин, демак, комбинацион сочилиш частотанинг камайишига ҳам, кўпайишига ҳам олиб келиши мумкин.

Икки фотон тўлдириш сонларини бир вақтда ўзгартирадиган ўтишлар учун электромагнит ўзаро таъсир оператори матрица элементига эга бўлмаганлиги учун сочилиш эффекти фақат ғалаёнланиш назариясининг иккинчи яқинлашишида пайдо бўлади. Уни маълум оралиқ ҳолатлар орқали юз беради деб қараш керак; бу ҳолатлар икки хил бўлиши мумкин:

I. k фотон ютилади, атом E_i бошланғич сатҳдан ўзининг бошқа мумкин бўлган бирор E_n сатҳига ўтади, охириги ҳолатга ўтишида k' фотон чиқарилади.

II. k' фотон чиқарилади, атом E_n ҳолатга ўтади, охириги ҳолатга ўтилганда, k фотон ютилади.

(36.2) га мувофиқ, кўрилатган процесс учун

$$V_{fi} = \sum_n \left(\frac{V_{fi} V_{ni}}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_n} + \frac{V_{fn} V_{ni}}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_n} \right) \quad (101.2)$$

Йиғинди матрица элементи ролини ўйнайди, бу ерда $\mathcal{E}_i = E_i + \omega$ — „атом+фотонлар“ системасининг бошланғич энергияси, $\mathcal{E}_n^I$ ва $\mathcal{E}_n^{II}$ эса кўрсатилган типдаги иккита оралиқ ҳолатларнинг энергиялари:

$$\mathcal{E}_n^I = E_n, \quad \mathcal{E}_n^{II} = E_n + \omega + \omega';$$

V_{ni} ва V_{fn} — ютиш орқали юз берадиган ўтишларнинг матрица элементлари, V_{fn} ва V_{ni}' эса фотон чиқариб ўтишларнинг матрица элементлари; n бўйича йиғишдан атомнинг бошланғич ҳолати чиқариб ташланади (бу йиғинди ишорасидаги штрих билан белгиланган).

Бизнинг вазифамиз сочилиш жараёнининг кесимини ҳисоблашдан иборат. Бу вазифа бундан олдин спонтан чиқариш эҳтимоллини ҳисоблашда қўлланилган (95. 14) формула ёрдамида ҳал этилади. Ҳақиқатан ҳам, фарқ шундаки, энди ω' фотонни чиқаришда изоляцияланган атом эмас, балки атомлар системаси унга тушадиган ω фотон билан биргаликда „нурлатувчи“ бўлади. Эҳтимолликдан кесимга ўтиш эҳтимоллики атомга тушаётган фотонлар оқимининг зичлигига бўлиш орқали, оддийгина амалга оширилади. „ Ω ҳажмда 1 фотон“га нормаланган фотоннинг тўлқин функциясига c/Ω га (c тезликни $1/\Omega$ фотонлар сонининг зичлигига кўпайтиришга) тенг бўлган оқим зичлиги тўғри келади. Релятивистик бирликларда $c = 1$ ва, демак, кесим қуйидаги формула бўйича ҳисобланади:

$$dz = \frac{\Omega^2}{4\pi^2} [V_{fi}]^2 \omega'^2 d\omega', \quad (101.3)$$

бу ерда $d\omega'$ — сочилган фотон йўналиши учун фазовий бурчак элементи.

Бошланғич ва охири фотоннинг тўлқин узунликлари сочувчи атомнинг ўлчамларига нисбатан жуда катта деб ҳисоблаймиз. Бунда ҳамма ўтишларнинг матрица элементлари учун дипол яқинлашишдан фойдаланиш мумкин. (97.2) ва (97.2 а) га мувофиқ,

$$V_{ni} = -i \sqrt{\frac{2\pi\omega}{\Omega}} (\mathbf{e} \mathbf{d}_{ni}), \quad V_{fn}' = i \sqrt{\frac{2\pi\omega'}{\Omega}} (\mathbf{e}'^* \mathbf{d}_{fn}).$$

V_{ni}' ва V_{fn} учун ҳам шунга ўхшаш ($\mathbf{e}$ ва $\mathbf{e}'$ мос ҳолда ω ва ω' фотонларнинг қутбланиш векторлари) олинади.

Бу ифодаларнинг ҳаммасини (101.2) га ва ундан кейин (101.3) га қўямиз, у ҳолда сочилиш кесими¹

$$d\sigma = [A_{fi}]^2 \frac{\omega\omega'^3}{\hbar^2 c^2} d\omega', \quad (101.4)$$

бу ерда сочилиш амплитудаси

$$A_{fi} = \sum_n \left\{ \frac{(\mathbf{d}_{fi}\mathbf{e}^*)(\mathbf{d}_{ni}\mathbf{e})}{\omega_{ni} - \omega} + \frac{(\mathbf{d}_{fn}\mathbf{e})(\mathbf{d}_{ni}\mathbf{e}^*)}{\omega_{nf} + \omega} \right\}, \quad (101.5)$$

$$\hbar\omega_{ni} = E_n - E_i, \quad \hbar\omega_{nf} = E_n - E_f.$$

Бу формула 1925 йилда Г. Крамерс ва В. Гейзенберг томонидан олинган. n бўйича йиғиш атомнинг барча мумкин бўлган ҳолатлари (узлуксиз спектр ҳолатлари ҳам) бўйича амалга оширилади (бунда i ва f ҳолатлар автоматик равишда йиғиндидан тушириб қолдирилади, чунки диагональ матрица элементлари $\mathbf{d}_{ii} = \mathbf{d}_{ff} = 0$ — 54- § га қаранг)².

Бир хил жуфтликка эга бўлган ҳолатлар (жумладан мос келувчи i ва f ҳолатлар) орасидаги ўтишлар учун сочилиш амплитудасининг нолдан фарқ қилишини кўриш осон. Ҳақиқатан, $\mathbf{d}$ векторнинг матрица элементи фақат турлича жуфтликка эга бўлган ҳолатлар орасидаги ўтишлар учун нолдан фарқ қилади; шунинг учун i ва f ҳолатларнинг жуфтлиги n ҳолатнинг жуфтлигига ((101.5) даги йиғиндининг ҳар бир ҳадида) қарама-қарши бўлиши керак, ва, демак, ўзаро бир хилдир. Бу қоида нурланишдаги (электр диполь) жуфтлик бўйича танлаш қондасига қарама-қаршидир, демак, бунда альтернатив таъқиқ мавжуд: нурланишда рухсат этилган ўтишлар сочилишда тақиқланган, сочилишда рухсат этилганлари эса нурланишда тақиқланган.

$\omega \rightarrow 0$ да сочилиш амплитудаси маълум чегарага интилади. Шунинг учун кичик ω ларда силжимаган сочилишнинг ($\omega' = \omega$) кесими ω^4 га пропорционал бўлади.

Тескари ҳолда эса, яъни ω частота (101.5) йиғиндидаги барча муҳим ω_{ni} , ω_{nf} частоталарга нисбатан

¹ Бу ерда ва қуйида одатдаги бирликларни қўллаймиз.

² Резонанс ҳолда, яъни ω частота ω_{ni} ёки ω_{fn} частоталардан бирига яқин бўлганда (101.4—5) формулани қўллаб бўлмайди. Бу ҳолда (резонанс флуоресценция деб аталадиган ҳолда) спектрал чизиқларнинг табиий кенглиги ҳисобга олиниши керак (102- §).

катта бўлганда (лекин, олдингидек тўлқин узунлиги атом ўлчамларига нисбатан катта, албатта), биз классик назария формулаларига қайтишимиз керак.

Ҳақиқатан, (101. 5) амплитуда ёйилмасининг биринчи йўқолмайдиган ҳадини $1/\omega$ даражалар бўйича ҳисоблаш (бунга биз тўхталиб ўтирмаймиз)

$$d\sigma = Z^2 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |e'^* e|^2 d\omega' \quad (101.6)$$

сочилиш кесимига олиб келади, бу ерда Z — атомдаги электронлар сони. (101.6) ни сочилган e' фотоннинг қутбланишлари бўйича йиғиб, биз Томсоннинг классик формуласини [I, (84.10)] оламиз.

Ёруғликнинг ўлчамлари тўлқин узунлигига нисбатан кичик бўлган ҳажмда жойлашган бир хил N атомлар тўпламидан сочилишини кўриб чиқамиз. Бундай тўпламдан сочилиш амплитудаси ҳар бир атом томонидан сочилиш амплитудалари йиғиндисига тенг. Лекин бунда бир вақтда кўрилаётган бир нечта бир хил атомларнинг тўлқин функцияларини (унинг ёрдамида дипол моментининг матрица элементи ҳисобланади) бир хил деб бўлмайди. Тўлқин функциялар ўз моҳиятига кўра фақат ихтиёрий фазавий кўпайтувчига аниқлик билан тасвирланган ва ҳар бир атом ўзининг шундай кўпайтувчисига эга. Сочилиш кесими ҳар бир атомнинг фазавий кўпайтувчилари бўйича мустақил ўртачалаштирилиши лозим.

Ҳар бир атомнинг A_{fi} сочилиш амплитудаси $\exp \{i(\varphi_i - \varphi_f)\}$ кўпайтувчига эга, бу ерда φ_i, φ_f — бошланғич ва охириги ҳолатлар тўлқин функцияларининг фазалари. Силжиган сочилиш учун i ва f ҳолатлар турлича ва бу кўпайтувчи бирдан фарқ қилади. Сочилиш кесимини аниқлайдиган модуль квадрати $|\sum A_{fi}|^2$ да (ҳамма N атомлар бўйича йиғинди) турли атомларга тааллуқли бўлган йиғинди ҳадларининг кўпайтмаси фазавий кўпайтувчиларга эга. Бу кўпайтувчилар атом фазалари бўйича ўртачаланганда нолга айланади; фақат ҳар бир ҳадларнинг модуллари квадрати қолади. Бу эса N атомларда сочилишнинг тўла кесими ҳар бир атомда сочилиш кесимини N га кўпайтириш йўли билан олинишини билдиради, яъни сочилишнинг амплитудалари эмас, балки унинг кесимлари қўшилади. Бу ҳолда сочилиш *нокогерент* дейилади.

