Mühazirə 2. BƏZİ FİZİKİ KƏMİYYƏTLƏRƏ UYĞUN OPERATORLARIN MƏXSUSİ QİYMƏTLƏRİ VƏ MƏXSUSİ FUNKSİYALARI

Kvant mexanikasına görə hər bir fiziki kəmiyyətin ala biləcəyi qiymət bu kəmiyyətə uyğun operatorun məxsusi qiymətidir və uyğun operator tənliyinin həllindən tapılır.

I. $\hat{p}_x$ operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyaları $\hat{p}_x$ operatoru üçün tənlik aşağıdakı kimidir:

$$\hat{p}_x \psi(x) = p_x \psi(x) \tag{1}$$

$\hat{p}_x$ operatorunun ifadəsini nəzərə alsaq (1) tənliyi aşağıdakı şəklə düşür:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \quad -i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = p_x \psi(x) \tag{2}$$

(2)-i birtərtibli diferensial tənlikdir və onun həllini aşağıdakı kimi axtarırıq:

$$\psi(x) = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p_x \cdot x} \tag{3}$$

Burada A- normallaşdırıcı vuruqdur.

Qeyd edək ki, p_x kəmiyyəti $-\infty; +\infty$-a qədər kəsilməz qiymətlər alır və məxsusi qiymətləri cırlaşmamışdır. Belə ki, hər bir p_x qiymətinə (3) ilə müəyyən olunan bir dalğa funksiyası uyğun gəlir.

II. $\hat{\vec{p}}$ - impuls operatorunun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları.

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar\left(\vec{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

Bunu nəzərə almaqla aşağıdakı operator tənliyini qura bilərik:

$$\hat{\vec{p}}\,\psi(x\,y\,z) = \vec{p}\,\psi(x\,y\,z) \quad \text{və ya}$$

$$-i\hbar\left(\vec{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi(x\,y\,z) = \left(\vec{i}\,\hat{p}_x + \vec{j}\hat{p}_y + \vec{k}\hat{p}_z\right)\psi(x\,y\,z) \tag{4}$$

(4) tənliyini həll etmək üçün ψ funksiyasının aşağıdakı 3 funksiyasının hasili şəklində axtarırlar:

$$\psi(x\,y\,z)=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z) \tag{5}$$

(5)-ni (4)-də nəzərə alaq. Bərabərliyin sağ və solunda $\vec{i},\vec{j},\vec{k}$ vektorlarının əmsallarını bərabərləşdirməklə aşağıdakı kimi 3 tənlik alarıq:

$$\begin{aligned} &-i\hbar\frac{\partial\psi_1(x)}{\partial x}=p_x\psi_1(x); \quad -i\hbar\frac{\partial\psi_2(y)}{\partial y}=p_y\psi_2(y); \\ &-i\hbar\frac{\partial\psi_3(z)}{\partial z}=p_z\psi_3(z); \end{aligned} \tag{6}$$

(6) tənliklərinin hər biri yalnız bir dəyişəndən asılıdır. Bu tənliklərin həlli p_x operatorunda olduğu kimi axtarılır. Yəni,

$$\left.\begin{aligned} \psi_1(x)&=A_1e^{\frac{i}{\hbar}p_x\cdot x} \\ \psi_2(y)&=A_2e^{\frac{i}{\hbar}p_y\cdot y} \\ \psi_3(z)&=A_3e^{\frac{i}{\hbar}p_z\cdot z} \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

Onda

$$\psi(x\,y\,z)=\underbrace{A_1A_2A_3}_{A}e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_x\cdot x+p_y\cdot y+p_z\cdot z\right)}=Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \tag{8}$$

(8) ilə müəyyən olunan dalğa funksiyası müstəvi dalğa funksiyasıdır. Ona bəzən De-Broyl dalğası da deyilir. İmpuls kəmiyyəti kəsilməz qiymətlər alır və impulsun hər bir qiymətinə bir məxsusi funksiyası uyğun gəlir. Başqa sözlə desək spektr cırlaşmamışdır.

III. Kinetik enerji operatorunun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları.

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

$$\hat{T}\psi(x\,y\,z)=T\psi(x\,y\,z) \tag{9}$$

Məlumdur ki, kinetik enerji operatoru impuls operatoru ilə kommutativdir. Deməli, bu iki operatorun məxsusi funksiyaları eyni olacaqdır. Ona görə (9)-u həll etməyə ehtiyac qalmır. Başqa sözlə desək kinektik enerji operatorunun məxsusi funksiyaları da müstəvi dalğa funksiyasıdır:

$$\psi(x\,y\,z) = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \tag{10}$$

Bu operatorun spektri də kəsilməzdir, lakin cırlaşma vardır. Kinetik enerjinin $T = \frac{p^2}{2m}$ qiymətinə bir-birindən impulsun istiqaməti ilə fərqlənən 2 məxsusi funksiya uyğun gəlir. Bu funksiyalar aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\psi_1 = \psi_{\vec{p}} = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \tag{11}$$

$$\psi_2 = \psi_{-\vec{p}} = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \tag{12}$$

Superpozisiya prinsipinə əsasən ψ_1 və ψ_2-nin istənilən xətti kombinasiyasından alınan funksiya da kinetik enerji operatorunun məxsusi funksiyası olacaqdır.

