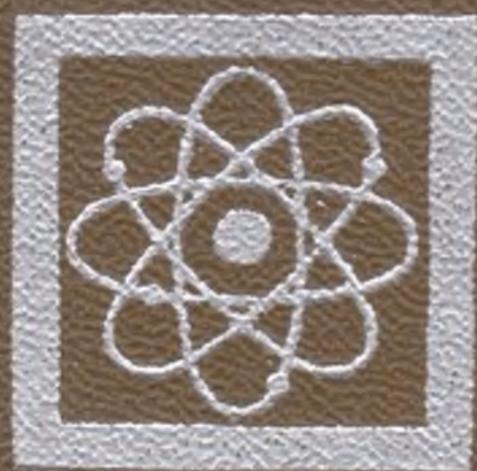


Р. БЕКЖОНОВ, Б. АХМАДХУЖАЕВ

АТОМ ФИЗИКАСИ

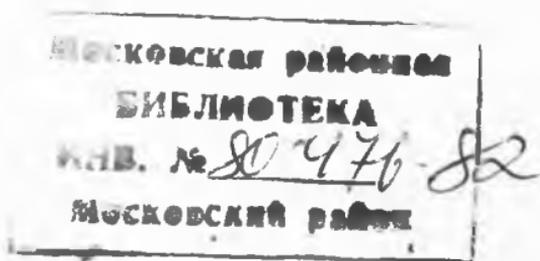


www.Orbita.Uz kutubxonasi

Р. БЕКЖОНОВ, Б. АҲМАДХЎЖАЕВ

АТОМ ФИЗИКАСИ

ОЛИЙ ЎҚУВ ЮРТЛАРИНИНГ ФИЗИКА ВА
ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАКУЛЬТЕТЛАРИ
СТУДЕНТЛАРИ УЧУН ЎҚУВ ҚўЛЛАНМА



ТОШКЕНТ — ЎҚИТУВЧИ — 1979

*ЎзССР Маориф министрлиги олий ўқув юртра-
рининг физика ва физика-математика факуль-
тетлари студентлари учун ўқув қўлланма си-
фатида рухсат этган*

На узбекском языке

**Рахим Бегжанович Бегжанов,
Батыр Ахмадходжаев**

АТОМНАЯ ФИЗИКА

Учебное пособие для студентов ВУЗов

Ташкент—«Ўқитувчи» — 1979

Редактор *М. Пўлатов*
Бадий редактор *Е. И. Соин*

Техредактор *В. Проходова*
Корректор *Д. Умарова*

ИБ №1093

Теришга берилди. 12.02.1979 й. Босишга рухсат этилди 2.08.79. РО 3773.
Формати 84×108¹/₃₂. Тип. қоғози №1. Кегли 10, японсиз. Юқори босма усулида
босилди. Шартли б. л. 21,63. Нашр. л. 19,0. Тиражи 8000. Зак. №2180. Баҳоси 90 т.

«Ўқитувчи» нашриёти. Тошкент, Навоий кўчаси, 30. Шартнома № 273 — 78.

Ўзбекистон ССР нашриётлар, полиграфия ва китоб савдоси ишлари Давлат
комитети Тошкент «Матбуот» полиграфия ишлаб чиқириш бирлашмасининг поли-
графия комбинати. Тошкент шаҳри, Навоий кўчаси 30, 1979.

Полиграфкомбинат Ташкентского полиграфического производственного объеди-
нения «Матбуот» Государственного комитета УзССР по делам издательств,
полиграфии и книжной торговли. Ташкент, ул. Навои 30.

⊙ «Ўқитувчи» нашриёти, 1979 й.

Б 20408 — 249 132 — 79 1704010000
353 (04) — 79

КИРИШ

Яқин вақтларда физика ва химия фанларининг бир қисми бўлган модда тузилиши ҳақидаги тасаввурларимиз математик аппарат илмий методологиясига эга бўлган алоҳида фанга айланиб қолди. Ҳозирги вақтда фан ва техниканинг турли соҳаларининг тараққий этишини квант механикаси ютуқларига асосланган модда тузилиши назариясисиз тасаввур этиш қийин. Шу сабабдан физика, қолаверса, химия ихтисослиги бўйича ўқувчи студентларни имкони борича тезроқ модда тузилишининг ҳозирги замон назарияси асослари билан қуроллантириб бориш зарур. Мазкур китоб шу мақсадда ёзилган.

Модда тузилиши назарияси анча мураккаб бўлиб, физиканинг деярли барча ютуқлари ва ҳозирги замон математик аппаратининг қудратига таянган. Шу сабабдан китобда модда тузилиши — атом физикасининг асосий масалаларини баён этишда унинг физикавий моҳиятини тушунтиришга алоҳида эътибор берилиб, физиканинг бу соҳадаги энг сўнгги ютуқлари ҳақида ҳам етарлича тўхталиб ўтилган.

Одатда, кўпгина муаллифлар атом физикасини баён қилишни унинг ривожланиш тарихидан бошлайдилар. Мазкур китоб муаллифлари эса материалларни танлаш ва уларни жойлаштиришни мантиқий тарзда баён этиш зарурлигини афзал кўрдилар. Шу сабабдан китобнинг биринчи боби абсолют қора жисмнинг иссиқлик нурланиши ва квант ҳақидаги тушунчаларнинг вужудга келишига бағишланган.

Иккинчи бобда ёруғликнинг корпускуляр ва зарраларнинг тўлқин табиати, фотоэффект, Комптон эффекти ва квант механикасининг асосини ташкил этувчи бошқа бир қатор ҳодисалар тажрибалар асосида ишонарли равишда баён қилинган.

Асосий квант тушунчалари билан танишгандан сўнг учинчи бобда баён этилган атом тузилиши ва Бор назарияси ҳақидаги масалалар билан танишиб олиш ўқувчилар учун қийинчилик туғдирмайди ва микрообъектлардаги квант ҳодисаларнинг узвий боғлиқлиги янада аниқроқ кўринади.

Кейинги бобда квант механикасига тегишли асосий масалалар: тўлқин функцияси, Шредингер тенгламаси, микродунёнинг ноаниқлик принципи, потенциал тўсиқ, туннель эффекти ва бошқалар баён этилган. Бунда ҳамма математик ҳисоблашлар тўла-тўқис келтирилмаган. Аммо студентларнинг мустақил ишлари учун етарлича кўрсатмалар берилган.

Бешинчи бобда квант механикаси принципларининг водородсимон атомлар спектрини таҳлил қилишга қўлланилиши конкрет мисолларда кўрсатилиб, ҳодисаларнинг физикавий моҳияти аниқ тушунтирилган.

Электрон спини, ҳаракат миқдори ва магнит моментлари, фазовий квантланишнинг тажрибада кузатилиши, магнитомеханик эффектлар ва водородсимон атомлар сатҳларининг нозик структураси каби масалалар олтинчи бобда ёритилган.

Мураккаб атомлар тузилиши, элементлар даврий системасининг квант асослари, рентген нурлари, Паули принципи, танлаш қоидалари, мураккаб атомларнинг оптикавий спектрлари каби масалалар еттинчи бобда, ҳамда фақат квант механикаси асосида тушунтириладиган Зееманнинг нормал ва аномал эффекти, Пашен-Бак ва Штарк эффектлари саккизинчи бобда ўз ўрнини топган.

Сўнгги IX—X бобларда молекулалар тузилиши, химиявий боғланиш кучлари, валентлиги, ёруғликнинг комбинацион сочилиши ҳамда қаттиқ жисмлар физикасига оид масалалар, металлар ва ярим ўтказгичларнинг электрон назарияси, кристаллардаги ион ва ковалент боғланишлар, Ван-дер-Ваальс кучлари, водород боғланиш ва атом физикаси соҳасида эришилган сўнгги ютуқлар, лазерларнинг ижтиро қилиниши ва қўлланилиши ҳақида сўз боради.

Материални бу тартибда танлаш XIX аср охири ва XX аср бошларида физика фанида рўй берган революцион ўзгаришлар сабабларининг физикавий ва фалсафий моҳиятини тушуниб олишда ва, шунингдек, студентларга уни тушунтиришда бирмунча қулайликлар яратади.

Китоб ўзбек тилида ёзилаётганлиги учун ҳам муаллифлардан кўп қийинчиликни енгишни талаб этди. Шунинг учун ҳам у камчиликлардан холи эмас, албатта. Айниқса шуни қайд қилиш керакки, китобдаги масалаларни баён қилишда бирмунча мураккаб математик аппаратдан фойдаланилди. Лекин бизнингча, бу камчилик эмас, чунки ҳозирги вақтда олий ўқув юртларининг иккинчи, учинчи курсларида таҳсил кўриб атом физикасини ўрганаётган студентлар замонавий математик аппаратдан хабардордирлар. Шу сабабли ўқувчилар учун асосий қийинчилик математика бўлмай, микрообъектларда юз берадиган физикавий ҳодисаларнинг ўзига хос хусусиятларидир.

Сўнгги йилларда атом спектроскопиясининг плазма диагностикасига, астрофизик тадқиқотларга, газли лазерлар спектроскопияси ва бошқа соҳаларга татбиқи анча ривож топди. Аммо бу масалаларни ёритиш атом спектрлари назариясига, атомда юз бераётган радиацион жараёнларнинг эҳтимоллиги ва кўндаланг кесими каби муҳим характеристикаларга тегишли конкрет ҳисобларни ўтказишни, шу билан бирга китоб ҳажмини ҳам анча орттирилишини талаб қилади. Лекин бундай масалаларни студентларга мўлжалланган умумий физика курси доирасидаги атом физикаси қўлланмасида ёритилиши унчалик зарур бўлмаса керак. Китобнинг ҳажми унча катта бўлмаса ҳам, атом физикаси курси бўйича педагогика институтлари ва университетларнинг физика мутахассислиги ҳамда квант механикаси асослари ўқиладиган бошқа олий ўқув юртлари студентлари учун мўлжалланган программадаги асосий масалаларни ўз ичига олган.

Муаллифлар китобнинг сифатини оширишга хизмат қилувчи ҳар қандай таклиф ва танқидий кўрсатмаларини юборувчи китобхонларга олдиндан ўз ташаккурларини билдирадilar.

Китоб ҳақидаги фикр ва мулоҳазаларингизни қуйидаги адресга юборинг: Тошкент, 700129, Навоий кўчаси, 30. «Ўқитувчи» нашриётининг физика-математика адабиёти редакцияси.

ИССИҚЛИК НУРЛАНИШИ ВА КВАНТ ҲАҚИДАГИ ТУШУНЧАНИНГ ВУЖУДГА КЕЛИШИ

1-§. Иссиқлик нурланиши

Ҳозирги замон физикаси асосида XX аср бошларида фан оламига киритилган икки принципаал ғоя: нисбийлик ва квант назариялари ётади. Нисбийлик назариясининг экспериментал асоси, яъни Майкельсон—Морли тажрибаси, XIX асрдаёқ яратилган эди. Нисбийлик назариясининг ўзи эса машҳур олим Альберт Эйнштейн томонидан яратилди.

Квант назариясининг тарихи мураккаб босқичларга эга. Биринчи қарашда квант назарияси эркин атом ва атом структураси (таркибий тузилиши) нинг назариясидек туюлиши мумкин. Аслида эса, квант назарияси микродунё физикасининг ҳамма соҳаларига тааллуқлидир. Квант назариясининг пайдо бўлиши ҳам атом физикаси билан эмас, балки иссиқлик нурланишини тўла тавсифлаш борасида олиб борилган уришишлар билан боғлиқ. Жисмларнинг иссиқлик нурланиши қонуниятларини назарий тушунтириш XIX аср охири XX аср бошларига келиб классик физикадаги энг муҳим муаммога айланган эди. Қуйида биз кўрамизки, электромагнит нурланишининг интенсивлиги ва спектрлари устида олиб борилган изланишларда классик физика биринчи бор жиддий мағлубиятга учради ва энергетик сатҳларнинг дискретлиги ҳақидаги Планк ғояси вужудга келди.