Агар атомнинг бошланғич ва охири ҳолатлари мос келса, у ҳолда $\exp\{i(\varphi_i - \varphi_f)\}$ кўпайтувчилар бирга тенг бўлади. Бу ҳолда сочилиш амплитудаси алоҳида атомда сочилиш амплитудасидан N кўпайтувчига фарқ қилади, сочилиш кесими эса мос равишда N^2 кўпайтувчига фарқ қилади. Бу ҳолда сочилиш *когерент* дейилади.

Когерент сочилиш, ҳар қандай ҳолда, силжимаган бўлади; аммо тескари фикрнинг тўғри бўлиши шарт эмас. Сочувчи атом фақат энергиянинг айнамаган сатҳида бўлгандагина силжимаган сочилиш когерент бўлади. Агар энергиянинг сатҳи айниган бўлса, у ҳолда атомнинг турлича ўзаро айниган ҳолатлари орасидаги ўтишларидан келиб чиқадиган нокогерент силжимаган сочилиш ҳам мавжуд бўлади. Силжимаган сочилишнинг нокогерентлиги соф квант эффекти эканини таъкидлаб ўтамыз. Классик назарияда частота ўзгармасдан бўладиган сочилиш шунга кўра когерент бўлади (I, 84- § да когерент тушунчаси худди шундай тавсифланган эди).

102- §. Спектрал чизиқларнинг табиий кенглиги

Шу вақтгача ёруғликнинг чиқарилиши ва сочилишини ўрганаётганда биз системанинг (айтайлик, атомнинг) ҳамма сатҳларини қатъий дискрет деб кўрдик. Лекин қўзғотилган сатҳлар ёруғсизланиш эҳтимолига эга бўлиб, чекланган яшаш вақтига эга. Бу эса шунга олиб келадики, сатҳлар кичик, лекин маълум кенгликни олиб, квазидискрет бўлиб қолади; улар $E - i\Gamma/2$ кўринишда ёзилади, бу ерда Γ ($\Gamma/\hbar$ одатдаги бирликларда) — шу ҳолатнинг барча мумкин бўлган „емирилиш“ процессларининг эҳтимоллиги (1 сек да) (38- §)¹.

Бу ҳолнинг нурланиш процессига таъсири қандайлиги масаласини кўриб чиқамиз. Олдиндан аниқки, сатҳ кенглиги чекланганлиги сабабли чиқарилган нур қатъий монохроматик бўлмайди; частоталар $\Delta\omega \sim \Gamma$ интервалда сочилган бўлади. Лекин фотонларнинг частоталар бўйича тақсимланишини шундай аниқлик билан

¹ Аслида, сатҳларнинг радиацион кенглиги жуда кичик. Жумладан, $\omega = 10^8 - 10^9 \text{ сек}^{-1}$ емирилиш эҳтимоллиги $\Gamma \sim 10^{-6} - 10^{-7}$ эв кенгликка тўғри келади.

ўлчаш учун $T \gg 1/\Delta\omega \sim 1/\Gamma$ вақт керак. Бу вақт ичида сатҳ катта эҳтимоллик билан ёруғсизланади. Шунинг учун гап вақт бирлигидаги эҳтимоллик ҳақида эмас, балки берилган частотали фотон чиқаришнинг тўла эҳтимоллиги ҳақида бориши керак. Атомнинг бирор қўзғотилган $E_i - i\Gamma_i/2$ сатҳдан чексиз яшаш вақтига эга бўлган ва шу сабабли қатъий дискрет бўлган асосий E_f ҳолатга ўтиш ҳоли учун шу эҳтимолликни ҳисоблаймиз. Фикрлашни соддалаштириш учун бу ҳолда ўтишни берилган қўзғотилган сатҳдан нурланишнинг ягона йўли деб фараз қиламиз.

Ўтиш эҳтимоллиги учун олинган (35. 6) формуланинг 35- § да қилинган исботига қайтайлик (унинг ёрдамида 95- § да нурланиш эҳтимоллиги ҳисобланган эди). Эслатиб ўтамизки, биз катта t вақтлар учун $a_{fi}(t)$ функцияни кўриб чиққан эдик ва $|a_{fi}|^2/t$ нисбат изланаётган вақт бирлигидаги ўтиш эҳтимоллигини берган эди. Энди биз бу ишнинг маъносини аниқлашимиз мумкин: у қўзғотилган сатҳ яшаш вақтига нисбатан кичик бўлган вақтларга тааллуқлидир; бунда катта вақтлар $1/(E_i - E_f)$ даврга нисбатан катта, лекин $1/\Gamma$ га нисбатан кичик вақтларни билдиради. Худди шунинг учун сатҳнинг чекланган кенлиги мавжуд эканлигини эътиборга олмаса ҳам бўлар эди. Энди эса, $1/\Gamma$ га яқин вақтларни кўриб чиқишимиз керак бўлганлиги учун қўзғотилган ҳолатнинг кенлигини эътиборга олиш керак.

Нурланиш ҳақидаги масалада биз атом + фотонлар системаси билан иш тутамиз; шунга мувофиқ (35.2) ифодада $E_f + \omega - E_i$ айирма ω_{fi} ўтиш частотасининг ролини ўйнайди.

Энди атомнинг бошланғич сатҳини $E_i - i\Gamma_i/2$ кўринишда ёзиб, қўйидагини оламиз:

$$a_{fi}(t) = V_{fi} \frac{1 - \exp \{i(E_f + \omega - E_i)t - (\Gamma_i/2)t\}}{E_f - E_i + \omega + i\Gamma_i/2}. \quad (102.1)$$

Ўтишнинг изланаётган тўла (ҳамма вақт учун) эҳтимоллиги $t \rightarrow \infty$ даги $|a_{fi}(t)|^2$ нинг чегаравий қиймати билан аниқланади, $d\omega$ интервалдаги частотали ва $d\phi$ фазовий бурчакдаги йўналишли фотонни чиқариш учун у

$$dW = |a_{fi}(\infty)|^2 \frac{\Omega \omega^2 d\omega d\phi}{(2\pi)^3} \quad (102.2)$$

(бу ерда Ω худди (95.13) дагидек, фотоннинг тўлқин функцияси учун нормалаш ҳажми). Бунга (102.1) ни қўямиз, у ҳолда

$$dW = \frac{\Omega \omega^2 d\omega}{(2\pi)^3} |V_{fi}|^2 \frac{d\omega}{[\omega - (E_i - E_f)]^2 + \Gamma_i^2/4}.$$

Фақат чиқариш эҳтимоллигининг спектрал тақсимооти билан қизиқиб, бу ифодани фотон йўналишлари бўйича интеграллаймиз. (95.14) га мувофиқ интеграл

$$\int \frac{\Omega \omega^2}{(2\pi)^3} |V_{fi}|^2 d\omega = \frac{\omega}{2\pi},$$

бу ерда ω — нурланишнинг одатдаги тўла (вақт бирлигидаги) эҳтимоли, у таъриф бўйича Γ_i билан мос келади. Шундай қилиб, натижада

$$dW = \frac{\Gamma_i}{2\pi} \frac{d\omega}{[\omega - (E_i - E_f)]^2 + \Gamma_i^2/4}. \quad (102.3)$$

формулани топамиз. Бу ифодани — ∞ дан $+\infty$ гача бўлган барча частоталар бўйича интеграллаш 1 ни беради, бу ҳол чексиз вақт ичида атом, албатта, у ёки бу частотали фотонни чиқаришига мос келади.

(102.3) формула *спектрал чизиқ шаклини* — унинг кенглиги бўйича интенсивликнинг тақсимланишини аниқлайди. (102.3) формула орқали тасвирланадиган чизиқ шакли изоляцияланган атомга хосдир; уни *табiiй* шакл деб аташади¹.

¹ Чизиқнинг нурланаётган атомнинг бошқа атомлар билан ўзаро таъсирига алоқадор бўлган кенгайиши (тўқнашиш кенгайиши) ёки ёруғлик манбаида турлича тезликлар билан ҳаракат қилувчи атомлар мавжудлигидан кенгайиши (Допплер кенгайиши) дан фарқ қилиш учун табiiй деб аталади.

ФЕЙНМАН ДИАГРАММАЛАРИ

103- §. Сочилиш матрицаси

Юқорида (75- §) айтилганидек, релятивистик квант назариясида қўйиладиган масаланинг типик моҳияти ҳар хил сочилиш процесслари, яъни эркин зарралар системасининг ҳар хил ҳолатлари орасидаги ўтишлар эҳтимолларининг амплитудаларини аниқлашдан иборат. Ҳозирги вақтда бу масалани квант электродинамикаси доирасида, яъни электромагнитик ўзаро таъсир билан боғлиқ бўлган процесслар учун принцип жиҳатдан ҳал килинган деб ҳисоблаш мумкин. Бу ўзаро таъсирнинг заифлиги (бу нозик структура доимийси α нинг кичиклигида ўз ифодасини топган) бундай процессларни ғалаёнланиш назарияси ёрдамида ўрганиш имконини беради. Лекин ғалаёнланиш назарияси аппаратининг одатдаги шакли (норелятивистик квант механикаси учун) камчиликка эга: унда релятивистик инвариантлик шарти ошкор ҳолда намоён бўлмайди. Бу камчилик Ричард Фейнман яратган изчил релятивистик ғалаёнланиш назариясида бартараф қилинди (1948). Ушбу назария аппарати ҳатто одатдаги ғалаёнланиш назариясида амалда бажариб бўлмайдиган ҳисоблашларни беҳад даражада соддалаштиради. Бунинг устига, у ҳисоблаш процессида вужудга келадиган интеграллар узоқлашишини (75- §¹ да эслатилган) бир қийматли тарзда бартараф қилиш имконини беради.

