

**O'zbekistan Respublikasi' Joqari' ha'm orta arnawli' bilim
ministrligi**

Berdaq ati'ndag'i' Qaraqalpaq ma'mleketlik universiteti

Fizika-matematika fakulteti

Fizika kafedrası'

Fizika-matematika fakultetinin' 4-kurs studenti

Abitova Azizani'n' pitkeriw qa'nigelik jumi'si'

**Kvantli'q mexanika boyi'nsha lekciyali'q ha'm
a'meliy sabaqlarda kompyuterlerden paydalani'w
ma'seleleri**

Ilimiy basshi'si'

professor B.Abdikamalov.

Kafedra basli'g'i'

fizika-matematika ilimlerinin'

kandidati', docent J.Akimova.

Fakultet dekani'

fizika-matematika ilimlerinin'

kandidati', docent B.Otemuratov.

No'kis 2016

Mazmuni'

Kirisiw.	3
1-§. Shredinger ten'lemesi.	10
2-§. Vodorod atomi'ni'n' relyativistlik emes kvantli'q teoriyasi'.	21
3-§. Tolqi'n funkciyasi'ni'n' radialli'q bo'limi.	29
4-§. Sferali'q funkciyalar.	39
5-§. Mathematica 10 programmalaw tilinin' operatorlari'ni'n' ja'rdeminde sferali'q funkciyalardi' esaplaw.	47
Pitkeriw qa'nigelik jumi'si' boyi'nsha uli'wmali'q juwmaqlar.	59
Paydalani'lg'an a'debiyatlar dizimi.	60

Kirisiw

Elektronlardi' "materialli'q noqatlar" si'yaqli' belgili bir traektoriyalar boyi'nsha qozg'alatug'i'n bo'leksheler dep esaplaw XX a'sirdin' basi'nda elektronli'q da'stelerdi (katod nurlari'n) izertlew ha'm u'lken tezliklerge iye ayi'ri'm elektronlardi' baqlawlar tiykari'nda qa'liplesti [1-5]. Vakuumli'q trubkada diafragmalardi'n' ja'rdeminde ani'q shegaralarg'a iye elektronlar da'stesin ali'w mu'mkin. Usi' da'stege magnit maydani' menen ta'sir jasasaq, onda elektronlardi'n' traektoriyalari' ayi'ri'm zaryadlang'an bo'lekshelerge magnit maydani' ta'sir etken jag'daylardag'i'day boli'p mayi'sadi'. Scintilyaciyalar usi'li' fluorescenciyanatug'i'n ekrang'a kelip tu'sken ayi'ri'm elektronlardi' registraciyalawg'a mu'mkinshilik beredi. Vilson kamerasi'nda bolsa ayi'ri'm elektronlardi'n' izlerin su'wretke tu'sirip ali'wg'a boladi'. Bul qubi'li'slar elektronlardi'n' bo'leksheler (korpuskulalar) ekenligin ko'rsetti [6].

Biraq, joqari'da ayti'lg'an jag'daylar menen bir qatarda XX a'sirdin' jigirmalanshi' ji'llari' elektronlardi'n' tolqi'nli'q qa'siyetlerge iye ekenligin da'lilleytug'i'n basqa da fizikali'q qubi'li'slar ashi'ldi'. Kristallar arqali' o'tken yamasa kristallarda shashi'rag'an elektronlardi'n' rentgen nurlari' si'yaqli' difrakciyalig' su'wretti payda etetug'i'nlig'i' baqlandi'. Bul qubi'li'slar elektronlardi'n' tolqi'nli'q qa'siyetke iye ekenligin ayqi'n tu'rde ko'rsetti. Demek ayi'ri'm eksperimentlerde elektronlar bo'leksheler si'pati'nda, al basqa bir eksperimentlerde elektronlar tolqi'n si'pati'nda ko'rinedi eken. Elektronlardi'n' bir birin biykarlaytug'i'n tolqi'nli'q ha'm korpuskulali'q qa'siyetleri arasi'ndag'i' qatnas 1923-ji'li' Lui de Broyldi'n' (Lui Viktor Per Raymon, Broildi'n' 7-gercogi', francuzsha Louis-Victor-Pierre-Raymond, 7eme duc de Broglie, Louis de Broglie, 1892-ji'li' 18-avgustta tuwi'lg'an ha'm 1987-ji'li' 19-martta qayti's bolg'an kvantli'q mexanikani'n' tiykari'n do'retiwshilerdin' biri ha'm 1929-ji'li' fizika boyi'nsha

Nobel si'yli'g'i'n ali'wg'a miyasar bolg'an francuz fizik teoretigi) jumi'si'nda ayqi'nlasti'ri'ldi' [7].

Lui de Broyl gipotezasi'ni'n' ma'nisi to'mendegilerden ibarat:

Tolqi'n ushi'n jiyilik ω ha'm tolqi'nli'q san $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ (tolqi'n vektori' $\mathbf{k}$), al bo'lekshe ushi'n kinetikali'q energiya $E = \frac{mv^2}{2}$ ha'm impuls $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ ta'n. Plank turaqli'si'n $\hbar$ (bul shamani' a'dette keltirilgen Plank turaqli'si' dep ataydi') arqali' belgileymiz ha'm bul konstanta tolqi'nli'q ja'ne korpuskulali'q qa'siyetlerdi ta'riyipleytug'i'n shamalar arasi'nda mi'naday baylani'slardi' ornati'wg'a mu'mkinshilik beredi:

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (1)$$

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ qatnasi'ni'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'n esapqa ali'p (1)-an'latpalardi'n' ekinshisinen biz to'mendegidey an'latpani' ala alami'z

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{h}{mv}. \quad (2)$$

Biraq klassikali'q mexanikada bir ob'ekte bir waqi'tta korpuskulali'q qa'siyettin' de, tolqi'nli'q qa'siyettin' de boli'wi' mu'mkin emes. Elektronda, soni'n' menen bir qatarda keyinirek ashi'lg'an basqa da elementar bo'lekshelerde tolqi'nli'q qa'siyetlerdin' ayqi'n tu'rde ko'riniwi olardi'n' qa'siyetlerin klassikali'q mexanikani'n' ni'zamlari' tiykari'nda tu'sindiriwdin' mu'mkinshiliginin' joq ekenligin bildiredi. Ko'rgizbeliligi boyi'nsha qolayli' bolg'an korpuskulali'q ha'm bo'lekshelik qa'siyetler elementar bo'lekshelerdin' ob'ektivlik qa'siyetlerin tek bir ta'repleme ha'm juwi'q tu'rde g'ana sa'wlelendire aladi'. Al bunday qa'siyetlerdi klassikali'q fizikag'a sali'sti'rg'anda pu'tkilley basqasha qaraytug'i'n kvantli'q mexanika ashi'p ko'rsete aladi' [8-13].

Kvantli'q mexanika boyi'nsha og'ada ko'p sanli' oqi'w a'debiyatlari'ni'n' bar ekenligin na'zerde tuti'p, biz to'mende oni'n' en' tiykarg'i' o'zgeshelikleri haqqi'nda qi'sqasha ga'p etemiz. Oni'n' ideyalari'na teren'irek kiriw maqsetinde elementar

bo'lekshelerdin' korpuskulali'q ha'm tolqi'nli'q qa'siyetlerin o'z aldi'na qarap shi'g'ami'z [1,2,12,14,15].

Klassikali'q mexanikada bo'lekshe haqqi'nda ga'p etkende usi' bo'lekshenin' qa'legen waqi't momentinde basi'p o'tetug'i'n noqatti'n' ken'isliklik koordinatalari' bolg'an x, y, z shamalari' da'l ma'nislerge iye boladi'. Eger ta'sir etetug'i'n $\mathbf{F}$ ku'shtin' shamasi' belgili bolsa, onda bazi' bir waqi't momentindegi bo'lekshenin' x_0, y_0, z_0 koordinatalari' menen $\mathbf{v}_0$ tezligi belgili bolg'an jag'dayda $m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}(x, y, z, t)$ tu'rindagi qozg'ali's ten'lemesin sheshiw arqali' bo'lekshenin' qa'legen waqi't momentindegi koordinatalari'n, tezligin ani'qlaw mu'mkin (joqari'da jazi'lg'an ten'lemenin' Nyutonni'n' ekinshi ni'zami'ni'n' matematikali'q an'latpasi' ekenligin an'g'ari'wi'mi'z kerek). Bo'lekshe o'tetug'i'n ken'isliklik noqatlardi'n' ji'ynag'i' oni'n' traektoriyasi'n ani'qlaydi'. Usi'ni'n' saldari'nan klassikali'q mexanika "bo'lekshe qaysi' ori'nda (noqatta) turi'pti'?" degen sorawg'a juwap bere aladi'. Usi'ni'n' menen bir qatarda kinematikali'q xarakteristika si'pati'nda waqi'tti'n' ha'r bir momentindegi bo'lekshenin' qozg'ali'si'n qozg'ali's mug'dari' (impuls) vektori' $\mathbf{M} = m\mathbf{v}$ ha'm kinetikali'q energiya $E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2m} M^2$ shamalari'ni'n' ja'rdeminde ta'riyiplew mu'mkin.

Processtin' pu'tkilley basqasha xarakteristikasi'n tolqi'n beredi. En' a'piwayi' tolqi'nli'q process si'pati'nda bir tekli ortalı'qta tarqalatug'i'n sheksiz da'wirli tegis tolqi'ndi' qaray alami'z. x ko'sherinin' on' bag'i'ti'nda tarqalatug'i'n usi'nday tolqi'nni'n' ten'lemesi

$$\Psi = A \cos 2\pi \left(vt - \frac{x}{\lambda} \right) \quad (3)$$

tu'rine iye boladi'. Eger ciklli'q jiyilik ω shamasi'na o'tsek tegis tolqi'nni'n' ten'lemesinin'

$$\Psi = A \cos(\omega t - kx) \quad (4)$$

formulasi'na aylanatug'i'nli'g'i'n ko'remiz.

(4)-an'latpadag'i' t menen x shamalari'n o'zgertiw arqali' Mathematica 10 programmalaw tilinin' ja'rdeminde tegis tolqi'ndi' sxema tu'rinde an'sat sa'wlelendiriw mu'mkin. Biz $\omega = 2$, $k = 1$ bolg'an jag'day ushi'n to'mendegidey programma du'zemiz:

om=3;k=1;

Plot3D[Cos[om t-k x],{t,0,10},{x,0,10}]

Programma bergin sxema 1-su'wrette keltirilgen.

A'dette tolqi'n fronti'ni'n' $A'B'$ tegisligindegi terbelisti (2-su'wret) (4)-an'latpani' kompleksli tu'rde jazi'w arqali' tallag'an qolayli'

$$\psi = A e^{-\frac{i}{\hbar}(\omega t - kx)}. \quad (5)$$

Bul an'latpada t arqali' tolqi'n fronti'ni'n' da'slepki AB hali'nan $A'B'$ hali'na shekem jetip keletug'i'n waqi't belgilengen. Tolqi'n fronti'na tu'sirilgen normaldi' On arqali', al baslang'i'sh O noqati'nan i'qti'yarli' tu'rde ali'ng'an ha'm On normali' menen α mu'yeshin quraytug'i'n bag'i'tti'n' boyi'ndag'i' noqat arasi'ndag'i' qashi'qli'qti' r arqali' belgileymiz. Bunday jag'dayda

$$t = \frac{r \cos[\alpha]}{v} = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}}{v}$$

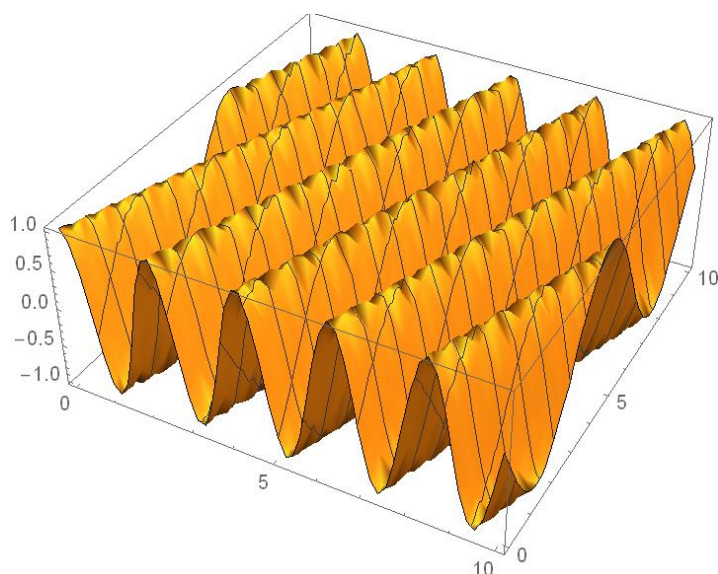
ten'ligi ori'nli' boladi'. Bul an'latpada $\mathbf{n}$ arqali' On normali' bag'i'ti'nda tu'sirilgen birlik vektor belgilengen. $\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}$ bolsa $\mathbf{r}$ ha'm $\mathbf{n}$ vektorlari'ni'n' skalyar ko'beymesi. Na'tiyjede tolqi'nni'n' an'latpasi' ushi'n mi'naday formulani' alami'z:

$$\psi = A e^{i\left(\frac{2\pi \mathbf{r} \cdot \mathbf{n}}{\lambda} - \omega t\right)}. \quad (6)$$

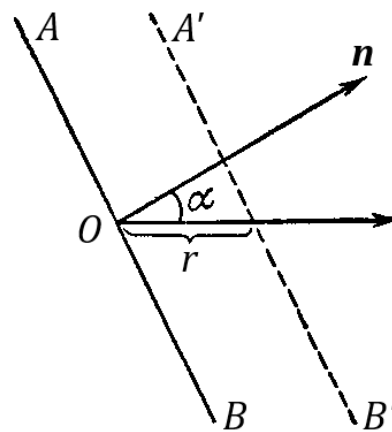
Eger (1)-an'latpalarda keltirilgen qatnaslardi' esapqa alsaq, onda

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad (7)$$

formulasi'na iye bolami'z ha'm bul formulani' keyinirek ken' tu'rde paydalanami'z.



1-su'wret. (4)-an'latpa tiykari'nda du'zilgen
tegisi tolqi'n.



2-su'wret. Tegisi tolqi'n
fronti'ni'n' tarqali'wi'.

Uli'wma jag'dayda A amplitudasi'ni'n' shamasi' kompleksli boli'wi' da mu'mkin. Bunday jag'dayda tolqi'n ta'repinen ali'p ju'riletug'i'n energiya bul kompleksli amplitudani'n' modulinin' kvadrati' $|A|^2 = A \cdot A^*$ arqali' an'latiladi'. Bul an'latpada A^* arqali' A shamasi'ni'n' kompleksli tu'yinlesi belgilengen. Ψ tolqi'n funkciyasi' A shamasi'nan tek da'wirli ag'za boyi'nsha g'ana ayri'latug'i'n bolg'anli'qtan [(6)- yamasa (7)-an'latpalar] amplitudani'n' modulinin' kvadrati' ushi'n

$$|A|^2 = A \cdot A^* = \Psi \cdot \Psi^* \quad (8)$$

ten'ligi ori'nlanadi'.

Tegisi tolqi'ng'a sa'ykes keliwshi geometriyalig' obraz – birdey fazag'a iye sheksiz tegisliklerdin' og'ada ko'p sani' yamasa bul tegisliklerge perpendikulyar bolg'an tuwri' "nurlardi'n" sheksiz ko'pligi. Tolqi'n haqqi'ndag'i' ko'z-qaras "qay ori'nda" degen sorawg'a juwap bere almaydi'. (3)- menen (6)-an'latpalar waqi't boyi'nsha sheklenbegen ha'm barli'q ken'islikti o'z ishine ali'wshi' tolqi'nli'q processti ta'riyipleydi.

Elektronni'n' yamasa basqa qa'legen elementar bo'lekshenin' haqi'yqi'y qa'siyetleri klassikalig' bo'lekshelerdin' qa'siyetlerine de, klassikalig' tolqi'nni'n'

qa'siyetlerine de sa'ykes kelmeydi. Klassikali'q mexanikag'a bag'i'natug'i'n bo'lekshe ko'z-qaraslari'nda turi'p difrakciya qubi'li'si'n tu'sindiriw mu'mkin emes. Eki san'laqtag'i' difrakciya qubi'li'si'n baqlap ati'rmi'z dep boljayi'q. Bunday jag'dayda difrakciya qubi'li'si' tek eki san'laq bir waqi'tta ashi'q bolg'an jag'dayda g'ana baqlanadi'. Mi'sali' jaqti'li'qti'n' difrakciyasi'nda jaqti'li'q bir waqi'tta eki san'laq arqali' o'tiwi sha'rt. Eger jaqti'li'qti' da'slep birinshi san'laq, al keyin ekinshisi arqali' o'tkeretug'i'n bolsaq, onda ekranda difrakciyalı'q su'wret payda bolmaydi'. Bul jag'dayda jaqti'li'qti'n' qosi'ndi' tarqali'wi' jaqti'li'q ha'r bir san'laq arqali' o'tkende ali'natug'i'n tarqali'wlardi'n' a'piwayi' qosi'ndi'si'nan turadi'. Demek tolqi'n menen islesken jag'dayda birden eki san'laq arqali' o'tkende payda bolatug'i'n su'wret penen tek ayi'ri'm san'laqlar arqali' o'tkendegi su'wretten u'lken ayi'rmag'a iye boladi'. Al elektronlar yamasa basqa elementar bo'leksheler menen o'tkerilgen ta'jiriybelerde eki san'laqti'n' bir waqi'tta ashi'q boli'wi' yamasa san'laqlardi'n' tek birinshisinin' yamasa ekinshisinin' ashi'q boli'wi' hesh qanday a'hmiyetke iye emes. Ekranda ali'ng'an su'wret san'laqti'n' qaysi'si'ni'n' ashi'q turg'anli'g'i'nan pu'tkilley g'a'rezsiz. Ha'r bir bo'lekshe tek bir san'laq arqali' g'ana o'tedi ha'm oni'n' qozg'ali'si' ekinshi san'laqti'n' ashi'q yamasa jabi'q turg'anli'g'i'nan pu'tkilley g'a'rezsiz. Solay etip belgili bir traektoriya menen qozg'ali'wshi' bo'lekshe haqqi'ndag'i' ko'z-qaraslar difrakciya qubi'li'si'n tu'sindire almaydi' [16].

Tap sol si'yaqli' tolqi'n elektronni'n' energiyasi'n kishkene ko'lemnin' sheklerinde bere ali'wg'a (mi'sali' soqli'g'i'si'wlarda yamasa fotoelektronli'q effekt qubi'li'si'nda) qa'biletli ekenligin tu'sindire almaydi'. Tolqi'n ta'repinen ali'p ju'riletug'i'n energiya oni'n' fronti'ni'n' barli'q noqatlari'nda birdey boli'p tarqalg'an ha'm sonli'qtan energiyani'n' barli'g'i'ni'n' bir waqi'tta u'lken emes ko'lemdegi basqa ob'ektke beriliwi mu'mkin emes.

Endigiden bi'lay elektrondi', basqa da elementar bo'lekshelerdi mikrobo'leksheler yamasa bo'leksheler dep ataymi'z. Olardi'n' haqi'yqi'y qa'siyetlerin qanday da bir fizikali'q qubi'li'sti' (mi'sali', joqari'da ga'p etilgen difrakciyali'q maksimumlardi'n' payda boli'w qubi'li'si'n) bir waqi'tta korpuskulali'q ko'z-qarasta ha'm tolqi'nli'q ko'z-qarasta turi'p tu'sindirgen jag'dayda ani'qlawg'a boladi'. Korpuskulali'q ko'z-qarastan qarag'anda difrakciyali'q maksimum ko'p sanli' bo'leksheler kelip tu'sken ori'nda baqlanadi'. Al tolqi'nli'q ko'z-qarasta turi'p tallag'anda difrakciyali'q maksimum ali'p kelingan energiyani' u'lken bolg'an ori'nda, yag'ni'y tolqi'nni'n' amplitudasi'ni'n' modulinin' kvadrati' $A \cdot A^* = \Psi \cdot \Psi^*$ u'lken bolg'an ori'nda qal'iplesedi. Eger ken'islikte ali'ng'an bir ko'lemge kelip tu'sken mikrobo'lekshelerdin' sani' tolqi'nni'n' terbelis amplitudasi'ni'n' moduli $A \cdot A^*$ u'lken bolg'an ori'nda u'lken boladi' dep esaplasaq, onda eki ko'z-qarasti' birlestiriwge boladi'.