Жисмларнинг қизишидан вужудга келадиган нурланиш, яъни иссиқлик нурланиши қонунларини баён этишдан олдин, ихтиёрий температурада вужудга келтирилган иссиқлик нурланишига оид баъзи таърифларни кўрайлик.

Нурланишни миқдорий характерлашда интеграл ва дифференциал (ёки спектрал) энергия оқими тушунчаси киритилади. Интеграл ёки тўла нурланиш оқими $E(\lambda, T)$ бирор сиртдан бирлик вақт ичида ўтган электромагнит тўлқин энергиясини миқдорий характерлайди. Жисмнинг

пур чиқара олиш қобилиятини билдирувчи $E(\lambda, T)$ катталик нурланиш қувватини ҳам характерлайди.

Электромагнит нурланиш энергиясининг спектрал (дифференциал) монохроматик оқими λ тўлқин узунлиги қиймати атрофида $d\lambda$ интервалидаги спектрал зичликни кўрсатади:

$$E_\lambda = \frac{dE_\Sigma}{d\lambda}, \quad (1.1)$$

яъни λ тўлқин узунлиқда нурланиш энергия оқимининг спектрал зичлиги тўлқин узунлиқнинг $d\lambda$ атрофидаги бирлик интервалида бирлик вақтда температураси T га тенг бирлик сиртдан нурланган энергияга тенг. Чунончи, $E_\lambda d\lambda dS dt$ λ дан $\lambda + d\lambda$ гача тўлқин узунлиги интервалида dt вақт ичида температураси T га тенг dS сирт элементидан нурланаётган энергия. Нурланаётган жисмнинг бирлик юзидан бирлик вақт ичида ҳамма йўналишда, тўлқин узунлигининг ҳамма қийматларида чиқаётган электромагнит энергия оқими жисмнинг энергетик ёритувчанлиги ёки унинг тўла чиқариш қобилияти деб аталади ва қуйидагича аниқланади:

$$E_\Sigma = E/S = \int_0^\infty E_\lambda d\lambda, \quad (1.2)$$

бунда S — қиздирилган жисмнинг нурланувчи юзи.

Биз биламизки, агар жисм сиртига нурланиш (нурий энергия) тушса, икки ҳодиса рўй беради: нурланишнинг маълум бир қисми жисм сиртидан қайтади, қолган қисми жисмга ўтади. Ўз навбатида жисм бўйлаб тарқалаётган нурланиш билан қуйидаги ҳодиса рўй беради: у қисман (ёки тўла) жисмда ютилади, қолган қисми жисмнинг нурланишга нисбатан шаффофлик даражасига бинноан, унинг қарама-қарши томонидан чиқиши мумкин. Қайтган нурланишнинг бир қисми кўзимизга тушиши туфайли биз у ёки бу жисмни кўра оламиз (албатта, агар жисмнинг ўзи нурланиш манбаи бўлмасдан, фақат қайтариш хусусиятига эга бўлса). Жисм нурларни қанча кам қайтарса, у шунча қорароқ туюлади. Агар ўзига тушган нурланишни қайтармасдан тўла ютиб қоладиган жисм бўлганда у бизга мутлақо қора туйиларди. Биз бундан буён *абсолют қора жисм* деганимизда худди шундай хусусиятга эга бўлган жисмни на-

зарда тутамиз. Абсолют қора жисм тушунчаси биринчи марта 1860 йилда Г. Р. Қирхгоф томонидан киритилган.

Нурланиш жисмда ютиლაётганда, албатта у ўзи билан энергия олиб ўтади. Натижада жисмнинг ички энергияси ортади ва мос равишда унинг температураси кўтарилади. Агар ҳар қандай жисм учун худди шу нурланиш жараёни воситасида муҳитга нисбатан ички ортиқча энергияни йўқотиш имконини берувчи механизм мавжуд бўлмаганда эди, абсолют қора (ва ҳар қандай) жисмнинг температураси вақт ўтиши билан ўз-ўзидан чексиз кўтарилиб кетарди (чунки ҳар қандай реал шароитдаги муҳитда чексиз кичик бўлса ҳам, нурланиш мавжуд). Мазкур механизмга биноан жисм ҳатто вакуумда жойлашган бўлса ҳам, яъни иссиқлик ўтказувчанлик ва конвекция мумкин бўлмаган ҳолда ҳам, ортиқча ички энергиясини йўқотади. Бу жараён фақат электромагнит нурланиш йўли билан юз беради. Ҳақиқатан ҳам ўзгармас ташқи муҳит шароитида абсолют қора, ҳатто, ҳар қандай бошқа жисм бирлик вақт ичида қанча нурланиш энергиясини ютса, у ўз ички энергиясидан шунчасини йўқотади ҳам. Чиқарилаётган нурланиш тўлқин узунлиги ультрабинафшадан инфрақизилгача ва бошқа соҳаларни ўз ичига олган узлуксиз спектрни ташкил этади.

Қора жисм нурланишини ўрганиш борасида вужудга келган ёндашишни кўрайлик.

Абсолют қора жисм. Идеал қайтарувчи моддий девордан ҳосил бўлган адиабатик қобиқ билан ўралган фазо — ёпиқ ковак мавжуд бўлсин. Фараз қилайлик, ковак деворида муайян температура сақлансин. У ҳолда Г. Р. Қирхгоф кўрсатганидек, ковакдаги мавжуд нурланиш қуйидаги хоссаларга эга. Биринчидан, фақат тўлқин узунликлар йиғиндиси учунгина эмас, ҳатто айрим тўлқин узунликлар учун ҳам нурланиш изотроп (ҳар қандай йўналишда бир хил) ва бир жинсли (ковак ичининг ҳар қандай нуқтасида бир хил) бўлади. Иккинчидан, у қора жисм нурланиши билан қуйидаги маънода айнан: бирлик сиртга вақт бирлигида тушган энергия вақт бирлигида қора жисмнинг бирлик сиртидан нурланган энергияга тенг. Бу ҳол тўлқин узунлиги бўйича бутун спектр учун ҳам, аниқ битта тўлқин узунлик учун ҳам ўринлидир.

Ковакдаги нурланишнинг изотроплиги ва бир жинс-

лилиги осон исботланади, акс ҳолда абадий двигатель қуриш мумкин бўлар эди. Фараз қилайлик, ковакда бир жинслилик ўринли эмас. У ҳолда ковак соҳасининг бирор нуқтасида нурланиш бошқа бирор нуқтасига қараганда катта интенсивликка эришиши мумкин. Икки бир хил ютиш қобилиятига эга бўлган жисмни шу икки нуқтага жойлаштирадик, маълум бир вақтдан сўнг иккинчи нуқтадагига нисбатан биринчи нуқтадаги жисм катта температурага эришади. Натижада иссиқлик машинаси учун улардан биринчисидан манба, иккинчисидан совиткич сифатида фойдаланиш мумкин. Шундай қилиб, бу ҳолда система ҳеч қандай ўзгаришсиз, ишчи куч манбаига айланар эди.

Ковакдаги нурланиш абсолют қора жисм нурланишига айланганлигини қуйидаги оддий мулоҳазалар ёрдамида тушунтириш мумкин. Фараз қилайлик, кичкина тирқишга эга ёпиқ, система — ковак берилган ва у ташқи муҳит билан фақат тирқиш орқали боғланган бўлсин. Тирқиш орқали ковак ичига ўтган нур ковакнинг ички сиртидан кўп марта қайтиб охири ковакда тўла ютилади. Инсон томонидан яратилган нурланиш энергиясини абсолют ютувчи жисмга энг яқин жисм — ношаффоф материалдан ясалган кичик тирқишли ковакдир. Мазкур кичик тирқишли ковак, аксинча, энг кўп нурланиш чиқара олувчи жисм ҳамдир. Агар биз тирқиш орқали нурланиш мавжуд бўлган ковак ичига қарасак, ковакнинг тирқишга қарама-қарши деворидан йўналган нурланишдан ташқари ковак деворининг бошқа қисмларидан шу қарама-қарши қисмга тушиб қайтган нурланишни ҳам кўрамиз. Шундай қилиб, ковак қанчалик кўп нурланиш ютса, у шунча кўп миқдорда энергия нурлайди.

Ковак ва абсолют қора жисм нурланиши ўртасида мувозанатни кўрайлик. Бунинг учун T температурага эга қора жисмни деворининг температураси T га тенг бўлган ковак ичига жойлайлик. Агар вақт бирлигида жисмнинг бирлик юзига тушаётган тўлқин узунлигининг бирлик интервалидаги λ тўлқин узунлики нурий энергия Φ_λ га тенг бўлса, абсолют қора жисм таърифига кўра бу энергиянинг ҳаммаси ютилади. Иккинчи томондан, бирлик вақт ичида абсолют қора жисм юзидан тўлқин узунлигининг бирлик интервалидаги нурланиш энергияси E_λ билан Φ_λ орасида мувозанат ҳолат юз бериши керак, акс ҳолда

бир хил температурадаги икки жисм ўртасида энергиянинг эркин узатилиши пайдо бўларди. Тажриба иссиқлик нурланиши воситаси орқалигина абсолют қора жисм билан қобиқ ўртасида нурланишнинг мувозанат ҳолати вужудга келишини кўрсатади. Бундан ташқари, абсолют қора жисм нурланиши билан боғлиқ бўлган катталиқ Φ_λ ни аниқлай олиш мумкинлиги абсолют қора жисмни реал асосга кўтаради.

Жисм билан нурланиш ўртасидаги мувозанатли энергия алмашинув ҳар бир тўлқин узунлик учун алоҳида бажарилиши керак. Ҳақиқатан, бирор тўлқин узунлик учун $E_{\lambda_1} > \Phi_{\lambda_1}$ мумкинлиги бошқа тўлқин узунликда тескари тенгсизликнинг $\Phi_{\lambda_2} \neq E_{\lambda_2}$ мавжудлиги билан компенсация қилиниб, тўлқин узунлигининг тўла соҳаси учун мувозанатни сақлаш мумкин бўлса, λ_1 ва λ_2 тўлқин узунликдан алоҳида фойдаланган ҳолда абадий двигатель қуриш мумкин бўлади. Демак, жисм билан нурланиш орасида мувозанатли ҳолат ҳар бир тўлқин узунликда энергия алмашинувнинг бир хил содир бўлишини тақозо қилади. Тажрибанинг кўрсатишича, юқоридаги шартни қаноатлаштирувчи фақат иссиқлик нурланишигина жисм билан мувозанат ҳолатдан ёпиқ системани ҳосил қилади.

Нурланишнинг бошқа турлари ҳам мавжуд, масалан, ёруғлик, радиотўлқин ва ҳоказо. Нурланиш электромагнит тўлқин табиатига эга бўлиб, унинг турлари бир-биридан тўлқин узунлиги (частотаси) билан фарқ қилади ва ҳар хил йўл билан вужудга келтирилади ва кузатилади. Нурланишнинг ҳамма турлари ягона назария нуқтаи назаридан қаралади.