¹ Бу бобнинг мақсади фақат назариянинг асосий ғоялари унда шакллантирилган тушунчалар ва катталикларнинг келиб чиқиши ва маъноси ҳақида тушунча бериб ўтишдангина иборат. Шу сабабли, зарурий ҳисоблашлар тўла-тўқис келтирилган эмас; бунда келтирилган ҳисоблаш процесси назариянинг асосида ётган ғояларни аниқлашни кўзда тутати, ҳолос.

Даставвал, ихтиёрий, процесслар учун сочилиш амплитудасининг энг умумий ифодаси қандай ҳосил қилинишини кўрсатамиз.

Зарралар системасининг иккиламчи квантланиш методи билан тавсифланишини назарда тутиб, мустақил ўзгарувчилари сифатида эркин зарралар ҳолатларининг тўлдирувчи сонлари олинган тўлқин функцияни киритамиз. Бу функцияни унинг, одатдаги, координата функциялари тўлқин функциялардан фарқли эканини таъкидлаш мақсадида φ символ билан белгилаймиз.

Система гамильтонианини $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ кўринишда келтирамыз, бу ерда $\hat{H}_0$ — эркин зарралар гамильтониани, $\hat{V}$ — электромагнитик ўзаро таъсир оператори. Φ функция

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Phi. \quad (103.1)$$

тўлқин тенгламага бўйсунди. Бу ерда операторлар ва тўлқин функциялар одатдаги (Шредингер) тасаввирида берилган деб фараз қилинади: операторлар вақтга боғлиқ эмас, система ҳолатининг вақт ўтиши билан ўзгариши эса тўлқин функциянинг вақтга боғлиқ қисми орқали тавсифланади.

76- § да кўрсатилганидек, квант механикаси аппаратининг бошқа таърифи ҳам бўлиши мумкин. Бу таърифда вақтга ошкор боғланиш тўлқин функциялардан операторларга кўчирилади, бу (Гейзенберг) тасаввурдаги тўлқин функциялар вақтга умуман боғлиқ бўлмайди. Лекин ҳозир қўйилган масалани ҳал қилишда маълум „оралиқ“ тасаввур қулай. Бундай тасаввурда операторга вақтга боғланишнинг ҳаммаси эмас, балки унинг бир қисми — эркин зарралар системаси ҳолатига мос қисмигина кўчирилади. Бошқача қилиб айтганда, бундай тасаввурда (уни *ўзаро таъсир тасаввури* дейилади) тўлқин функциянинг вақтга боғланиши фақат ғалаёнланиш таъсиригагина боғлиқдир, яъни у бизни қизиқтираётган ва зарраларнинг ўзаро таъсири натижа-сида юз берадиган сочилиш процессига тўла мос келади.

Айтилганларга биноан, ўзаро таъсир тасаввурда Φ функция учун тўлқин тенглама (103.1) дан ўнг томондаги $\hat{H}_0$ нинг йўқлиги билан фарқ қилади ва

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \hat{V}(t) \Phi \quad (103.2)$$

кўринишга эга бўлади. $\hat{V}(t)$ операторда t аргументни кўрсатишимиздан мақсад, бу операторнинг қаралаётган тасаввурда (103.1) даги вақтга боғлиқ бўлмаган $\hat{V}$ Шредингер операторидан фарқ қилишини, яъни унинг вақтга боғлиқ эканини таъкидлашдир.

Агар $\Phi(t)$ ва $\Phi(t + \delta t)$ орқали Φ нинг бир-бирига чексиз яқин моментлардаги қийматларини белгиласак, у ҳолда (103.2) га кўра, улар бир-бири билан

$$\Phi(t + \delta t) = [1 - i\delta t \cdot \hat{V}(t)] \Phi(t)$$

ёки худди шундай аниқликда $\Phi(t + \delta t) = e^{-i\delta t \cdot \hat{V}(t)} \Phi(t)$ ифода орқали боғланади. Бу формулани вақтнинг $t = -\infty$ дан $t = +\infty$ гача оралиғидаги кетма-кет δt_n интервалларга қўллаб, функциянинг $\Phi(+\infty)$ охирги қийматини унинг $\Phi(-\infty)$ дастлабки қиймати орқали ифодалаш мумкин. Бу қийматларни ўзаро боғловчи операторни $\hat{S}$ орқали белгилаб, $\Phi(+\infty) = \hat{S} \Phi(-\infty)$ ни ҳосил қиламиз; бунда

$$\hat{S} = \prod_n e^{-i\delta t_n \cdot \hat{V}(t_n)} \quad (103.3)$$

бўлиб, Π белги вақтнинг барча δt_n интерваллари бўйича кўпайтманинг чегарасини билдиради. Агар $\hat{V}(t)$ одатдаги функция бўлганда эди, бу чегара

$$\exp\left(-i \sum_n \delta t_n \cdot V(t_n)\right) = \exp\left(-i \int_{-\infty}^{+\infty} V(t) dt\right)$$

га келтирилган бўлур эди. Лекин бундай келтиришда ҳар хил вақт моментларида олинган кўпайтувчиларнинг ўзаро коммутативлигига асосланиш лозим. Шундагина (103.3) кўпайтмадан экспонентадаги йиғиндига ўтиш

мумкин. $\hat{V}(t)$ оператор учун бундай коммутативлик, умуман мавжуд эмас ва шу сабабли, даража кўрсат-

кични одатдаги интегралга келтириб бўлмайди. (103.3) ни

$$\hat{S} = \hat{T} \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{\infty} \hat{V}(t) dt \right\}. \quad (103.4)$$

символик кўринишда ёзамиз, бунда $\hat{T}$ *хронологик оператор* бўлиб, у (103.3) кўпайтманинг кетма-кет кўпайтувчиларида вақт моментларининг маълум („хронологик“) кетма-кетлигини билдиради. Бундай ёзиш албатта, фақат соф символик характерга эга. Лекин у $\hat{S}$ нинг ғалаёнланиш даражалари бўйича ёйилмаси бўлган

$$\hat{S} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_k \hat{T} \{ \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_k) \}. \quad (105.5)$$

қаторни ёзишни осонлаштиради. Бунда ҳар бир ҳадда интегралнинг k -даражаси k -каррали интеграл кўринишида ёзилган, $\hat{T}$ оператор эса $t_1, t_2, \dots, t_k$ ўзгарувчилар қийматларининг ҳар бир соҳасида $\hat{V}(t_1), \hat{V}(t_2) \dots, \hat{V}(t_k)$ кўпайтувчиларни хронологик тартибда, яъни чапдан ўнгга t қийматларининг ортиш тартибида жойлаш кераклигини билдиради. Энди хронологиялаш операцияси кўпайтмага алоқадор [(103. 4) даги каби экспоненциал ифодага эмас] бўлганидан, (103. 5) йиғиндининг ҳар бир ҳади символик эмас, балки реал характерга эга бўлиб қолади.

$\hat{S}$ оператор таърифидан маълумки, агар система тўқнашгунга қадар Φ ҳолатда (эркин зарраларнинг маълум тўплами) турган бўлса, у ҳолда унинг Φ_f ҳолатга (эркин зарраларнинг бошқа тўплами) ўтиш эҳтимоллигининг амплитудаси S_{fi} матрица элементи билан берилади. Ҳақиқатан ҳам, операторнинг матрица элементлари таърифига кўра, $\Phi(\infty) = \hat{S} \Phi$ функция

$$\Phi(\infty) = \sum_f S_{fi} \Phi_f$$

ёйилма кўринишида берилиши мумкин ((11.11) билан солиштиринг). Демак, $|S_{ji}|^2$ катталик системанинг $t \rightarrow \infty$ да (яъни ўзаро таъсир процессидан сўнг) охириги Φ_j ҳолатда топилиш эҳтимолини беради. $\hat{S}$ оператор сочилиш оператори деб, унинг матрица элементлари тўплами сочилиш матрицаси ёки S -матрица деб аталади (бу термин 75- § да эслатилган эди). Бу матрицанинг нодиagonal ($i \neq f$) элементлари $i \rightarrow f$ сочилиш процессларининг амплитудасидир¹.

(103.5) формулага батамом конкрет маъно бериш учун мумкин бўлган барча электродинamik процессларни ўз ичига олувчи $\hat{V}(t)$ ўзаро таъсир операторининг умумий кўринишини аниқлаш лозим. Бунга 95- § да ёзилган формулаларни умумлаштириш йўли билан осон эришиш мумкин. Мазкур параграфда (95.1) да $\hat{A}$ оператор билан берилган электромагнит майдонгина иккиламчи квантланган эди. Энди биз, шунингдек, электрон-позитрон майдонни ҳам иккиламчи квантлашга ўтишимиз керак. Бу ўтиш (95.5 — 6) матрица элементларидаги электрон тўлқин функцияларини тегишли Ψ -операторлар билан алмаштириш орқали бажарилади. Шундай қилиб,

$$\hat{V}(t) = -e \int \hat{j} \hat{A} d^3x \quad (103.6)$$

ифодага келамиз, бунда $\hat{j} = \hat{\Psi}^* \alpha \hat{\Psi}$ зарралар оқими зичлигининг иккиламчи квантланган оператори ($d^3x = dx dy dz$ — ҳажм элементи).