Kvantli'q mexanikani'n' tiykari'nda jatatug'i'n ideya da'lirek tu'rde bi'layi'nsha ayti'ladi': $d\tau$ elementar ko'leminde mikrobo'leksheni tabi'wdi'n' itimalli'g'i' $d\omega$ usi' ko'lem ushi'n esaplang'an tolqi'n funkciyasi'ni'n' modulinin' kvadrati' bolg'an $|\Psi|^2$ shamasi' menen usi' ko'lemnin' ko'beymesine ten', yag'ni'y

$$d\omega = |\Psi|^2 d\tau. \quad (9)$$

Birdey waqi't ishinde ken'isliktin' ha'r qi'yli' oblastlari'nda tabi'latug'i'n bo'lekshelerdin' sani' olardi' usi' oblastlarda tabi'wdi'n' itimalli'g'i' $d\omega$ shamasina tuwri' proporcional. Bul ga'ptin' duri's ekenligin ta'jiriybelerdi birdey sharayatlarda ko'p ret qaytalawdi'n' na'tiyjesinde da'lillewge boladi'. Tolqi'n funkciyasi'ni'n' modulinin' kvadrati' $|\Psi|^2 = A \cdot A^*$ itimalli'qti'n' ti'g'i'zli'g'i'ni'n' ken'isliktegi tarqali'wi'n beredi [2].

Biz to'mende kvantli'q mexanikani'n' ayi'ri'm prinsipleri, solardi'n' ishinde superpoziciya prinsipi haqqi'nda ga'p etemiz. Na'tiyjede kvantli'q mexanikani'n'

en' tiykari' haqqi'nda bi'layi'nsha juwmaq shi'g'ari'w mu'mkinshiligine iye bolami'z:

Kvantli'q mexanikani'n' tiykari' korpuskulali'q-tolqi'nli'q dualizm menen superpoziciya principi boli'p tabi'ladi'.

Kvantli'q mexanika en' da'l na'tiyjelerdi beretug'i'n teoriyali'q fizikani'n' bo'limlerinin' biri boli'p tabi'ladi'. Biz to'mende vodorod ha'm vodorod ta'rizli atomlardi'n' fizikali'q qa'siyetlerin u'yreniw ushi'n relyativistlik emes kvantli'q mexanikani' qollanami'z ha'm ilimnin' bul tarawi'ni'n' ma'selelerdi qanday joqari' da'llik penen sheshe alatug'i'nli'g'i'n da'lilleymiz. Esaplawlardi' o'tkeriw ushi'n Wolfram firmasi' ta'repinen islep shi'g'i'lg'an ha'm rawajlandi'ri'lg'an Mathematica 10 universalli'q kompyuterlik algebra sistemasi'n ken' tu'rde paydalanami'z [17-32].

Biz vodorod atomi'ni'n' yamasa vodorod ta'rizli atomlardi'n' en' a'piwayi' kvantli'q sistemalardi'n' biri ekenligin atap o'temiz. Vodorod atomi' tek bir protonnan turatug'i'n yadrodan ha'm oni'n' do'gereginde aylani'p ju'retug'i'n bir elektronnan turadi'. Bunday sistemani'n' matematikali'q modeli da'l tu'rdegi sheshimlerge iye Kulon potentsiali'na iye Shredinger ten'lemesi boli'p tabi'ladi'. Soni'n' menen bir qatarda kvantli'q mexanikani'n' ko'p sanli' ma'seleleri usi'nday modelge ali'p klinedi. Bunday jag'day vodorod atomi' haqqi'ndag'i' kvantli'q mexanikali'q ma'selege ayri'qsha status beredi ha'm bul ma'sele ko'pshilik oqi'wli'qlarda toli'q bayanlanadi'. Biraq usi'nday jag'daylarg'a qaramastan vodorod atomi'ni'n' kvantli'q teoriyasi'n u'yreniw metodikali'q ko'z-qaraslardan bir qatar qi'yi'nshi'li'qlar, oni'n' u'stine ma'selelerdi sheshiwde ha'r qi'yli' avtorlardi'n' bir birine toli'q sa'ykes kelmeytug'i'n ha'r qi'yli' matematikali'q an'latpalardi' paydalani'wi' menen baylani'sli'. Mi'sali', elektronni'n' tolqi'n funkciyasi'ni'n' radialli'q bo'limi Lagerr ko'p ag'zali'si'ni'n' ja'rdeminde an'lati'ladi'. Olardi'n' koefficientleri bir biri menen rekurrentli formula arqali'

baylani'sqan ha'm konstanta da'lliginde berilgen. Bul konstantani'n' ma'nisi ha'r qi'yli' avtorlarda ha'r qi'yli' jollar menen ani'qlanadi'. Kvantli'q mexanikani'n' ma'selelerinde sol konstantani' a'dette tolqi'n funkciyasi'ni'n' normirovka sha'rtinin' tiykari'nda esaplaydi'. Usi'nday jollar menen ali'ng'an ma'nisler Lagerr polinamlari'na emes, al tolqi'n funkciyasi'ni'n' normirovkalang'an ko'beytiwshisine tiyisli boladi'. Na'tiyjede ha'r qi'yli' oqi'w qollanbalari'nda ha'r qi'yli' jollar menen normirovkalang'an ko'p ag'zali'lar birdey belgi menen belgilengen. Bunnan radialli'q funkciyani'n' uli'wma tu'rin qalay jazı'w mu'mkin ekenligi ko'p sanli' oqi'ti'wshi'lar menen studentlerge tu'siniksiz ma'selege aylanadi'. Usi' jag'daylarg'a baylani'sli' pitkeriw qa'nigelik jumi'si' vodorod atomi'ni'n' teoriyasi'n qatan' tu'rde bayanlaw ha'm bul teoriyani'n' matematikali'q ta'repine teren'irek itibar beriw din' saldari'nan ali'natug'i'n na'tiyjelerdi izertlew ushi'n ori'nlandi'.

1-§. Shredinger ten'lemesi

Shredinger ten'lemesi (Schrödinger equation) gamiltonli'q kvantli'q sistemalardag'i' tolqi'n funkciyasi'ni'n' ja'rdeminde beriletug'i'n gamiltonli'q kvantli'q sistemalardag'i' taza haldi'n' ken'isliktegi (uli'wma jag'daylarda konfiguraciyali'q ken'isliktegi) ha'm waqi't boyi'nsha o'zgerisin ta'riyipleytug'i'n dara tuwi'ndi'larg'a iye si'zi'qli' differencialli'q ten'leme boli'p tabi'ladi'. Nyutonni'n' ekinshi ni'zami'ni'n' ten'lemesi menen Gamilton ten'lemeleri klassikali'q mexanikada yamasa Maksvell ten'lemeleri elektromagnitlik tolqi'nlardı' izertlegende qanday ori'ndi' iyeleytug'i'n bolsa, Shredinger ten'lemesi kvantli'q mexanikada tap sonday ori'ndi' iyeleydi. Ten'leme Ervin Shredinger ta'repinen 1925-jı'li' tabi'lg'an ha'm 1926-jı'li' baspada jari'q ko'rdi. Ta'biyatti'n' tiykarg'i' ni'zamlari' si'yaqli' Shredinger ten'lemesi keltirilip shi'g'ari'lmaydi', al

eksperimentalli'q mag'li'wmatlardi' uli'wmalasti'ri'w tiykari'nda klassikali'q optikag'a sa'ykes postulat tu'rinde qabi'l etiledi [33-38].

Biz Ervin Rudolf Yozef Aleksandr Shredingerdin' (nemisshe Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger) 1887-ji'li 12-avgust ku'ni Vena qalasi'nda tuwi'lg'an ha'm 1961-ji'li 4-yanvar ku'ni qayti's bolg'an Avstriyalı' fizik-teoretik, kvantli'q mexanikani' do'retiwshilerdin' biri ekenligin, 1933-ji'lg'i' fizika boyi'nsha Nobel si'yli'g'i'na miyasar bolg'anli'g'i'n atap o'temiz.

Shredinger ten'lemesi jaqti'li'qti'n' tezliginen a'dewir kishi tezlikler menen qozg'alatug'i'n spini joq bo'leksheler ushi'n arnalg'an. U'lken tezlikler menen qozg'alatug'i'n bo'leksheler ushi'n oni' uli'wmalasti'ri'w joli' menen ali'ng'an basqa ten'lemeler qollani'ladi' (Kleyn-Gordon ten'lemesi, Pauli ten'lemesi, Dirak ten'lemesi ha'm basqalar).

Shredinger ten'lemesi Galiley tu'rlendiriwlerine qarata invariant. Bul ten'lemenin' relyativistlik emes kvantli'q mexanikani'n' ten'lemesi ekenligin ko'rsetedi ha'm bunnan ju'da' a'hmiyetli bolg'an na'tiyjeler kelip shi'g'adi': Galiley tu'rlendiriwleri menen baylani'sli' bolg'an kvantli'q mexanikani'n' bir qatar operatorlari'ni'n' ori'n ali'wi', massalar spektrine iye yamasa stabilli emes elementar bo'lekshelerdi relyativistlik emes kvantli'q mexanikada ta'riyiplewdin' mu'mkin emes ekenligi, Galiley tu'rlendiriwleri ta'repinen payda etiletug'i'n kvantli'q-mexanikali'q invariantlardi'n' bar boli'wi' ha'm tag'i' basqalar.

Dara tuwi'ndi'li' ha'm si'zi'qli' differencialli'q Shredinger ten'lemesi klassikali'q mexanikadag'i' Gamiltonni'n' birinshi ta'rtpi differencialli'q ten'lemeler sistemasi'na sali'sti'rg'anda a'dewir quramali'. Ten'lemenin' si'zi'qli' ekenligi kvantli'q mexanikani'n' en' tiykarg'i' principi bolg'an superpoziciya principinin' na'tiyjesi ha'm uli'wmalasti'ri'li'wi' boli'p tabi'ladi'. Demek Ψ ha'm Φ funkciyalari' Shredinger ten'lemesin qanaatlandi'ratug'i'n bolsa, onda ten'lemeni olardi'n' si'zi'qli' kombinaciyasi' bolg'an

$$\alpha\Psi + \beta\Phi$$

funkciyasi' da (bul an'latpada α ha'm β arqali' kompleksli sanlar belgilengen) qanaatlandi'radi'.

Shredinger ten'lemesi Gamilton ten'lemesi si'yaqli' waqi't boyi'nsha birinshi ta'rtpi ten'leme boli'p tabi'ladi'. Bul jag'day kvantli'q mexanikadag'i' statistikali'q determenizm principinin' matematikali'q sa'wlesi si'pati'nda belgili. Usi'ni'n' na'tiyjesinde sistemani'n' qanday da bir waqi't momentindegi hali' belgili bolsa, onda oni'n' bunnan keyingi hallari'ni'n' bir ma'nisli ani'qlay almaytug'i'nli'g'i'ni'n', al keyingi hallardi'n' Ψ tolqi'n funkciyasi'ni'n' ja'rdeminde bazi' bir itimalli'q penen ani'qlanatug'i'nli'g'i'ni'n' matematikali'q jaqtan an'lati'li'wi' boli'p tabi'ladi'.

Tiykarg'i' wazi'ypag'a kirispesten buri'n biz a'hmiyetli bolg'an to'mende keltirilgen bir qatar an'latpalardi' esletip o'temiz.

Biz joqari'da erkin bo'lekshenin' qozg'ali'si'n

$$\Psi = A e^{i(kr - \omega t)} = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)} \quad (1.1)$$

tegis tolqi'n menen ta'riypley alatug'i'ni'mi'zdi' atap o'tken edik. Bul an'latpada Ψ arqali' tolqi'n funkciyasi', al $\mathbf{k}$ arqali' moduli $2\pi/\lambda$ shamasi'na ten' tolqi'n vektori', A arqali' konstanta belgilengen. Bul tolqi'n elektromagnit maydani'n da, bo'lekshelerdi de ta'riypley aladi'. Elektromagnit maydani' jag'dayi'nda Maksvell ten'lemelerinen

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \quad (1.2)$$

tu'rindagi tolqi'n ten'lemesin ali'w mu'mkin (bul an'latpada ψ tu'rindagi belgilewdi qollandi'q). Bul ten'lemege tegis tolqi'n ushi'n jazi'lg'an an'latpani' qoysaq elektromagnit maydani' ushi'n jiyilik ω menen $\mathbf{k}$ vektori'ni'n' qurawshi'lari' arasi'ndag'i' baylani'sti', yag'ni'y dispersiya ni'zami'n alami'z:

$$\omega^2/c^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \quad (1.3)$$

Endi dispersiya ni'zami' menen tegis tolqi'n ushi'n jazi'lg'an an'latpa tiykari'nda massasi' m bolg'an erkin bo'lekshenin' tolqi'n funkciyasi' ushi'n

ten'lemeni jazi'wg'a ti'ri'sami'z. Uli'wma jag'dayda bunday bo'leksheler ushi'n energiya menen impuls arasi'ndag'i' baylani's bi'layi'nsha jazi'ladi':

$$E^2/c^2 = m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2. \quad (1.4)$$

De Broyl tolqi'ni' ushi'n $E = \hbar\omega$ ha'm $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ ten'likleri ori'nlanatug'i'n bolg'anli'qtan (1.4)-an'latpadan

$$\omega^2/c^2 = \frac{\omega_0^2}{c^2} + k_x^2 + k_y^2 + k_z^2, \quad \omega_0 = mc^2/\hbar \quad (1.5)$$

formulalari'na iye bolami'z. Eger relyativistlik emes jag'day menen sheklenetug'i'n bolsaq (bunday jag'dayda $pc \ll mc^2$ sha'rti ori'nlanadi'), onda

$$E = mc^2 + 1/(2m)(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (1.6)$$

qatnasi'n alami'z.

(1.6)-an'latpadan relyativistlik emes bo'leksheler ushi'n to'mendegidey dispersiya ni'zami' ali'nadi'

$$\omega = \omega_0 + \frac{\hbar}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (1.7)$$

Relyativistlik emes mexanikada energiya ushi'n esaplawdi'n' qay ori'nda baslanatug'i'nli'g'i' a'hmiyetke iye emes. Usi'ni'n' na'tiyjesinde $E - mc^2 \rightarrow E$ almasti'ri'li'wi' (usi'g'an sa'ykes $\omega - \omega_0 \rightarrow \omega$ almasti'ri'li'wi') hesh na'rsege ta'sir etpeydi. Sonli'qtan (1.7)-an'latpadag'i' ω_0 konstantasi'n esapqa almay dispersiya ni'zami'n

$$\omega = \frac{\hbar}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (1.8)$$

tu'rinde jazi'w mu'mkin.

Endi de Broyl tolqi'ni'na qayti'p kelemiz ha'm oni' (1.1)-an'latpa tu'rinde jazami'z ha'm an'latpadan waqi't ha'm koordinata boyi'nsha tuwi'ndi'lar alami'z. Waqi't boyi'nsha ali'ng'an dara tuwi'ndi'

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{E}{\hbar}i\Psi, \quad (1.9)$$

al koordinata boyi'nsha ali'ng'an dara tuwi'ndi'

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = ip\Psi \quad (1.10)$$

tu'rine iye boladi'.

Koordinata boyi'nsha ali'ng'an tuwi'ndi'ni' bi'layi'nsha o'zgertiwimiz mu'mkin:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p\Psi. \quad (1.11)$$

Bul operatorli'q ten'leme boli'p tabi'ladi'. Oni' biz

$$\hat{p}\Psi = p\Psi \quad (1.12)$$

tu'rinde jaza alami'z. Bul an'latpada

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (1.13)$$

al u'sh o'lshemli ken'islikke o'tsek

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (1.14)$$

operatorlari'n alami'z.

Endi waqi't boyi'nsha tuwi'ndi' alami'z.

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{E}{\hbar} i\Psi. \quad (1.15)$$

(1.15)-an'latpada E arqali' toli'q energiya belgilengen. Bul jag'dayda da energiya ushi'n operator

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (1.16)$$

ha'm sa'ykes operatorli'q ten'leme ali'wi'mi'zg'a boladi':

$$\hat{E}\Psi = E\Psi. \quad (1.17)$$

(1.17)-an'latpa Shredinger ten'lemesi boli'p tabi'ladi'. Biz toli'q energiyani'n' kinetikali'q ha'm potencial energiyalardi'n' qosi'ndi'si'nan turatug'i'nli'g'i'n jaqsi' bilemiz. Sonli'qtan

$$E = T + U \quad (1.18)$$

ten'ligi ori'nlanadi'. Bul ten'likte T arqali' kinetikali'q energiya, al U arqali' potencial energiya belgilengen. Usi' ten'likke sa'ykes

$$\hat{E} = \hat{T} + \hat{U} = \hat{T} + U \quad (1.19)$$

ten'ligin jaza alami'z. Potencial energiyani'n' ma'nisinin' tek koordinatalardan g'a' rezli ekenligin itibarg'a ali'p biz $\hat{U} = U$ ten'liginin' ori'nlanatug'i'nli'g'i'n esapqa aldi'q (tap sol si'yaqli' koordinata operatorlari' ushi'n

$$\hat{x} = x, \hat{y} = y, \hat{z} = z$$

ten'liklerin jaza alami'z).

Ekinshi ta'repten

$$T = \frac{p^2}{2m}. \quad (1.20)$$

Usi' jag'dayg'a sa'ykes

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (1.21)$$

formulasi'n alami'z ha'm u'sh o'lishemli jag'dayda laplasianni'n' payda bolatug'i'nli'g'i'n ko'remiz. Joqari'da ali'ng'an qatnaslardi' esapqa ali'p biz

$$\hat{E}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U\Psi = E\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1.22)$$

ten'liklerinin' ori'n alatug'i'nli'g'i'n ko'remiz.

(1.22)-ten'lemeni a'dette bi'layi'nsha da jazadi':

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.23)$$

Eger bul ten'lemeni

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.24)$$

tu'rinde jazatug'i'n bolsaq, onda Gamilton operatori' (toli'q energiya operatori') yamasa gamiltonian ushi'n

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \quad (1.25)$$

an'latpasi'n alami'z. Bunday jag'dayda Shredinger ten'lemesin

$$\hat{H}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (1.26)$$

tu'rinde jaza alami'z.

Waqitqa baylani'sli' bolmag'an hallar ushi'n (yag'ni'y stacionar hallar ushi'n)
(1.22)-an'latpalardan

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0 \quad (1.27)$$

yamasa uli'wmali'q u'sh o'lshe'mli ma'selelerdi sheshiw ushi'n

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi = 0 \quad (1.28)$$

ten'lemesin alami'z. Bul ten'lemede

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}. \quad (1.29)$$

Biz stacionar jag'daylar ushi'n tolqi'n funkciyasi'n $\psi = \psi(x, y, z)$ arqali' belgiledik [al $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(x, y, z, t)$ ekenligin na'zerde tutami'z].