2-§. Кирхгоф қонуни

Фараз қилайлик, берк қобиқ ичига қоралик даражаси ҳар хил бўлган иккита жисм жойлаштирилган бўлсин. Биз кўрдикки, бундай системада бирор вақт ўтиши билан термодинамика қонунига мувофиқ иссиқлик мувозанати ҳолати вужудга келади, яъни қобиқнинг ва ҳамма жисмларнинг температураси тенглашади. Ёпиқ система учун бу мувозанат ҳолат вақт ўтиши билан ўзгармайди. Мазкур мувозанат ҳолат чиқариш қобилияти катта бўлган ва шунинг учун кўп энергия чиқарувчи жисм кўп энергия

ютиши ва, аксинча, кам энергия чиқарувчи жисм кам энергия ютиши лозимлигини тақозо қилади. Демак, жисмнинг чиқариш қобилияти билан ютиш қобилияти ўртасида аниқ боғланиш мавжуд. Бу боғланишнинг миқдорий ифодасини кўрайлик.

Тажрибада қаралаётган бир неча жисм жойлаштирилган қобиқ бўшлиғидаги нурий энергиянинг вақт бирлигида бирлик юзга тушаётган тўлқин узунлигининг бирлик интервалидаги қисмини аввалгидек Φ_λ га тенг дейлик. Бу энергиянинг бир қисми — $\Phi_{\lambda_{\text{ют}}}$ жисмда ютилади, бир қисми — $\Phi_{\lambda_{\text{қ}}}$ жисмдан қайтади, қолган қисми $\Phi_{\lambda_{\text{ўт}}}$ эса жисмдан ўтиши мумкин, яъни энергиянинг сақланиш қонунига асосан ҳар қандай жисм юзига тушаётган нурланиш қуйидаги йиғинди кўринишида ифодаланади:

$$\Phi_\lambda = \Phi_{\lambda_{\text{ют}}} + \Phi_{\lambda_{\text{қ}}} + \Phi_{\lambda_{\text{ўт}}}. \quad (1.3)$$

Тенгликнинг иккала томонини Φ_λ миқдорга бўламиз:

$$\frac{\Phi_{\lambda_{\text{ют}}}}{\Phi_\lambda} + \frac{\Phi_{\lambda_{\text{қ}}}}{\Phi_\lambda} + \frac{\Phi_{\lambda_{\text{ўт}}}}{\Phi_\lambda} = 1. \quad (1.4)$$

Бу формуладаги биринчи нисбат жисмнинг ютиш қобилиятини характерловчи ўлчамсиз катталиқ — *спектрал ютиш коэффициенти* дейилади:

$$\frac{\Phi_{\lambda_{\text{ют}}}}{\Phi_\lambda} = a_{\lambda_{\text{т}}}. \quad (1.5)$$

Жисмнинг спектрал ютиш қобилияти ($a_{\lambda_{\text{т}}}$) унга тушаётган монохроматик нурий энергия оқимининг қанча қисми ютилишини характерлайди. Бу катталиқ нурланиш тўлқин узунлигига ва жисм температурасига боғлиқ. У (1.5) га биноан бирдан катта бўлиши мумкин эмас. (1.4) тенгликнинг чап қисмидаги иккинчи нисбат тушаётган монохроматик энергия оқимининг қанча қисми жисмдан қайтишини кўрсатувчи ўлчамсиз катталиқни беради. Учинчи нисбат эса тушаётган монохроматик нурланишга нисбатан жисмнинг шаффофлигини характерлайди.

Абсолют қора жисм таърифига кўра унинг ютиш қобилияти (1.5) тенгламага биноан $a_{\lambda_{\text{т}}} = 1$. Биз бундан буён $a_{\lambda_{\text{т}}} < 1$ бўлган жисмларни *кулранг жисмлар* деб атаймиз.

Биз юқорида кўрдикки, бир хил шаронтда чиқариш ва ютиш қобилияти ҳар хил жисм учун ҳар хилдир. Термодинамиканинг иккинчи принципига биноан термодинамик мувозанат шarti қўйидаги Кирхгоф қонунидан иборат. Ҳар қандай жисм учун нурланишнинг монохроматик спектрал зичлигини спектрал ютиш коэффициентига нисбати жисмнинг табиатига ёки унинг хоссасига боғлиқ бўлмасдан ҳамма жисмлар учун бир хилда бўлиб, фақат тўлқин узунлик ва температурага боғлиқ.

Кирхгоф қонунини қўйидагича осон исботласак бўлади. Фараз қилайлик, қобиқнинг девори фақат адиабатик бўлмасдан, кўзгу хусусиятига ҳам эга эллипсоид кўринишда бўлсин. Агар эллипсоид фокусларига икки жисм жойлаштирадик, биринчи жисмдан чиққан нурланиш $E_{1\lambda}$ тўла иккинчисига, иккинчисидан чиққан нурланиш $E_{2\lambda}$ тўла биринчисига етиб келади. Жисмда ютилган нурланиш $\Phi_{\lambda_{\text{ют}}}$ ни ундан чиққан нурланиш E_{λ} га тенглигини ҳисобга олсак, биринчи жисмга келиб тушган нурланиш ундан иккинчисига келаётган, яъни тушаётган нурланишга тенг ва у ўз навбатида иккинчидан биринчига тушаётган нурдир. Демак, иккала жисмга бир хил миқдорда нурланиш тушмоқда, масалан, Φ_{λ} . У ҳолда (1.5) га биноан биринчи жисм нурланиши

$$\Phi_{1\lambda_{\text{ют}}} = E_{1\lambda} = a_{1\lambda T} \cdot \Phi_{\lambda},$$

иккинчи жисм нурланиши

$$\Phi_{2\lambda_{\text{ют}}} = E_{2\lambda} = a_{2\lambda T} \cdot \Phi_{\lambda}$$

билан аниқланади. Бу икки тенгликдан Кирхгоф қонунининг исботи келиб чиқади, яъни

$$\frac{E_{1\lambda}}{a_{1\lambda T}} = \frac{E_{2\lambda}}{a_{2\lambda T}} = \dots \quad (1.6)$$

Демак, жисмларнинг нурланиш, чиқариш ва ютиш қобилиятининг ўзаро нисбати тўлқин узунлик ва температуранинг универсал функциясидир:

$$\frac{E_{\lambda}}{a_{\lambda T}} = f(\lambda, T). \quad (1.7)$$

Бу ифодалар абсолют қора жисмнинг муҳим роли ни яна бир марта таъкидлайди. Агар биз абсолют қора жисм нурланишини тўлқин узунлик ва температуранинг функцияси сифатида аниқласак, ҳар қандай жисм учун нурланиш қонуни аниқ бўлади. Чунки (1.7) формулага биноан абсолют қора жисмнинг нурланиш (чиқариш) қобилияти Кирхгофнинг универсал функциясига тенг. Бу ҳол ҳар қандай кулранг жисм учун, агар унинг нурланиш ютиш қобилиятини тўлқин узунлик ва температурага боғланиши аниқ бўлса, нурланиш қобилиятини ва, аксинча, нурланиш қобилияти аниқ бўлган ҳолда нурланиш ютиш қобилиятини аниқлашга имкон беради. Агар абсолют қора жисм спектрал монохроматик нурланиш (энергия чиқариш) қобилиятини $E_{\lambda T}$ орқали белгиласак, уни Кирхгофнинг универсал функцияси $f(\lambda, T)$ га тенглигини ҳисобга олган ҳолда ҳар қандай жисм учун Кирхгоф нурланиш қонунини қўйидагича ёзишимиз мумкин:

$$E_{\lambda} = a_{\lambda T} \cdot E^{\circ}_{\lambda T}. \quad (1.8)$$

Юқоридаги биз кўрган мулоҳазалар XIX аср охирларида абсолют қора жисм нурланиши проблемасига нисбатан катта қизиқиш уйғотган эди. Лекин энг қизиқарли натижаларнинг кўп қисми реал жисмлар нурланишининг спектрал тақсимланишини кузатиш борасида олинган маълумотларга асосланган эмпирик хулосалар характериға эга эди.

Шулар жумласидан 1879 йилда Й. Стефан томонидан олинган ягона эмпирик натижагина шу кунгача ўз қийматини йўқотмади.

3- §. Иссиқлик нурланишининг классик назарияси

Жисмнинг тўла нурланиш энергияси, албатта, температурага боғлиқ. Берилган температурада у (1.2) формулага кўра жисмнинг спектрал чиқариш қобилияти E_{λ} орқали аниқланади. Демак, асосий масала берилган температурада монохроматик спектрал нурланиш энергияси E_{λ} нинг ҳар хил тўлқин узунликлар бўйича тақсимланиш

қонунини аниқлашдан иборат. Абсолют қора жисм учун эса асосий масала берилган температурада Кирхгоф функцияси $f(\lambda, T)$ нинг тўлқин узунлик ёки нурланиш частотаси билан боғланишини аниқлашдир.

Эксперимент техникаси устида тўхталиб ўтирмасдан олинган натижаларни анализ қилсак, қўйидаги умумий хулосаларга келамиз:

1. Нурланиш интенсивлиги E_λ берилган температурада тўлқин узунлиги қийматлари — абсцисса бўйича аввал тез ўсувчи, λ нинг маълум қийматидан сўнг секин камаювчи ва максимум қийматига нисбатан асимметрик эгри чизиқ кўринишида бўлади.

2. Жисм температурасининг ошишида спектрал интенсивликнинг ҳамма қийматларининг тез ўсиши кузатилади. Юқори температурага тўғри келадиган нурланиш эгри чизиғи паст температурадагига нисбатан юқори жойлашади.

3. Нурланиш спектрал зичлигининг тўлқин узунлик бўйича тақсимоти ҳар хил температура учун турлича. Лекин ҳар қандай температурада ҳам асимметрик эгри чизиқнинг умумий кўриниши газ молекулаларининг тезлик бўйича тақсимотига ўхшаш характерга эга.

4. Қоралик даражаси ҳар хил бўлган реал жисмлар учун, берилган температурада нурланиш спектрал зичлигининг тақсимот эгри чизиғи ҳар хил бўлишига қарамасдан, бир хил характерга эга ва тахминан тўлқин узунликнинг бир қийматида максимумга эришади. Умуман, бир температурада кўп миқдорда ҳар хил жисмларнинг нурланишини ўрганиш билан ҳар хил эгри чизиқларни оламиз. Лекин уларнинг ҳеч бири худди шу температурадаги абсолют қора жисм нурланиш интенсивлиги эгри чизиғидан юқори бўла олмайди.

Экспериментлар натижаси нурланиш эгри чизиғи характерининг нурланувчи жисм табиатига боғлиқ эмаслигини кўрсатади.

Стефан — Больцман қонуни. Бирлик вақт ичида бирлик юздан нурланган тўла энергия нурланиш эгри чизиғи билан чегараланган юзга пропорционал бўлади ва қиймати (1.2) формула орқали аниқланади. Эмпирик йўл билан И. Стефан 1879 йилда ҳар қандай жисм учун тўла энергия, яъни энергетик ёритувчанлик E_s , иссиқлик нурланувчи

жисм абсолют температураси T нинг тўртинчи даражасига пропорционал эканлигини топди:

$$E_s = \int_0^{\infty} E_\lambda d\lambda = \sigma T^4, \quad (1.9)$$

бу ерда σ — ўзгармас катталиқ. Людвиг Больцман 1884 й. бу боғланишни назарий йўл билан абсолют қора жисм учун ҳосил қилади. Кейинчалиқ, абсолют қора жисм энергетик ёритувчанлигининг абсолют температуранинг тўртинчи даражасига боғлиқлигини кўрсатувчи (1.9) ифода *Стефан — Больцман қонуни* деб ном олди ва ўзгармас катталиқ σ — *Стефан — Больцман доимийси* деб аталди:

$$\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{град}^4. \quad (1.10)$$

1893 йилда Вильгельм Вин иккита муҳим қонуниятни баён қилди. Фараз қилайлик, юқорида биз келтирган қобиқнинг ички ҳажмини, масалан, унга адиабатик ўрнатилган поршенни силжитиш йўли билан кичрайтириш мумкин бўлсин. У ҳолда В. Вин таъбири билан айтганда, қобиқнинг бирлик ҳажмига тўғри келадиган нурланиш энергияси фақат энергияни кичик ҳажмга тўпланиши ҳисобигагина ортмасдан, балки нурланишнинг поршенга кўрсатган босими туфайли нурланишни сиқувчи поршеннинг ҳаракатида шу босимни енгиш учун иш бажарилиши ҳисобига ҳам ортади. Энергия зичлигининг бу икки сабабга кўра ортиши термодинамиканинг иккинчи қонунига биноан юз беради ва улар ўртасидаги нисбат тўла энергия зичлиги учун ҳам, тўлқин узунлиқнинг чексиз кичик интервалидаги энергия зичлиги учун ҳам бир хил.