(103.6) да биз ҳозиргача фойдаланиб келган майдон потенциали калибровкасини махсус танлаш (нолга тенг скаляр потенциал билан калибровкалаш) га алоқадор бўлган уч ўлчовли $\hat{j}$ ва $\hat{A}$ векторлар қатнашади. Релятивистик инвариант ифодадар топишни кўзда тутиб, тўрт ўлчовли шаклга ўтамиз:

$$\hat{V}(t) = e \int \hat{j}^\mu \hat{A}_\mu d^3x, \quad (103.7)$$

¹ (103.5) ёйилма ёрдамида релятивистик ғалаёнланиш назарияси қоидаларини Φ . Дайсон келтириб чиқарган.

бу ерда $\hat{j}^\mu = \hat{\Psi} \gamma^\mu \hat{\Psi}$ — оқим зичлигининг 4-вектор оператори, $\hat{A}_\mu$ — калибровка шартли олдиндан аниқланмаган 4-потенциал оператори ($\hat{A}^\mu = (0, \hat{\mathbf{A}})$ да (103.7) ифода (103.6) га айланади). $\hat{A}^\mu$ операторнинг кўриниши (76.15) дан фақат фотонларнинг е қутбланиш вектори ўрнига бирлик e^μ 4-вектор ёзилиши билан фарқ қилади (e^μ бирлик вектор фақат махсус калибровкадагина $e^\mu = (0, \mathbf{e})$ га келтирилиши мумкин)¹:

$$\hat{A}^\mu = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi}{\Omega\omega}} (\hat{c}_{\mathbf{k}} e^\mu e^{-i(kx)} + \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{\mu*} e^{i(kx)}). \quad (103.8)$$

$\hat{\Psi}$ -операторларнинг электронлар ва позитронларни ҳосил қилиш ва йўқотиш операторлари орқали ифодалари (85.3) формулалар билан берилади. Уларни

$$\begin{aligned} \hat{\Psi} &= \sum_{\mathbf{p}} (\hat{a}_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}} + \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \Psi_{-\mathbf{p}}), \quad \hat{\bar{\Psi}} = \\ &= \sum_{\mathbf{p}} (\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \bar{\Psi}_{\mathbf{p}} + \hat{b}_{\mathbf{p}} \bar{\Psi}_{-\mathbf{p}}). \end{aligned} \quad (103.9)$$

кўринишда ёзамиз. Бунда $\Psi_{\mathbf{p}}$ функциялар — $\mathbf{p}$ 4-импульсли ясси тўлқинлар:

$$\Psi_{\mathbf{p}} = (1/\Omega) u(\mathbf{p}) e^{-i(p x)}. \quad (103.10)$$

(103.8—9) операторлардаги ва шу билан бирга (103.7) ўзаро таъсир операторидаги вақтга боғланиш зарраларнинг эркин ҳаракат тўлқин функциялари —

¹ Қисқалик мақсадида, ҳамма жойда зарралар қутбланишини кўрсатувчи индексни тушириб қолдирамиз. Бу бобда биз 4-векторларни уларнинг компонентларини кўрсатувчи $\mu, \gamma, \dots$ индексларсиз оч ҳарфлар ёрдамида шартли белгилаш усулидан кенг фойдаланамиз. Масалан, x ва p ҳарфлари $x^\mu = (t, \mathbf{r})$ ва $p^\mu = (e, \mathbf{p})$ 4-векторларини билдиради. Бунда 4-векторларнинг скаляр кўлайтмалари ҳам индексиз ёзилади. Масалан, $(px) \equiv p_\mu x^\mu = et - \mathbf{p}\mathbf{r}$; m массали зарранинг 4-импульси учун $p_\mu p^\mu = m^2$ тенглик $p^2 = m^2$ кўринишда ёзилади, фотоннинг 4-импульси учун $k_\mu k^\mu = 0$ тенглик $k^2 = 0$ кўринишда ёзилади ва ҳоказо. Бу хил шартли белгилар ҳозирги замон адабиётида кенг қўлланилади. Ҳарфлар миқдори билан физиканинг аҳтиёжи ўртасидаги бу келишув китобхонлардан, албатта, катта эътибор талаб қилади.

ясси тўлқинлардан ўтказилганини таъкидлаб ўтамыз. Бошқача қилиб айтганда, бу операторлар худди талаб қилинаётган тасаввурда, яъни ўзаро таъсир тасаввурида ёзилган.

104- §. Фейнман диаграммалари

Сочилишнинг матрица элементларини ҳисоблаш йўлини конкрет мисоллар ёрдамида тушунтирамиз.

Галаёнланиш назариясининг иккинчи яқинлашишида рўй берадиган процессларни кўриб чиқамиз. Уларга (103.5) ёйилмадаги иккинчи тартибли ($k=2$) ҳад мос келади; k ни ўрнига қўйиб, бу ҳадни

$$\hat{S}^{(2)} = -\frac{e^2}{2} \iint d^4x d^4x' \hat{T} \{ \hat{j}^\mu(x) \hat{A}_\mu(x) \hat{j}^\nu(x') \hat{A}_\nu(x') \} \quad (104.1)$$

кўринишда ёзамиз, бу ерда $d^4x = dt d^3x$ — 4- ҳажм элементи. Бу формуланинг релятивистик инвариант характерига диққатни жалб қиламиз: $(\hat{j} \hat{A})$ кўпайтмалар — 4- скалярлар; 4- ҳажм бўйича интеграллаш ҳам скаляр операция бўлади¹.

Биринчи мисол сифатида иккита электроннинг эластик сочилишини кўриб чиқамиз: бошланғич ҳолатда p_1 ва p_2 4- импульсли иккита электронга, охириги ҳолатда эса p_3 ва p_4 4- импульсли бошқа иккита электронга эгамиз. Фотон ва электрон операторлар турли ўзгарувчиларга (фотон ва электрон тўлдирувчи сонларга) таъсир қилганидан уларнинг матрица эмементлари мустақил равишда ҳисобланади. Мазкур ҳолда бошланғич ва охириги ҳолатларда фотонлар умуман йўқ. Шунинг учун бизга керакли матрица элементи $\hat{A}_\mu(x) \hat{A}_\nu(x')$ фотон операторларга нисбатан $\langle 0 (\dots) 0 \rangle$ диагональ элемент бўлади, бу ерда $|0 \rangle$ символ электромагнит майдоннинг фотонсиз ҳолатини ёки бошқача айтганда *фотон вакууми* деб аталувчи ҳолатини белгилайди. Бу матрица элементи x ва x' 4- координаталарнинг маълум функциясидан иборат бўлади. Бунда фазо ва вақтнинг бир

¹ Биз релятивистик инвариантлик хронологиялаш операциясида ҳам бузилмаслигини исботлайдиган мулоҳазаларга тўхталиб ўтирмаймиз.

жинслилиги туфайли, бу функция фақат $(r - r')$ фазовий интервал ва $(t - t')$ вақт интервалларига, яъни алоҳида x ва x' қиймагларга эмас, балки фақат $x - x'$ айирмага боғлиқ бўлиши мумкин. Шундай қилиб, баён қилинаётган назариянинг асосий янги тушунчаларидан бири — тарқалишнинг фотон функцияси ёки фотон пропагатор¹ деб аталувчи тушунча пайдо бўлади. У

$$D_{\mu\nu}(x-x') = \begin{cases} t' < t, \text{ да } i < 0 | A_\mu(x) A_\nu(x') | 0 \rangle & (104. 2) \\ t < t' \text{ да } i < 0 | A_\nu(x') A_\mu(x) | 0 \rangle \end{cases}$$

каби аниқланади ($t' < t$ ва $t < t'$ бўлганда кўпайтувчи-лар тартибининг ҳар хил бўлиши (104. 1) даги $\hat{T}$ операторнинг таъсирига боғлиқ).

Энди (104. 1) даги электрон операторларни кўриб чиқамиз. Бу ерда турган иккита зичлик операторининг

ҳар бири $\hat{j} = \hat{\Psi}^\dagger \gamma \hat{\Psi}$ кўпайтмадан иборат, ҳар қайси ψ -оператор эса (103. 9) йиғинди орқали берилади. Шунинг учун $\hat{j}^\mu(x) \hat{j}^\nu(x')$ кўпайтма ҳар бири тўртта $\hat{a}_p, \hat{a}_p^+, \hat{b}_p, \hat{b}_p^+$ оператордан бирортасининг кўпайтмасига эга бўлган ҳадлар йиғиндиси билан берилади. Бизга керакли матрица элементига шу ҳадлардан операторларни бошланғич p_1, p_2 электронларни йўқотишни ва охириги p_3, p_4 электронларнинг ҳосил бўлишини таъминлайдиган ҳадларгина нолдан фарқли ҳисса қўшади. Бошқача қилиб айтганда, булар $\hat{a}_{p_1}, \hat{a}_{p_2}, \hat{a}_{p_3}^+, \hat{a}_{p_4}^+$ операторлар кўпайтмасига эга бўлган ҳадлардир. Шундай йўл билан ўтказилган ҳисоблашлар қуйидаги натижани беради:

$$S_{fi} = ie^2 \int \int d^4x d^4x' D_{\mu\nu}(x-x') \{ (\bar{\Psi}_4 \gamma^\mu \Psi_2) (\bar{\Psi}'_3 \gamma^\nu \Psi'_1) - (\bar{\Psi}_4 \gamma^\mu \Psi_1) (\bar{\Psi}'_3 \gamma^\nu \Psi'_2) \}, \quad (104. 3)$$

бу ерда $\Psi_1 = \Psi_{p_1}(x)$, $\Psi'_1 = \Psi_{p_1}(x')$ ва ҳ. к.

