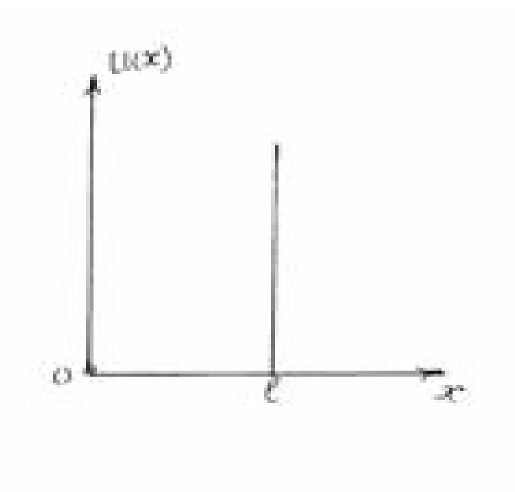
Mühazirə 3. BİRÖLÇÜLÜ POTENSİAL ÇUXURDA HİSSƏCİYİN HƏRƏKƏTİNİN ŞREDİNGER TƏNLİYİ

Tutaq ki, zərrəcik sonsuz hündür və keçilməz divarlarla hüdudlanmış fəza oblastında hərəkət edir. Belə oblasta potensial çuxur deyilir. Divarlar keçilməz olduğundan çuxur daxilinə düşmüş zərrəciyin hərəkəti məhdud olacaqdır. O yalnız çuxurun daxilində hərəkət edə bilər. Qəbul edək ki, zərrəciyin hərəkəti $x = 0$ və $x = \ell$ divarları ilə hüdudlanmış oblastda baş verir:



Şəkil

Belə zərrəcik üçün potensial funksiya:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le \ell \\ \infty & x < 0 \;\; x > \ell \end{cases} \qquad (1)$$

Qeyd edək ki, bu model ideal modeldir. Lakin bəzi fiziki məsələləri öyrənərkən ondan istifadə edilir. Birölçülü potensial çuxurda hərəkət edən hissəciyin Şredinger tənliyi aşağıdakı kimi yazılır:

$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right]\psi(x) = E\psi(x) \qquad (2)$$

(2) tənliyini xüsusi hallarda həll edək:

1. Fərz edək ki, zərrəcik potensial çuxurdan kənardadır, yəni $U(x) \to \infty$. (2) tənliyini aşağıdakı şəklə salaq:

$$\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\left[U(x) - E\right] \tag{3}$$

(3)-dən görünür ki, bərabərliyin sağ tərəfi sonsuzluğa gedir. Bu o zaman mümkündür ki, $\psi \to 0$ olsun. Deməli, potensial çuxurdan kənarda zərrəciyin dalğa funksiyası 0-a bərabərdir. Bu da həmin oblasta zərrəciyin olma ehtimalının sıfır olması deməkdir.

2. Fərz edək ki, zərrəcik potensial çuxur daxilindədir:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{4}$$

Aşağıdakı kimi işarələmə qəbul edək:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{5}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \tag{6}$$

(6) tənliyi ikitərtibli diferensial tənlikdir. Onun həlli

$$\psi(x) = A\sin(kx + \alpha) \tag{7}$$

kimi axtarılır. Dağla funksiyasının kəsilməz olması üçün aşağıdakı sərhəd şərtləri ödənilməlidir:

1. $\psi(0) = 0$; 2. $\psi(\ell) = 0$

I sərhəd şərtindən

$\psi(0) = A\sin\alpha = 0$ yəni, $\alpha = 0$ alınır.

II sərhəd şərtindən

$\psi(\ell) = A\sin k\ell = 0$ yəni, $k\ell = \mp\pi n$, $n = 1,2,3,...$ olmalıdır. Demək ki,

$$k = \frac{\pi n}{\ell} \tag{8}$$

olacaq. (5) və (8)-in müqayisəsindən potensial çəpərlə məhdudlaşmış çuxurda hərəkət edən hissəciyin enerjisi üçün alarıq:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m\ell^2} \tag{9}$$

Dalğa funksiyasının ifadəsindəki A vuruğu normallaşdırıcı vuruqdur və o, dalğa funksiyasının normallıq şərtindən tapılır:

$$A=\sqrt{\frac{2}{\ell}} \qquad \psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{\ell}}\sin\frac{\pi n}{\ell}x \tag{10}$$