Лекин, иккинчи томондан, Допплер эффекти туфайли поршеннинг ҳаракати натижасида ундан қайтган нурланишнинг тўлқин узунлигида ўзгариши содир бўлади. Демак, қобиқда температура ортиши энергия зичлигининг тўлқин узунлиқ бўйича тақсимоли ўзгариши билан юз беради. Бу мулоҳазалардан икки хил хулоса чиқади. Биринчидан, агар тўлқин узунлиқнинг функцияси бўлган икки хил физикавий катталиқ қийматларини икки хил температурада таққослаш лозим бўлса, бу қийматларни бир тўлқин узунлиқда олиш нотўғри бўлади. Бошқача айтганда, агар абсолют температура T да ва тўлқин узунлиқ λ да аниқланган физикавий катталиқни T' темпера-

турада аниқланган бошқа катталиқ билан таққослаш лозим бўлса, бу катталиқнинг $\lambda'T' = \lambda T$ шартни қаноатлантирган λ' тўлқин узунлиқдаги қийматини олиш керак.

Иккинчидан, абсолют қора жисмнинг бу тўлқин узунликларга тўғри келувчи спектрал зичлиги— $E_{\lambda, T}^{\circ}$ температура бўйича қуйидагича ўзгариши керак:

$$\frac{E_{\lambda, T}^{\circ}}{E_{\lambda', T'}^{\circ}} = \frac{T^5}{T'^5} \quad (1.11)$$

Чунончи, агар $E_{\lambda, T}^{\circ}$ температура ўзгармас бўлганда, тўлқин узунлиқнинг λ_m қийматида максимум $E_{\lambda_m}^{\circ}$ га эришса, температуранинг бошқа қийматлари учун қуйидаги муносабатлар ўринли бўлади:

$$E_{\lambda_m}^{\circ} \cdot T^{-5} = \text{const}, \quad (1.12)$$

$$\lambda_m T = \text{const}. \quad (1.13)$$

Бу икки муносабат биргаликда умумий ҳолда $E_{\lambda, T}^{\circ}$ учун қуйидаги ифодани беради:

$$E_{\lambda, T}^{\circ} = \lambda^{-5} F(\lambda, T) = T^5 \varphi(\lambda, T) \quad (1.12a)$$

Юқоридаги мулоҳазалар $F(\lambda, T)$ ва $\varphi(\lambda, T)$ функцияларни ошкор кўринишда аниқлашга олиб келмаса ҳам, лекин уларнинг λ ва T лар кўпайтмасининг функцияси эканлигини беради. (1.13) муносабат Виннинг силжиш қонуни деб юритилади. Доимийнинг қийматини, табиийки, $E_{\lambda, T}^{\circ}$ (ёки F ва φ) функцияни ошкор кўринишини билмасдан туриб аниқлаш мумкин эмас. Бу $\varphi(\lambda, T)$ ёки $F(\lambda, T)$ функцияни аниқлаш учун термодинамикадан фойдаланиб бўлмайди. Бунинг учун аниқ модель зарур, чунки термодинамикадан маълумки, нурланиш қонунининг кўриниши нурланиш механизмининг аниқ бир турига боғлиқ эмас.

Релей — Жинс формуласи. Классик статистика физикасининг энергиянинг тенг тақсимланиши теоремасига биноан электромагнит нурланишнинг ҳар бир эркинлик даражаси ўртача kT энергияга эга бўлади (k — Больцман доимийси). У ҳолда адиабатик ёпиқ қобиқ ичидаги нурланиш энергиясининг тўла қийматини аниқлаш шу ҳажмдаги электромагнит майдон эркинлик даражасининг тўла сонини аниқлаш масаласига ўтади.

Бунинг учун Релей ва Жинс ковакдаги мувозанатли электромагнит нурланишни турғун тўлқинлар система-сидан иборат деб ҳисобладилар. Турғун тўлқиннинг пайдо бўлиши учун бўшлиқ томонларини координата система-сининг Ox ўқи бўйича l_x га, Oy ўқи бўйича l_y га, Oz ўқи бўйича l_z га тенг бўлган тўғри бурчакли параллелепипед шаклида деб қараймиз. У ҳолда Ox ўқи бўйлаб турғун тўлқин пайдо бўлиш шарти қуйидагича ифодаланади:

$$l_x = m_x \cdot \frac{\lambda}{2} \quad (m_x = 0, 1, 2, \dots). \quad (1.14)$$

Oy ва Oz ўқлари бўйлаб пайдо бўлувчи турғун тўлқинлар учун ҳам (1.14) каби шартлар бажарилиши лозим.

Томонлари l_x , l_y , l_z бўлган тўғри бурчакли қобикдаги j -турғун тўлқин узунлигининг мумкин бўлган қиймати қуйидаги формула билан аниқланади:

$$\lambda_j = 2\pi \left[\left(\frac{m_x}{l_x} \right)^2 + \left(\frac{m_y}{l_y} \right)^2 + \left(\frac{m_z}{l_z} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (1.15)$$

m_x , m_y , m_z — ихтиёрий бутун сонлар.

j -турғун тўлқиннинг λ ва $\lambda + d\lambda$ интервалида тўлқин узунлигининг λ_j қиймати учун мумкин бўлган эркинлик даражаси сони эса

$$d_j = \frac{8\pi^2 V}{\lambda^4} d\lambda \quad (V = l_x l_y l_z \text{ — ковак ҳажми}). \quad (1.16)$$

Энди ҳар бир эркинлик даражасига ўртача kT энергия тўғри келишини ҳисобга олсак, V ҳажмда λ ва $\lambda + d\lambda$ интервалдаги тўла энергия (kT) $\cdot d_j$ га тенг. λ ва $\lambda + d\lambda$ интервалдаги нурланиш энергиясининг зичлиги эса қуйидаги Релей — Жинс формуласи билан аниқланади:

$$E_{\lambda T}^0 d\lambda = \frac{c}{4} \cdot \frac{kT}{V} d_j = \frac{2\pi^2 c kT}{\lambda^4} d\lambda$$

ёки

$$E_{\lambda T}^0 = \frac{2\pi^2 c}{\lambda^4} kT. \quad (1.17)$$

Нурланишни λ тўлқин узунлиги билан бир қаторда частота ω орқали ҳам характерлаш мумкин. $d\lambda$ тўлқин узун-

лик интервалига спектрнинг $d\omega$ қисми мос келади. Айнан бир соҳани характерловчи $d\lambda$ ва $d\omega$ лар ўзаро

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi c}{\omega} \quad (1.18)$$

формуладан келиб чиқувчи қуйидагича муносабатда боғланган:

$$|\lambda| \frac{c}{\nu^2} d\nu = \frac{2\pi c}{\omega^2} d\omega. \quad (1.19)$$

Одатда, формулаларда $d\lambda$ ёки $d\omega$ катталикларнинг фақат абсолют қийматларигина қатнашади. Бу муносабатлар ёрдамида Релей — Жинс формуласининг частота орқали ифодаси қуйидагича ёзилади:

$$E_{\lambda T} = \frac{kT}{4\pi^2 c^2} \omega^2. \quad (1.20)$$

Релей — Жинс формуласи ҳар қандай ҳол учун ўринли бўлган ва термодинамикадан тўғридан-тўғри келтириб чиқарилган Виннинг силжиш қонунига мувофиқдир.

Ультрабинафша ҳалокат. Нурланишнинг узун тўлқинлар соҳасида, яъни ν нинг кичик қийматларида ҳам нурланишнинг Релей — Жинс қонуни шу соҳада частота квадратига пропорционал ўсувчи нурланиш интенсивлиги тақсимотининг экспериментал эгри чизиғи билан яхши мос келади. Экспериментдан биламизки, нурланиш интенсивлиги маълум бир частотада максимумга эришиб, сўнгра яна пасаяди. Аммо, бу ҳолни Релей — Жинс формуласи акс эттира олмайди, чунки юқорида келтирилган формулада ҳеч қандай максимум кўринмайди. Аксинча, Релей — Жинс формуласига биноан нурланишнинг спектрал интенсивлиги юқори частоталар чегарасида (яъни қисқа тўлқинлар соҳасида) ҳам частотанинг квадрати кўринишида ўсиши керак. Нурланишнинг тўла энергияси учун ҳам худди шу ҳол ўринли, яъни

$$E_s = \int_0^{\infty} E_{\lambda} d\lambda = \int_0^{\infty} E_{\nu} d\nu = \infty \quad (1.21)$$

тегишли интеграллар узоқлашади. Бу ҳол физика тарихида «ультрабинафша ҳалокат» номи билан маълум. Релей — Жинс формуласининг тажрибага мос келмаслиги, «ультрабинафша ҳалокат» га олиб келиши классик электро-

динамика, статистик физика доирасига тўғри келмайдиган қандайдир бошқа тасаввур ва қонуниятларнинг мавжудлигидан дарак беради.

Биз юқорида қўшимча ғоя жалб қилмасдан фақат классик назария асосида келтириб чиқариш мумкин бўлган муносабатларни кўриб чиқдик. Ҳақиқатан, Вин ўзининг 1896 йилда эълон қилган илмий мақоласида нурланиш энергиясининг частота бўйича тақсимотини газ молекула-ларининг тезлик бўйича Максвелл тақсимотига ўхшаш деб анча илгари қадам қўйди:

$$E_{\lambda}^{\circ} \tau = A \lambda^{-5} e^{-B/\lambda T}. \quad (1.22)$$

Бу ерда A , B — доимийлар. Вин формуласига биноан частота бўйича энергия тақсимоти эгри чизигида максимум соҳа мавжуд. Бироқ Вин тақсимоти формуласи тажрибада тасдиқланмади. У абсолют қора жисм спектрида энергия тақсимоти эгри чизигининг фақат қисқа тўлқин қисминигина ифодалай олар экан.

4- §. Люммер — Прингсгейм тажрибаси

Шундай қилиб, икки аср чегарасида классик физикада иссиқлик нурланиши назариясига оид вазият янги ғоя талаб қилар эди. Шундай бир вазият ҳукм суриб турганда ҳал қилувчи тажриба Люммер ва Прингсгейм томонидан ўтказилди. Улар ўзларининг тажриба методикасини асослаш учун ковак нурланиши билан абсолют қора жисм нурланиши ўртасидаги эквивалентликдан қўйидагича фойдаландилар. Ковак деворида кичкина тешик мавжуд деб фарз қилайлик. Тешик юзи ковак деворлари сиртининг умумий юзидан етарлича кичик бўлсин. У ҳолда, ташқаридан шу тешикка тушаётган ҳар қандай нурланиш деярли тўла ковак ичига ўтади. Шундай қилиб, тешик ковак хусусиятини абсолют қора жисм хусусиятига жуда яқинлаштиради (абсолют қора жисмга тушган нурланиш бутунлай ютилиши керак). Тешик орқали ташқарига чиққан нурланиш эса биз юқорида абсолют қора жисм нурланишига эквивалентлигини исботлаган ковак нурланиши

билан айнандир. Демак, ковак тешигидан чиққан нурланишнинг хоссаларини текшириш абсолют қора жисм нурланиши ҳақида маълумот беради.

