

Mühazirə 7. ELEKTRONLARIN SEÇİLMƏZLİYİ PRİNSİPİ. PAULİ PRİNSİPİ. DETERMİNANT DALĞA FUNKSİYASI

Fərz edək ki, sistem eyni zərrəciklərdən təşkil olunmuşdur (məs: elektronlardan). Klassik fizika təsəvvürlərinə əsasən belə sistemdə hər bir zərrəcik öz fərdiliyini saxlayır. Əgər zamanın başlanğıc anında zərrəciyin koordinatları məlumdursa, onda müəyyən tənlikləri həll etməklə sonrakı anlarda da zərrəciyin koordinatını tapmaq olar. Bu o deməkdir ki, zərrəcik müəyyən trayektoriya üzrə hərəkət edir və trayektoriyasının formasını qurmaq olar. Beləliklə, klassik fizika təsəvvürlərinə əsasən hər bir zərrəcik müəyyən trayektoriya üzrə hərəkət edir və onları bir-birindən seçmək olar. Kvant mexanikası təsəvvürlərinə əsasən isə zərrəciyin trayektoriyası anlayışı öz mənasını itirir. Əgər başlanğıc anda zərrəciyin koordinatları məlumdursa, qeyri-müəyyənlik prinsipinə əsasən sonrakı anlarda zərrəciyin koordinatını dəqiq tapmaq mümkün olmur. Ona görə də zərrəciklər fərdiliklərini itirir və seçilməz olurlar. Xüsusi halda elektronlardan ibarət sistemə baxaq (məs: atom və ya molekullara). Məlumdur ki, N elektronlu atomlar üçün Hamilton operatoru aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$\hat{H} = - \sum_{\mu=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mu}^2 - \sum_{\mu=1}^N \frac{Ze^2}{r_{\mu}} + \sum_{\mu < \nu} \frac{e^2}{r_{\mu\nu}} \quad (1)$$

(1)-də 2 elektronun, məs: μ və ν saylı elektronun yerini dəyişməsi cəmdə 2 həddin yerinin dəyişməsinə səbəb olur. Aydındır ki, belə dəyişmə zamanı Hamilton operatoru dəyişməz. H -in məxsusi funksiyasını ψ ilə göstərək:

$$H\psi(1,2,\dots,\mu,\nu,\dots) = E\psi(1,2,\dots,\mu,\nu,\dots) \quad (2)$$

Burada $1,2,\dots,\mu,\nu,\dots$ ilə elektronların koordinatları yığımı işarə edilmişdir. Sistemdə 2 elektronun məs: μ və ν saylı elektronların yerini dəyişən $\hat{p}_{\mu\nu}$ operatoru daxil edək. Qeyd etdiyimiz kimi, belə yerdəyişmədə Hamilton operatoru dəyişməz qalır. Ona görə də \hat{H} və $\hat{p}_{\mu\nu}$ operatorları kommutativ olmalıdır:

$$\hat{p}_{\mu\nu}\hat{H} = \hat{H}\hat{p}_{\mu\nu} \quad (3)$$

Kommutativ operatorların məxsusi funksiyaları eyni olduğundan $\psi(1,2,\dots,\mu,\nu,\dots)$ həm də $\hat{p}_{\mu\nu}$ operatorunun məxsusi funksiyası olmalıdır. Ona görə də yazı bilərik:

$$\hat{p}_{\mu\nu}\psi(1,2,\dots,\mu,\nu,\dots)=\psi(1,2,\dots,\nu,\mu,\dots) \quad (4)$$

$\hat{p}_{\mu\nu}$ operatorunun məxsusi qiymətini λ ilə işarə edək. Onda

$$\hat{p}_{\mu\nu}^2\psi=\lambda^2\psi \quad (5)$$

λ -nı tapmaq üçün $\hat{p}_{\mu\nu}^2$ ilə ψ -ya təsir edək:

$$\begin{aligned} \hat{p}_{\mu\nu}^2\psi(1,2,\dots,\mu,\nu,\dots) &= \hat{p}_{\mu\nu}[\hat{p}_{\mu\nu}\psi(1,2,\dots,\mu,\nu,\dots)] = \\ &= \hat{p}_{\mu\nu}\psi(1,2,\dots,\nu,\mu,\dots) = \psi(1,2,\dots,\mu,\nu,\dots) \end{aligned} \quad (6)$$

(5) və (6)-nın müqayisəsindən $\lambda^2=1$ alırıq. Beləliklə, $\hat{p}_{\mu\nu}$ yerdəyişmə operatorunun məxsusi qiyməti ya +1, ya da -1 olur:

$$\lambda^2=1 \Rightarrow \text{yəni, } \lambda=+1; \lambda=-1$$

$\lambda=1$ olduqda $\hat{p}_{\mu\nu}$ operatorunun təsiri nəticəsində dalğa funksiyası işarəsini dəyişmir:

$$\hat{p}_{\mu\nu}\psi_s = \psi_s \quad (7)$$

Belə dalğa funksiyasına simmetrik dalğa funksiyası deyilir:

$\lambda=-1$ olduqda isə operatorun funksiyaya təsiri nəticəsində o işarəsini dəyişəcəkdir.

$$\hat{p}_{\mu\nu}\psi_{as} = -\psi_{as} \quad (8)$$

Belə dalğa funksiyasına antisimmetrik dalğa funksiyası deyilir.