(9) və (10) düsturlarından göründüyü kimi potensial çəpərdə hərəkət edən zərrəciyin enerjisi cırlaşmayıb. Belə ki, enerjinin hər bir qiymətinə bir dalğa funksiyası uyğun gəlir. Zərrəciyin enerjisi diskret qiymətlər alır:

$$n=1 \qquad E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}$$

$$n=2 \qquad E_2=4\cdot\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}=4E_1$$

$$n=3 \qquad E_3=9E_1$$

$$n=4 \qquad E_4=16E_1 \quad \text{və s.}$$

E_1 zərrəciyin ən kiçik enerjili halıdır. Sistemin ən kiçik enerjili halına onun əsas halı və ya normal halı deyilir. Digər hallar həyacanlanmış hallardır. Göründüyü kimi zərrəciyin əsas halının enerjisi 0-dan fərqlidir. Bu fakt klassik fizika təsəvvürlərinə ziddir. Belə ki, çuxur daxilində zərrəciyə təsir edən qüvvə

$$U(x)=0, \quad F=-\frac{\partial u}{\partial x}=0$$

sıfır olduğundan o dayana da bilər. Belə zərrəciyin enerjisi 0-a bərabər olmalıdır. Lakin kvant mexanikası təsəvvürlərinə əsasən $E_1\neq 0$ olur. Əgər zərrəcik dayansaydı onun x koordinatı və p_x impulsu eyni zamanda dəqiq ölçülə bilərdi. Bu isə qeyri-müəyyənlik münasibətlərinə ziddir. Beləliklə, çəpər daxilində zərrəcik sükunətdə ola bilməz. İndi də iki qonşu enerji səviyyəsi arasındakı fərqi tapaq:

$$\Delta E_n=E_{n+1}-E_n=\frac{\pi^2\hbar^2(n+1)^2}{2m\ell^2}-\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2m\ell^2}=$$

$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}\left(\cancel{n^2}+2n+1-\cancel{n^2}\right)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}(2n+1)$$

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\Delta E_n}{E_n}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}(2n+1)\cdot\frac{2m\ell^2}{\pi^2\hbar^2n^2}=\frac{2n+1}{n^2}\to 0$$

Göründüyü kimi $n \to \infty$ olduqda enerji səviyyələri arasındakı fərq sıfra gedir. Bu da enerjinin diskretliyinin kəsilməzliklə əvəz olunmasıdır. Başqa sözlə $n \to \infty$ olduqda kvant mexanikasından klassik fizikaya keçid alınır. Yuxarıda qeyd olunanlara əsasən aşağıdakı 4 nəticəni çıxarmaq olar:

1. Potensial çuxur daxilində hərəkət edən zərrəciyin enerjisi diskret qiymətlər alır. Enerji səviyyələri cırlaşmamışdır.
2. Zərrəciyin kütləsi və potensial çəpərin ölçüsü kiçiklikdə enerjinin diskretliyi daha da qabarıq görünür.
3. Zərrəciyin əsas halının enerjisi sıfırdan fərqli olur. Bu da qeyri-müəyyənlik münasibətlərinə uyğun gəlir.
4. n artdıqca eneji səviyyələri bir-birinə yaxınlaşır və $n \to \infty$ 0-a bərabər olur. Bu zaman enerji səviyyələri arasındakı fərq itir. Yəni, spektrin diskretliyi kəsilməzliklə əvəz olunur.

MƏRKƏZİ SAHƏDƏ HƏRƏKƏT EDƏN HİSSƏCİK ÜÇÜN ŞREDİNGER TƏNLİYİ

Zərrəciyin hərəkət etdiyi sahənin potensialı yalnız zərrəcikdən mərkəzə qədər (elektrondan nüvəyə qədər) məsafədən asılıdırsa, sahəyə mərkəzi sahə deyilir. Tərifdən aydındır ki, mərkəzi sahənin potensialı θ, φ bucaqlarından asılı olmur, yalnız r-dən asılı olur. Belə sahədə hərəkət edən hissəcik üçün Şredinger tənliyini sferik koordinatlarda həll etmək daha asan olur:

$$\hat{H}\psi = E\psi \Rightarrow \left[\hat{T}_r + \frac{\hat{M}^2}{2mr^2} + U(r)\right]\psi(r\,\theta\,\varphi) = E\,\psi(r\,\theta\,\varphi) \qquad (1)$$

$$\hat{T}_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right); \quad \hat{M}^2 = -\hbar^2\nabla^2_{\theta\varphi}$$

(1)-dən aydın olur ki, Şredinger tənliyinin həlli həm də $\hat{M}^2$ operatorunun məxsusi funksiyası olmalıdır. Məlumdur ki, $\hat{M}^2$ operatorunun məxsusi funksiyaları kompleks sferik funksiyalardır. Yəni,

$$\hat{M}^2 Y_{\ell m}(\theta\varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1)\ Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

Burada $Y_{\ell m}$ kompleks sferik funksiyalardır. Beləliklə, Şredinger tənliyinin həllini $Y_{\ell m}$ funksiyaları ilə hər hansı radial funksiyaların hasili şəklində axtarmaq olar. Yəni,

$$\psi(r\theta\varphi) = R(r)\cdot Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \tag{3}$$

(3) tənliyini (1)-də yerinə qoyaq və (2)-ni nəzərə alaq. Onda, $R(r)$ radial funksiyalar üçün aşağıdakı tənlik alınır:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} + U(r)\right]R(r) = ER(r) \tag{4}$$

(4) tənliyi radial funksiyalar üçün Şredinger tənliyidir. Bu tənliyi həll etmək üçün mərkəzi sahənin $U(r)$ potensialının aşkar ifadəsi məlum olmalıdır. $U(r)$ yalnız H atomu və hidrogenəbənzər ionlar üçün dəqiq məlumdur.