Tolqi'n funkciyasi'ni'n' fizikali'q ma'nisi haqqi'nda kirisiw bo'liminde ayti'ldi': oni'n' modulinin' kvadrati' $|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$ bo'leksheni x noqati'nda tabi'wdi'n' itimalli'g'i'ni'n' ti'g'i'zli'g'i'na ten', al $|\psi(x)|^2 dx$ shamasi' bolsa bo'lekshenin' koordinatalari'ni'n' x ha'm $x + dx$ noqatlari' arasi'nda boli'wi'ni'n' itimalli'g'i'n beredi (a'piwayi'li'q ushi'n biz bir o'lshe'mli jag'daydi' qarap ati'rmi'z). Qanday da bir fizikali'q shamani'n' ortasha ma'nisin tabi'w ushi'n oni'n' mu'mkin bolg'an ma'nislerin olardi'n' payda boli'w itimalli'qlari'na ko'beytip summalaw kerek boladi'. Bo'lekshenin' koordinatalari' ma'nislerdin' u'zliksiz qatari'n qabi'l etetug'i'n bolg'anli'qtan, biz qarap ati'rg'an jag'dayda hali' $\psi(x)$ funkciyasi' menen ani'qlanatug'i'n jag'dayda bo'lekshenin' usi' haldag'i' x koordinatasi'ni'n' ortasha ma'nisi

$$\bar{x} = \int x |\psi|^2 dx = \int \psi^* x \psi dx \quad (1.30)$$

integrali'ni'n' ja'rdeminde ani'qlanadi'. Tap usi'nday jag'day $\bar{y}$, $\bar{z}$ ler, olardi'n' kvadratlari', kublari', basqa da'rejeleri ushi'n da ori'nli' boladi'. Bunnan i'qti'yarli' tu'rde ali'ng'an $f(x, y, z)$ funkciyasi'ni'n' ortasha ma'nisin de

$$\overline{f(x, y, z)} = \int \psi^* f(x, y, z) \psi dx \quad (1.31)$$

integrali'ni'n' ja'rdeminde esaplaw mu'mkin degen juwmaq kelip shi'g'adi'.

Biz joqari'da an'latpalardi'n' barli'g'i'n $\Psi = A e^{i(kr - \omega t)}$ tu'rindegi tegis tolqi'nni'n' tiykari'nda alg'an edik. Endi tap sonday an'latpalardi' $\Psi = A e^{i(\omega t - kr)}$ an'latpasi'ni'n' ja'rdeminde, yag'ni'y ψ funkciyasi'ni'n' orni'na ψ^* funkciyasi'na su'yeniwge bolama degen sorawg'a juwap beriwge ti'ri'sami'z. Bunday jag'dayda biz

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U(\mathbf{r}) \psi^* \quad (1.32)$$

tu'rindegi ten'lemeni, yag'ni'y

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\mathbf{r}) \psi \quad (1.33)$$

ten'lemesine tu'yinles bolg'an ten'lemeni alg'an bolar edik. A'lbette ψ funkciyasi'n yamasa ψ^* funkciyasi'n tabi'wdi'n' ayi'rmasi' joq, sebebi birewin tabi'w menen birge ekinshisi de tabi'ladi'. En' basli'si' fizikalii'q ma'niske tolqi'n funkciyasi'ni'n' o'zi emes, al $\psi^* \psi$ ko'beymesi iye boladi'. Eger biz (1.33)-ten'lemeni shep ta'repten ψ^* g'a, al (1.32)-ten'lemeni ψ ge ko'beytip (1.33) dan (1.32) ti alsaq ha'm onnan keyin quramali' emes bazi' bir tu'rlendiriwlerdi ori'nlasaq

$$\frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m} \nabla(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = 0 \quad (1.34)$$

ten'lemesin alami'z. Bul ten'leme haqi'yqati'nda itimalli'qti'n' ti'g'i'zli'g'i' bolg'an $\rho = \psi\psi^*$ ushi'n jazi'lg'an u'zilmeslik ten'lemesi boli'p tabi'ladi':

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0. \quad (1.35)$$

Bul ten'lemede itimalli'q ag'i'si'ni'n' ti'g'i'zli'g'i' shamasini'n' orni'n

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (1.36)$$

vektori' iyeleydi.

Matematikali'q ko'z-qarastan Shredingerdin' stacionar ten'lemesin sheshiw $\hat{H}$ operatori'ni'n' menshikli funkciyalari' menen menshikli ma'nislerin tabi'wdan ibarat boli'p tabi'ladi'. Differencialli'q ten'lemeler teoriyasi'nda (1.26)-ten'lemenin'

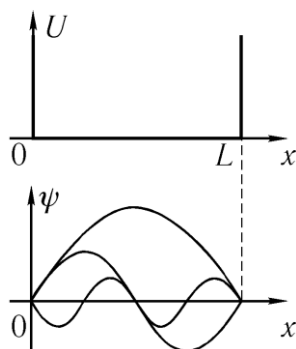
shekli ha'm bir ma'nisli sheshimlari tek E energiyani'n' belgili bir ma'nislerinde g'ana ali'natug'i'nli'g'i' da'lillenedi. Biraq Shredinger ten'lemesi energiya E nin' qa'legen ma'nisleri ushi'n da sheshimlarga iye bola aladi'. Bug'an mi'sal boli'p erkin bo'lekshe ushi'n jazi'lg'an

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi \quad (1.37)$$

tu'rindagi ten'lemeni E nin' qa'legen ma'nislerinde qanaatlandi'ratug'i'n tolqi'n funkciyasi'n ko'rsetiwge boladi'. Bunday jag'day tutas spektrge sa'ykes keledi. Bunday ma'seleler qatari'na bo'lekshelerdin' shashi'rawi' (yag'ni'y bo'lekshenin' infinitlik qozg'ali'si') haqqi'ndag'i' ma'sele kiredi. Al finitlik qozg'ali's haqqi'ndag'i' ma'seleler (yag'ni'y baylani'sqan hallar haqqi'ndag'i' ma'seleler) bolsa E nin' tek belgili bir ma'nislerindagi sheshimlarga, yag'ni'y energiyani'n' diskret qa'ddilerinin' bar boli'wi'na ali'p keledi. Bul a'hmiyetli na'tiyjeni ju'da' a'piwayi' bolg'an bir mi'salda ko'riwge boladi'.

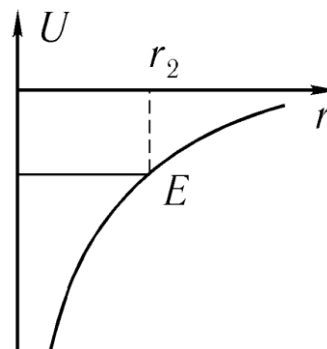
Eki shag'i'li'sti'ri'wshi' diywal ortasi'ndag'i' elektronni'n' x ko'sheri boyi' menen qozg'ali'si'n qaraymi'z. Bul diywallar elektron ushi'n "ideal shag'i'li'sti'ri'wshi' ayna" xi'zmetin atqaratug'i'n bolsi'n. Tolqi'nli'q ko'z-qarastan bul turg'i'n tolqi'nlar boli'p tabi'ladi' (bul jag'day eki ushi' bekitilgen tardi'n' terbelislerine sa'ykes keledi). Elektron diywal arqali' o'te almaytug'i'n bolg'anli'qtan diywalni'n' si'rti'nda ha'm diywalni'n' o'zinde de ψ amplitudasi' nolge ten' boli'wi' kerek. Solay etip amplituda ψ din' shamasi' $x = 0$ ha'm $x = L$ bolg'an jag'daylarda nolge aylanadi'. Bul "shegarali'q sha'rtler dep atalatug'i'n jan'a sha'rtler boli'p tabi'ladi'. Demek turg'i'n tolqi'nlar diywallarda tu'yinlarga iye boli'wi' kerek. Bunnan qa'legen uzi'nli'qtag'i' emes, al tek $A = 2L$ yamasa $2L/2, 2L/3, 2L/4$ ha'm t.b. shamalarg'a ten' bolg'an tolqi'nlardi'n' bar bolatug'i'nli'g'i' kelip shi'g'adi'. Diskret tolqi'n funkciyalar 3-su'wrette ko'rsetilgen (diywallar arasi'ndag'i' elektron). Tap usi'nday jag'day skripkani'n' tari'ni'n' sesinin' belgili bir toni'na sa'ykes keledi. $A = 2L$ bas tondi' beredi, al basqa $A = 2L/2,$

$2L/3, \dots$ tolqi'n uzi'nli'qlari' obertonlardi' beredi.



3-su'wret. O'tkermeytug'i'n eki diywal

arasi'ndag'i' bo'lekshe ma'selesin
sheshiw ushi'n arnalg'an su'wret.



4-su'wret.

$U = -e^2/(4\pi \epsilon_0 r)$ potentsiali'ni'n'
grafigi.

Tolqi'n funkciyasi' formalli'q jaqtan tardi'n' terbelislerinin' amplitudasi'ni'n' koordinatadan g'a'rezligi menen toli'q sa'ykes keledi

$$\psi = A \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right).$$

biraq bul ten'lemade $\lambda = \frac{h}{p} = h/\sqrt{2mE}$ elektronni'n' de Broyli'q tolqi'n uzi'nli'g'i' boli'p tabi'ladi'. Bul tolqi'n funkciyasi' $x = 0$ bolg'an jag'dayda $\psi = 0$ shegarali'q sha'rtin qanaatlandi'radi'. Ekinshi shegarali'q sha'rt ekinshi shegaradag'i' tolqi'n funkciyasi'ni'n' nolge ten' boli'wi', yag'ni'y $\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}L\right) = 0$ sha'rti boli'p tabi'ladi'. Bul sha'rt tolqi'n uzi'nli'g'i' λ nin'

$$\frac{2\pi}{\lambda}L = n\pi \quad (1.38)$$

sha'rtin qanaatlandi'ratug'i'n ma'nislerinde ori'nlanadi'. Bul an'latpada n arqali' pu'tin san belgilengen. Son'g'i' (1.38)-sha'rt λ ushi'n ruqsat etilgen ma'nislerdi beredi, yag'ni'y

$$\lambda_1 = 2L, \quad \lambda_2 = \frac{2L}{2}, \quad \lambda_3 = \frac{2L}{3}, \quad \dots, \lambda_n = \frac{2L}{n} \quad (1.39)$$

ten'likleri ori'n alg'anda ori'nlanadi'.

Demek biz qarap ati'rg'an ma'selede elektronni'n' tolqi'n funkciyalari'ni'n' sheksiz ko'pligine iye bolami'z:

$$\psi_n = A_n \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right). \quad (1.40)$$

A_n amplitudasi'ni'n' ma'nisi ha'r qi'yli' n ler ushi'n ha'r qi'yli' boli'wi' mu'mkin.

Energiya qa'ddilerinin' diskretligin ko'rsetiw ushi'n λ tolqi'n uzi'nli'g'i'ni'n' orni'na energiyani' paydalanami'z

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{m}{2} \left(\frac{p}{m}\right)^2 = \frac{m}{2} \left(\frac{h}{m\lambda}\right)^2. \quad (1.41)$$

λ shamasin' (1.39)-an'latpalardag'i' ruqsat etilgen ma'nisleri menen almasti'rsaq energiya ushi'n

$$E_n = \frac{m}{2} \frac{h^2}{m^2} \frac{n^2}{4L^2} = \frac{h^2}{8mL^2} n^2 \quad (1.42)$$

an'latpasi'n alami'z. Demek energiyani'n' shamasi' tek diskret ma'nislerge iye boladi' eken. Bul ma'nislerdin' en' kishisi

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2}, \quad n = 1 \quad (1.43)$$

shamasina ten' boladi'. Energiya E_n nin' ma'nislerin menshikli ma'nisler, al ψ_n funkciyalari'n menshikli funkciyalar dep ataydi'.

Eger stacionar hallarda energiya belgili ma'nislerge iye bolatug'i'n bolsa, onda bo'lekshenin' impulsi haqqi'nda bunday ga'plerdi ayta almaymi'z. Bunday jag'dayda da'l ma'niske tek p_x^2 shamasi' g'ana iye boladi'. p_x impulsinin' da'l ma'nisi bolmaydi'. Tegis tolqi'nda ori'n alatug'i'n jag'daylardag'i'day, berilgen impulske iye bo'lekshenin' tolqi'n funkciyasi' barli'q waqi'tta da kompleksli boli'p tabi'ladi'. Kvantli'q mexanikani'n' uli'wmali'q qa'siyeti usi'nnan ibarat ekenligin atap o'temiz.

Biz joqari'da tallap o'tken mi'salda energiya ka'ddilerinin' diskretligi shegarali'q sha'rtlerdin' sebebinen payda bolatug'i'nli'g'i'n ko'rdik. Bul mi'sal tolqi'nli'q mexanikani'n' ko'z-qaraslari' boyi'nsha diskret kvantli'q hallardi' tu'siniwge mu'mkinshilik beredi. Usi' jag'dayg'a usag'an jag'daydi'n' atomda da ori'n ali'wi' kerek. Biraq bul jag'dayda atomni'n' ani'q tu'rdegi shegaralari'ni'n'

joqli'g'i'nan kelip shi'g'atug'i'n a'dewir quramali' bolg'an qubi'li'sti' tallawg'a tuwri' keledi. Ekinshi ta'repten vodorod atomi'nda zaryadi' $-e$ ge ten' bolg'an elektron zaryadi' $+e$ ge ten' proton payda etken elektr maydani'nda qozg'aladi'. Bul maydanni'n' potentsiali' $U = -e^2/(4\pi \epsilon_0 r)$ shamasina ten'. 4-su'wrette kulonli'q potentsialg'a iye maydandag'i' elektronni'n' potentsial energiyasi' ko'rsetilgen.

Elektron menen yadro arasi'nda tarti'li's ku'shi ori'n alatug'i'n bolg'anli'qtan oni'n' energiyasi'ni'n' ma'nisi nolden kishi (teris) boli'wi' kerek. Biraq elektronni'n' kinetikali'q energiyasi' barli'q waqi'tta da on' ma'niske iye. Sonli'qtan, eger biz elektronni'n' qozg'ali'si'n klassikali'q ko'z-qaraslarda turi'p izertleytug'i'n bolsaq, onda ol kinetikali'q energiyasi'ni'n' ma'nisi nolge ten' bolatug'i'n shegarag'a shekemgi oblastta g'ana jasay alatug'i'nli'g'i'n tu'siniwimiz kerek boladi'. Bunday shegarada oni'n' toli'q energiyasi' E potentsial energiyasi'ni'n' ma'nisine ten' boladi' [4-su'wrette bul shegaralar $r_1 = 0$ ha'm $r_2 = -e^2/(4\pi \epsilon_0 E)$ shamalari' menen sheklengen]. Bul sha'rt biz joqari'da ko'rgen shegarali'q sha'rtlerge uqsas. Bul jag'day shi'n ma'nisinde elektron teris ma'nisli energiyag'a iye bolg'anda atomdi' taslap kete almaytug'i'nli'g'i'n bildiredi. Al tolqi'nli'q ko'z-qarasta tursaq, onda atomnan u'lken qashi'qli'qlarda tolqi'nni'n' amplitudasi'ni'n' nolge aylanatug'i'nli'g'i'n an'g'ari'wi'mi'z kerek. Bul sha'rt atomda elektronni'n' energiyalari'ni'n' diskret ma'nislerge iye boli'wi'na ali'p keledi. Biraq energiya qa'ddileri arasi'ndag'i' qashi'qli'qlar biz joqari'da tani'sqan eki ayna arasi'ndag'i' elektronni'n' energiya ka'ddilerinin' arasi'ndag'i' qashi'qli'qlardan pu'tkilley basqasha boladi'.

2-§. Vodorod atomi'ni'n' relyativistlik emes kvantli'q teoriyasi'

En' a'piwayi' kvantli'q sistema si'pati'nda vodorod atomi'n ko'rsetiwge boladi'. Vodorod ta'rizli atomlar dep atalatug'i'n yadroni'n' do'gereginde tek bir elektron aylani'p ju'retug'i'n sistemalar da a'piwayi' sistemalar qatari'na kiredi. Bunday atomlar si'pati'nda geliy ioni'n (He^+), eki qaytara ionlasti'ri'lg'an litiydi (Li^{++}), u'sh qaytara ionlasti'ri'lg'an berilliydi (Be^{+++}) ha'm tag'i' da basqa ionlardi' ko'rsetiwge boladi'. Bunday atomli'q sistemalardag'i' elektron ku'shlerdin' orayli'q maydani'nda (orayli'q simmetriyag'a iye maydanda) qozg'aladi' ha'm bul jag'day vodorod ha'm vodorod ta'rizli atomlardi'n' o'zine ta'n en' tiykarg'i' o'zgesheligi boli'p tabi'ladi'.

Biz en' a'piwayi' atomli'q sistemalarg'a siltili metallardi'n' atomlari'ni'n' da kiretug'i'nli'g'i'n atap o'temiz. Biraq olardi' vodorod ta'rizli atomlar dep atay almaymi'z. Bunday atomlarda sferali'q simmetriyag'a iye tuyi'q elektronli'q qabi'qti'n' si'rti'nda tek bir elektron aylani'p ju'redi. Eki yamasa onnan da ko'p sanli' elektronlari' bar quramali' atomlarda ha'r bir elektron yadro menen de, basqa elektronlar menen de ta'sirlesedi. Sonli'qtan quramali' atomlarda ku'shlerdin' orayli'q maydani' bolmaydi' .

Ko'pshilik oqi'w a'debiyatlari'nda atomlardi'n' quri'li'si'n Quyash sistemasi'ni'n' quri'li'si' menen sali'sti'radi'. Bunday sali'sti'ri'wdi'n' sheklengenligin to'mende keltirilgen mi'sal ani'q ko'rsetedi. Jerdin' orbitasi'ni'n' radiusi'ni'n' Jerdin' o'zinin' radiusi'na qatnasi' 235 ke ten'. Al atomni'n' radiusi'ni'n' (oni'n' ma'nisi $0,5 \cdot 10^{-8}$ sm) atom yadrosi'ni'n' radiusi'na (10^{-13} sm) qatnasi' (elektronni'n' radiusi'n yadroni'n' radiusi'nan u'lken emes dep esaplaymi'z) shama menen 50 000 g'a ten'. Demek, klassikali'q mexanikani'n' ko'z-qaraslari' menen

qarag'anda atomlardi' derlik toli'g'i' menen bosli'qtan turadi' dep esaplawi'mi'z kerek.

Orayli'q ku'shler maydani'ndag'i' bo'lekshenin' qozg'ali'si' haqqi'ndag'i' uli'wmali'q klassikali'q ma'seleden qozg'ali's integrallari'ni'n' (yag'ni'y saqlanatug'i'n shamalardi'n') toli'q energiya E ha'm bo'lekshenin' orayg'a sali'sti'rg'andag'i' impulsinin' momenti (yag'ni'y $\mathbf{M}, M_x, M_y, M_z$) ekenligin belgili. Kvantli'q-mexanikali'q ma'seleni sheshiw arqali' bul qozg'ali's integrallari'ni'n' en' a'piwayi' atomli'q sistemalardi'n' hallari'n qanday da'rejede ta'riyiple' alatus'i'nli'g'i'n ayqi'n tu'rde ko're alami'z.

Derlik barli'q jag'daylarda da orayli'q maydandag'i' elektronni'n' qozg'ali'si'na baylani'sli' bolg'an ma'selelerdi sferali'q koordinatalar sistemasi'nda sheshedi. Bunday jag'dayda elektronni'n' psi funkciyalari' r, θ, φ o'zgeriwshilerinin' funkciyalari' boli'p tabi'ladi'. Al fizikali'q ma'niske sol argumentlerdin' $0 \leq r \leq \infty, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$ o'zgeriw oblasti'ndag'i' ma'nislerinin' standart sha'rtlerge sa'ykes keliwshi sheshimleri iye.

Biz zaryadlang'an bo'lekshenin' (elektronni'n') orayg'a qarata simmetriyali' bolg'an elektr maydani'ndag'i' qozg'ali'si'n qaraymi'z.