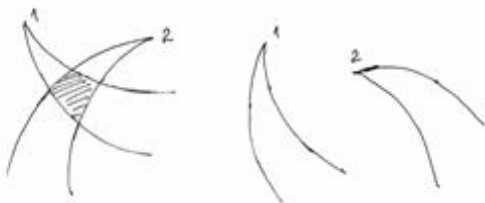
Beləliklə, təbiətdə yalnız 2 növ dalğa funksiyası reallaşır. Eyni zərrəciklər sistemində 2 zərrəciyin yerini dəyişdikdə işarəsini dəyişməyən yəni, simmetrik və işarəsini dəyişən yəni, antisimmetrik dalğa funksiyası.

Yerdəyişmə operatoru zamandan asılı deyildir və Hamilton operatoru ilə kommutativdir. Ona görə də bu operatorun məxsusi qiyməti saxlanmalıdır. Bu faktı aşağıdakı kimi başa düşmək olar.

Tutaq ki, başlanğıc halda sistemin halı simmetrik dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Təcrübə göstərir ki, sonrakı hallarda da sistemin halı simmetrik dalğa

funksiyası ilə təsvir olunacaq. Başqa sözlə desək, dalğa funksiyasının qeyd onunan simmetriyasını heç bir xarici təsirlə dəyişmək olmaz. Eyni sözləri antisimmetrik dalğa funksiyası üçün də söyləmək olar. Təcrübələrlə müəyyən edilib ki, spinləri $\frac{1}{2}$ və onun tək misillərinə bərabər olan eyni zərrəciklər sisteminin (məs: elektronlar, protonlar) halı antisimmetrik dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Belə zərrəciklər Fermi-Dirak statistikasına tabe olurlar və ferimonlar adlanırlar. Spinləri tam qiymətlər alan zərrəciklərdən təşkil olunmuş sistemin halı isə (fotonlar pimezonlar halı) simmetrik dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Belə zərrəciklər sisteminin halı Boze-Eynşteyn statistikasına tabe olur və bozonlar adlanır. Beləliklə, elektronlar sisteminin halı antisimmetrik dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Məlumdur ki, dalğa funksiyasının özünün mənası yoxdur, lakin onun modulunun kvadratı həmin halda olma ehtimalını verir. Eyni zərrəciklər sistemində 2 zərrəciyin yerinin dəyişməsi zamanı dalğa funksiyasının modulunun kvadratı dəyişməz. Bu da sistemin fiziki-kimyəvi xassələrinin dəyişməz qalması deməkdir. Eyni zərrəciklər sistemində iki zərrəciyin yerinin dəyişməsi sistemin fiziki kimyəvi xassələrini dəyişdirmir. Bu müddəə kvant mexanikasında eyni zərrəciklərin seçilməzliyi prinsipi kimi məlumdur. Qeyd edək ki, seçilməzlik prinsipi zərrəciklərin dalğa təbiətli olması ilə əlaqədardır. Tutaq ki, fəzanın hər hansı nöqtəsində 2 elektrona məxsus elektron buludları bir-birini örtür. Örtmə oblastında müşahidə olunan elektronun I və ya II olduğunu əminliklə söyləmək olmaz.

Elektronlar bir-birindən seçilə də bilər. Bu o halda mümkündür ki, həmin elektronların elektron buludları bir-birini örtməsin. Bu zaman I oblastda müşahidə olunan elektronun I, II oblastdakı elektron isə məhz II elektron olduğunu əminliklə söyləmək olar.



Şəkil

Elektron buludlarının bir-birini örtüyü oblastda elektronlar öz halları arasında mübadilə edilirlər. Bu zaman mübadilə qarşılıqlı təsiri və bu təsiri xarakterizə edən mübadilə qüvvələri yaranır. Mübadilə qarşılıqlı təsiri və mübadilə qüvvələri anlayışları kvant mexaniki anlayışlarıdır, klassik fizikada onların analoqları yoxdur. Mübadilə qüvvələri aşağıdakı 3 xassəyə malikdir:

I. Mübadilə qüvvələri yalnız elektron buludlarının bir-birini örtüyü oblastda yaranır. Onlar yaxına təsir qüvvələridir.

II. Mübadilə qüvvələri doyma xassəsinə malikdir. Əgər hər hansı oblastda ikidən artıq elektron buludu bir-birini örtərsə, mübadilə qüvvələri itələmə xarakterli olurlar.