VI. $\hat{M}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ operatorunun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları.

Bu operatorun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları aşağıdakı operator tənliyindən alınır:

$$\hat{M}_z\psi(\varphi) = M_z\psi(\varphi) \quad \text{və ya}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = M_z\psi(\varphi) \tag{13}$$

(13)-də birtərtibli diferensial tənlikdir. Onun həlli də $\hat{p}_x$ operatorunda olduğu kimi axtarılır:

$$\psi(\varphi) = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}M_z\varphi} \tag{14}$$

Məlumdur ki, dalğa funksiyası birqiymətli olmalıdır. (14) düsturu ilə müəyyən olunan funksiyanın birqiymətli olması üçün onun φ və $\varphi + 2\pi$-də aldığı qiymətlər eyni olmalıdır. Yəni,

$$\psi(\varphi)=\psi(\varphi+2\pi)=A\cdot e^{\frac{i}{\hbar}M_Z(\varphi+2\pi)}$$

$$A\cdot e^{\frac{i}{\hbar}M_Z\varphi}=e^{\frac{i}{\hbar}M_Z\varphi}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}M_Z 2\pi} \qquad (15)$$

Bu bərabərliyin ödənməsi üçün

$$e^{\frac{i}{\hbar}M_Z 2\pi}=1 \text{ olmalıdır.} \qquad (16)$$

Eyler düsturundan istifadə etməklə göstərmək olar ki, (16) şərtinin ödənilməsi üçün $M_z/\hbar$ kəmiyyəti tam qiymətlər almalıdır. Bu qiyməti m ilə işarə etsək:

$$M_z=\hbar\cdot m \qquad m=0,\ \pm1,\ \pm2,... \qquad (17)$$

alarıq. Beləliklə, $\hat{M}_z$ operatorunun məxsusi qiymətləri (17) ilə müəyyən olunur və diskret qiymətlər alır. m kəmiyyəti impuls momentinin üstün istiqamət üzrə (məs: z oxu üzrə) proyeksiyasını müəyyən edir. Adətən üstün istiqamət olaraq atomun yerləşdiyi xarici maqnit sahəsinin istiqaməti götürülür. Ona görə də m kəmiyyətinə maqnit kvant ədədi deyilir. İndi də (14) məxsusi funksiyasının ifadəsindəki A-normallaşdırıcı vuruğunu tapaq:

$$\int_0^{2\pi}\psi^*(\varphi)\psi(\varphi)d\varphi=1=\int_0^{2\pi}A\cdot e^{-im\varphi}\cdot A\cdot e^{im\varphi}d\varphi$$

$$A^2\int_0^{2\pi}d\varphi=A^2 2\pi$$

$$A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Demək ki, normallaşmış dalğa funksiyası üçün

$$\psi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi} \qquad (18)$$

alarıq. (18) ilə müəyyən olunan funksiya $\hat{M}_z$ operatorunun məxsusi funksiyasıdır. (17) və (18) düsturlarından göründüyü kimi M_z operatorunun həm məxsusi qiyməti, həm də məxsusi funksiyası yalnız bir kvant ədədindən asılıdır. Ona görə də operatorun spektri cırlaşmamışdır:

V. $\hat{M}^2 = -\hbar^2\nabla^2_{\theta\varphi} = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$ **operatorunun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları.**

$\hat{M}^2$ operatorunun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları aşağıdakı operator tənliyinin həllindən tapılır:

$\hat{M}^2\psi(\theta\varphi) = M^2\psi(\theta,\varphi)$ və ya

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi(\theta,\varphi) = \hat{M}^2\psi(\theta,\varphi) \qquad (19)$$

(19) tənliyi ikitərtibli diferensial tənlikdir.

Riyaziyyat kurslarından isbat olunur ki, bu tənliyin birqiymətli və kəsilməz həllərinin olması üçün aşağıdakı şərt ödənilməlidir:

$$M^2 = \hbar^2\ell(\ell+1) \quad \ell = 0,1,2,3,... \qquad (20)$$

Göründüyü kimi M^2 kəmiyyəti diskret qiymətlər alır. Məs:

$$\ell = 0 \;\; M^2 = 0; \;\; \ell = 1 \;\; M^2 = 2\hbar^2; \;\; \ell = 2 \;\; M^2 = 6\hbar^2$$

ℓ- kəmiyyəti elektronun orbital hərəkətini xarakterizə edən M^2 kəmiyyətini təyin edir. Ona görə də ℓ-ə orbital kvant ədədi deyilir. (19)-un həllindən həm də M^2 operatorunun məxsusi funksiyaları tapılır. Məlum olur ki, $\hat{M}^2$ operatorunun məxsusi funksiyaları kompleks sferik funksiyalarla ifadə olunur. Yəni,

$$\psi(\theta,\varphi) = Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}P_{\ell|m|}(\cos\theta)\,e^{im\varphi} \qquad (21)$$