Иزلанишнинг биринчи босқичи Стефан — Больцман қонунини текширишдан иборат бўлиб, тажриба натижасига биноан бу қонун тўғри деб топилди. Иккинчи босқичда берилган температурада нурланиш қобилиятининг тўлқин узунлик бўйича ўзгариши масаласи қўйилди. Масала, аввал нурланишни призмали спектрометр ёрдамида ажратиш, сўнгра қувватини ўлчашдан иборат эди. Тажриба натижаларини тасвирлашнинг бир усули, албатта, ҳар хил температураларда $E_{\lambda, T}^{\circ}$ ни λ нинг функцияси сифатида чиизишдир (1-расм). Люммер ва Прингсгейм мазкур боғланишдан спектрал зичлик $E_{\lambda, T}^{\circ}$ максимумига тўғри келган тўлқин узунлигининг λ_m қийматини ва $E_{\lambda, T}^{\circ}$ нинг максимумдаги қиймати $E_{\lambda_m}^{\circ}$ ни аниқладилар. Бу қийматлар ёрдамида (1.12) ва (1.13) ифодаларнинг тўғрилиги текшириб кўрилди.



1-расм. Абсолют қора жисм нурланиш интенсивлигининг тўлқин узунлик бўйича ҳар хил температурада тақсимланиши. Эгри чизиқлар Люммер ва Прингсгейм (крестлардан ўтказилган узлуксиз чизиқлар) тажрибасидан олинган. Доирачалардаги крестлардан ўтказилган узлукли чизиқлар (1.22) дан келиб чиқади.

ган узлуксиз чизиқлар) тажрибасидан олинган.

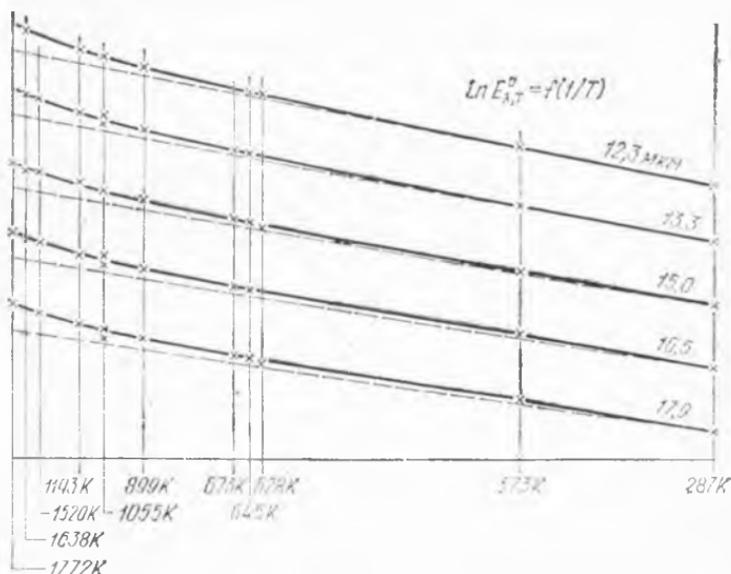
лардан ўтказилган узлукли чизиқлар (1.22)

дан келиб чиқади.

Нурланиш энергиясининг частота бўйича тақсимотини тажриба натижалари билан таққослаш учун Люммер ва Прингсгейм ўз натижаларини Виннинг (1.22) формуласи билан солиштирди. Бунинг учун улар (1.22) формулани кўйидаги кўринишга келтирадилар:

$$\lg E_{\lambda, T}^{\circ} = \lg (A \cdot \lambda^{-5}) - \frac{B}{\lambda} (\lg e) \frac{1}{T}. \quad (1.23)$$

Агар $y = \lg E_{\lambda, T}^{\circ}$, $a = \lg (A \cdot \lambda^5)$, $b = -\frac{B}{\lambda} \lg e$ ва $x = \frac{1}{T}$ деб алмаштирсак, (1.23) ифода $y = a + bx$ кўринишга келади. Демак, Вин формуласига биноан, берилган λ да $\lg E_{\lambda, T}^{\circ}$ нинг $1/T$ га боғлиқлик графиги, яъни изохромата деб аталувчи чизиқ қиялик (тангенс) бурчаги b га пропорционал тўғри чизиқдан иборатдир. Изохроматанинг $\lg E_{\lambda, T}^{\circ}$ ўқ билан кесишган кесмаси берилган λ учун a нинг қийматини кўрсатади. Вин формуласининг келтириб чиқарилишида асос бўлган мулоҳазаларга кўра B коэффициент универсал дои-



2- расм. Изохроматалар тўплами.

мий, A коэффициент эса фақат ҳар бир эксперимент учун ўзгармас бўлиши керак.

Люммер ва Прингсгейм ўз тажрибаларининг аниқлигини ошириш йўли билан (1.22), яъни (1.23) ифодаларнинг нотўғрилигини изохроматаларнинг эгриликка эга эканлигини аниқладилар. Тажриба натижалари 2-расмда тасвирланган.

5-§. Планк формуласи

Планк тажриба натижаларига асосланиб (1.22) формулани ўзгартиришга ҳаракат қилди. Абсолют қора жисм учун тегишли тақсимот қонунининг абсолют характерга эгаллигини, яъни нурланиш ковак деворларига боғлиқ эмаслигини Планк ўз изланишида ковак деворларини гармоник осцилляторлар сифатида тасвирлаш билан қўлади. Планк олдида турган масала гармоник осцилляторлар ансамбли учун термодинамик катталиқ — энтропияни ҳисоблаш эди, чунки биринчи томондан, биз юқорида кўрганимиздек, ковак ичида мувозанат ҳолат ковакни абсолют қора жисм нурланиши билан тўлдирилганида юз беради. Иккинчи томондан эса, системанинг мувозанат ҳолатида энтропия максимал қийматга эришади.

1877 йил Больцман кўрсатганидек, бирор ҳолат энтропияси шу ҳолатнинг вужудга кела олиш эҳтимоллиги ўлчовидир. Иккинчи томондан эса, худди шу эҳтимолликни, осцилляторлараро энергия тақсимотининг мумкин бўлган усулларини тенг эҳтимолли деб фараз қилиб, тақсимланиш усуллари сонини санаш билан аниқласа бўлади. Аммо бу хил санаш энергияни ихтиёрий узлуксиз қийматлар эмас, балки фақат узлукли, дискрет ва, демак, бирор асосий энергия бирлиги ϵ га, яъни квантига карралаи қийматлар қабул қилади деб ҳисоблаганимиздагина мумкин. Планк, шунинг учун, осциллятор энергиясини асосий энергия бирлиги ϵ га пропорционал ва асосий энергия бирлиги эса осциллятор частотасига пропорционал $\epsilon = h\nu$ деб қабул қилди. 1900 йилда Планк юқоридаги тажриба натижаларини ҳисобга олган ҳолда ва келтирилган мулоҳазалар асосида нурланишнинг қуйидаги формуласини Немис физика жамиятида эълон қилади:

$$E_{\lambda, T}^0 = \frac{8\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)}, \quad (1.24)$$

h — Планк доимийси, k — Больцман доимийси, c — ёруғлик тезлиги.

Бу ифода эксперимент натижаларини жуда яхши тавсифлайди. Иккинчи томондан, тўлқин узунлигининг ёки температуранинг кичик қийматларида, яъни $h\nu/kT \gg 1$ да (1.24) ифоданинг махражидаги экспонента бирдан каттадир. Бу ҳолда махраждаги бирни ҳисобга олмасак, кичик тўлқинларда нурланишнинг тақрибий қонуни — Виннинг (1.22) формуласига келамиз.

Тўлқин узунлиги λ нинг ёки температура T нинг катта қийматларида, яъни $h\nu/kT \ll 1$, экспонентани $h\nu/kT$ нинг даражалари бўйича қаторга ёйиш мумкин. Қаторнинг биринчи ҳади Релей — Жинс қонуни (1.20) ни беради.

Абсолют қора жисм учун энергетик ёритувчанликни ҳисобласак, Стефан — Больцман қонунини ҳосил қиламиз:

$$E_s = \int_0^{\infty} E_{\lambda, T} d\lambda = \sigma T^4. \quad (1.25)$$

Ниҳоят, Планк формуласидан Виннинг силжиш қонунини келтириб чиқарамиз. (1.24) функциянинг максимумини қидирайлик. Бунинг учун (1.24) функцияни λ га nisбатан биринчи ҳосиласини нолга тенглаймиз.

$$\frac{dE_{\lambda, T}}{d\lambda} = 8\pi c^2 h \frac{(hc/\lambda kT) e^{hc/\lambda kT} - 5(e^{hc/\lambda kT} - 1)}{\lambda^6 (e^{hc/\lambda kT} - 1)^2} = 0. \quad (1.26)$$

Бу тенглама суратидаги ифодани нолга айланттирувчи $\lambda = \lambda_m$ қийматда функция $E_{\lambda, T}$ ўз максимумига эришади. $\lambda = \lambda_m$ қиймат қуйидаги трансцендент тенгламанинг ечимидир:

$$x \cdot e^x - 5(e^x - 1) = 0.$$

Трансцендент тенгламани ечсак, $x = 4,965$, демак, $hc/\lambda_m kT = 4,965$, бундан

$$\lambda_m T = \frac{hc}{4,965 \cdot k} = \text{const}. \quad (1.27)$$

(1.26) тенгламани қаноатлантирувчи $\lambda = 0$ ва $\lambda = \infty$ ечимлар $E_{\lambda, T}$ функциянинг минимумларини беради.

Демак, Планк формуласи мувозанатли иссиқлик нурланишининг тугалланган тафсилотини беради.

Шундай қилиб, квант назариясининг вужудга келиши классик назарияга ғоят зид, бегона бўлган, мутлақо янги тушунча киритишни тақозо қилувчи эксперимент натижаси билан боғлиқ. Демак, баъзи системаларда энергия ихтиёрий узлуксиз қиймат қабул қилолмайди, бундай системалар коинотнинг қолган қисми билан дискрет миқдорли энергия, яъни квантлар билан энергия алмашади.

Планкнинг квантлар ҳақидаги янги ғояси битта эксперимент натижаларини тушунтириш билан боғлиқ бўлганда, албатта, у ўзида унчалик қизиқиш уйғотмаган бўлар эди. Квантлар ғояси даставвал бир эксперимент натижаларини тушунтиришда ягона тўғри йўл кўрсатиб ҳаммани қойил қилган бўлса, кейинчалик эса бу ғоя асосида янги ғояларнинг туғилиши одат тусига кириб қолди.