III. Mübadilə qüvvələri istiqamətlənmə xassəsinə malikdir. Bu qüvvələr yalnız müəyyən istiqamətlərdə özünü göstərir. Məs: CH_4 molekulunda mübadilə qüvvələri tetraedrin mərkəzindən onun təpələrinə doğru istiqamətlənir (tetraedrik istiqamətlər, $109,28^\circ$).

Mübadilə qüvvələrinin bu xassəsi molekulların fəza quruluşunu müəyyən edir.

Mərkəzi sahə yaxınlaşmasına əsasən atomda hər bir elektron nüvənin və digər elektronların yaratdığı orta effektiv mərkəzi sahədə hərəkət edir. Elektronların hərəkəti bir-birindən asılı olmadan baş verir. Kvant mexanikasına görə belə sistemin tam dalğa funksiyası ayrı-ayrı elektronların dalğa funksiyalarının hasili şəklində axtarılır. Yəni

$$\psi = U_{n_1}(x_1)U_{n_2}(x_2)..U_{n_N}(x_n) \quad (9)$$

Burada n_1, n_2, \dots, n_N ilə elektronların kvant ədədləri yığılımı işarə edilmişdir:

$$n_\mu = n\ell m_\ell m_s$$

x_μ - ilə elektronların fəza və spin koordinatları yığılımı işarə edilmişdir:

$$x_\mu = r\theta\varphi\sigma$$

(9)-da 2 elektronun yerinin dəyişməsi zamanı dalğa funksiyasının işarəsinin dəyişməsi haqqında heç bir fikir söyləmək olmaz. Yəni bu funksiya antisimetriya şərtini ödəmir. Antisimetriya şərtini ödəyən dalğa funksiyasını aşağıdakı kimi

axtarırlar: Bir-birindən elektronların hallarının və ya koordinatlarının mümkün yerdəyişmələri ilə fərqlənən və bir-birindən asılı olmayan (9) şəkilli bütün dalğa funksiyaları qurulur. Bu zaman başlanğıc funksiya müsbət işarəli götürülür. Tək sayda yerdəyişmələrlə xarakterizə olunan hədlər mənfi işarəli götürülür. Tapılmış funksiyaların elə xətti kombinasiyası qurulur ki, alınmış yeni funksiya antisimetriya şərtini ödəsin.

1929-cu ildə Sleyter müəyyən etmişdir ki, həm antisimetriya şərtini, həm də Pauli prinsipini ödəyən dalğa funksiyasını (elektron sisteminin tam dalğa funksiyasını) aşağıdakı determinant şəklində axtarmaq olar:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} U_{n_1}(x_1)U_{n_2}(x_1)\dots U_{n_N}(x_1) \\ U_{n_1}(x_2)U_{n_2}(x_2)\dots U_{n_N}(x_2) \\ \dots \\ U_{n_1}(x_N)U_{n_2}(x_N)\dots U_{n_N}(x_N) \end{vmatrix} \quad (10)$$

Burada $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ normallaşdırıcı vuruqdur. (10) funksiyası Sleyter determinantı və ya determinant dalğa funksiyası adlanır.

(10) funksiyasında 2 elektronun yerini dəyişməsi, məs: yerdəyişməsi, I və II elektronun yerdəyişməsi determinantının I və II sətirinin yerini dəyişməsinə səbəb olur. Determinantın xassələrinə əsasən bu halda (10) funksiyası işarəsini dəyişir. Başqa sözlə desək, (10) funksiyası antisimetriya şərtini ödəyən dalğa funksiyasıdır. (10) determinantında 2 elektronun məs: I və II elektronun, bütün 4 kvant ədədi eyni olsa, $(n_1 \equiv n_2)$ olsa, onda (10) determinantında I və II sütun eyni olacaqdır. Belə determinant sıfıra bərabərdir. Deməli, $n_1 \equiv n_2$ olan halın ehtimalı da sıfıra bərabərdir. Bu isə Pauli prinsipidir. Pauli prinsipi kvant mexanikası yaranmazdan əvvəl 1924-cü ildə verilib. Pauli təcrübi faktlar əsasında müəyyən edib ki, atom və ya molekulda bütün 4 kvant ədədi eyni olan 2 elektronun yerləşməsi mümkün deyil. Bu müddəanı bəzən aşağıdakı kimi də ifadə edirlər.

$n\ell m_\ell$ kvant ədədləri ilə müəyyən olunan hər bir atom orbitalında spinləri antiparalel olmaqla ən çoxu 2 elektron yerləşə bilər.