Электрон тўлқин функциялар — (103. 10) ясси тўлқинлардир. Шунинг учун, масалан, (104. 3) да катта қавс ичидаги биринчи ҳад

$$e^{-i((p_2 - p_1) \cdot x) - i((p_1 - p_3) \cdot x')}$$

¹ Инглизча propagation — тарқалиш сўзидан олинган.

экспоненциал кўпайтувчига эга. Лекин 4-импульснинг сақланиш қонунига биноан, тўқнашишда $p_1 + p_2 = p_3 + p_4$ ва шунинг учун $p_2 - p_4 = p_3 - p_1$. Юқорида ёзилган кўпайтувчи

$$e^{i((p_4 - p_2)(x - x'))}$$

кўринишни олади ва (104. 3) да $d^4(x - x')$ бўйича интеграллаш $k = p_4 \rightarrow p_2$ 4-импульсга тўғри келадиган $D_{\mu\nu}(x - x')$ функцияни тўрт ўлчовли Фурье интегралига ёйиш компонентларини топишни билдиради. Шундай ёйиш орқали аниқланадиган

$$D_{\mu\nu}(k) = \int D_{\mu\nu}(x - x') e^{i(k(x - x'))} d^4(x - x') \quad (104.4)$$

функцияни *импульс тасаввурдаги фотон пропагатор* деб аталади.

Худди шундай йўл билан (104. 3) даги иккинчи ҳад ҳам алмаштирилади ва натижада

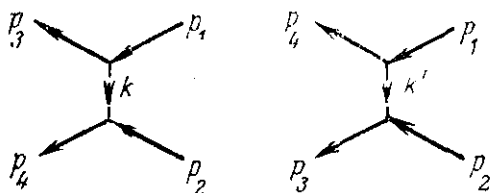
$$S_{II} \sim e^2(u_4 \bar{\gamma}^\mu u_2) D_{\mu\nu}(k) (\bar{u}_3 \gamma^\nu u_1) - e^2(\bar{u}_4 \gamma^\mu u_1) D_{\mu\nu}(k') (\bar{u}_3 \gamma^\nu u_2) \quad (104. 5)$$

ҳосил бўлади, бу ерда $k = p_4 - p_2$, $k' = p_4 - p_1$ ¹. Бу сочилиш амплитудасининг биринчи ва иккинчи ҳадларини символик равишда *Фейнман диаграммалари* деб аталадиган кўринишда бериш мумкин (14- расм). Диаграмманинг чизиқлар кесишган ҳар бир нуқтасига (чўққисига) $e\gamma^\mu$ кўпайтувчи таққосланади. Чўққига йўналган „кирувчи“ яхлит чизиқлар бошланғич электронларга мос келади; уларга u кўпайтувчилар — тегишли электрон ҳолатларнинг биспинор амплитудалари таққосланади. Чўққидан йўналган „чиқувчи“ яхлит чизиқлар охириги электронларга мос келади; бу чизиқларга $\bar{u}$ кўпайтувчилар таққосланади. Диаграммани „ўқишда“ кўрсатилган кўпайтувчилар чапдан ўнгга, яхлит чизиқлар бўйлаб стрелкалар йўналишига тескари ҳаракатга мос келадиган тартибда ёзилади. Иккала чўққи пунктир чизиқ билан бирлаштирилган, бу эса бир чўққидан „чиқарилган“ ва иккинчисига „ютилган“ *виртуал* (ора-

¹ Бизни фақат S -матрица элементлари математик структурасининг характери қизиқтиради. Шунинг учун биз унга таъсири бўлмаган умумий кўпайтувчиларни тушириб қолдирамиз. Биз шунингдек, $|S_{II}|^2$ квадратни кузатиладиган катталиққа — сочилиш кесимига алмаштириш усули устида ҳам тўхталиб ўтирмаймиз.

лик) фотонга мос келади: бу чизиққа $D_{\mu\nu}(k)$ кўпайтувчи таққосланади. Виртуал фотоннинг 4-импульси (k ёки k') „чўққида 4-импульснинг сақланиши“ орқали, яъни кирувчи ва чиқувчи чизиқларнинг йиғинди импульсларининг тенглиги орқали аниқланади. Бошланғич ва охири зарраларга мос келадиган чизиқлар *ташқи чизиқлар* ёки диаграмманинг эркин учлари деб аталади. 14-расмдаги иккита диаграмма бир-биридан иккита эркин учларининг алмашинуви билан фарқ қилади.

Таъкидлаб ўтамизки, виртуал фотоннинг $k^2 \equiv k_\mu k^\mu$ 4-импульси квадрати нолга мутлақо тенг эмас (реал

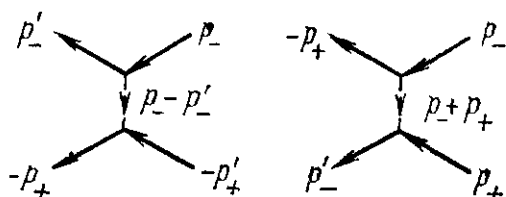


14-расм.

фотон учун у нолга тенг бўлиши керак). Шу муносабат билан яна шуни таъкидлаб ўтамизки, процессни диаграмма кўринишига мос ҳолда виртуал фотоннинг чиқиши ва сўнггра унинг ютилиши сифатида тавсифлаш, албатта, бевосита маънога эга эмас; у фақат сочилиш амплитудасига кирувчи ифодаalar структурасини оғзаки тавсифлашнинг қулай усулидир, холос.

Энди электрон ва позитроннинг ўзаро сочилишини қараб чиқамиз. Уларнинг бошланғич 4-импульсларини p_- ва p_+ билан, охиригиларини эса p'_- ва p'_+ билан белгилаймиз. Бу ҳолда диаграмманинг қандай ўзгариши кераклиги ψ -операторлар (103.9) структурасининг хараактеридан тушунарлидир: бу ифодаalarга позитронни ҳосил қилиш ва йўқотиш операторлари мос равишда электронни ҳосил қилиш ва йўқотиш операторлари билан биргаликда киради, улар олдидаги коэффициентлар сифатида эса $u(p)$, $\bar{u}(p)$ ўрнида $\bar{u}(-p)$ ва $u(-p)$ туради. Бундан хулоса шуки, 14-расмда тасвирланган диаграммалар ўрнига 15-расмда тасвирланган диаграммаларга эга бўламиз. Диаграммаларни тузиш қоидалари фақат позитронга нисбатан алмашинади. Аввалгидек,

кирувчи яхлит чизиқларга u кўпайтувчи, чиқувчи яхлит чизиқларга эса $\bar{u}$ кўпайтувчи таққосланади. Лекин энди кирувчи учлар охириги, чиқувчи учлар эса бошланғич позитронларга мос келади, ҳамма позитронларнинг 4- импульслари тескари ишора билан олинади, 15- расмдаги иккита диаграмманинг турли характерга эга эканига диққатни жалб қиламиз. Уларнинг биринчиси



15- расм.

14- расмдаги диаграмма характерига эга: чўққиларнинг бирида бошланғич ва охириги электронларнинг чизиқлари кесишади, иккинчи чўққида эса худди шунга ўхшаб, бошланғич ва охириги позитронларнинг чизиқлари кесишади („сочувчи“ типдаги диаграмма). Иккинчи диаграммада эса чўққиларнинг ҳар бирида электрон ва позитроннинг чизиқлари (бошланғич ва охириги) кесишади; юқориги чўққида виртуал фотон чиқарилиб жуфтнинг аннигиляцияси юз беради, пастки чўққида эса фотондан жуфтнинг ҳосил бўлиши („аннигиляция“ типдаги диаграмма) юз беради.

Иккинчи тартибли бошқа эффектни — фотоннинг электронда сочилишини (*Комптон эффекти*) карашга ўтамиз. Айтайлик, бошланғич ҳолатда фотон ва электрон k_1 ва p_1 4- импульсга, охириги ҳолатда эса k_2 ва p_2 импульсга эга бўлсин.

$\hat{S}$ - матрицанинг тегишли элементида (104.1) даги $\hat{A}_\mu(x)$ $\hat{A}_\nu(x')$ операторлар k_1 фотоннинг йўқолишини ва k_2 фотоннинг ҳосил бўлишини таъминлайди (уларда бўлган $\hat{c}_{k_1}$ ва $\hat{c}_{k_2}^+$ операторлар ҳисобига). p_1 электронни

йўқотишни ва p_2 электронни ҳосил қилишни $\hat{\Psi}$ ва $\hat{\bar{\Psi}}$ операторлар икки жуфтининг бири таъминлайди (уларда бўлган $\hat{a}_{p_1}$ ва $\hat{a}_{p_2}^+$ ҳисобига). Шундан сўнг, (104.1) даги Ψ - операторларнинг иккинчи жуфти учун

$\langle 0 | \dots | 0 \rangle$ диагональ матрица элементи қолади, бунда $|0\rangle$ символ энди *электрон-позитрон вакууми* ҳолатини (заррасиз майдонни) билдиради. Шундай қилиб, назариянинг тарқалишининг электрон функцияси ёки электрон пропагатор деб аталувчи иккинчи асосий тушунчаси пайдо бўлади. У

$$G_{ik}(x-x') = \begin{cases} t' < t \text{ да } -i \langle 0 | \hat{\Psi}_i(x) \hat{\bar{\Psi}}_k(x') | 0 \rangle \\ t < t' \text{ да } i \langle 0 | \hat{\bar{\Psi}}_k(x') \hat{\Psi}_i(x) | 0 \rangle \end{cases} \quad (104.6)$$

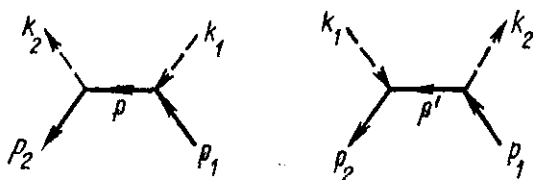
кўринишда аниқланади. Бу ерда i, k — биспинор индекслар, демак, G_{ik} иккинчи ранг биспинордир.