Zaryadi' $+Ze$ bolg'an yadrog'a ha'm tek bir elektrong'a iye atomli'q sistema ushi'n potentsial energiyani'n'

$$U = -\frac{Ze^2}{r} \quad (2.1)$$

formulasi'ni'n' ja'rdeminde ani'qlanatug'i'nli'g'i' ma'lim. Sonli'qtan vodorod yamasa vodorod ta'rizli (tek bir elektroni' bar) atomlar ushi'n Shredinger ten'lemesi bi'layi'nsha jazi'ladi':

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi = 0 \quad (2.2)$$

Bul tolqi'n ten'lemesinin' sheshimin

$$\Psi = \psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (2.3)$$

tegis tolqi'n tu'rinde izlep (ψ arqali' tolqi'n funkciyasi'ni'n' tek koordinatag'a baylani'sli' bolg'an bo'limi belgilengen) ψ amplitudali'q funkciyasi' ushi'n tap sonday bolg'an

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (2.4)$$

ten'lemesine iye bolami'z.

Vodorod yamasa vodorod ta'rizli atomlarda potencial sferali'q simmetriyag'a iye bolg'anli'qtan sferali'q koordinatalar sistemasi'na o'temiz ha'm r, θ, φ sferali'q koordinatalardi'n' tuwri' mu'yeshli x, y, z koordinatalari' arasi'nda

$$x = r \sin(\theta) \cos(\varphi), \quad y = r \sin(\theta) \sin(\varphi), \quad z = r \cos(\theta) \quad (2.5)$$

tu'rindeg'i baylani'sti'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'n na'zerde tutami'z.

Sa'ykes tu'rlendiriwlerden keyin sferali'q koordinatalardag'i' Shredinger ten'lemesini alami'z:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \\ & + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Bul ten'lemenin' sheshimin birewi tek radius-vektor r den, al ekinshisi θ, φ mu'yeshlerinen g'a'rezli bolg'an eki funkciyani'n' ko'beymesi tu'rinde ko'rsetiw mu'mkin:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (2.7)$$

Tolqi'n funkciyasi' ψ ni'n' usi' ma'nisin (2.6)-an'latpag'a qoyi'p, bunnan keyin ali'ng'an na'tiyjeni $R(r)Y(\theta, \varphi)$ ko'beymesine bo'lip

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R} \left[\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (Er^2 + Ze^2 r) \right] + \\ & + \frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] = 0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

ten'lemesinin' ori'n alatug'i'nli'g'i'na isenemiz. Son'g'i' an'latpa eki qosi'li'wshi'dan turadi': birinshi qosi'li'wshi' tek r den, al ekinshisi θ, φ mu'yeshlerinen g'a'rezli. Sonli'qtan olardi'n' qosi'ndi'si' eger olardi'n' ha'r qaysi'si' belgileri qarama-qarsi'

bolg'an turaqli' shamag'a ten' bolg'an jag'dayda g'ana nolge ten' boladi'. Bul jag'daydi' bi'layi'nsha jazami'z:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (Er^2 - Ze^2 r) R = \lambda R, \quad (2.9)$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left[\sin\theta \frac{dY}{d\theta} \right] + \frac{1}{\sin^2\theta} \cdot \frac{d^2 Y}{d\varphi^2} = -\lambda Y. \quad (2.10)$$

(2.10)-an'latpani' qi'sqasha tu'rde

$$\Delta_{\theta,\varphi} Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (2.11)$$

tu'rinde de jaza alami'z.

Bul ten'lemelerde Y shamasini'n θ ha'm φ mu'yeshlerinin' funkciyasi' ekenligin, al λ arqali' turaqli' shama belgilengenligin an'g'arami'z.

(2.10)-ten'lemenin' a'jayi'p qa'siyeti bar – bul ten'lemede potencial energiya qatnaspaydi'. Sonli'qtan oni' sheshimlari universalli'q xarakterge iye ha'm ol qa'legen orayli'q ku'shler maydani'ndag'i' bo'lekshelerdin' uli'wmali'q qa'siyetlerin ta'riyipleydi. Al (2.9)-ten'lemege keletug'i'n bolsaq, onda oni'n' sheshimlari $U(r)$ funkciyasi'ni'n' qanday ekenligin g'a'rezli. Biz to'mende vodorod ta'rizli atomlarda ori'n alatug'i'n

$$U(r) = -Ze^2/r \quad (2.12)$$

tu'rindagi potencial energiya menen is ali'p barami'z.

Endi $Y(\theta, \varphi)$ funkciyasi'ni'n' o'zin birewi tek θ mu'yeshinen, al ekinshisi tek φ mu'yeshinen g'a'rezli bolg'an eki funkciyani'n' ko'beymesi tu'rinde ko'rsetemiz:

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (2.13)$$

Bul ma'nislerdi (2.10)-ten'lemege qoysaq, bir qatar algebrali'q tu'rlendiriwlerden keyin

$$\left[\frac{1}{\Theta \sin\theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \lambda \right] \sin^2\theta + \frac{1}{\Phi} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = 0 \quad (2.14)$$

tu'rindagi ten'lemeni alami'z. Bul ten'leme de birinshisi tek θ , al ekinshisi φ mu'yeshinen g'a'rezli bolg'an eki qosi'li'wshi'dan turadi'. Demek, eger o'zgeriwshilerdi bo'leklew usi'li'n qollanatug'i'n bolsaq, onda qosi'ndi'ni'n'

qosi'li'wshi'lardi'n' ha'r qaysi'si' belgileri qarama-qarsi' bolg'an birdey turaqli' shamalarg'a ten' bolg'anda g'ana nolge ten' bolatug'i'nli'g'i'na ko'z jetkeremiz:

$$\left[\frac{1}{\Theta \sin \theta} \cdot \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \lambda \right] \sin^2 \theta = m^2, \quad (2.15)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -m^2. \quad (2.16)$$

Bul ten'lemelerde Θ ha'm Φ o'zgeriwshilerinin' ha'r qaysi'si' tek bir o'zgeriwshinin' funkciyasi' bolg'anli'qtan dara tuwi'ndi'lar toli'q tuwi'ndi'lar menen almasti'ri'lg'an ha'm m arqali' turaqli' shama belgilengen.

Bizdi atom yadrosi'ni'n' maydani'ndag'i' bo'lekshenin' tek baylani'sqan hallari' qi'zi'qti'ratug'i'n' bolg'anli'qtan toli'q psi-funkciya to'mendegidey qatnasti'n' ja'rdeminde 1 shamasi'na normirovkalanadi':

$$\begin{aligned} 1 &= \int \psi^* \psi dV = \int_0^\infty R^* R r^2 dr \int_{(4\pi)} Y^*(\theta, \varphi) Y(\theta, \varphi) d\Omega = \\ &= \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr \int_0^\pi |\Theta|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi. \end{aligned}$$

Bul an'latpadan normirovkani'n' ha'r bir funkciya ushi'n o'z aldi'na esaplawdi'n' kerek ekenligi kelip shi'g'adi':

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr &= 1, \\ \int_0^\pi |\Theta|^2 \sin \theta d\theta &= 1, \\ \int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi &= 1. \end{aligned}$$

Kvantli'q mexanikada tolqi'n funkciyalari' ushi'n olardi'n' bir ma'nisi, shekli, u'zliksiz boli'wi', soni'n' menen birge normirovka sha'rtin qanaatlandi'ri'wi' talap etiledi. Bul sha'rtlerdi standart sha'rtler dep ataydi'. Usi' sha'rtlerdi qabi'l etsek (2.16)-ten'lemenin' sheshiminin'

$$\Phi(\varphi) = A e^{im\varphi} \quad (2.17)$$

tu'rine iye bolatug'i'nli'g'i'na iye bolami'z (A arqali' turaqli' shama belgilengen). Eger normirovka sha'rtinin' ori'nlani'wi'n talap etsek, onda $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ shamasi'na ten' bolatug'i'nli'g'i'ni'n' gu'wasi' bolami'z. (2.17)-sheshim u'zliksiz ha'm shekli. Al bir ma'nislilik sha'rti φ mu'yeshinin' ma'nisi $2k\pi$ ge o'zgergende (k arqali' pu'tin san belgilengen) funkciyani'n' ma'nisinin' birdey boli'wi'n talap etedi. Sonli'qtan eger m shamasi' on' ha'm teris pu'tin sanlar boli'p tabi'latug'i'n bolg'anda

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi \pm 2k\pi)} \quad (2.18)$$

ten'luginin' ori'n alatug'i'nli'g'i'na isenemiz. Demek m sani'

$$m = 0, \quad \pm 1, \quad \pm 2, \quad \dots \quad (2.19)$$

ma'nislerin qabi'l etetug'i'nli'g'i'na iye bolami'z ha'm oni' magnit kvant sani' dep ataymi'z.

(2.17)-an'latpadag'i' turaqli' A shamasi'ni'n' ma'nisin $\int_0^{2\pi} |\Phi|^2 d\varphi = 1$ tu'rindeg i normirovka sha'rtinin' ja'rdeminde ani'qlaymi'z. Haqi'yqati'nda da

$$\int_0^{2\pi} |A e^{im\varphi}|^2 d\varphi = 1$$

integrali'nan $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ shamasi'na ten' bolatug'i'nli'g'i'n ko'remiz. Usi'nday jollar menen azimutalli'q mu'yesh φ den g'a'rezli bolg'an to'mendegidey sheshim alami'z:

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (2.20)$$

Bul sheshim ortonormirovkalang'an funkciyalardi'n' toli'q sistemasi'n payda etedi:

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

(2.15)-ten'lemeni bi'layi'nsha ko'shirip jazami'z:

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \Theta + \lambda\Theta = 0. \quad (2.21)$$

Bul ten'lemedegi m shamasi' (2.19)-sha'rtti qanaatlandi'radi'.

(2.21)-ten'lemenin Lejandr ten'lemesi dep ataydi'. Bul ten'lemenin' sheshimlari biz joqari'da ga'p etken Lejandrdi'n' birlestrilgen funkciyalari' bolg'an $P_l^m(x)$ funkciyalari' boli'p tabi'ladi'. Olardi' biz

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad (2.22)$$

tu'rinde jazi'latug'i'nli'g'i'n atap o'temiz (bul haqqi'nda to'mendegi paragraflarda toli'q tu'rde ayti'ladi'). Endigiden bi'lay l sani'n azimutal kvant sani' dep ataymi'z. Soni'n' menen birge $m > l$ ten'sizligi ori'nlang'anda $P_l^m(x) \equiv 0$ teppe-ten'luginin' ori'n alatug'i'nli'g'i'na itibar beremiz. Sonli'qtan l din' ha'r bir ma'nisine Lejandrdi'n' $l + 1$ polinomi' sa'ykes keledi (demek $l = 0$ bolg'an jag'daylarda $l + 1 = 1$ Lejandr polinomi'na iye bolami'z).

Lejandrdi'n' birlestirilgen polinamlari' $P_l^m(x)$ de $P_l(x)$ polinamlari' si'yaqli' $[-1, 1]$ kesindisi ishinde funkciyalardi'n' toli'q ha'm ortogonalli'q sistemasi'n payda etedi.

(2.21)-ten'leme shar funkciyalardi'n' (Spherical harmonics) ten'lemesi boli'p tabi'ladi' ha'm

$$\lambda = l(l + 1) \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.23)$$

sha'rti qanaatlang'anda g'ana regulyarli'q sheshimlarga iye boladi'. Usi'ni'n' menen bir qatarda m nin' ma'nisi $|m| \leq l$ ten'sizligin qanaatlandi'ri'wi' kerek. Bul talap (2.19)-sha'rt penen birlikte m shamasi'ni'n'

$$m = -l, -l + 1, \dots, 0, 1, 2, \dots, l \quad (2.24)$$

ma'nislerinin' birin qabi'l ete alatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.

(2.23)-sha'rt qanaatlandi'ri'latug'i'n jag'daylarda $\Theta_{l,m}(\theta)$ funkciyasi'ni'n' normirovkalang'an ma'nisleri

$$\Theta_{l,m}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} \sin^m \theta P_l^{|m|}(\cos \theta) \quad (2.25)$$

tu'rine iye boladi'. Bul an'latpadag'i' $P_l^{|m|}(\theta)$ arnawli' funkciyasi' biz joqari'da ko'rgen Lejandr'di'n' birlestirilgen polinomlari' dep ataladi'.

Solay etip, (2.10)-ten'lemeni xa'm tolqi'n funkciyalari' ushi'n qoyi'latug'i'n standart sha'rtlerdi qanaatlandi'ratug'i'n psi funkciyani'n' mu'yeshlik bo'limi $Y(\theta, \varphi)$ ushi'n to'mendegidey an'latpani' alami'z:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} \sin^m \theta P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (2.26)$$

Sferali'q funkciyalar dep atalatug'i'n (2.13)-an'latpa tu'rindagi $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ funkciyasi'ni'n' normirovka sha'rti

$$\int_{(4\pi)} Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm}$$

tu'rine iye boladi'. Bul an'latpa boyi'nsha integrallaw toli'q denelik mu'yesh 4π boyi'nsha ali'nadi'.

Endi Wolfram Mathematica tilindagi ali'ng'an sferali'q funkciyalardi'n' da'slepki bir neshesinin' ma'nislerin beremiz (1-keste).

1-keste

Wolfram Mathematica tilindagi ali'ng'an sferali'q funkciyalardi'n' da'slepki

bir neshesinin' ma'nisleri

l	m	$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ yamasa SphericalHarmonicY[l, m, θ , ϕ]
0	0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos[\theta]$

2	0	$\frac{1}{8}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(1 + 3\cos[2\theta])$
2	± 1	$-\frac{1}{2}e^{i\phi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cos[\theta]\sin[\theta]$
2	± 2	$\frac{1}{4}e^{2i\phi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin[\theta]^2$
3	0	$\frac{1}{16}\sqrt{\frac{7}{\pi}}(3\cos[\theta] + 5\cos[3\theta])$
3	± 1	$-\frac{1}{16}e^{i\phi}\sqrt{\frac{21}{\pi}}(3 + 5\cos[2\theta])\sin[\theta]$
3	± 2	$\frac{1}{4}e^{2i\phi}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}\cos[\theta]\sin[\theta]^2$

Biz joqari'da alg'an an'latpalar jetkilikli da'rejede formalli'q bolg'an matematikali'q quri'wlardi'n' na'tiyjeleri boli'p tabi'ladi'. Sonli'qtan olardi' fizikali'q ma'nis penen bayi'ti'wg'a ti'ri'sami'z. Buni'n' ushi'n kvantli'q mexanikadag'i' bo'lekshenin' impuls momenti ma'selesine di'qqatti' awdarami'z.

3-§. Tolqi'n funkciyasi'ni'n' radialli'q bo'limi

(2.9)-ten'leme $\lambda = l(l + 1)$ ten'ligi ori'nlang'an jag'dayda

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(Er^2 + Ze^2r - \frac{l(l + 1)\hbar^2}{2m}\right)R = 0 \quad (3.1)$$

tu'rine enedi. Eger $E < 0$ sha'rti ori'nlang'an, atap aytqanda

$$E = -\frac{me^4Z^2}{2\hbar^2(n' + l + 1)^2} \quad (3.2)$$

menshikli ma'nisleri ori'n alatug'i'n bolsa, onda bul ten'leme regulyarli'q sheshimga iye boladi' (n' arqali' pu'tin san belgilengen). Energiyani'n' bul

ma'nisleri Bor ta'limati' ja'rdeminde esaplang'an energiyani'n ma'nislerine sa'ykes keledi. Bul jag'dayda $n' + l + 1$ qosi'ndi'si' bas kvant sani'ni'n' orni'n iyeleydi, yag'ni'y

$$n' + l + 1 = n. \quad (3.3)$$

$n' > 0$ bolg'anli'qtan $n \geq l + 1$. Solay etip kvantli'q mexanika vodorod ha'm og'an usag'an atomlar ushi'n Bor ta'limati' beretug'i'nday stacionar hallardi'n' bar bolatug'i'nli'g'i'n tasti'yi'qlaydi'. Jan'a kvant sani' l Bor ta'limati'ndag'i' azimutal kvant sani'nan birge kem boladi': $l = n_{\varphi} - 1$.

Joqari'da ga'p etilgen na'tiyjeler tolqi'n funkciyasi'ni'g' radialli'q bo'limini'g' haldi'g' energiyasi'nan ha'm usi' haldag'i' impuls momentinen g'a'rezli ekenligin ko'rsetedi. Energiya qa'ddilerini'g' $(2l + 1)$ dana azg'i'ni'wi'ni'g' ori'n alatug'i'nli'g'i'na baylani'sli' magnit kvant sani' m menen baylani'sti'g' joq ekenligi kelip shi'g'adi'. Magnit kvant sani'nan g'a'rezsizlik

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \right] + U(r)$$

tu'rindagi gamiltoniannan da, to'mendegi tu'rde jazi'lg'an Shredinger te'jlemesinen de ko'rinip tur:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0.$$

Bul te'jlemege

$$\psi = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = R_{El}(r) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi)$$

tu'rinde ko'beytiwshilerge bo'lingen tolqi'n funkciyasi'n qoyi'p Y_{lm} tu'rindagi ko'beytiwshini'g' r den g'a'rezli bolmag'anli'g'i'nan uli'wmali'q ekenligin a'ng'ari'wg'a boladi'. Sol ko'beytiwshige bo'liw arqali' R ushi'n ayi'ri'm te'jleme alami'z:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0.$$

Bul te'jlemege ja'na

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

o'zgeriwshisin qoyi'p

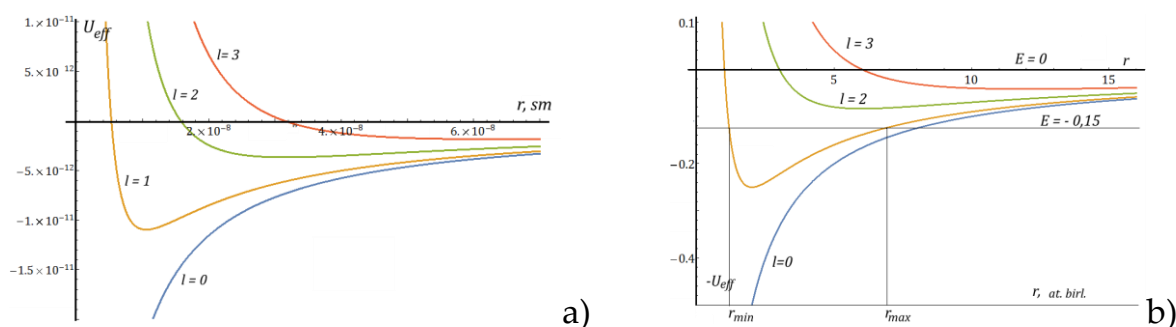
$$U_{eff} = U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = U(r) + \frac{\hat{M}^2}{2mr^2}$$

tu'rinegi potencial energiyasi' bar maydanda qozg'ali'wshi' bo'lekshe ushi'n to'mendegidey bir o'lshemli Shredinger tenglamesin alami'z:

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] \chi = 0.$$

Bul an'latpada

$$U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = U_{eff}.$$



5-su'wret. Kulon maydani' ushi'n effektivlik potencial energiyani'ning iymekliklari. b) su'wret atomli'q birliklerde berilgen.

5-su'wrette Kulon maydani' ushi'n effektivlik potencial energiyani'n' iymekliklari ko'rsetilgen. U_{eff} funkciyasi' momenttin' (azimutal kvant sani'ni'n') $l = 0, 1, 2, 3$ shamalari'na ten' bolg'an to'rt ma'nisi ushi'n si'zi'lg'an (yag'ni'y s, p, d, f hallari' ushi'n ali'ng'an). Momenttin' o'zi $|\mathbf{M}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ formulasi'na sa'ykes $M = 0, \sqrt{2}\hbar, \sqrt{6}\hbar$ ha'm $\sqrt{12}\hbar$ shamalari'na ten' boladi'. Iymekliklerdin' barli'q parametrlari vodorod atomi'na sa'ykes keledi. Atomli'q masshtablarda esaplawlar ju'rgizgende atomli'q birlikler dep atalatug'i'n birliklerdi (bunday birliklerge $c = 137$; $\hbar = 1$; $m = 1$; $e = 1$) paydalani'wdi'n' qolayli' ekenligi ani'q ko'rinip tur. Usi'nday shkalada uzi'nli'q birligi si'pati'nda $0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 0.529 \text{ \AA}$ shamasina ten' Bor radiusi', al energiya birligi si'pati'nda $4.36 \cdot 10^{-18} \text{ Dj} = 27.21 \text{ eV}$

shamasi'na ten' energiya qabi'l etiledi. Ridberg dep atalatug'i'n bul shamani'n' yari'mi' u'lken da'llikte vodorod atomi'n tiykarg'i' haldan ionlasti'ri'w ushi'n kerek bolatug'i'n energiyani'n' shamasi'na ten'.