6-§. Планк доимийсини оптикавий пирометрия йўли билан аниқлаш

Вин қонунини ифодаловчи $\omega \sim T$ боғланиш кундалик тажрибадан маълум. Уй температурасида жисмларнинг нурланиши оддий кўз билан сезиб бўлмайдиган инфрақизил соҳада юз беради. Биз бу нурланишни қиздирилган жисмлардан келувчи иссиқлик сифатида сезамиз. Жисм температурасининг кўтарилишида кўзга кўринувчи даставвал тўқ қизил, сўнгра, оч қизил, ниҳоят, сарғиш ва ҳатто, оқ нурланиш ҳосил бўлади. Бу ҳолни математик тарзда Виннинг (1.13) қонуни тавсифлайди. Температуранинг қиздирилган жисм рангига боғлиқлиги фанда ҳам қўлланилади. Чунончи, шу йўл билан Қуёш фотосферасининг температураси аниқланган. Жисм нурланишини текшириш йўли билан унинг температураси аниқланади. Юқори температурани аниқлашда айтилган мулоҳазаларга асосланган оптикавий методлар кенг қўлланилади. Жисмнинг иссиқлик нурланишини ўлчаш йўли билан температурасини аниқловчи асбобга *оптикавий пирометр* дейилади. Оптикавий методлар ёрдамида температурани аниқлаш йўллари урганувчи амалий физика соҳасига *оптикавий пирометрия* дейилади.

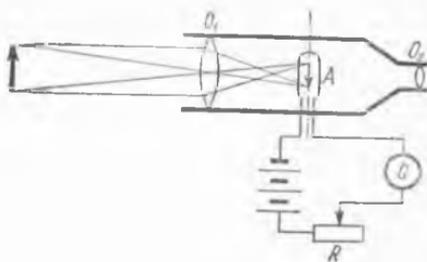
Оптикавий пирометрия методида кузатилаётган жисм нурланишининг бирор характеристикаси билан абсолют қора жисм нурланишининг худди шундай характери-

каси солиштирилади. Одатда, нурланиш характеристикаларини таққослаш нурланишларнинг интеграл ёки спектрал интенсивлигининг тенглигига ёки спектрал таркибининг айнанлигига асосланади. Уч хил таққослашга мос равишда жисмнинг нурланиш қобилияти ва термодинамик температуранинг функционали бўлган уч хил: энергетик (радиацион) $T_{эн}$, рангли $T_{ранг}$, равшанлик (қора) $T_{равш.}$ температураларини фарқ қиладилар.

Энергетик ёки радиацион температура деб, ёритувчанлиги кузатилаётган жисм энергетик интеграл ёритувчанлигига тенг абсолют қора жисм температураси тушунилади. Берилган икки тўлқин узунлик учун энергетик спектрал равшанликлар нисбати абсолют қора жисмнинг худди шу тўлқин узунликлардаги энергетик спектрал равшанликлари нисбатига тенг бўлганда абсолют қора жисм температураси рангли температура деб юритилади. Ниҳоят, равшанлик температураси деб кузатилаётган нурланиш спектрал энергетик равшанлигига шу тўлқин узунликда спектрал энергетик равшанлиги тенг абсолют қора жисм температураси тушунилади.

Биз равшанлик температурасини ўлчайдиган оптикавий пирометрни кўрамиз. Равшанлик пирометрининг принципал схемаси 3-расмда берилган. Қиздирилган жисмнинг температурасини ўлчаш толаси ғойиб бўлувчи оптикавий, яъни равшанлик пирометрида бажарилади. Бунинг учун кузатилаётган жисмнинг объективдаги тасвирини объектив фокусига жойлашган ва қиздирилган тола билан солиштирилади. Шу методни батафсилроқ кўрайлик.

Маълум температурага ча қиздирилган қора жисмнинг объективдаги тасвирига лампа толаси A жойлашган бўлсин. Жисм ва тола кузатиладиган окуляр O_2 олдига ҳамма спектрдан маълум тўлқин узунликка ($\lambda = 0,66$ мк) эга нурланишни ажратиб берувчи фильтр жойлаштирамиз. Тола кўздан ғо-



3- расм. Равшанлик пирометри:

A — ток билан чўғлантириладиган тола;
 O_1 — объектив; O_2 — окуляр; G — реостат
 орқали уланган гальванометр.

йиб бўлгунча лампа толасининг электр токини реостат ёрдамида ўзгартирамиз. Берилган ёруғлик тўлқин узунлигида қиздирилган жисм тасвири фонида толанинг кўздан ғойиб бўлиши тола ва жисм равшанлиги тенглашганда юз беради. Толадаги ток қийматини билган ҳолда тажрибани қора жисмнинг ҳар хил температуралари учун ўтказилади ва ҳар гал ток ва температура қийматларини солиштириб улар ўртасидаги мослик аниқланади. Энди лампа толасини термометр сифатида қўллаш мумкин. Масалан, бирор кулранг жисм температурасини аниқлаш учун унинг нурланиш фонида толанинг кўздан ғойиб бўлиш токига тўғри келадиган абсолют қора жисм температурасини аниқлаш керак.

Биз маълум тўлқин узунликда абсолют қора жисм равшанлигига тенг равшанликка эга кулранг жисм температурасини аниқладик. Лекин у кулранг жисмнинг ҳақиқий температурасига тенг бўлмайди. У фақат жисм нурланиши равшанлигининг температурасини беради. Равшанлик температураси ҳар доим ҳақиқий температурадан паст бўлади, чунки берилган бир хил температурада ҳар қандай кулранг жисм абсолют қора жисмга нисбатан кам нурланиш чиқаради. Демак, абсолют қора жисм билан бир хил равшанликка эришган кулранг жисмнинг ҳақиқий термодинамик температураси абсолют қора жисм температурасидан юқори.

Абсолют қора жисм ва кулранг жисм равшанликларини мос равишда $R^{\circ}(\lambda, T)$ ва $R(\lambda, T)$ орқали белгиласак, абсолют қора жисм равшанлиги температураси унинг ҳақиқий температурасини кўрсатишини ҳисобга олиб қуйидаги муносабатни ёзишимиз мумкин:

$$R^{\circ}(\lambda, T_{\text{равш.}}) = R(\lambda, T). \quad (1.28)$$

Ҳар бир спектрал ташкил этувчи нурланиш учун

$$E_{\lambda, T} = \pi R(\lambda, T) \quad (1.29)$$

ва $E_{\lambda T}$ учун эса (1.7) формулани эсласак, қуйидаги муносабатга келамиз:

$$R(\lambda, T) = \frac{1}{\pi} a_{\lambda, T} f(\lambda, T). \quad (1.30)$$

Абсолют қора жисм учун $a_{\lambda, T} = 1$ эканлигини ҳисобга олиб (1.28) тенгликнинг ҳар икки томонига равшанликнинг (1.30) ифодасини қўямиз ва нурланувчи жисмнинг ҳақиқий температурадаги ютиш қобилияти учун қуйидаги ифодага келамиз:

$$a_{\lambda, T} = \frac{f(\lambda, T_{\text{равш.}})}{f(\lambda, T)}. \quad (1.31)$$

Абсолют қора жисмнинг спектрал монохроматик нурланиш энергияси чиқариш қобилияти $E_{\lambda T}$ учун (1.24) ифодани ва $E_{\lambda T}^0$ ни Қирхгофнинг универсал функцияси $f(\lambda, T)$ га тенглигини эсласак, (1.31) учун аниқ ифодага келамиз:

$$a_{\lambda, T} = \frac{e^{hc/\lambda kT} - 1}{e^{hc/\lambda kT_{\text{равш.}}} - 1}. \quad (1.32)$$

$\lambda = 0,66$ мк, $T \sim T_{\text{равш.}} \sim 3000^\circ$ К деб қарасак, экспонента даражаси тахминан 7 га тенг бўлади, яъни $e^7 \gg 1$. Шунинг учун (1.32) ифоданинг сурат ва махражидаги бирни ташлаб юборсак,

$$a_{\lambda, T} = e^{(hc/\lambda k)(1/T - 1/T_{\text{равш.}})} \quad (1.33)$$

бўлади (1.33) дан бизни қизиқтираётган температура учун қуйидаги ифодани ҳосил қиламиз:

$$T = \frac{T_{\text{равш.}}}{\lambda + (\lambda k/hc) \ln a_{\lambda, T} \cdot T_{\text{равш.}}}. \quad (1.34)$$

$T_{\text{равш}}$ температуранинг ҳақиқий термодинамик температура T га яқинлигини назарда тутиб T нинг биринчи тартибли тузатиш ҳадини ҳисоблаймиз:

$$\Delta T = -\frac{\lambda k}{hc} \ln a_{\lambda, T} \cdot T_{\text{равш.}}^2 = -\frac{\lambda T_{\text{равш.}}^2}{9568} \lg a_{\lambda, T}. \quad (1.35)$$

у ҳолда

$$T = T_{\text{равш.}} + \Delta T. \quad (1.36)$$

Стефан — Больцман қонунига биноан температураси T га тенг абсолют қора жисмнинг бирлик юзидан температураси T_m га тенг абсолют қора муҳитга ўтган иссиқлик миқдори

$$W = \sigma (T^4 - T_m^4) \quad (1.37a)$$

бўлади, бунда σ — Стефан—Больцман доимийси.

Кулранг жисмлар нурланишининг тақсимот характери абсолют қора жисм спектрига ўхшашдир. Шунинг учун кулранг жисмлар учун ҳам

$$W = \sigma [\alpha(T) \cdot T^4 - \alpha(T_{\text{км}}) \cdot T_{\text{км}}^4]. \quad (1.376)$$

Бу ерда $\alpha(T)$ — жисмнинг қоралик даражаси ёки коэффициенти, $T_{\text{км}}$ — кул ранг муҳит температураси.

Агар биз толани қиздириш учун сарф бўлган электр қувватини аниқласак, у бирлик вақт ичида объект ўзидан Стефан — Больцман қонуни бўйича йўқотаётган энергия миқдорига тенг бўлади:

$$IV = \sigma S [\alpha(T) \cdot T^4 - \alpha(T_{\text{км}}) T_{\text{км}}^4] \approx \sigma S \alpha(T) T^4, \quad (1.38)$$

S — нурланувчи жисм юзи; I — толадаги электр ток кучи V — кучланиш. (1.38) ифодадан ва биринчи марта Планк келтириб чиқарган

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} \quad (1.39)$$

муносабатдан Планк доимийсининг сон қийматини аниқлаш мумкин. (1.38) да $\alpha(T)$ тажриба учун берилган бўлади.

КВАНТ НАЗАРИЯСИ АСОСЛАРИ

7-§. Ёруғликнинг корпускуляр ва зарраларнинг тўлқин табиати

Ёруғликнинг корпускуляр табиати. Планкнинг квантлар ғоясига биноан жисмларнинг нурланиш энергиясини ютиш ва чиқариш жараёни узлукли равишда юз беради. Бу ғоя классик механика ва классик статистика еча олмаган иссиқлик нурланиши муаммосини ҳал қилиб жисмлар иссиқлик нурланишининг тугал назариясини яратишга олиб келганлигини биз I бобдан кўрдик. Шу давргача физикавий катталиклар фақат узлуксиз ўзгарувчи катталиклар бўлиб ҳисобланар эди. Узлуксиз катталиклар ўрнига узлукли, дискрет ўзгарувчи катталиклар киритилиши фан тарихида буюк революцион қадам бўлди.

Лекин Планк ғояси ёруғликнинг классик электродинамика назариясини тамомила янги асосга кўчириш зарурлигини кўрсатмади. Планк ғоясига биноан нурланиш энергиясининг жисмларда ютилиш ва чиқарилиш жараёни янги асосда тушунтирилса ҳам, лекин нурланишнинг тарқалиш жараёнлари ҳали ҳам классик назария қонунларига бўйсунганича қолган эди. Планк ғояси нурланишнинг, яъни ёруғликнинг табиати ҳақида ҳеч қандай маълумот бермади.