Натижада сочилиш амплитудаси учун

$$S_{fi} \sim e^2 \bar{u}_2(e_2^* \gamma) G(p)(e_1 \gamma) u_1 + e^2 \bar{u}_2(e_1 \gamma) G(p')(e_2^* \gamma) u_1 \quad (104.7)$$

ифода ҳосил бўлади, бу ерда $p = p_1 + k_1$, $p' = p_1 - k_2$; e_1 ва e_2 — бошланғич ва охириги фотонлар қутбланишининг 4- векторлари¹; $G(p)$ ва $G(p')$ — импульс тасаввурдаги электрон пропагаторлар.

Бу ифодадаги биринчи ва иккинчи ҳадлар мос равишда 16- расмда тасвирланган Фейнман диаграммалари орқали тасвирланади. Диаграмманинг пунктир



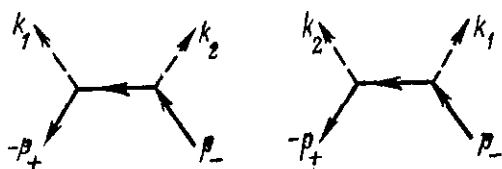
16- расм.

эркин учлари реал фотонларга мос келади; кйривчи чизиқларга (бошланғич фотон) e_1 кўпайтувчи (4- вектор), чиқувчи чизиқларга (охириги фотон) эса e_2^* кўпайтувчи таққосланади. Иккала чўққиларни бирлаштирувчи ички яхлит чизиқ виртуал электронга мос келади, бу чизиққа $G(p)$ кўпайтувчи таққосланади. Виртуал электроннинг 4- импульси (p ёки p') чўққиларда

¹ Қутбланиш 4- векторларининг белгисини квадрати (104. 7) да умумий коэффициент сифатида турган e электрон заряди билан чалкаштирмаслик керак!

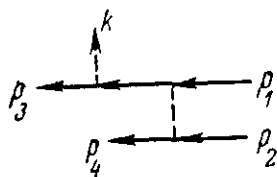
4- импульсининг сақланиши орқали аниқланади; таъкидлаб ўтамизки, унинг квадрати мутлақо m^2 га тенг эмас (у реал электрон учун m^2 га тенг бўлиши керак).

14- расмдаги диаграммада ташқи электрон учларнинг маъносини ўзгартириш билан электрон ва позитроннинг сочилиши учун диаграмма олингани каби, 16- расмдаги диаграммалардан бошқа процессга—иккита k_1 ва k_2 фотон ҳосил қилувчи p_- электрон ва p_+ позитрон аннигиляциясига мос келадиган диаграммаларни олиш мумкин (17- расм).



17- расм.

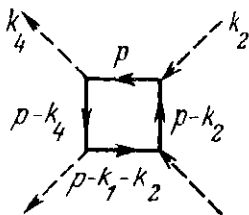
Бу ерда конкрет мисолларда баён этилган қоидалар *диаграмма техникасининг* асосий қоидалари бўлиб, у турли электродинamik процессларнинг амплитудасини тузишга имкон беради. Ғалаёнланиш назариясининг n - яқинлашишида пайдо бўладиган сочилиш процессининг амплитудаси n та чўққи ва шунча эркин учга эга бўлган, бошланғич ва охири зарралар процессида қатнашаётган барча диаграммалар тўплами билан тасвирланади. Ҳар бир чўққида учта чизиқ—битта фотон ва иккита (кирувчи ва чиқувчи) электрон чизиқлар бирлашади.



18- расм.

Айтайлик, учта чўққили диаграмма (18- расм) p_1 ва p_2 4- импульсли электронларнинг тўқнашишида (p_3 ва p_4 — электронларнинг тўқнашишдан кейинги 4- импульси) k фотоннинг нурланишига мос келадиган (ғалаёнланиш назариясининг учинчи тартибида) саккизта диаграммдан бири бўлсин. Бу диаграммада k фотон охири электронларнинг бири томонидан чиқарилади; бошқа диаграммаларда фотонни бошқа электронлар чиқаради (ва бундан ташқари, p_3 ва p_4 ларнинг ўринлари алмашган бўлиши мумкин).

19- расмдаги 4- тартибли диаграмма фотоннинг фотонда сочилишини тавсифловчи олтита диаграммадан биридир; бошқа диаграммалар бундан тўртта фотон учларнинг ўрин алмашганлиги билан фарқ қилади¹. 19- расмдаги диаграмма олдин тасвирланган диаграммалардан унинг чўққиларида 4- импульснинг сақланиши (берилган бошланғич k_1, k_2 ва охириги k_3, k_4 ларда) виртуал электронларнинг 4- импульсларини (диаграмманинг ички яхлит чизиқлари) бир қийматли аниқламаслиги билан фарқ қилади; уларнинг бирига ихтиёрий p қиймат бериш мумкин. Бу ҳолда диаграмма бўйича тузилган ифода p 4- вектор компонентларининг ҳамма қийматлари бўйича интегралланган бўлиши керак.



19- расм.

Пропагатор ҳақидаги тушунча квант электродинамикасида асосий роль ўйнайди. Сочилиш амплитудасини ҳақиқий аниқлаш учун бу пропагаторларни бутунлай ечиш керак. Пропагаторларнинг қуйида келтирилган муҳим математикавий хоссаси бундай ҳисоблашлар учун бошлаш нуқтаси бўлади.

$\hat{\Psi}(x)$ оператор $[(\hat{p}\gamma) - m]\hat{\Psi}(x) = 0$ Дирак тенгламасини қаноатлантиради (чунки (103. 9) ёйилмадаги ҳар бир Ψ_p тўлқин функция шу тенгламани қаноатлантиради). Бундан $G(x - x')$ функция (ифодасида (104. 6) га биноан $\hat{\Psi}(x)$ қатнашувчи) унга $t = t'$ бўлган нуқталардан бошқа барча x нуқталарда $(\hat{p}\gamma) - m$ оператор таъсир эттирилганда нолга айланади, деган хулоса келиб чиқади. Гап шундаки, (104. 6) таърифга биноан $G(x - x')$ функция t нинг t' га юқоридан ёки пастдан интилишида ($t \rightarrow t' + 0$ ёки $t \rightarrow t' - 0$) турли лимитларга интилади. Бу лимитлар айирмасини ҳисоб-

¹ Фотоннинг фотонда сочилиши ўзига хос квантоэлектродинamik процессдир, классик электродинамикада Максвелл тенгламасининг чизиқлилиги туфайли сочилиш бўлмайди. Бу эффектнинг мавжудлиги квант ҳодисаларининг Максвелл тенгламаларида чизиқли бўлмаган кичик қўшимчалар пайдо бўлишига олиб келишини билдиради.

лаш оддий натижага олиб келади: G функция $t = t$ да

$$\Delta G \equiv (G|_{t \rightarrow t'+0} - G|_{t \rightarrow t'-0}) = -i\gamma^0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

га тенг бўлган ўзгаришни сезади. Аммо агар $G(t - t', \mathbf{r} - \mathbf{r}')$ функция $t - t' = 0$ да ΔG ўзгариш сезса, у ҳолда унинг $\partial G / \partial t$ ҳосиласида δ - функцияли ҳад пайдо бўлади: $\Delta G \cdot \delta(t - t')$ ¹. Вақт бўйича ҳосила $(\hat{\gamma} p) - m$ операторга $i\gamma^0 \partial / \partial t$ кўринишда киради. Шунинг учун узил-кесил

$$[(\hat{\gamma} p) - m] G(x) - x') = \delta^{(4)}(x - x')$$

натижани оламиз, бу ерда $\delta^{(4)}$ символ 4- вектор аргументида турган тўртта компонентдан олинган тўртта δ - функциялар кўпайтмасини билдиради:

$$\delta^{(4)}(x - x') = \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Шундай қилиб, $G(x - x')$ функция ўнг томонига δ - функция қўшилган бир жинсли бўлмаган дифференциал тенглама—Дирак тенгламасини қаноатлантиради. Математикавий физикада бундай функцияни тегишли бир жинсли тенгламанинг, мазкур ҳолда Дирак тенгламасининг Грин функцияси деб аталади. Шу сабабли, электрон пропагаторни кўпинча *Гриннинг электрон функцияси* деб ҳам аталади.

Худди шунга ўхшаб, фотон пропагатор электромагнит майдон потенциали қаноатлантирадиган тўлқин тенгламанинг Грин функцияси бўлади (бундан унинг яна бошқа номи — *Гриннинг фотон функцияси* келиб чиқади).

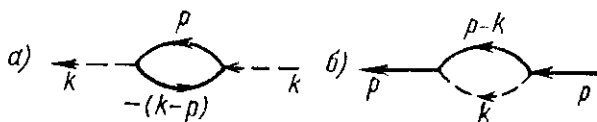
105- §. Радиацион тузатмалар

Диаграмма техникаси принцип жиҳатдан, галаёнланиш назариясининг биринчи йўқолмайдиган яқинлашишида сочилиш амплитудасини ҳисоблаш имконини берибгина қолмасдан, балки уларга кейинги яқинлашишлардан келиб чиқадиган тузатмалар ҳам беради. Булар *радиацион тузатмалар* деб аталади.

¹ Ҳақиқатан ҳам, $\partial G / \partial t$ ҳосилани t' нуқта атрофида t вақтининг кичик интервали бўйича интеграллаб, биз $t = t'$ моментнинг иккала томони бўйича G қийматларнинг айирмасини олишимиз керак; функцияни интеграллаш t ни берганлигидан, биз талаб қилинган ΔG ни оламиз.