Biz ha'zir elektronni'n' kvantli'q qozg'ali'si'n qarap ati'rg'an bolsaq ta bo'lekshe traektoriya boyi'nsha qozg'alatug'i'n klassikali'q jag'daydi' qarap o'tken paydali' boladi'. Radialli'q tezlik $\dot{r}$ nolge aylanatug'i'n r din' ma'nisi toqtaw noqatlari'ni'n' ori'nlarini' iyeleydi (biraq traektoriya boyi'nsha qozg'ali's pu'tkilley toqtamaydi', sebebi azimutal kvant sani' nolge ten' bolmag'an jag'dayda mu'yeshlik tezlik $\dot{\phi}$ nolge ten' bolmaydi'). Bul noqatlar –su'wrettegi r_{max} ha'm r_{min} qashi'qli'qlari'n ani'qlaydi'. Bul noqatlarda bo'leksheler orayg'a qaray qozg'ali'w oraydan qashi'qlasi'wg'a yamasa oraydan qashi'qlasi'w orayg'a qaray qozg'ali'sqa o'tedi. Basqa so'zler menen aytqanda r_{max} ha'm r_{min} shamalari' oraydan minimalli'q ha'm maksimalli'q qashi'qli'qlarg'a sa'ykes keledi. Eger joqarg'i' shek (yag'ni'y r_{max} shamasi') bolmaytug'i'n bolsa, onda qozg'ali's infinitlik qozg'ali's boli'p tabi'ladi' ha'm bo'lekshe sheksizlikke ketedi.

Oraydan qashi'wg'a sa'ykes keliwshi energiyani'n' bar boli'w sebebinen U_{eff} shamasi' $r \rightarrow 0$ sheginde sheksizlikke umti'ladi'. Usi'ni'n' na'tiyjesinde teris ma'niske iye energiya bolg'an jag'dayda (finitlik qozg'ali's) tarti'li'sti'n' ori'n alatug'i'nli'g'i'na qaramastan bo'lekshe orayg'a en' jaqi'n keletug'i'n r_{min} qashi'qli'g'i' bar boladi' (a'l'bette, klassikali'q qozg'ali'sta, al kvantli'q emes). Moment nolge ten' bolg'anda g'ana bo'lekshe orayg'a kirip kele aladi'. Bunday jag'day qa'legen $U(r) = -\frac{\alpha}{r^k}$ tu'rindagi potencial bar bolg'anda ($k > 2$) ori'n aladi'. Bul bo'lekshenin' "orayg'a qulap tu'siwinin'" kvantli'q-mexanikali'q mu'mkinshiligine sa'ykes keledi.

Solay etip, kvantli'q mexanikada klassikali'q mexanikadag'i' jag'daydag'i'day bo'lekshenin' orayg'a qarata simmetriyali' maydanda qozg'ali'w ma'selese bir ta'repten sheklengen bir o'lshemli ma'selege ali'p kelinesi eken. Bul jag'dayda $U(r)$

potenciali'na tap sonday tu'rdegi oraydan qashi'wshi' $\frac{M^2}{2mr^2}$ energiyasi' qosi'ladi' $\left[U_{eff} = U(r) + \frac{M^2}{2mr^2}\right]$. Kvantli'q mexanikada bunday energiya azimutal kvant sani'ni' ja'rdeminde ani'qlanadi' ha'm sonli'qtan diskret ma'nislerge iye boladi' ha'm usi'g'an baylani'sli' tolqi'n funkciyasi'ni' radialli'q bo'limine bir o'lsheмли kvantli'q-mexanikali'q qozg'ali'sqa tiyisli bolg'an barli'q teoremlardi' qollani'wg'a boladi'. Mi'sali' radialli'q qozg'ali's energiyasi'ni' qa'ddileri azg'i'nbag'an. Sonli'qtan l di beriw menen $\chi(r)$ funkciyasi' da, oni' menen birge $R(r)$ funkciyasi' da toli'q ani'qlanadi'. Demek m ha'm l kvant sanlari'na energiya qa'ddilerini' qatar sanlari'n ani'qlawshi' n_r kvant sani' qosi'ladi'. Finitlik qozg'ali'sti' ori'n alatug'i'nli'g'i'n na'zerde tuti'p oscillyaciyali'q teoremag'a sa'ykes ja'ha kvant sani'n r di' shekli ma'nislerindegi $R(r)$ funkciyasi'ni' tu'yinlerini' sani'n ani'qlaytug'i'nday etip alami'z ($r = 0$ noqati' bug'an kirmeydi). Energiyani' e' to'mengi qa'ddine $n_r = 0$ sani' sa'ykes keledi. Bul sandi' endigiden bi'lay radialli'q kvant sani' dep ataymi'z ha'm ol joqari'da ayti'lg'an jag'daylarg'a baylani'sli'

$$n_r = 0, 1, 2, \dots$$

ma'nislerin qabi'l etedi.

Ali'ng'an na'tiyjelerdi' barli'g'i' da joqari'da ga'p etilgen E, M^2 ha'm M_z shamalari'ni' sferali'q maydandag'i' bo'lekshe ushi'n fizikali'q shamalardi' toli'q ji'ynag'i'n quraytug'i'nli'g'i'na sa'ykes keledi. Radialli'q qozg'ali'sti' bir o'lsheмли xarakterge iye ekenliginen $R(r)$ funkciyasi'ni' normirovka sha'rti kelip shi'g'adi':

$$\int_0^\infty |R(x)|^2 r^2 dr = 1.$$

Ha'r bir stacionar hal pu'tin bolg'an u'sh n', l ha'm m sanlari'ni'n' ja'rdeminde ta'riyiplenedi. (3.3)-ten'likke baylani'sli' n', l ha'm m sanlari'ni'n' orni'na n, l ha'm m sanlari'nan paydalang'an qolayli'. Bunday jag'dayda berilgen n ushi'n $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ ma'nislerin, al berilgen l sani'nda $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ ma'nislerin qabi'l ete aladi'.

Birdey n ge ten' bolg'an stacionar hallar birdey energiyag'a iye boladi'. Eger bir neshe halg'a energiyani'n' bir ma'nisi sa'ykes keletug'i'n bolsa, onda bunday hallardi' azg'i'ng'an hallar dep ataymi'z.

n kvant sani'ni'n' berilgen ma'nisine l din' n dana ma'nisi sa'ykes keledi. Al l kvant sani'ni'n' berilgen ma'nisine m kvant sani'ni'n' $2l + 1$ dana ha'r qi'yli' ma'nisi sa'ykes keledi. Bunnan berilgen n ge sa'ykes keliwshi ha'r qi'yli' hallardi'n' sani'ni'n' $1 + 3 + \dots + (2n - 1) = n^2$ shamasina ten' bolatug'i'nli'gi' kelip shi'g'adi'.

Eger energiyani'n' ma'nisi nolden u'lken bolsa, yag'ni'y $E > 0$ sha'rti ori'n alsa, onda (2.17)-ten'lemenin' sheshimleri E nin' qa'legen ma'nisi ushi'n tabi'ladi', sonli'qtan E nin' menshikli ma'nisleri u'zliksiz tu'rde o'zgeriwshi shamalarg'a aylanadi'.

$E < 0$ ten'sizligi ori'nlang'anda (2.17)-ten'lemenin' normirovkalang'an menshikli funkciyalari'

$$R_{n,l}(\rho) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{na}\right)^3 \frac{4(n-l-1)!}{2n(n+1)!}} \left(\frac{2\rho}{n}\right)^l e^{-\frac{\rho}{n}} L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right) \quad (3.4)$$

tu'rine iye boladi'. Bul ten'lemede

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,52939 \cdot 10^{-8} \text{ sm}; \quad \rho = \frac{Z}{a} r$$

belgilewleri paydalani'lg'an, al N_{n+l}^{2l+1} arqali' Lagerr polinomi' belgilengen.

Eger biz o'lshem birligi joq ρ shamasinan uzi'nli'q r shamasina o'tsek, onda

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{an}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} e^{-\frac{Zr}{an}} \left(\frac{2Zr}{an}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{an}\right) \quad (3.5)$$

formulasi'na iye bolami'z. Bul formula esaplawlar o'tkeriw ushi'n a'dewir qolayli' formula boli'p tabi'ladi'.

(3.4)- yamasa (3.5)-an'latpalardan radialli'q $R_{n,l}(r)$ funkciyasi'ni'n' magnit kvant sani' m nen g'a'rezsiz ekenligin an'g'arami'z.

3-kestede (3.5)-formulani'n' ja'rdeminde esaplang'an n menen l din' ha'r qi'yli' ma'nislerine sa'ykes keliwshi radialli'q tolqi'n funkciyalari' keltirilgen.

3-keste.

(3.4)-formulani'n' ja'rdeminde esaplang'an n menen l din' ha'r qi'yli' ma'nislerine sa'ykes keliwshi $R_{n,l}(r)$ radialli'q tolqi'n funkciyalari'

n	l	$R_{n,l}(r)$
1	0	$2e^{-\frac{rZ}{a}} \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}};$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}} e^{-\frac{rZ}{2a}} \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} \left(2 - \frac{rZ}{a}\right);$
2	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}a} e^{-\frac{rZ}{2a}} rZ \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}};$
3	0	$\frac{1}{81\sqrt{3}a^2} 2e^{-\frac{rZ}{3a}} \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} (27a^2 - 18arZ + 2r^2Z^2);$
3	1	$\frac{1}{81a^2} 2\sqrt{\frac{2}{3}} e^{-\frac{rZ}{3a}} rZ \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} (6a - rZ);$
3	2	$\frac{1}{81Z} 2\sqrt{\frac{2}{15}} a e^{-\frac{rZ}{3a}} r^2 \left(\frac{Z^3}{a^3}\right)^{3/2};$
4	0	$\frac{1}{768a^3} e^{-\frac{rZ}{4a}} \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} (192a^3 - 144a^2rZ + 24ar^2Z^2 - r^3Z^3);$
4	1	$\frac{1}{256\sqrt{15}Z^2} e^{-\frac{rZ}{4a}} r \left(\frac{Z^3}{a^3}\right)^{3/2} (80a^2 - 20arZ + r^2Z^2);$
4	2	$\frac{1}{768\sqrt{5}Z} e^{-\frac{rZ}{4a}} r^2 \left(\frac{Z^3}{a^3}\right)^{3/2} (12a - rZ);$
4	3	$\frac{1}{768\sqrt{35}} e^{-\frac{rZ}{4a}} r^3 \left(\frac{Z^3}{a^3}\right)^{3/2};$

5	0	$\frac{1}{46875\sqrt{5}a^4} 2e^{-\frac{rZ}{5a}} \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} (9375a^4 - 7500a^3rZ + 1500a^2r^2Z^2 - 100ar^3Z^3 + 2r^4Z^4);$
5	1	$\frac{1}{46875a^4} 2\sqrt{\frac{2}{15}} e^{-\frac{rZ}{5a}} rZ \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} (3750a^3 - 1125a^2rZ + 90ar^2Z^2 - 2r^3Z^3);$
5	2	$\frac{1}{46875a^4} 2\sqrt{\frac{2}{35}} e^{-\frac{rZ}{5a}} r^2Z^2 \sqrt{\frac{Z^3}{a^3}} (525a^2 - 70arZ + 2r^2Z^2);$
5	3	$\frac{1}{46875a} 2\sqrt{\frac{2}{35}} e^{-\frac{rZ}{5a}} r^3 \left(\frac{Z^3}{a^3}\right)^{3/2} (20a - rZ);$
5	4	$\frac{1}{140625a} 2\sqrt{\frac{2}{35}} e^{-\frac{rZ}{5a}} r^4 Z \left(\frac{Z^3}{a^3}\right)^{3/2};$

Endi radially q funkciyani' grafikali'q tu'rde su'wretlew menen shug'i'llanami'z ha'm fizikali'q ma'niske tolqi'n funkciyasi'ni'n' o'zi emes, al modulinin' kvadrati'ni'n' iye ekenligin eske tu'siremiz. Tolqi'n funkciyasi'ni'n' modulinin' kvadrati' o'z gezeginde bo'leksheni atomni'n' orayi'nan r qashi'qli'qta tabi'wdi'n' itimalli'g'i'ni'n' ti'g'i'zli'g'i'n beredi. Haqi'yqati'nda da psi-funkciyani'n' ma'nisi boyi'nsha n, l, m hali'ndag'i' elektronni'n' koordinatalari' r, θ, φ bolg'an noqatti'n' a'tirapi'nda tabi'wdi'n' itimalli'g'i'

$$dP(r, \theta, \varphi) = |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 dV = |\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega = \quad (3.6)$$

$$= R_{nl}^2(r) r^2 dr |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

shamasi'na ten' boladi'. Bul an'latpada $dV = r^2 dr d\Omega$ arqali' elementar ko'lem belgilengen. Bul ko'lem radiusi' r , qali'n'li'g'i' dr , denelik mu'yeshi $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ bolg'an shar qatlami'ni'n' ko'lemine ten'.

(3.6)-an'latpani' barli'q 4π denelik mu'yeshi boyi'nsha integrallap ha'm $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sferali'q funkciyasi'n 1 ge normirovkalap elektronni'n' qali'n'li'g'i' dr bolg'an shar qatlami'nda, yag'ni'y yadrodan r menen $r + dr$ qashi'qli'qlari' arasi'nda tabi'wdi'n' itimalli'g'i' ushi'n an'latpani' alami'z:

$$dP_{nl}(r) = R_{nl}^2(r)r^2 dr \int_{(4\pi)} |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = R_{nl}^2(r)r^2 dr. \quad (3.7)$$

Biz endi itimalli'qti'n' radialli'q ti'g'i'zli'g'i' bolg'an $dP_{nl}(r)/dr = R_{nl}^2(r)r^2$ shamasi'ni'n' ha'r qi'yli' n ler ushi'n ali'ng'an grafiklerin beremiz (6-su'wret). Bul grafiklerdin' to'mendegidey o'zgesheliklerin atap o'temiz:

$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1$ normirovka sha'rtine sa'ykes barli'q iymeklikler menen shegaralang'an maydanlar birdey u'lkenlikke iye.

Nolge jaqi'n ori'nlarda funkciyalardi'n' qa'siyetleri da'rejeli funkciyani'n' qa'siyetlerine jaqi'n, yag'ni'y $\sim (r/r_0)^{2(l+1)}$ g'a'rezligi ali'nadi', al r din' u'lken ma'nislerinde funkciyalar eksponencialli'q tu'rde kemeyedi (shama menen $\text{Exp}\left[-\frac{2r}{nr_0}\right]$ g'a'rezligi ori'nlanadi')

Tu'yinlerdin' sani' $[R_{nl}(r) = 0]$ ten'ligi ori'n alatug'i'n noqatlardi'n' sani'] radialli'q kvant sani' dep atalatug'i'n ha'm $n_r = n - (l + 1)$ shamasina ten' kvant sani'ni'n' ja'rdeminde ani'qlanadi'. Koordinata basi'ndag'i' ali'natug'i'n tu'yin esapqa ali'nbaydi'.

Maksimalli'q jaqtan mu'mkin bolg'an $l = n - 1$ hallari' ushi'n dP_{nl}/dr funkciyalari'ni'n' maksimumlari'na sa'ykes keletug'i'n qashi'qliqlar shen'ber ta'rizli orbitalardi'n' radiuslari'na ten'. Bunday hallarg'a Bor ta'limati'ndag'i' shen'ber ta'rizli orbitalardi'n' radiusi' sa'ykes keledi.

Elektronni'n' yadrodan qanday qashi'qli'qta qozg'alatug'i'nli'g'i'n

$$\langle r_{nl} \rangle = \int r dP_{nl}(r) = \int_0^\infty R_{nl}^2(r)r^3 dr$$

integrali'ni'n' ja'rdeminde esaplanadi'. Bul integraldi' esaplaw qi'yi'n [bul qi'yi'nshi'li'q Lagerr polinomi'n o'z ishine alatug'i'n $R_{nl}(r)$ funkciyasi'ni'n' ma'nislerin joqari'dag'i' integralg'a qoyi'w za'ru'rli'gi menen baylani'sli'], sonli'qtan integrallawdi'n' na'tiyjesin birden beremiz:

$$\langle r_{nl} \rangle = n^2 r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right] \right\}.$$

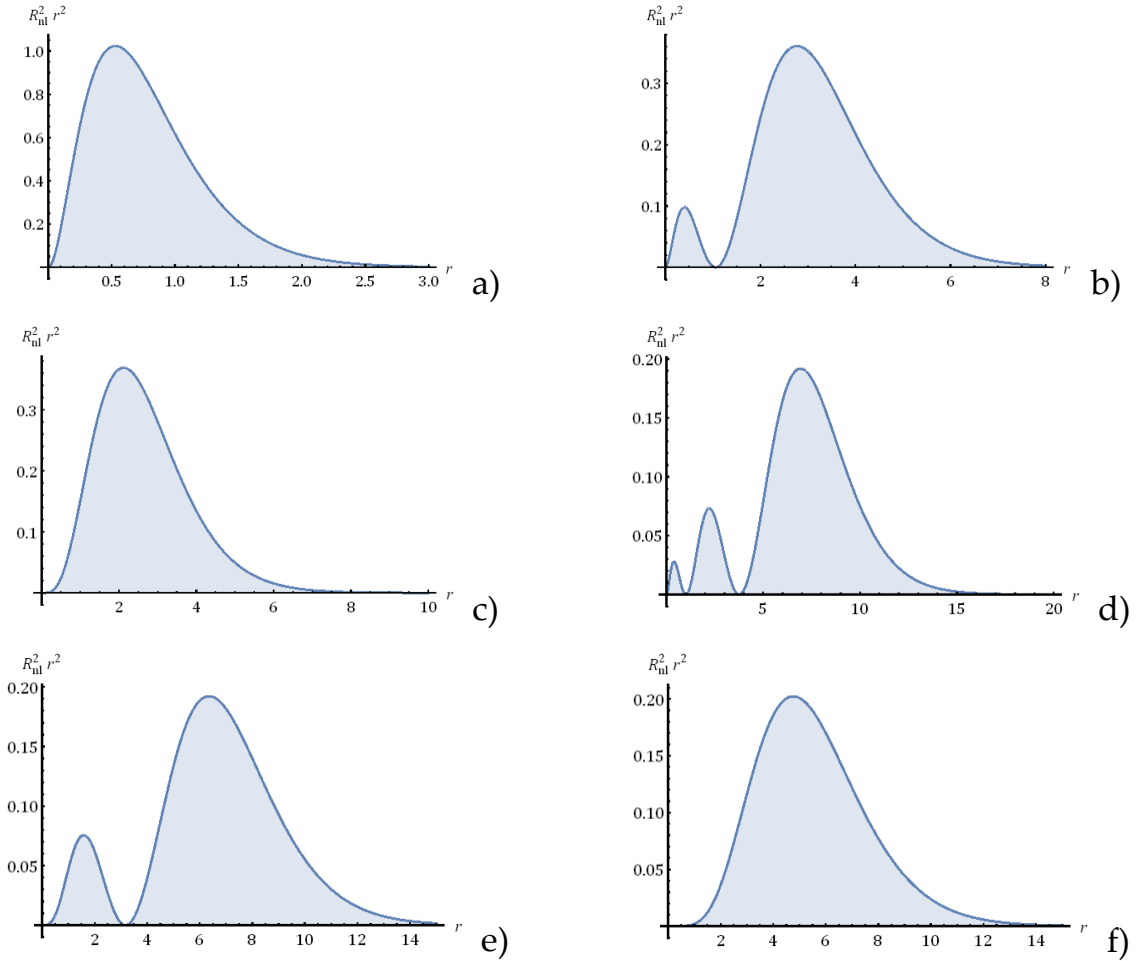
Bul formula boyi'nsha esaplawlar ju'rgizemiz. Eger $n = 100$ ten'ligi ori'nlanatug'i'n bolsa to'mendegidey na'tiyjeler ali'nadi':

l	0	1	2	3
$\langle r_{nl} \rangle, sm$	0.0000794085	0.0000794032061	0.0000793926183	0.0000793767366

Eger $n = 1000$ ten'ligi ori'nlanatug'i'n bolsa, onda mi'naday na'tiyjelerge iye bolami'z:

l	0	1	2	3
$\langle r_{nl} \rangle, sm$	0.00794085	0.0079408447061	0.0079408341183	0.0079408182366

Bul kestede keltirilgen mag'li'wmatlar $\langle r_{nl} \rangle$ shamasi'n ani'qlag'anda bas kvant sani'ni'n' u'lken ma'nislerinde azimutal kvant sani' l din' a'hmiyetinin' to'menleytug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.