$Y_{\ell m}$ - kompleks sferik funksiyalardır. (21)-dəki $P_{\ell|m|}$ - birləşmiş, normallanmış Lejandr polinomudur və aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$P_{\ell|m|}(x) = \frac{1}{2^e}\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\cdot\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}\left(1-x^2\right)^{\frac{|m|}{2}}$$

$$\sum_{k=0}^{E\left(\frac{\ell-|m|}{2}\right)} \frac{(-1)^k(2\ell-2k)!}{k!(\ell-k)!(\ell-|m|-2k)!}\,x^{\ell-|m|-2k} \qquad (22)$$

$x = \cos\theta$ işarə edilmişdir.

(22) ifadəsində k üzrə cəmləmənin yuxarı sərhəddi $(\ell - |m|)/2$ kəmiyyətinin tam hissəsinə bərabərdir. Məs: $E(0) = 0;\ E\left(\frac{1}{2}\right) = 0;\ E(1) = 1;\quad E\left(\frac{3}{2}\right) = 1;$ $E(2) = 2;\quad E\left(\frac{5}{2}\right) = 2;...$

(20) və (21) ifadəsindən görünür ki, $\hat{M}^2$ operatorunun məxsusi qiyməti yalnız bir kvant ədədindən, ℓ- dən asılıdır. Məxsusi funksiyalar isə 2 kvant ədədindən, ℓ və m-dən asılıdır. Orbital kvant ədədinin hər bir verilmiş qiymətində m maqnit kvant ədədi -ℓ-dən $+\ell$-ə qədər $2\ell+1$ sayda tam qiymətlər alır. Ona görə də $\hat{M}^2$ operatorunun spektri cırlaşmışdır və cırlaşmanın tərtibi $2\ell+1$-ə bərabərdir. Məs: $\ell = 2 \quad M^2 = 6\hbar^2 \quad m = -2, -1, 0, 1, 2$. $Y_{\ell m}$; Y_{2-2}, Y_{2-1}, $Y_{2,0}$, $Y_{2,1}$, $Y_{2,2}$. Deməli, $\ell = 2$-ə uyğun M^2-nin bu qiyməti 5 tərtibdən cırlaşmış olur.

ELEKTRONUN SPİNİ. SPİN FUNKSİYALARI

Məlumdur ki, elektron nüvə ətrafındakı hərəkəti ilə əlaqədar müəyyən orbital momentinə malik olur. Təcrübələr göstərir ki, elektronun müəyyən məxsusi mexaniki momenti də vardır. Bu moment elektronun heç bir mexaniki hərəkəti ilə əlaqədar deyil. Elektronun məxsusi mexaniki momentinə onun spini deyilir və s hərfi ilə işarə olunur. Qeyd edək ki, spin anlayışının klassik fizikada analoqu yoxdur. Ona görə də spin operatorlarını təyin etmək üçün ənənəvi qaydalardan istifadə etmək olmur. Təcrübələrlə müəyyən edilib ki, elektronun məxsusi mexaniki momentinin, yəni spininin xarici maqnit sahəsi üzrə proyeksiyası iki qiymət alır: $-\frac{\hbar}{2};\ +\frac{\hbar}{2}$.

Buradan da elektronun spininin $s = \frac{1}{2}$ olduğu məlum olur. Spini xarakterizə etmək üçün spin funksiyasından istifadə olunur və $U_{m_s}(\sigma)$ kimi işarə edilir. Burada m_s- spin kvant ədədidir və $\mp\frac{1}{2}$-ə bərabər olan iki qiymət alır. σ isə spin koordinatıdır. σ-da $\pm\frac{1}{2}$ bərabər iki qiymət alır. Beləliklə, məlum olur ki, elektronun üç fəza koordinatı ilə yanaşı dördüncü spin koordinatı da var. Fəza koordinatları kəsilməz, spin koordinatları isə diskret qiymətlər alır. Ona görə də hesablamalar zamanı fəza koordinatlarına görə inteqrallama, spin koordinatlarına görə cəmləmə aparılır. Kvant mexanikasında elektronun spin funksiyası aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$U_{m_s}(\sigma) = \begin{cases} 1 & m_s = \sigma \\ 0 & m_s \neq \sigma \end{cases} \tag{23}$$

Elektronun spin funksiyası $\hat{S}^2$ və $\hat{S}_z$ kimi spin operatorlarının məxsusi funksiyalarıdır. Yəni,

$$\hat{S}^2 U_{m_s}(\sigma) = \hbar^2 S(S+1) U_{m_s}(\sigma) \tag{24}$$

$$\hat{S}_z U_{m_s}(\sigma) = \hbar\, m_s U_{m_s}(\sigma) \tag{25}$$