Радияцион тузатмаларни ҳисоблашда, одатда, узоқлашувчи интегралларнинг пайдо бўлиши билан боғлиқ бўлган қийинчиликлар вужудга келади. Бунда мавжуд квант электродинамикасининг мантиқан мукамал эмаслиги намоён бўлади. Аммо бу назарияда „чексизликларни айириш“ни бир қийматли равишда амалга оширишга ва натижада кузатиладиган физикавий маънога эга бўлган барча катталиклар учун аниқ қийматларни олишга имкон берадиган тавсияларни белгилаш мумкин. Бу тавсиялар асосида фотоннинг массаси нолга, электроннинг массаси ва заряди эса уларнинг кузатиладиган қийматларига тенг бўлиши керак деган аниқ физикавий талаблар ётади. Узоқлашувчи интегралларга олдиндан берилган қийматларни (физикавий талаблар орқали белгиланган) ёзиб қўйишдан иборат иш тартиби тегишли катталикларни *қайта нормалаш* деб аталади.

Сочилиш амплитудасига киритиладиган радиацион тузатмаларни тасвирловчи диаграммалар асосий диаграммалардан уларни ташқи учлар сони ўзгармагани ҳолда, янги чўққилар қўшиш йўли билан мураккаблаштириш натижасида олинади. Масалан, диаграммадаги виртуал фотон чизиғини унга иккита янги чўққиси бўлган „электрон сиртмоғи“ киритиш билан мураккаблаштириш мумкин (20- а расм). Бунда p 4- век-



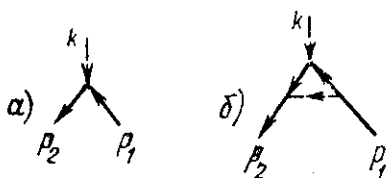
20- расм.

тор ихтиёрий бўлиб қолади ва у бўйича интеграллаш амалга оширилиши керак бўлади; бу интеграл узоқлашувчи бўлиб, қайта нормалашни талаб қилади. Бу диаграммани вакуумдан k виртуал фотон томонидан виртуал электрон-позитрон жуфтнинг (p ва $k - p$ 4- импульсли) ҳосил бўлиши ва сўнгра жуфтнинг аввалги фотонни ҳосил қилиш билан аннигиляцияланиши сифатида яққол баён қилиш мумкин. Шу сабабли, диаграммаларнинг 20- а расмда келтирилган кўринишига боғлиқ бўлган радиацион тузатмаларни *вакуумнинг қутбланиш эффекти* дейилади. Бу эффект, ху-

сусан, зарядланган зарралар яқинида Кулон майдонининг бир оз бузилишига олиб келади¹.

Худди шунга ўхшаб, иккита янги чўққи қўшиш йўли билан виртуал электрон чизигини мураккаблаштириш мумкин (20- б расм). Виртуал p электрон худди виртуал фотонни чиқариб, сўнггра уни яна ютгандек бўлади.

Электроннинг фотон билан ўзаро таъсири Фейнман диаграммаларида чўққи — k фотон чизиги билан p_1 ва p_2 электрон чизиқларнинг кесишган нуқтаси орқали тасвирланади (21- а расм). Янада мураккаброқ „диаграмма блоки“ (21- б расм) оддий чўққига киритила-



21- расм.

диган радиацион тузатмаларни ифодалайди. Бу тузатма, хусусан, муҳим натижага олиб келади: электроннинг μ магнит моменти Дирак тенгламасидан келиб чиқадиган (93. 9) қийматга қатъий равишда тенг бўлмай қолади. Радиацион тузатмани ҳисобга олинганда μ (одатдаги бирликларда)

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc} \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi}\right)$$

бўлади, бу ерда α — нозик структура доимийси (бу формула биринчи марта 1949 йилда *Юлиан Швингер* томонидан олинган).

106- §. Атом сатҳларининг радиацион силжиши

Радиацион тузатмалар эффектларининг энг ажойиб—атом сатҳлари энергияси қийматларининг силжишидир (буни *Лэмб силжиши* деб аталади). У хусусан, водород атоми сатҳларининг Дирак тенгламаси (94- §) бўйича қолган охириги айнишларини йўқотишга олиб

¹ Бу бузилишлар $\sim \hbar/mc$ масофага чўзилади, бу ерда m —электроннинг массаси.

келади. Бу тузатмаларнинг тўла ҳисобини келтиришнинг имкони бўлмаганидан, биз бу ерда унинг норелятивистик назария доирасида оддий натижасини келтирамиз. Лекин бу натижа тўла изчил бўлмаса-да, у радиацион тузатмаларнинг келиб чиқишини намойиш қилиши мумкин¹.

Электрон системанинг (водород атоми ҳақида гапирамиз) фотон майдони билан ўзаро таъсир оператори диагональ матрица элементига эга эмас (95- §). Шунинг учун ғалаёиланиш назариясининг биринчи яқинлашида бу ўзаро таъсир атомнинг энергия сатҳларига тузатма бермайди. Лекин иккинчи яқинлашишда шундай тузатма вужудга келади. Умумий (32. 10) формулага биноан, энергия сатҳларига киритиладиган иккинчи тартибли тузатма берилган ҳолатдан оралиқ ҳолатга ўтишларга мос келадиган ғалаёиланишнинг нодиагональ матрица элементлари орқали аниқланади. Ушбу ҳолда гап атом билан бирга фотонлар майдони системасининг ҳолатлари ҳақида, бормоқда, бунда атом ўзининг бирор (n -) сатҳида бўлиб, фотонлар умуман бўлмаган ҳолат бошланғич ҳолат бўлади. Оралиқ ҳолатларда атом ўзининг исталган сатҳида бўлиши мумкин, майдонда эса битта фотон бўлади. Айтиш мумкинки, энергияга киритиладиган тузатма атомнинг виртуал фотонлар чиқариши ва сўнгра уларнинг ютилиши билан боғлиқ².

Фотон нурланишига мос келадиган электромагнит ўзаро таъсир операторининг матрица элементлари норелятивистик ҳол учун (97.2) ва (97.1) га мувофиқ қуйидагига тенг:

$$-e \sqrt{\frac{2\pi}{\omega Q}} (e^* v_{nm}).$$

Оралиқ ҳолатлар бўйича йиғинди олиш атом ҳолатлари (m индекс билан белгиланган) бўйича йиғинди олишни ва фотон импульслари бўйича интеграллашни (яъни $\Omega dk_x dk_y dk_z / (2\pi)^3$ бўйича) ва шунингдек, унинг

¹ Бу натижани биринчи марта 1947 йилда *Банс Вете* берган бўлиб, у квант электродинамикасининг келгусидаги ҳамма тараққиёти учун бошланғич туртки бўлиб хизмат қилди.

² Норелятивистик назарияда фотоннинг виртуаллиги унинг чиқарилиши ёки ютилишида энергиянинг сақланиш қонунига амал қилинмаслигида намоён бўлади. Виртуал электрон-позитрон жуфтининг ҳосил бўлишини олсак, у норелятивистик яқинлашишда бўлмайди.

қутбланиши бўйича йиғинди олишни ҳам ўз ичига олади. k йўналишлар бўйича интеграллаш ва қутбланиш бўйича йиғинди олиш худди (97.4) ни келтириб чиқаришда бажарилгандек амалга оширилади ва натижада энергияга киритиладиган тузатма учун

$$-\frac{2e^2}{3\pi} \sum_m \int \frac{|v_{nm}|^2 \omega d\omega}{(E_m + \omega) - E_n} \quad (106.1)$$

олинади, бу ерда E_n, E_m — атом энергиясининг ғалаёнланмаган сатҳлари. Аммо бу интеграл юқори чегарада узоқлашади.

Эркин электрон учун (106.1) ифода массага киритиладиган тузатмаларни билдиради ва қайта нормалаш операцияси уни бутунлай ташлаб юборишдан иборат — электроннинг „ғалаёнланмаган“ массаси энди унинг кузатиладиган қийматидир. Бошқа томондан, эркин электрон учун $\hat{v} = \hat{p}/m$ тезлик оператори фақат v нинг маълум (эркин зарра учун) қийматларига мос келади — v_{nn} диагональ матрица элементларигагина эга. Бу ҳолда (106.1) да m бўйича олинган йиғинди битта ҳадга ($m = n$) келтирилади:

$$-\frac{2e^2}{3\pi} \int v^2 d\omega.$$

Боғланган (атомда) электрон учун қайта нормалаш доимийсини олиш учун v^2 тезлик квадратини унинг атомнинг берилган ҳолатидаги ўртача қиймати, $(v^2)_{nn}$ матрица элементи, алмаштириш керак. Лекин матрицаларни кўпайтириш қондасига мувофиқ қўйиладигани оламиз:

$$(v^2)_{nn} = \sum_m v_{nm} v_{mn} = \sum_m |v_{nm}|^2.$$

Шундай қилиб,

$$-\frac{2e^2}{3\pi} \sum_m \int |v_{nm}|^2 d\omega$$

ифодага келамиз. Бу ифодани (106.1) дан айирсак, энергия сатҳига киритиладиган тузатманинг кузатиладиган қийматини оламиз:

$$\delta E_n = \frac{2e^2}{3\pi} \sum_m \int \frac{|v_{nm}|^2 (E_m - E_n)}{E_m - E_n + \omega} d\omega. \quad (106.2)$$

Бу интеграл ҳали ҳам юқори чегарада узоқлашади, лекин энди логарифмик узоқлашади; изчил релятивистик назарияда бу узоқлашиш ҳақиқатда қолмайди. Нормал релятивистик назария доирасида (106. 2) интегрални 0 дан электрон массаси m гача бўлган чегарада интеграллаб, δE_n катталик учун анча аниқ баҳо олиш мумкин. Бунда нормал релятивистик қараш фотоннинг $\omega \ll m$ частоталаридагина ўринли бўлишини ва логарифмик интегралнинг қиймати унинг юқори чегарасининг (атом энергия сатҳларининг барча $E_m - E_n$ айирмаларига нисбатан катта бўлган) аниқ танланишига кам боғлиқ бўлишини кўзда тутиш керак.