6-su'wret. $R_{nl}^2(r)r^2$ funkciyasi'ni'n' r den g'a'rezligi.

- a). $n = 1, l = 0$. b). $n = 2, l = 0$. c). $n = 2, l = 1$. d). $n = 3, l = 0$. e). $n = 3, l = 1$. f). $n = 3, l = 2$.

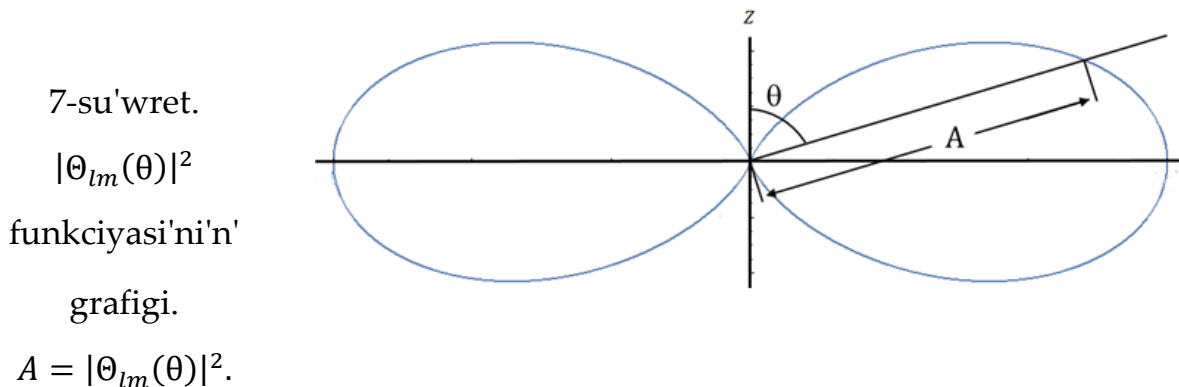
Psi-funkciyani'n' fizikali'q ma'nisi boyi'nsha n, l, m hali'nda turg'an elektronni'n' r, θ, φ noqati' a'tirapi'nda tabi'wdi'n' itimalli'g'i' (3.6)-formulani'n' ja'rdeminde esaplanadi'. Biz joqari'da (3.6)-an'latpani' toli'q denelik mu'yesh 4π boyi'nsha integrallap ha'm $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ funkciyasi'ni'n' normirovka sha'rtin paydalani'p biz elektronni'n' qali'n'li'g'i' dr bolg'an shar qatlami'nda, yag'ni'y yadrodan r menen $r + dr$ qashi'qli'qlari' arasi'nda tabi'wdi'n' itimalli'g'i' ushi'n $dP_{nl}(r)$ an'latpa alg'an edik. Endi sol an'latpani' r boyi'nsha 0 den ∞ shamasina shekem integrallap ha'm $R_{nl}(r)$ funkciyasi'ni'n' normirovka sha'rtin esapqa ali'p θ, φ nuri'ni'n' bag'i'ti'nda $d\Omega$ mu'yeshinin' sheklerinde tabi'wdi'n' itimalli'g'i'

$$dP_{lm}(\theta, \varphi) = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = |\Theta_{lm}(\theta)|^2 |\Phi_m(\varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi.$$

formulasi'ni'n' ja'rdeminde esaplanadi'. (73)-formuladan $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$ ten'liginin' ori'nlanatug'i'nli'g'i'n, sonli'qtan $|\Phi_m(\varphi)|^2 = 1/2\pi$ shamasina ten' ekenligin, al bul jag'daydan itimalli'qti'n' mu'yeshlik tarqali'wi'ni'n' φ mu'yeshinen pu'tkilley g'a'rezsiz ekenligin ko'rsetedi. Demek bazi' bir bag'i'tta elektrondi' tabi'wdi'n' itimalli'g'i' bolg'an

$$\frac{dP_{lm}(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{\Theta_{lm}^*(\theta)\Theta_{lm}(\theta)}{2\pi} = |\Theta_{lm}(\theta)|^2 / (2\pi)$$

shamasini'n' Oz ko'sherine qarata simmetriyali' ekenligin ko'rsetedi. Bul funkciyani'n' mu'yeshlik g'a'rezligi 6-su'wrette keltirilgen.



7-su'wrettegi polyar diagrammani' itimalli'qti'n' ken'isliktegi tarqali'wi'na aylandi'ri'w ushi'n Z ko'sherinin' do'gereginde toli'q aylandi'ri'w kerek. Bunday procedurani' biz kelesi paragraflarda ori'nlaymi'z.

4-§. Sferali'q funkciyalar

Sferali'q funkciyalar ilimga Laplas ten'lemesinin' sheshimlerin u'yreniw bari'si'nda kirgizilgen. Bunday funkciyalar matematikali'q fizikani'n' ko'p sanli' ma'selelerin sheshkende ku'shli qural si'pati'nda paydalani'ladi'.

Sferali'q funkciyalar sferali'q koordinatalarda jazi'lg'an Laplas ten'lemesinin' ortogonalli'q sheshimlerinin' ji'ynag'i'ni'n' mu'yeshlik bo'limi boli'p tabi'ladi'. Bunday funkciyalar dara tuwi'ndi'li' differencialli'q ten'lemeler teoriyasi'nda, teoriyali'q fizikada u'lken a'hmiyetke iye. Mi'sali', sferali'q funkciyalar atomdag'i' elektronli'q orbitallardi', geoidtin' gravitaciya'li'q maydani'n, planetalardi'n' magnit maydanlari'n ha'm reliklik nurlardi'n' intensivligin esaplawda ken'nen qollanadi'.

Sferali'q funkciyalardi' kvantli'q mexanikada olardi' $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ arqali' belgileydi ha'm

$$Y_{l,m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{l,m}(\theta)$$

tu'rine iye. Olar eki o'lshemli sferadag'i' funkciyalar ken'isliginde ortonormirovkalang'an sistemani' payda etedi:

$$\langle Y_{lm}; Y_{lm} \rangle = \int \int |Y_{lm}|^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi,$$

$$\langle Y_{lm}; Y_{l'm'} \rangle = \int \int Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin(\theta) d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Bul an'latpalardag'i' $*$ belgisi kompleksli tu'yinleslikni bildiradi. $\delta_{ll'}$ arqali' Kroneker simvoli' belgilengen.

(46)-an'latpadag'i' $\Theta_{l,m}(\theta)$ funkciyasi'

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

ten'lemesinin' sheshimlari boli'p tabi'ladi' ha'm ol

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta)$$

formulasi'ni'n' ja'rdeminde esaplani'ladi'. Bul ten'lemede $P_l^m(\cos\theta)$ arqali' Lenjandrdi'n' 1-a'wlad birlestirilgen funkciyalari' (associated Legendre functions), al ! arqali' faktorial belgilengen.

n –da'rejeli Lejandr polinomi'n (Legendre polynomials) Rodrig formulasi'ni'n' ja'rdeminde

$$P_n(z) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dz^n} (z^2 - 1)^n$$

tu'rinde ko'rsetiw mu'mkin. Ko'pshilik jag'daylarda z o'zgeriwshisining' orni'na polyarli'q mu'yeshtin' kosinusi'n jazadi':

$$P_n(\cos\theta) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d(\cos\theta)^n} (\cos^2\theta - 1)^n.$$

θ mu'yeshi $0 \leq \theta \leq \pi$ intervali'nda o'zgeretug'i'n bolg'anli'qtan $z = \cos\theta$ shamasi' ushi'n $-1 \leq z \leq +1$ o'zgeriw intervali'n jaza alami'z.

Lejandrdi'n' ko'p ag'zali'si' ortasha kvadratli'q ma'niste nolden en' kishi da'rejede awi'satug'i'n ko'p ag'zali', al z shamasi' kompleksli o'zgeriwshi boli'p tabi'ladi'. n shamasi' pu'tin sanlarga ten' bolg'anda

$$(1 - z^2) \frac{d^2 u}{dz^2} - 2z \frac{du}{dz} + n(n+1)u = 0$$

ten'lemesinin' sheshimi Lejandrdi'n' ko'p ag'zali'lari' dep atalatug'i'n ko'p ag'zali'lar tu'rine iye boladi'.

Lejandrdi'n' birinshi ko'p ag'zali'lari' 4-kestede berilgen.

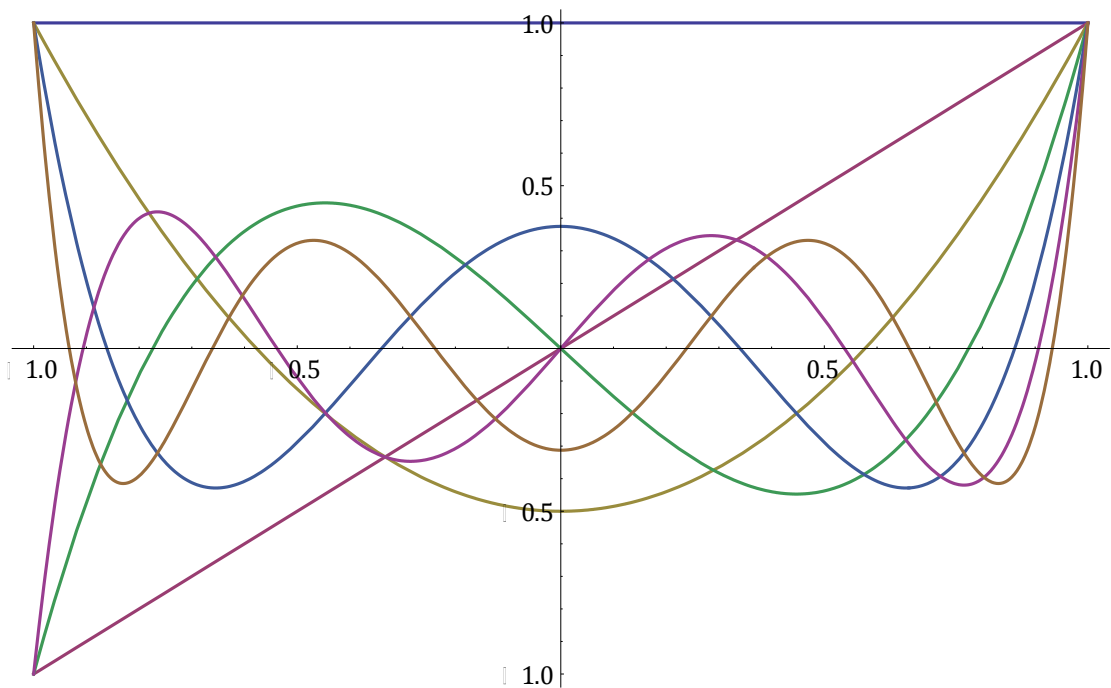
4-keste.

Lejandrdi'n' birinshi ko'p ag'zali'lari'

n	$P_n(z)$
-----	----------

0	1
1	x
2	$\frac{1}{2}(-1 + 3x^2)$
3	$\frac{1}{2}x(-3 + 5x^2)$
4	$\frac{1}{8}(3 - 30x^2 + 35x^4)$
5	$\frac{1}{8}x(15 - 70x^2 + 63x^4)$
6	$\frac{1}{16}(-5 + 105x^2 - 315x^4 + 231x^6)$
7	$\frac{1}{16}x(-35 + 315x^2 - 693x^4 + 429x^6)$
8	$\frac{1}{128}(35 - 1260x^2 + 6930x^4 - 12012x^6 + 6435x^8)$
9	$\frac{1}{128}x(315 - 4620x^2 + 18018x^4 - 25740x^6 + 12155x^8)$
10	$\frac{1}{256}(-63 + 3465x^2 - 30030x^4 + 90090x^6 - 109395x^8 + 46189x^{10})$

Lejandrdi'n birinshi 6 ko'p ag'zali'si'ni'n grafikleri 8-su'wrette keltirilgen.



8-su'wret. Lejandrdi'n birinshi 6 ko'p ag'zali'si'ni'n grafikleri.

Lejandrdi'n polinomlari' ju'da' a'jayi'p qa'siyetlarga iye - ular funkciyalardi'n toli'q ha'm ortogonalli'q sistemasi'n payda etedi. Ortogonalli'q qatnaslari'

$$\begin{cases} k \neq n \text{ bolsa } \int_{-1}^1 P_n(x) P_k(x) dx = 0 \\ k = n \text{ bolsa } \int_{-1}^1 P_n(x) P_k(x) dx = \frac{2}{2n+1}. \end{cases}$$

tu'rine iye.

Endi Lejandr*di*'n' birlestirilgen funkciyalari' haqqi'nda ga'p etemiz. Olar

$$\frac{d}{dx}(1-x^2) \frac{dP}{dx} + \lambda P = 0$$

tu'rine iye bolg'an Lejandr teqlemesini*ñ* sheshimleri boli'p tabi'ladi'. Lejandr*di*'n' birlestirilgen polinomi' (associated Legendre functions) ushi'n

$$P_n^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x)$$

formulasi' ori'nli'. Eger x shamasi'n polyar mu'yeshtin' kosinusi' menen almasti'ratug'i'n bolsaq, onda

$$P_n^m(\cos\theta) = \sin^m\theta \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_n(\cos\theta)$$

an'latpasi'na iye bolami'z. $m = 0$ sha'rti ori'nlang'anda $P_n^0 = P_n$ ten'ligi ori'nlanadi'. Sonli'qtan n shamasi'ni'ñ ha'r bir ma'nisine Lejandr*di*'ñ $n + 1$ birlestirilgen funkciyasi' (polinomi') sa'ykes keledi. Olardi'ñ da'slepki 11 dana ko'p ag'zali'si' 5-kestede berilgen.

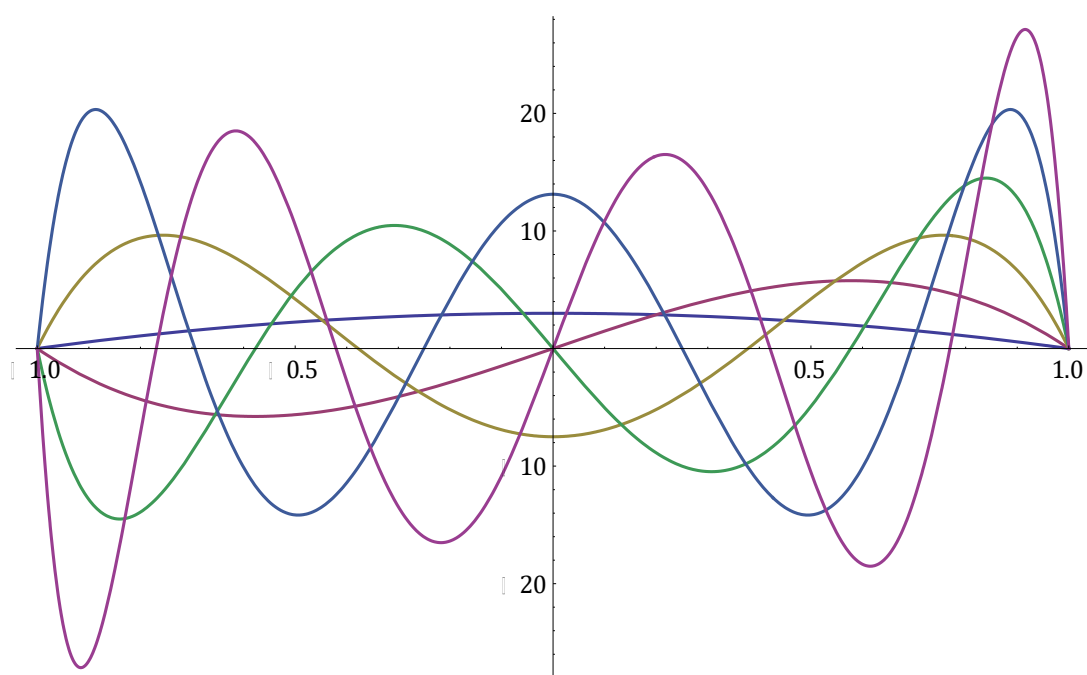
5-keste.

$P_n^2(x)$ funkciyasi'ni'n' ha'r qi'yli' n lerdegi tu'rleri

n	$P_n^2(x)$
0	0,
1	0,
2	$3 - 3x^2$,
3	$-15x(-1 + x^2)$,
4	$-\frac{15}{2}(-1 + x^2)(-1 + 7x^2)$,

5	$-\frac{105}{2}x(-1+x^2)(-1+3x^2),$
6	$-\frac{105}{8}(-1+x^2)(1-18x^2+33x^4),$
7	$-\frac{63}{8}x(-1+x^2)(15-110x^2+143x^4),$
8	$-\frac{315}{16}(-1+x^2)(-1+33x^2-143x^4+143x^6),$
9	$-\frac{495}{16}x(-1+x^2)(-7+91x^2-273x^4+221x^6),$
10	$-\frac{495}{128}(-1+x^2)(7-364x^2+2730x^4-6188x^6+4199x^8),$
	...
15	$-\frac{1}{1024}[1785x(-1+x^2)(429-16302x^2+171171x^4-749892x^6+1562275x^8-1533870x^{10}+570285x^{12}),$
	...
20	$-\frac{1}{65536}[21945(-1+x^2)(-221+45747x^2-1524900x^4+19213740x^6-119399670x^8+411265530x^{10}-822531060x^{12}+949074300x^{14}-585262485x^{16}+149184555x^{18})],$

$m = 2$ ha'm $n = 2-7$ bolg'an Lejandr di'n' birlestirilgen polinomlari' ushi'n du'zilgen grafikler 9-su'wrette berilgen.



9-su'wret. $m = 2$ ha'm $n = 2-7$ bolg'an Lejandrini'n birlestirilgen polinomlari' ushi'n du'zilgen grafikler.

Endi Lagerrdin' ko'p ag'zali'lari' haqqi'nda ga'p etemiz. Matematikada Edmon Lagerrdin' (1834-1886) hu'rmetine Lagerrdin' ko'p ag'zali'lari' (Laduerre polynomials) ekinshi ta'rtpili

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0$$

ten'lemesinin' kanonikali'q sheshimlari' boli'p tabi'ladi'. A'dette $L_1, L_2, \dots$ arqali' belgilenetug'i'n ja'ne polinomlardi'n' izbe-izligi boli'p tabi'latug'i'n Lagerr ko'p ag'zali'lari' Rodrig formulasi'ni'n' ja'rdeminde tabi'ladi':

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n).$$

Bul polinomlar bir birine ortogonal ha'm to'mendegidey skalyar ko'beymege iye:

$$\langle f, g \rangle = \int_0^\infty f(x)g(x)e^{-x}dx.$$

Lagerrdin' da'slepki ko'p ag'zali'lardi'n' bir neshesi 6-kestede berilgen.