1905 йил Альберт Эйнштейн ўзининг учта машҳур илмий ишларини эълон қилди. Шулардан бири ташқи фотоэффектга оид эди. Бу ишида Эйнштейн Планкнинг нурланиш квантлари ғоясини янада олға суриб, квант хусусият умуман ёруғликка тегишли хусусиятдир, деб ҳисоблашни таклиф этди. Эйнштейннинг ёруғлик квантлари ҳақидаги ғоясига биноан ёруғлик $h\nu$ энергияга эга ва ёруғлик тезлигида ҳаракат қилувчи квантлардан — фотонлардан иборатдир ва у фотонлар тарзида нурланади, тарқалади, ютилади, яъни у фотонлар сифатида мавжуддир. Фотонлар ғояси Планкнинг революцион квантлар ғоясининг маҳсули

бўлиб, ўта дадил фикр эди. У квантлар проблемасини ёруғликнинг порциялардан, улушлардан иборатлигини бевосита исботлаш билан ечишни талаб қилар эди.

XX аср бошларида ёруғликнинг классик тўлқин назарияси асосида тушунтириб бўлмаган бир қатор экспериментлар мавжуд эди. Фотонлар ғоясининг тўғрилиги шу экспериментларни тушунтириш билан исботланди. Бунинг учун Эйнштейн корпускуляр хусусиятни характерловчи механик (кинетик) энергияга ёруғлик энергияси тўғридан-тўғри айланишини амалга оширадиган фотоэффект (Г. Герц, 1887 й., А. Г. Столетов, 1888—1889 йй., Ленард 1898—1902 йй.) экспериментети натижаларини исботлади.

Де-Бройль тўлқини. Биз юқорида электромагнит нурланишнинг баъзан тўлқин, баъзан зарра сифатида намоён бўлишлигини кўрдик. 1924 йилларга келиб электромагнит нурланиш ҳақидаги тўлқин-зарра дуализми умум қабул қилинган нуқтаи назарга айланган эди. Худди шу йили француз физиги аспирант Луи де-Бройль тўлқин-зарра дуализми ҳамма бошқа зарралар ва жисмлар учун ҳам ўринли бўлиши керак, деган жуда кутилмаган гениал фикрни ўртага ташлади. Чунончи, у, энергия ва импульс каби корпускуляр характеристикалар ўртасидаги муносабат бир томондан, тўлқин узунлик ва частота каби тўлқин характеристикалари ўртасидаги муносабат иккинчи томондан, модда ҳамда нурланиш учун бир хилдир, деган ғояни илгари сурди. Натижада ҳам ёруғликка, ҳам моддага тегишли корпускуляр ва тўлқин хоссаларнинг синтези вужудга келади. Ёруғлик учун ҳам, модда учун ҳам корпускуляр ва тўлқин хоссалар ўртасидаги боғланиш бир хил тенгламалар билан тасвирланади.

Бу тенгламаларни ҳосил қилиш осон. Энергиянинг релятивистик ва квант ифодасидан фотон энергияси ва импульси билан ёруғлик тўлқини ва частотаси ўртасидаги қуйидаги боғланишни аниқлаш мумкин:

$$E = h \nu = \frac{hc}{\lambda},$$

$$p = E/c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Агар тўлқин сонини киритсак: $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c}$ импульс учун

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad \hbar = h/2\pi \quad (2.1)$$

тенгликни ҳосил қиламиз. (2.1) муносабат де-Бройль томонидан ҳамма зарраларга татбиқ қилинди. (2.1) га биноан p импульс билан ҳаракат қилаётган массаси m га тенг зарранинг тўлқин узунлиги

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (2.2)$$

орқали аниқланади. Бу тўлқин узунлик зарранинг де-Бройль тўлқин узунлиги деб аталади.

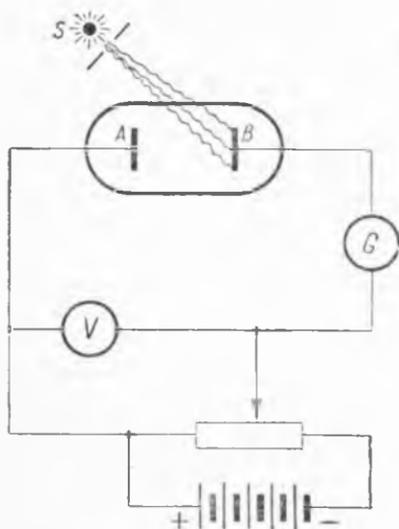
Модда ёки зарра тўлқин хусусиятларини де-Бройль-гача сезилмаганлигининг сабаби макроскопик миқдор билан характерланувчи модда учун де-Бройль тўлқин узунлигининг жуда кичиклигидир. Масалан, массаси 10^{-6} грамм, тезлиги 1 мм/сек бўлган чанг заррачасининг де-Бройль тўлқин узунлиги

$$\lambda = \frac{6,6 \cdot 10^{-27}}{10^{-6} \cdot 10^{-1}} = 6,6 \cdot 10^{-20} \text{ см.}$$

Демак, заррача ўлчамларига нисбатан унинг де-Бройль тўлқин узунлиги таққослаб бўлмайдиган даражада кичик экан. Албатта, бундай шароитда ҳеч қандай тўлқин хусусияти сезилмайди. Зарранинг тўлқин хусусиятларини кузатиш учун ўлчамлари де-Бройль тўлқин узунлиги тартибда бўладиган атом масштабидаги объектларни олиш керак. Шунинг учун дастлаб де-Бройль ғояси кўпчилик физиклар эътиборидан четда қолган эди.

8- §. Фотоэлектрик эффект

Фотоэлектрик эффектга доир экспериментнинг принципиал схемаси 4-расмда берилган. Юқори вакуум шароитида бўлган A ва B металл пластинкалар орасида потенциаллар фарқи мавжуд бўлсин. Пластинкалар вакуумга жойлашганлиги сабабли занжирда ток йўқ, занжир узўқ. Агар металл пластинкалардан бири — B нинг ички сиртига ёруғлик нури туширсак, занжирда ток пайдо бўлганлигини гальванометр G кўрсатади. Занжирда токнинг пайдо бўлиши ёруғлик таъсирида ажралиб чиққан зарядлар манфий ишорага эга бўлишини кўрсатади (А. Г. Столетов, 1888—1889 йиллар). Электрон кашф этилгандан кейин бу ажралиб чиққан зарядлар электронлар эканлигини 1898 йил Ленард ва Томсон кўрсатдилар.



4- расм. Фотоэффект тижрибасининг схемаси:

A — коллектор; B — эмиттер; G — гальванометр; V — вольтметр; S — интенсивлиги ва тўлқин узунлиги ўзгармас ёруғлик манбаи.

жуддир. U ҳолда $e\phi$ энг кўп энергияга эга электронни металдан ажратиш учун зарур бўлган энг кам энергияни билдиради.

Электроннинг кашф этилиши биланоқ фотоэлектрик эффектни тушунтириш учун металл электронлари ва ёруғлик тўлқини электр майдонининг ўзаро таъсирлашуви ҳақида фикр эътибор қозонди.

Агар фотоэлектрик эффектда қатнашаётган металл электронларини эркин деб фараз қилсак, мавжуд классик назарияга биноан, берилган интенсивликдаги ёруғлик частотаси ортиши билан электронларнинг кинетик энергияси камайиши керак, яъни катта тўлқин узунликдаги ёруғлик таъсиридагина металдан электрон чиқиши мумкин. Ҳақиқатан ҳам, ёруғлик тўлқинининг электр майдони $E \cos \omega t$ таъсирида металдаги эркин электроннинг ҳаракат тенламаси қуйидагича ёзилиши керак:

Даставвал чиқиш иши тушунчасига тўхталиб ўтайлик. Шу нарса равшанки, жисм (масалан, металл) билан электроннинг боғланиш энергияси мавжуд бўлиши керак, акс ҳолда электронлар жуда кучсиз электр майдонда жисмдан ажралиб чиқиши мумкин бўлар эди. Электроннинг қаттиқ жисмда боғланиш энергиясини электронвольтларда ўлчанувчи $e\phi$ орқали белгилайлик. ϕ — вольтларда ўлчанувчи чиқиш иши. $e\phi$ қиймат электронни металдан ажратиш учун электронга зарур бўлган минимал энергиядир. Одатда, металда энергияси энг паст қийматдан бир неча электронвольтларгача бўлган ҳар хил электронлар мав-

$$m \frac{dv}{dt} = eE \cos \omega t.$$

Бу ифодани бир марта вақт бўйича интеграллаб:

$$mv = \frac{eE}{\omega} \sin \omega t,$$

мазкур жараён учун электроннинг кинетик энергиясини топамиз:

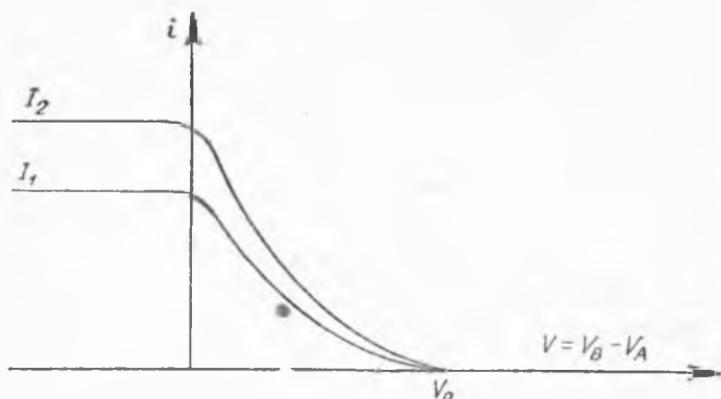
$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2m} \left(\frac{eE}{\omega} \right)^2 \sin^2 \omega t.$$

Демак, классик назарияга биноан ёруғлик частотаси ω ўсиши билан электроннинг кинетик энергияси камаяди. Биз қуйида кўрамизки, бу ҳол фотоэлектрик эффект тажрибалари натижасига мутлақо зиддир.

Агар фотоэлектрик эффект электронларини металда муштақкам эластик боғланган деб қарасак, электронни металдан чиқарувчи бирдан-бир ҳаёлий механизм — ёруғлик частотаси электрон тебранишининг хусусий частотасига тўғри келишида юз берадиган резонансдир. Аммо, бу ҳолда фотоэффект ёруғликнинг айрим дискрет частоталаридагина ёки частотанинг жуда кичик соҳасидагина юз берган бўлар эди. Бундан ташқари, бу ҳол фотоэлектрон энергиясининг ёруғлик частотасига боғлиқлигини мутлақо тушунтирмайди.

Ниҳоят, классик назарияга биноан ёруғлик интенсивлиги электронга таъсир кўрсатувчи электр вектори амплитудасининг квадратига пропорционалдир. Шу сабабли ёруғликнинг интенсивлиги қанча юқори бўлса, металдан чиқаятган электронларнинг кинетик энергияси шунча юқори бўлиши керак.

Фотоэффектни ўрганишга тааллуқли тажрибада, одатда, чиқаятган электронлар сони (ёки занжирдаги ток) ва уларнинг энергияси тушаётган монохроматик ёруғлик интенсивлигининг ва частотасининг функцияси сифатида қаралади. Ёруғликнинг спектрал таркибини ўзгартирмаган ҳолда (яъни маълум частотада) тушаётган ёруғлик интенсивлигини ўзгартирайлик. Бу шароитда занжирдаги ток кучининг электродлараро потенциаллар фарқига боғлиқлигини кузатайлик (5-расм). Эксперимент натижасига кўра занжирда ток $V = V_B - V_A$ нинг ҳамма манфий қийматларида ҳамда мусбат соҳада V_0 қийматгача мавжуд.



5-расм. Ток кучининг ёруғлик интенсивлигига ва потенциаллар фарқига боғлиқлик графиги.