Ниҳоят, (97.1) га мувофиқ электрон тезлигининг матрица элементларини дипол моментнинг матрица элементлари билан алмаштириб, δE_n учун узил-кесил (одатдаги бирликларда) қуйидаги ифодани ҳосил қиламиз:

$$\delta E_n = \frac{2}{3\pi\hbar^2 c^3} \sum_m |d_{nm}|^2 (E_m - E_n)^3 \ln \left| \frac{mc^2}{E_m - E_n} \right|. \quad (106. 3)$$

Бу силжиш атомдаги электроннинг ҳамма квант сонларига — n бош квант сони, j тўла момент ва l орбитал моментга боғлиқ. Шунинг учун (106. 3) тузатма киритилгандан кейин, аввал бир хил n , j ва турлича $l = j \pm 1/2$ га эга бўлган ўзаро айниган сатҳлар ҳам ҳар хил бўлиб қолар экан¹.

¹ Масалан, сатҳларнинг $E(2s_{1/2}) - E(2p_{1/2})$ айирмасига мос келадиган частота учун (106. 3) формула бўйича ҳисоблаш ≈ 1000 Мгц қийматни беради (аниқ релятивистик ҳисоб эса 1050 Мгц қийматни беради).

МУНДАРИЖА

Сўз боши	3
Баъзи белгилар	6
I қисм. Нормативистик назария	
I боб. Квант механикасининг асосий тушунчалари . . .	7
1-§. Ноаниқлик принципи	7
2-§. Суперпозиция принципи	13
3-§. Операторлар	17
4-§. Операторларни қўшиш ва кўпайтириш	23
5-§. Узлуксиз спектр	25
6-§. Чегаравий ўтиш	29
7-§. Зичлик матрицаси	31
II боб. Квант механикасида сақланиш қонунлари . . .	34
8-§. Гамильтониан	34
9-§. Операторларни вақт бўйича дифференциаллаш	35
10-§. Стационар операторлар	37
11-§. Физикавий катталикларнинг матрицалари	40
12-§. Импульс	45
13-§. Ноаниқлик муносабати	49
14-§. Импульс моменти	51
15-§. Моментнинг хос қийматлари	56
16-§. Моментнинг хос функциялари	61
17-§. Моментларни қўшиш	63
18-§. Момент бўйича танлаш қондалари	66
19-§. Ҳолатлар жуфтлиги	71
III боб. Шредингер тенгламаси	75
20-§. Шредингер тенгламаси	75
21-§. Оқим зичлиги	77
22-§. Шредингер тенгламаси ечимларининг умумий хоссалари	80
23-§. Вақтнинг ўгирилиши	84
24-§. Потенциал ўра	86
25-§. Чизиқли осциллятор	90
26-§. Квазиклассик тўлқин функция	95
27-§. Бор—Зоммерфельднинг квантлаш қондаси	98
28-§. Ўтиш коэффициенти	104
29-§. Марказий-симметрик майдондаги ҳаракат	109
30-§. Сферик тўлқинлар	113
31-§. Кулон майдондаги ҳаракат	119
IV боб. Ғалаёнланиш назарияси	125
32-§. Вақтга боғлиқ бўлмаган ғалаёнланишлар	125
33-§. Секуляр тенглама	130
34-§. Вақтга боғлиқ ғалаёнланишлар	133
35-§. Узлуксиз спектрда ўтиш	136
36-§. Оралик ҳолатлар	139
37-§. Энергия учун ноаниқлик муносабати	140
38-§. Квазистационар ҳолатлар	143
V боб. Спин	146
39-§. Спин	146
40-§. Спин оператори	150
41-§. Спинорлар	152
42-§. Электронларнинг қутбланиши	157
43-§. Магнит майдондаги зарра	160
44-§. Бир жинсли магнит майдондаги ҳаракат	163

VI боб. Зарраларнинг айнан ўхшашлиги	165
45-§. Бир хил зарраларни фарқ қилиб бўлмаслик принципи	165
46-§. Алмашинувчи ўзаро таъсир	170
47-§. Иккиламчи квантланиш (Бозе статистикаси учун)	172
48-§. Иккиламчи квантланиш (Ферми статистикаси учун)	180
VII боб. Атом	183
49-§. Атомнинг энергия сатҳлари	183
50-§. Атомдаги электронларнинг ҳолатлари	185
51-§. Атом сатҳларининг назик структураси	188
52-§. Менделеевнинг элементлар даврий системаси	193
53-§. Рентген термлари	200
54-§. Электр майдондаги атом	202
55-§. Магнит майдондаги атом	207
VIII боб. Икки атомили молекула	212
56-§. Икки атомили молекуланинг электрон термлари	212
57-§. Электрон термларнинг кесилиши	215
58-§. Валентлик	218
59-§. Икки атомили молекула термларининг тебранма ва айланма структуралари	224
60-§. Параводород ва ортоводород	228
61-§. Бан-дер-ваальс кучлари	230
IX боб. Эластик тўқнашувлар	234
62-§. Сочилиш амплитудаси	234
63-§. Сочилишнинг квазиклассиклик шарти	237
64-§. Дискрет энергия сатҳлари сочилиш амплитудасининг қутблари сифатида	239
65-§. Секин зарраларнинг сочилиши	241
66-§. Кичик энергияларда резонанс сочилиш	244
67-§. Борн формуласи	247
68-§. Резерфорд формуласи	252
69-§. Бир хил зарралар тўқнашуви	254
70-§. Тез электронларнинг атомлар билан эластик тўқнашуви	257
X боб. Ноэластик тўқнашувлар	262
71-§. Мукамал мувозанат принципи	262
72-§. Ноэластик процесслар мавжудлигида эластик сочилиш	266
73-§. Секин зарраларнинг ноэластик сочилиши	268
74-§. Тез зарраларнинг атомлар билан ноэластик тўқнашishi	269
II қисм. РЕЛЯТИВИСТИК НАЗАРИЯ	
XI боб. Фотон	273
75-§. Релятивистик соҳада ноаниқлик муносабатлари	273
76-§. Эркин электромагнит майдонни квантлаш	278
77-§. Фотонлар	283
78-§. Фотоннинг моменти ва жувфтлиги	286
XII боб. Дирак тенгламаси	290
79-§. Клейн—Фок тенгламаси	290
80-§. Тўрт ўлчовли спинорлар	292
81-§. Спинорлар инверсияси	296
82-§. Дирак тенгламаси	298
83-§. Дирак матрицалари	302

84-§. Дирак тенгламасида ток зичлиги	306
XIII боб. Зарралар ва антизарралар	310
85-§. Ψ -операторлар	310
86-§. Зарралар ва антизарралар	313
87-§. Спиннинг статистикага алоқаси	318
88-§. Чин нейтрал зарралар	319
89-§. Зарраларнинг ички жуфтлиги	323
90-§. <i>CPT</i> -теорема	325
91-§. Нейтрино	330
XIV боб. Ташқи майдондаги электрон	333
92-§. Ташқи майдондаги электрон учун Дирак тенгла- маси	333
93-§. Электроннинг магнит моменти	335
94-§. Спин-орбитал ўзаро таъсир	338
XV боб. Нурланиш	342
95-§. Электромагнит ўзаро таъсир оператори	342
96-§. Спонтан (ўз-ўзидан) ва мажбурий нурланиш	346
97-§. Дипол нурланиш	349
98-§. Мультипол нурланиш	352
99-§. Атомларнинг нурланиши	353
100-§. Инфрақизил ҳалокат	356
101-§. Ёруғлиқнинг сочилиши	359
102-§. Спектрал чизиқларнинг табиий кенглиги	363
XVI боб. Фейнман диаграммалари	366
103-§. Сочилиш матрицаси	366
104-§. Фейнман диаграммалари	372
105-§. Радиацион тузатмалар	380
106-§. Атом сатҳларининг радиацион силжиши	382

ИБ № 345

На узбекском языке

ЛЕВ ДАВИДОВИЧ ЛАНДАУ И
ЕВГЕНИЙ МИХАЙЛОВИЧ ЛИФШИЦ

КРАТКИЙ КУРС ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Книга 2

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Пособие для студентов физических
специальностей ВУЗов.

Перевод с русского издания „Наука“ М., 1972

Издательство „Ўқитувчи“

Ташкент—1977

Таржимонлар: Р. Вакиль, Қ. Азимов
Редакторлар: М. Шерматова, М. Пулатов
Корректор Д. Нуриддинова

Бадий редактор Е. Соин
Техредактор Т. Скиба

Теришга берилди 19/X—1976 й. Босишга рухсат этилди 26/VII—1977 й. Қоғоз № 3.
84×108¹/₃₂. Физ. 6. л. 12,125. Шартли л. 20,37. Нашр. л. 21,76. Тиражи 5000.

„Ўқитувчи“ нашриёти. Тошкент, Навоий кўчаси, 30. Шартнома № 124—76 й.
Баҳоси 76 т. Муқоваси 14 т.

ЎзССР Министрлар Советининг нашриётлар, полиграфия ва китоб савдоси ишлари
Давлат комитетининг Тошкент 1-босмахонаси, Ҳамза кўчаси, 21. 1977 й. Заказ № 270.

Типография № 1 Государственного комитета Совета Министров УССР по делам
издательств, полиграфии и книжной торговли. Ташкент, ул. Ҳамзы, 21.