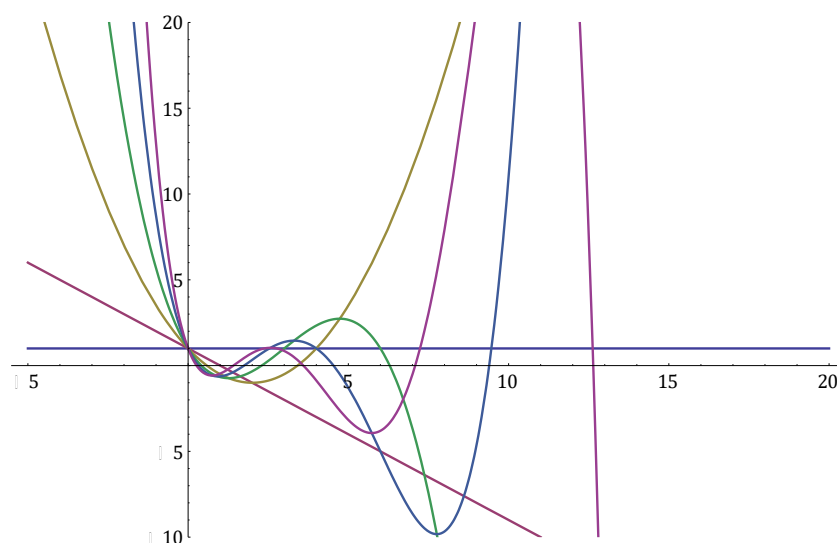
6-keste.

Lagerrdin' da'slepki ko'p ag'zali'lardi'n' bir neshesi

n	$L_n(x)$
0	1
1	$1 - x$
2	$\frac{1}{2}(2 - 4x + x^2)$
3	$1 - 3x + \frac{3x^2}{2} - \frac{x^3}{6}$
4	$1 - 4x + 3x^2 - \frac{2x^3}{3} + \frac{x^4}{24}$
5	$1 - 5x + 5x^2 - \frac{5x^3}{3} + \frac{5x^4}{24} - \frac{x^5}{120}$
6	$1 - 6x + \frac{15x^2}{2} - \frac{10x^3}{3} + \frac{5x^4}{8} - \frac{x^5}{20} + \frac{x^6}{720}$

7	$1 - 7x + \frac{21x^2}{2} - \frac{35x^3}{6} + \frac{35x^4}{24} - \frac{7x^5}{40} + \frac{7x^6}{720} - \frac{x^7}{5040}$
8	$1 - 8x + 14x^2 - \frac{28x^3}{3} + \frac{35x^4}{12} - \frac{7x^5}{15} + \frac{7x^6}{180} - \frac{x^7}{630} + \frac{x^8}{40320}$
9	$1 - 9x + 18x^2 - 14x^3 + \frac{21x^4}{4} - \frac{21x^5}{20} + \frac{7x^6}{60} - \frac{x^7}{140} + \frac{x^8}{4480} - \frac{x^9}{362880}$
10	$1 - 10x + \frac{45x^2}{2} - 20x^3 + \frac{35x^4}{4} - \frac{21x^5}{10} + \frac{7x^6}{24} - \frac{x^7}{42} + \frac{x^8}{896} - \frac{x^9}{36288} + \frac{x^{10}}{3628800}$

6-kestede berilgen funkciyalardi'n' $n = 2 - 7$ bolg'an jag'daylar ushi'n ali'ng'an grafiklari 10-su'wrette berilgen.



10-su'wret. 6-kestede berilgen funkciyalardi'n' $n = 2 - 7$ bolg'an jag'daylar ushi'n ali'ng'an grafiklari.

Lagerrdin' uli'wmalasqan polinomlari'

$$L_{n,l} = A_0 + A_1 r + \dots + A_{n-1-l} r^{n-1-l}$$

tu'rine iye boladi'. Bul an'latpada n arqali' bas (radialli'q), al l arqali' orbitalli'q (azimutalli'q kvant sanlari' belgilengen. Lagerrdin' uli'wmalasqan polinomlari' $L_n^a(x)$

$$xy'' + (a + 1 - x)y' + ny = 0$$

ten'lemesinin' sheshimi boli'p tabi'ladi'. Sonli'qtan

$$L_n(x) = L_n^0(x)$$

ten'ligi ori'nli' boladi'.

Lagerrdin' birlestirilgen polinomi' bolg'an $P_l^m(x)$ shamasini'n' (ingliz tilinde associated Laguerre polynomials) ma'nisleri

$$L_l^m = \frac{e^x x^{-m}}{l!} \frac{d^m}{dx^m} L_l(x) = \frac{e^x x^{-m}}{l!} \frac{d^m}{dx^m} (e^{-x} x^{l+m})$$

formulalari'ni'n' ja'rdeminde esaplanadi'. Soni'n' menen birge polinomdi' esaplaw ushi'n arnalg'an basqa da formulalar belgili:

$$L_n^m(z) = (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!} e^z z^{-m} \frac{d^{n-m}}{dz^{n-m}} e^{-z} z^n.$$

$m = 0$ bolg'an jag'daylardag'i' $L_n^m(z)$ polinomi'n $L_n(z)$ arqali' belgileydi ha'm oni' a'piwayi' tu'rde Lagerr polinomialari' dep ataydi'. Oni'n' ma'nisin

$$L_n(z) = e^z \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^n)$$

formulasi'ni'n' ja'rdeminde esaplaydi'.

Mathematica 10 programmalaw tilinde Lejandrini'n ko'p ag'zali'si'n da, Lagerrdin' ko'p ag'zali'si'n da an'sat esaplaw, yamasa olar menen ko'p sanli' matematikali'q operaciyalardi' islew mu'mkin. Biz to'mendegi kestdede olardi' esaplaw ushi'n arnalg'an komandalardi' 7-kestdede beremiz.

7-keste.

Mathematica 10 programmalaw tilinde Lejandrini'n ha'm Lagerrdin' ko'p ag'zali'lari'n esaplaw ushi'n arnalg'an komandalar

Lejandrini'n ko'p ag'zali'si' $P_n(x)$	LegendreP[n, x]
Lejandrini'n birlestirilgen polinomi' $P_n^m(x)$	LegendreP[n, m, x]
Lagerrdin' ko'p ag'zali'si' $L_l(x)$	LaguerreL[l, x]
Lagerrdin' birlestirilgen polinomi' $L_l^m(x)$	LaguerreL[l, m, x]

Biz joqari'da vodorod atomi'ni'n' kvantli'q-mexanikali'q teoriyasi'ni'n' ma'selelerin sheshiw bari'si'nda sferali'q funkciyalardi' sheshiw ushi'n za'ru'rli bolg'an Lagranj ha'm Lagerr ko'p ag'zali'lari'n esaplaw usi'llari'n ko'rsettik.

Usi'g'an baylani'sli' biz ko'p sanli' ha'r qi'yli' ilimiy ha'm oqi'w a'debiyatlari'nda biz joqari'da jazg'an an'latpalarg'a toli'q sa'ykes kelmeytug'i'n da Lagranj yamasa Lagerr ko'p ag'zali'lari'ni'n', oni'n' birlestirilgen polinomlari'ni'n' bar ekenligin ko'remiz. Sonli'qtan barli'q jag'daylarda da biz qanday da bir polinomlar haqqi'nda ga'p etkenimizde tek kvantli'q mexanikadag'i' sferali'q funkciyalardi' esaplaw ushi'n qollani'latug'i'n an'latpalardi' paydalani'wdi'n' za'ru'rli ekenligin atap o'temiz (mi'sali' geodeziyali'q ma'selelerdi sheshkende paydalani'latug'i'n polinomlardi'n' sanli'q ma'nisleri kvantli'q mexanikada paydalani'latug'i'n polinomlardi'n' sanli'q ma'nislerine sa'ykes kelmeydi).

5-§. Mathematica 10 programmalaw tilinin' operatorlari'ni'n' ja'rdeminde sferali'q funkciyalardi' esaplaw

Wolfram firmasi'ni'n' Mathematica universalli'q kompyuterlik algebra tilinin' (paketinin') ja'rdeminde ko'p sanli' ha'm ha'r qi'yli' ilimiy ha'm injenerlik ma'selelerdi analitikali'q ha'm sanli' usi'llar menen sheshiw mu'mkin. Bul paketti simvulli'q, grafikali'q ha'm sanli' kalkulyator si'pati'nda, soni'n' menen birge funkcionalli'q stilde programmalar jazi'wg'a mu'mkinshilik beretug'i'n joqari' programmalaw tili si'pati'nda qollani'wg'a boladi'. Paketti paydalani'w ha'r bir paydalani'wshi'ni' og'ada ko'p sanli' matematikali'q esaplawlardan qutqaradi'. Ha'zirgi waqi'tlari' Mathematica o'z ishine onlag'an mi'n' funkciyalardi' (komandalardi') aladi'. Usi' jag'daydi' ayqi'n tu'rde ko'rsetiw maqsetinde biz to'mende bir qatar mi'sallardi' keltiremiz ha'm ma'seleni bayanlawdi'n' bari'si'nda "programmani'n' o'zinde ornati'lg'an funkciya" so'zi menen "komanda" so'zin bir ma'niste qollanami'z.

$$\text{Laplacian}[f[x, y, z], \{x, y, z\}]$$

komandasi' laplasiandi' esaplaydi' ha'm bizge

$$f^{(0,0,2)}[x,y,z] + f^{(0,2,0)}[x,y,z] + f^{(2,0,0)}[x,y,z]$$

na'tiyjesin beredi. Bul an'latpada $f^{(0,0,2)}[x,y,z]$ qosi'li'wshi'si' z boyi'nsha ali'ng'an ekinshi ta'rtpi'li' tuwi'ndi'ni' bildiredi.

U'sh o'lshe'mli cilindrlik koordinatalar sistemasi'ndag'i' laplasian

$$\text{Laplacian}[\{1,1,1\}, \{r, \theta, \phi\}, \text{"Spherical"}]//\text{Expand}$$

tu'rinde jazi'ladi' ha'm oni'n' ushi'n

$$f^{(0,0,2)}[r, \theta, z] + \frac{f^{(0,2,0)}[r, \theta, z]}{r^2} + \frac{f^{(1,0,0)}[r, \theta, z]}{r} + f^{(2,0,0)}[r, \theta, z]$$

tu'rindegi an'latpa ali'nadi'.

Al u'sh o'lshe'mli sferali'q koordinatalar sistemasi'nda laplasiandi'

$$\text{Laplacian}[f[r, \theta, \phi], \{r, \theta, \phi\}, \text{"Spherical"}]//\text{Expand}$$

tu'rinde jazami'z ha'm esaplawdi'n' na'tiyjesinde

$$\frac{\text{Csc}[\theta]^2 f^{(0,0,2)}[r, \theta, \phi]}{r^2} + \frac{\text{Cot}[\theta] f^{(0,1,0)}[r, \theta, \phi]}{r^2} + \frac{f^{(0,2,0)}[r, \theta, \phi]}{r^2} + \frac{2f^{(1,0,0)}[r, \theta, \phi]}{r} + f^{(2,0,0)}[r, \theta, \phi]$$

an'latpasi'na iye bolami'z.

8-keste.

Mathematica programmalaw tilindegi vodorod atomni'ni'n' kvantli'q teoriyasi'ni'n' ma'selelerin sheshiwde qollani'latug'i'n polinomlar ha'm sferali'q funkciya ushi'n jazi'latug'i'n komandalardi'n' dizimi

Lejandr polinomi'.	$P_n(x)$	LegendreP[n,x]
Lejandr'di'n' birlestirilgen polinomi'	$P_m^n(x)$	LegendreP[n,m,x]
Lagerrdin' polinomlari'	$L_n(x)$	LaguerreL[n,x]
Lagerrdin' birlestirilgen polinomlari'	$L_n^a(x)$	LaguerreL[n,a,x]
Ermit polinomlari'	$H_n(x)$	HermiteH[n,x]
Sferali'q funkciyalar	$Y_l^m(\theta, \phi)$	SphericalHarmonicY[l,m,theta,phi]

9-kestede ko'rinip turg'ani'nday, sferali'q funkciyalardi' esaplaw ushi'n Mathematica programmalaw tilinde arawli' komanda (operator) qollani'ladi' ha'm ol bi'layi'nsha jazi'ladi'

$$\text{SphericalHarmonicY}[l, m, \theta, \phi]$$

Oni'n' ushi'n l menen m shamalari'ni'n' ma'nislerin beriwimiz kerek. Mi'sali'

$$\text{SphericalHarmonicY}[1, 0, \theta, \phi]$$

funkciyasi'ni'n' ma'nisinin'

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \text{Cos}[\theta]$$

ekenligin ko'remiz. Al $\text{SphericalHarmonicY}[5, 4, \theta, \phi]$ funkciyasi'ni'n' ma'nisin esaplag'ani'mi'zda

$$\frac{3}{16} e^{4i\phi} \sqrt{\frac{385}{2\pi}} \text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta]^4$$

funkciyasi'n alami'z.

l, m kvant sanlari' ushi'n jazi'lg'an sferali'q funkciyalar 8-kestede berilgen

9-keste.

l, m kvant sanlari'ni'n' ha'r qi'yli' ma'nisleri ushi'n jazi'lg'an sferali'q funkciyalar

l	m	$Y_l^m(\theta, \varphi),$ ($\text{SphericalHarmonicY}[l, m, \theta, \phi]$)
0	0	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
1	0	$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \text{Cos}[\theta]$
2	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (-1 + 3\text{Cos}[\theta]^2)$
3	0	$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (-3\text{Cos}[\theta] + 5\text{Cos}[\theta]^3)$
1	1	$-\frac{1}{2} e^{i\varphi} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \text{Sin}[\theta]$

2	1	$-\frac{1}{2}e^{i\varphi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cos[\theta]\sin[\theta]$
2	2	$\frac{1}{4}e^{2i\varphi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin[\theta]^2$
3	2	$\frac{1}{4}e^{2i\varphi}\sqrt{\frac{105}{2\pi}}\cos[\theta]\sin[\theta]^2$
5	4	$\frac{3}{16}e^{4i\varphi}\sqrt{\frac{385}{2\pi}}\cos[\theta]\sin[\theta]^4$

9-kestede magnit kvant sani' $m = 0$ bolg'an jag'dayda sferali'q funkciyada $e^{2i\varphi}$ tu'rindagi kompleksli ko'beytiwshinin' bolmaytug'i'nli'g'i' ko'rinip tur.

Biz da'slep $l = 4$, $m = 0$ bolg'an jag'day ushi'n sferali'q funkciyani'n' kvadrati'ni'n' (modulinin') grafik du'zeyik. $\phi = 0$ bolg'an jag'dayda

$$\frac{3(3 - 30\cos[\theta]^2 + 35\cos[\theta]^4)}{16\sqrt{\pi}}$$

funkciyasi'n alami'z ha'm grafikti du'ziw ushi'n

$$\text{Plot}[(\text{SphericalHarmonicY}[4,0,\theta,0])^2,\{\theta,0,\pi/2\}]$$

tu'rindagi komandani' jazami'z. Usi'ni'n' na'tiyjesinde 7-su'wrette ko'rsetilgendey grafikti alami'z (ko'sherlerdin' atamaları'n jazi'w, ha'riplerdin' u'lkenligin ha'm grafiktin' o'zin u'lkeytiw ushi'n

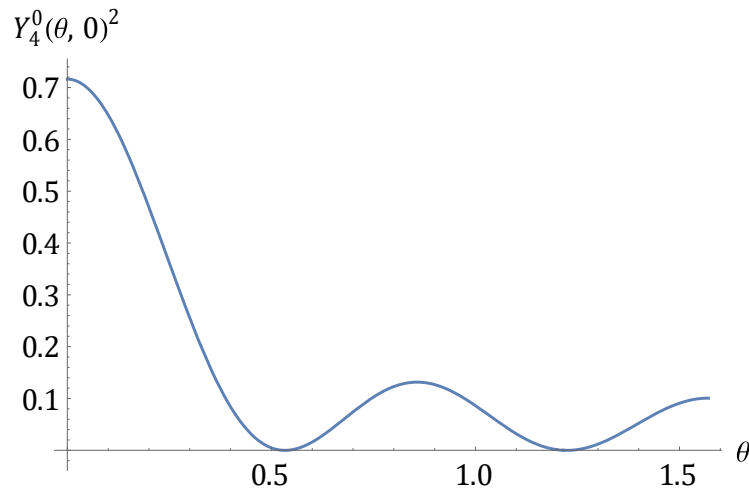
Show[%38,AxesLabel

→ {HoldForm[θ], HoldForm[SphericalHarmonicY[4,0, θ ,0]²]}, PlotLabel

→ None, LabelStyle → {FontFamily → "Cambria", 16, GrayLevel[0]}, ImageSize

→ 400]

tu'rindagi komandasi' qosi'lg'an).

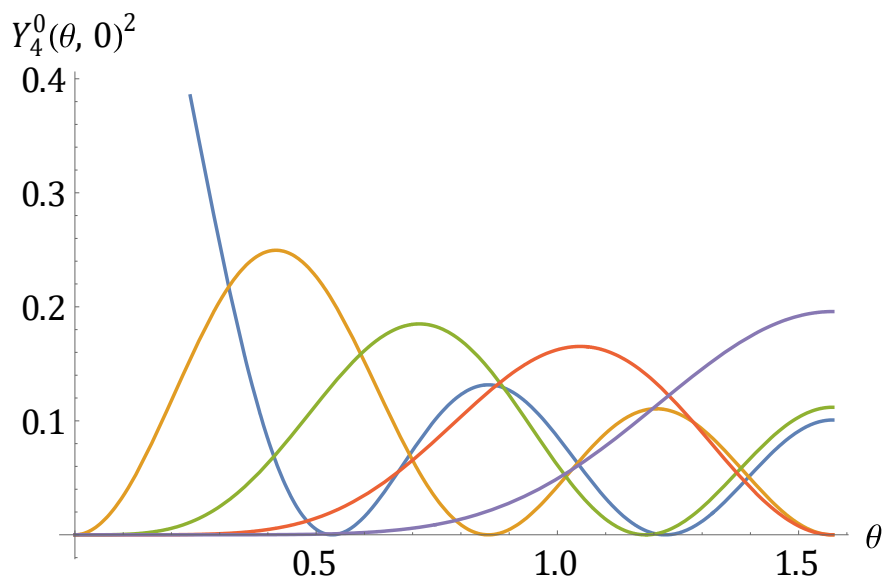


11-su'wret. $Y_4^0(\theta, 0)$ funkciyasi'ni'n' kvadrati'ni'n' θ shamasi'nan g'a'rezligi.

Eger m ge 0, 1, 2, 3 ha'm 4 ma'nislerin beretug'i'n bolsaq, onda

```
Plot[{(SphericalHarmonicY[4,0,θ,0])^2,(SphericalHarmonicY[4,1,θ,0])^2,
      (SphericalHarmonicY[4,2,θ,0])^2,(SphericalHarmonicY[4,3,θ,0])^2,
      (SphericalHarmonicY[4,4,θ,0])^2},{θ,0,π/2},
AxesLabel→{HoldForm[θ],HoldForm[SphericalHarmonicY[4,0,θ,0]^2]},PlotLabel
→None,LabelStyle→{FontFamily
→"Cambria",16,GrayLevel[0]},ImageSize→400]
```

tu'rindagi programmani' du'zgen qolayli' ha'm bul programma 9-su'wrette berilgen grafiklerdi beredi.



12-su'wret. Bul grafikte $l = 4$, al m nin' 0, 1, 2, 3, 4 sanlari'na ten' bolg'an ma'nislari ushi'n ali'ng'an $Y_4^m(\theta, 0)$ funkciyasi'ni'n' kvadrati'ni'n' θ shamasi'nan g'a'rezligi.

Endi tolqi'n funkciyasi'ni'n' modulinin' kvadrati'ni'n' ken'isliktegi tarqali'wi'n beremiz. Oni'n' ushi'n azimutal kvant sani' l ge baylani'sli' bolg'an elektronni'n' hallari'ni'n' spektroskopiyadan o'tken belgilewlerin eske tu'siremiz.

l	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Belgileniwi	s	p	d	f	g	h	i	k	l	m	n

Kestede keltirilgen jag'daylarg'a baylani'sli' to'mendegidey hallardi'n' bar ekenligin atap o'temiz:

1s,

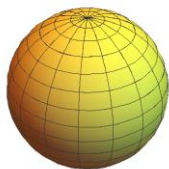
2s, 2p,

3s, 3p, 3d,

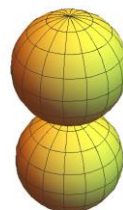
4s, 4p, 4d, 4f,

5s, 5p, 5d, 5f, 5g 5h, h.t.b.

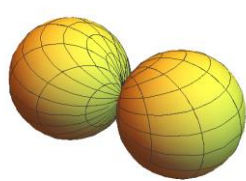
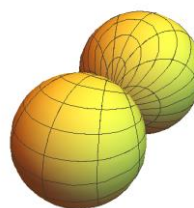
13-su'wrette ha'r qi'yli' hallar ushi'n tolqi'n funkciyasi'ni'n' modulinin' kvadrati'ni'n' ken'isliktegi tarqali'wlari' berilgen.



1s



$2p_z$

 $2p_x$  $2p_y$  $3d$  $4f$

13-su'wret. Ha'r qi'yli' hallar ushi'n tolqi'n funkciyasi'ni'n' modulinin' kvadrati'ni'n' ken'isliktegi tarqali'wlari'.

Mathematica programmalaw tilinin' DensityPlot komandasi'ni'n' ja'rdeminde elektrondi' tabi'wdi'n' itimalli'g'i'ni'n' tarqali'wi'n vizuallasti'ri'w ushi'n universalli'q programmani' du'ziw mu'mkin. Programma to'mendegidey tu'rge iye boladi':

```
Manipulate[
```

```
  If[l>=n,l=n-1];
```

```
  If[m>l,m=l];
```

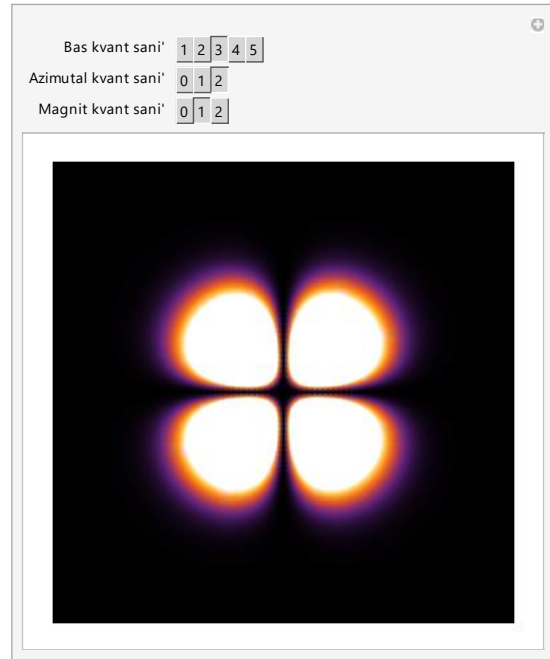
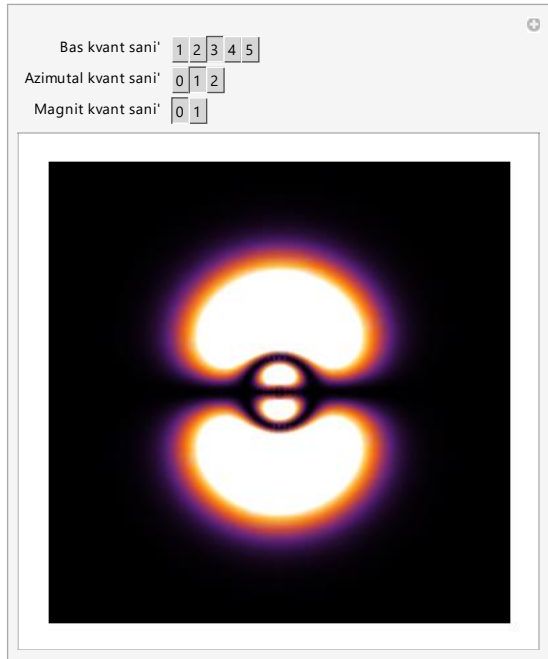
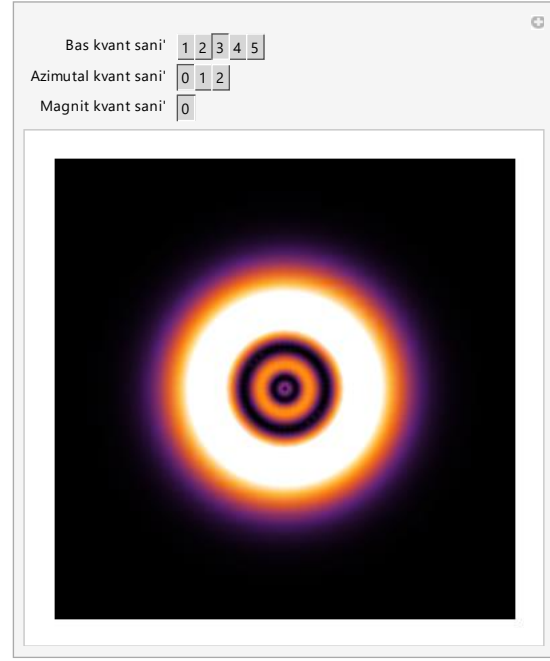
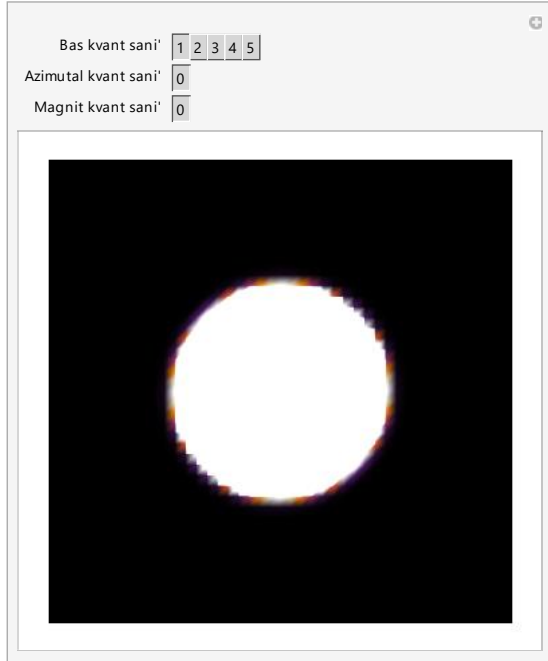
```
  DensityPlot[Module[{r=Norm[{x,0,z]}},4 π r2 (Exp[-(r/n)] rl LaguerreL[n-1-l,2  
l+1,(2 r)/n])2 Abs[SphericalHarmonicY[l,m,ArcCos[z/r],ArcTan[x,0]]]2},{x,-  
40,40},{z,-40,40},Mesh->False,Frame->False,PlotPoints->45,ColorFunctionScaling-  
>True,ColorFunction->"SunsetColors"],
```

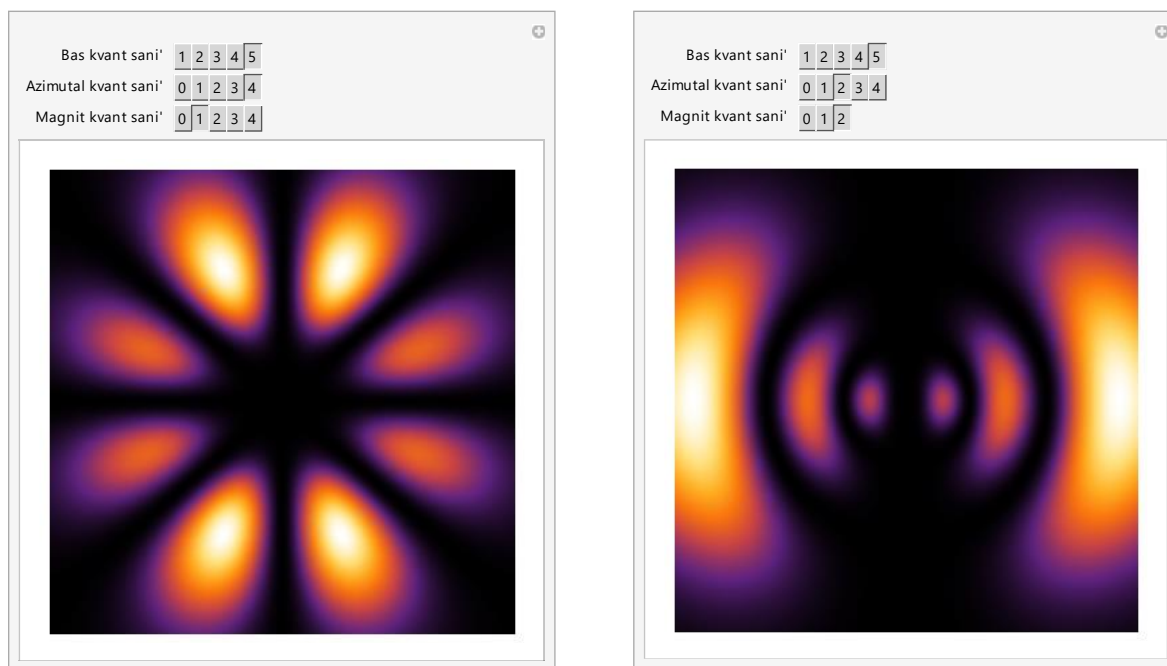
```
  {{n,3, "Bas kvant sani"},1,6,1,ControlType->Setter},
```

```
  {{l,1,"Azimutal kvant sani"},Range[0,n-1],ControlType->SetterBar},
```

```
  {{m,0,"Magnit kvant sani"},Range[0,l],ControlType->SetterBar}]
```


Bul programmani'n' ja'rdeminde ali'ng'an na'tiyjeler 14-su'wrette Manipulate funkciyasi'ni'n' ha'm ControlType → SitterBar opsiyasi'ni'n' ja'rdeminde ali'ng'an za'ru'rli bolg'an mag'li'wmatlar menen birge berilgen.





14-su'wret. Mathematica programmalaw tilinin' DensityPlot komandasi'ni'n' ja'rdeminde elektrondi' tabi'wdi'n' itimalli'g'i'ni'n' tarqali'wi'n vizuallasti'ri'wdi'n' na'tijjeleri (su'wretler Manipulate funkciyasi'ni'n' ha'm ControlType → SitterBar opsiyasi'n qollani'wdi'n' ja'rdeminde ali'ng'an).

To'mende Mathematica universalli'q kompyuterlik algebra sistemasi'ni'n' kvantli'q mexanikani'n' ma'selelerin sheshiw ushi'n qollani'latug'i'n komandalari'ni'n' dizimin beremiz (10-keste).

10-keste.

Mathematica universalli'q kompyuterlik algebra sistemasi'ni'n' kvantli'q mexanikani'n' ma'selelerin sheshiw ushi'n qollani'latug'i'n komandalari'ni'n' dizimi (argumentler jazi'lmag'an)

Garmonikali'q oscillyator	HermiteH[n,x], LaguerreL[l,m,x]
Vodorod yamasa vodorod ta'rizli atomlar	SphericalHarmonicY, LaguerreL[l,m,x], Hypergeometric1F1, WhittakerM
Si'zi'qli' potenciallar qatnasatug'i'n ma'seleler	AiryAi, AiryAiPrime, AiryBi, AiryAiZero, AiryBiZero

Da'wirli potencial	MathieuS, MathieuC, MathieuCharacteristicExponent
Sferali'q geometriya qollani'latug'i'n ma'seleler	SpheroidalPS, SpheroidalS1, SpheroidalEigenvalue
SHashi'raw teoriyasi'	LegendreP, SphericalBesselJ, LegendreQ
Dirak ten'lemesin sheshiw	Hypergeometric1F1, BesselK
Mu'yeshlik moment	ClebschGordan, ThreeJSymbol, SixJSymbol, Jacob iP, PauliMatrix

Joqari'da keltirilgen mag'li'wmatlar Mathematica programmalaw tilinde ko'p sanli' kvantli'q-mexanikali'q ma'selelerdi an'sat sheshiwge bolatug'i'nli'g'i'n ko'rsetedi.

Pitkeriw qa'nigelik jumi'si' boyi'nsha uli'wmali'q juwmaqlar

1. Pitkeriw qa'nigelik jumi'si'nda vodorod atomi'ni'n' relyativistlik emes kvantli'q teoriyasi' ha'm oni'n' matematikali'q tiykarlari' toli'q tu'rde bayanlang'an. Orayli'q maydandag'i' potencial ushi'n Shredinger ten'lemesinin' sheshimlerin ali'w ushi'n za'ru'rli bolg'an barli'q matematikali'q funkciyalar, ko'p ag'zali'lar, polinomlar, atap aytqanda Lajendr ten'lemesi, Lejandr di'n' ko'p ag'zali'lari', birlestirilgen funkciyalari', polinomlari', Lagerr ko'p ag'zali'lari', polinomlari', uli'wmalasqan polinomlari' haqqi'nda toli'q ga'p etilgen.

2. Kvantli'q mexanikada, a'sirese vodorod yamasa vodorod ta'rizli atomlardi'n' kvantli'q teoriyasi'n u'yrengende esaplaw jumi'slari' menen funkciyalardi'n' grafiklerin du'zgende (yag'ni'y ali'ng'an na'tiyjelerdi

vizualizatsiyalarda) kompyuterlarning tutqa orni, a'hmiyeti ayqi'n mi'sallarda k'rsatilgen.

3. Pitkeriw qa'nigelik jumi'si'nda keltirilgen materiallardin' barli'g'i' da relyativistlik emes jag'daylardag'i' vodorod atomlari'ni'n' ha'm vodorod ta'rizli atomlardin' fizikali'q qa'siyetlerin toli'q u'yreniw ushi'n paydali' oqi'w-metodikali'q quraldin' orni'n iyeley aladi'.

Paydalani'lg'an a'debiyatlar dizimi

1. Д.И.Блохинцев. Основы квантовой механики. Издание седьмое. Издательство "Лань". Санкт-Петербург-Москва-Краснодар. 2004. 672 с.

2. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Курс теоретической физики. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е издание. ФИЗМАТЛИТ. Москва. 2004. 800 с.

3. Я.Г.Дорфман. Всемирная история физики (с начала XIX до середины XX вв.). Издательство "Наука". Москва. 1979. 317 с.

4. Г.Бете, Э.Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Государственное издательство физико-математической литературы. Москва. 1960. 562 с.

5. Г.Бете. Квантовая механика простейших систем. ОНТИ. Главная редакция общетехнической литературы. Москва-Ленинград. 1935. 399 с.

6. Д.В.Сивухин. Общий курс физики. Т. V. Атомная и ядерная физика. 2-е изд. ФИЗМАТЛИТ. Издательство МФТИ. Москва. 2002. 784 с.

7. Луи де Бройль. Революция в физике (новая физика и кванты). 2-е издание. Атомиздат. Москва. 1965. 231 с.

8. К.Коэн-Таннуджи, Б. Диу, Ф. Лалоэ. Квантовая механика. Т.1. Екатеринбург: Изд-во Уральского университета, 2000. 944 с.
9. К.Коэн-Таннуджи, Б. Диу, Ф. Лалоэ. Квантовая механика. Т.2. Екатеринбург: Изд-во Уральского университета, 2000. 800 с.
10. Дирак П. Принципы квантовой механики. 2-е изд. М.: Наука, 1979. 480 с. П.А.М.Дирак. Собрание научных трудов. Т. II. Квантовая теория (статьи 1924-1947). Издательство ФИЗМАТЛИТ. Москва. 2003. 848 с.
11. А.А.Соколов, И.М.Тернов, В.Ч.Жуковский, Квантовая механика. Издательство "Наука". Москва. 1979. 528 с.
12. А.С.Давыдов. Квантовая механика. Издательство "Наука". Москва. 1973. 703 с.
13. А.Н.Матвеев. Квантовая механика и строение атома. Издательство "Высшая школа". Москва. 1965. 355 с.
14. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Пер. с англ., Том. 8. Том 9. М. 1967.
15. Макс Джеммер. Эволюция понятий квантовой механики. Издательство "Наука". Москва. 1985. 384 с.
16. Г.С.Ландсберг. Оптика. Учебное пособие для вузов. 6-е издание. стереот. Москва. ФИЗМАТЛИТ. 2003. 848 с.
17. Stephen Wolfram. Mathematica Book. 5th ed. Wolfram Media. 2003. 1301 p.
18. Gerd Baumann. Mathematica in Teoretical Physics. Electrodinamics, Quantum Mechanics, General Relativity and Fractals. Second Edition. Springer-Verlag. 1993. P. 544-942.
19. James M.Feagin. Quantum Methods with Mathematica. Springer-Verlag. 1993. 482 p.

20. Дьяконов В. П. Компьютерная математика. Теория и практика. М., СПб: «Нолидж», «Питер», 1999, 2001. С. 1296.
21. Дьяконов В. П. Системы символьной математики Mathematica 2 и Mathematica 3. М.: «СК-ПРЕСС», 1998. С. 320.
22. Дьяконов В. П. Mathematica 4 с пакетами расширения. М.: «Нолидж», 2000. С. 608.
23. В. Дьяконов, Ю. Новиков, В. Рычаков. Компьютер для студента. Самоучитель. СПб.: «ПИТЕР», 2000. С. 592.
24. Дьяконов В. П. Mathematica 4. Учебный курс. СПб.: «ПИТЕР», 2001. С. 656.
25. Дьяконов В. П. Mathematica 4.1/4.2/5.0 в математических и научно-технических расчетах. М.: «СОЛОН-Пресс», 2004. С. 696.
26. Дьяконов В. П. Mathematica 5/6/7. Полное руководство. М.: «ДМК Пресс», 2009. С. 624.
27. Дьяконов В. П. Mathematica 5.1/5.2/6 в математических и научно-технических расчетах. Издание второе дополненное и переработанное. М.: «СОЛОН-Пресс», 2008. С. 744.
28. Дьяконов В. П. Mathematica 5.1/5.2/6. Программирование и математические вычисления. М.: «ДМК-Пресс», 2008. С. 576.
29. Чарльз Генри Эдвардс, Дэвид Э. Пенни. Дифференциальные уравнения и проблема собственных значений: моделирование и вычисление с помощью Mathematica, Maple и MATLAB = Differential Equations and Boundary Value Problems: Computing and Modeling. 3-е изд. М.: «Вильямс», 2007.
30. R. Ennis, G. McGuire. Nonlinear Physics with Mathematica for Scientists and Engineers. Birkhauser Boston. 2001. 726 p.

31. Gerd Baumann. Mathematica® for Theoretical Physics. Electrodynamics, Quantum Mechanics, General Relativity, and Fractals. Second Edition. Springer Science+Business Media, Inc. 2005. 942 p.

32. Robert L. Zimmerman, Fredrick I. Olness. Mathematica for Physics. Second Edition. Addison Wesley. San Francisco, Boston, New York, Capetown, Hong Kong, London, Madrid 645 p.

33. Ф.А.Березин, М.А.Шубин. Уравнение Шредингера. Издательство Московского университета. 1983. 392 с.

34. И.В.Абаренков, С.Н.Загуляев. Простейшие модели в квантовой механике. Издательство С.-Петербургского университета. 2004. 128 с.

35. Боум А. Квантовая механика: основы и приложения. М.: Мир, 1990. 720 с.

36. Л.Н.Лабзовский. Теория атома. Квантовая электродинамика электронных оболочек и процессы излучения. Москва. Наука. ФИЗМАТЛИТ. 1996. 304 с.

37. М.Г.Веселов, Л.Н.Лабзовский. Теория атома. Строение электронных оболочек. Издательство "Наука". Москва. 1986. 328 с.

38. В.В.Толмачев, Ф.В.Скрипник. Квазиклассическая и квантовая теория атома водорода. Издательство "Регулярная и хаотическая динамика". Ижевск. 2008. 132 с.