$V = V_B - V_A = V_0$ дан бошлаб ток оқими тўхтайтиди. Потенциаллар фарқининг V_0 қиймати (яъни $V_0 = V_B - V_A$) *тўхтатувчи потенциал* деб юритилади. Кучланишлар фарқининг бу қийматида ҳеч қандай электрон, ҳатто энг максимал кинетик энергияга эга электронлар ҳам А га етиб бора олмайди. Тўхтатувчи потенциал электронларнинг максимал кинетик энергияси билан қуйидагича боғланган:

$$eV_0 = T_{\max} = mv_{\max}^2/2. \quad (2.3)$$

5-расмда мазкур частотада ёруғлик интенсивлиги I нинг иккинчи қиймати учун ҳам ток кучининг потенциаллар фарқига боғланиши тасвирланган. Тажриба натижаларига биноан ёруғлик интенсивлигининг катта қиймати учун ток кучи i нинг V га боғлиқлик чизиги юқоридан ўтади. Интенсивликнинг ҳар қандай қиймати учун ҳам тўхтатувчи потенциал V_0 ўзгармайди.

Демак, тажрибанинг кўрсатишича ток кучи, яъни В пластинкадан чиқаётган электронлар сони ёруғлик интенсивлигига тўғри пропорционал. Иккинчидан, потенциаллар фарқининг маълум қийматидан бошлаб ток кучининг тўйиниш ҳодисаси юз беради, яъни В пластинкадан чиқаётган электронларнинг ҳаммаси А пластинкага етиб боради. Монохроматик ёруғлик тушаётганда фото-

электрик тўйиниш ток кучи ва демак, бирлик вақтда бирлик юздан чиқаётган фотоэлектронлар сони спектрал таркиби ўзгармас бўлган ёруғлик оқимига (интенсивлигига) тўғри пропорционал (Столетов қонуни):

$$i = k\Phi, \quad (2.4)$$

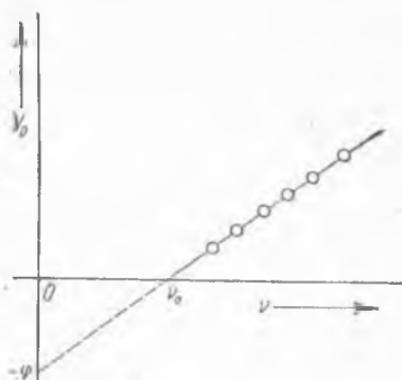
бу ерда k — пропорционаллик коэффициенти.

Тажрибанинг ажойиб томони шундаки, V_0 интенсивликка боғлиқ эмас (Ленард, 1902 й.). Монохроматик ёруғлик интенсивлигининг, яъни электронга таъсир кўрсатувчи электромагнит тўлқини электр майдони кучланганлиги E нинг ўзгариши, чиқаётган электронлар кинетик энергиясини ўзгартирмайди, фақат уларнинг сони — ток кучини ўзгартиради.

Шунингдек, тажрибанинг қўйилмаган натижаси ёруғлик интенсивлигининг берилган қийматида ёруғлик частотасини ўзгартирини билан ҳосил бўлади. Тажрибанинг 6-расмда келтирилган натижасига кўра фотоэлектронларнинг максимал энергияси eV_0 ёруғлик частотасига нисбатан чизикли пропорционал ўзгаради, тўғри чизикнинг оғмалиги электрон чиқарувчи пластинка — эмиттер материалига боғлиқ бўлмайди. Фотоэффект юз берадиган энг кичик ёруғлик частотаси $\nu_0 = \omega_0/2\pi$ га *фотозффектнинг қизил чегараси* дейилади. Қизил чегара эмиттер материалига боғлиқ.

Эйнштейн тақлифига кўра металл электронлари билан ўзаро таъсир жараёнида электромагнит майдон $h\nu$ энергия порциялари тарзида ютилади. Фотоэффектга Эйнштейннинг фотонлар назариясини қўллайлик. Пластинкага ёруғлик нури тушганда жисм электронлари билан ёруғлик ўзаро таъсирида фотон энергияси электронга берилади. Электроннинг максимал кинетик энергияси қуйидаги Эйнштейн формуласи билан аниқланади:

$$T_{\max} = h\nu - e\phi. \quad (2.5)$$



6-расм. Тўхтатувчи потенциалнинг частотага боғлиқлик графиги.

Бу ифода ёруғликнинг фотоэлектрик ютилишида энергиянинг сақланиш қонунини билдиради.

Шу нарсани эслатиш лозимки, пластинкани монохроматик ёруғлик орқали ёритганимизда ҳам фотоэлектронлар энергияси ҳар хил бўлади, чунки ҳар хил электронлар металл сиртига чиқишда ҳар хил масофани босиб ўтади. Шунинг учун (2.5) тенглик кинетик энергияси максимал бўлган электронларга тааллуқлидир.

Ёруғлик таъсирида чиқаётган электронларнинг максимал кинетик энергияси ўз навбатида (2.3) га биноан тажрибада ўлчанаётган eV_0 катталikka тенг:

$$\frac{1}{2} m v_{\max}^2 = eV_0 = h\nu - e\varphi. \quad (2.6)$$

Фотоэлектрик эффектга бағишланган кейинги экспериментларнинг натижалари Эйнштейн формуласида ифодаланган қўйидаги хулосаларнинг аниқ бажарилишини кўрсатди.

1) фотоэлектронларни вужудга келтира олувчи ёруғликнинг ҳар бир частотасига электронларнинг ўлчаш мумкин бўлган максимал тезлиги тўғри келади;

2) V_0 ва ν лар ўртасида чизиқли боғланиш мавжуд;

3) $dV_0/d\nu$ нинг қиймати (ёки $V_0 = f(\nu)$ тўғри чизиқнинг оғмалиги) сон қиймати жиҳатдан h/e га тенг;

4) критик частота ν_0 учун $V_0 = 0$ га ва чиқиш иши $h\nu_0$ га тенг, яъни $V_0 = f(\nu)$ тўғри чизиқнинг ν ўқи билан кесишган нуқтаси тажриба ўтказилаётган металдан электронларнинг чиқа олиши учун зарур энг паст частотани белгилайди. ν_0 частотага тўғри келувчи тўлқин узунлик $c\nu_0^{-1} = \lambda_0 = \frac{hc}{e\varphi}$ бўлади;

5) A , B электродлар ўртасидаги контакт потенциаллар фарқи* $\left(\frac{h}{e}\right)(\nu_0^A - \nu_0^B) = (V_0^A - V_0^B)$ га тенг.

* Агар икки хил металл электр занжирига бирлаштирилган бўлса, улар ўртасида ташқаридан қўйилган потенциаллар фарқидан булак контакт потенциаллар фарқи ҳам вужудга келади. Контакт потенциаллар фарқи электрон трубканинг икки электродлари ўртасидаги потенциал фарқига ҳисса қўшади. Ҳақиқатан ҳам, электрон чиқарувчи B ва электрон йиғувчи A электродлар ўртасидаги ҳақиқий потенциаллар фарқи ташқаридан қўйилган потенциаллар фарқи қиймати билан контакт потенциаллар фарқи срасидаги айирмага тенг.

Эйнштейн формуласини ва ундан келиб чиқувчи хулосаларни экспериментал текшириш учун кўп уринишлар бўлди. Фотозлектрик эффектнинг тугал эксперименти Чикаго университетиди Р. А. Милликен томонидан ўтказилиб, эксперимент натижалари 1914—16 йилларда эълон қилинган. Эйнштейн тенгламаси эълон қилинганидан кейин ўтган ўн йил ичида тенгламадан тўғридан-тўғри келиб чиқувчи бешинчи хулоса умуман текширилмаган, учинчи ва тўртинчи хулосалар устида эса ҳеч қачон аниқ эксперимент ўтказилмаган эди. Милликен экспериментининг асосий мақсадларидан бири ҳам шу потенциаллар фарқининг тушаётган ёруғлик частотасига боғланиш тўғри чиқиғининг оғмалигини юқори аниқликда текширишдан иборат эди. Бунинг учун ёруғлик частотасини юқори аниқликда билиш ва бошқа частотали ёруғликнинг эмиттерга тушишига йўл қўймаслик лозим эди. Ёруғлик манбаи сифатида симоб лампа нуридан фойдаланилган. Эксперимент учун қисқа тўлқинли частоталар соҳасида сателлитлари бўлмаган чизик таъланган.

Милликен эксперименти натижасида V_0 нинг частота билан чизикли боғланишига эга эканлиги юқори аниқликда исботланди. (2.6) ифоданинг ўнг қисмидаги тенгликнинг ҳар икки томонини электрон заряди e га бўламиз. Ихтиёрий частота учун ҳосил бўлган бу тенгликдан критик частота ν_0 учун ёзилган мос тенгликни айирсак, тўхтатувчи потенциалнинг частота билан қуйидаги боғланишига

$$V_0 = \left(\frac{h}{e}\right) \nu - \left(\frac{h}{e}\right) \nu_0, \quad (2.7)$$

яъни (h/e) оғмаликка эга тўғри чизик тенгламасига келамиз. Шундай қилиб, $V_0 = f(\nu)$ тўғри чизикнинг оғмалиги бўйича e нинг қийматини ҳисоблаб h нинг қийматини аниқлаш мумкин. Милликеннинг аниқлашича $h = 6,56 \cdot 10^{-27}$ эрг \cdot сек. Бу Планк томонидан абсолют қора жисм иссиқлик нурланиши қонунларига кирувчи доимийлар орқали аниқланган қийматига аниқ тенг эди. (h/e) ни (2.7) дан аниқлаб (2.6) га қўйсак, чиқиш иши учун қуйидаги формулани ҳосил қиламиз:

$$\Phi = \frac{\nu_0}{\nu - \nu_0} V_0. \quad (2.8)$$

Милликен ўз эксперименти натижаларига кўра Эйнштейн тенгламасининг ва ундан келиб чиқувчи хулосаларининг жуда юқори аниқликда тўғрилигини аниқлади. Эйнштейн тенгламаси билан тасвирланувчи фотоэлектрик эффект эса квант назарияси фундаментал асосларининг тўғрилигини, яъни атом электронларига унга тушаётган ёруғлик тўлқинидан берилаётган энергия қиймати узлукли характерга эга эканлигини исботлади. У Планкнинг абсолют қора жисм иссиқлик нурланишини ўрганишда киритган доимийси h ни моддийлаштирди ва Планк ғоясини асословчи дастлабки физикавий тафсилотлар тўғри эканлигини кўрсатди.

9-§. Комптон эффекти

Фотозффект ёруғликнинг квант табиатга эга эканлигини рад қилиб бўлмайдиган даражада тўла исботлаган бўлса-да, Эйнштейннинг фотонлар назарияси 1923 йилда яна бир тасдиққа эга бўлди. Америка физиги Комптон қисқа тўлқинли электромагнит нурланишларни, яъни рентген нурларини қаттиқ жисмларда сочилишига боғлиқ изланишларида нурланишнинг тўлқин узунлиги ўзгариши ҳодисасини кашф қилди. Бу ҳодиса *Комптон эффекти* деб ном олган.

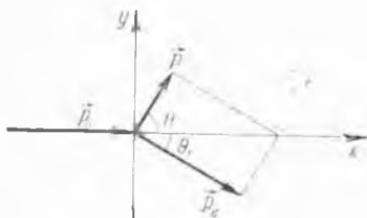
1912 йилда Лауэ таклифи бўйича Фридрих ва Книппинг томонидан рентген нурлари билан ўтказилган дифракция тажрибалари рентген нурлари электромагнит тўлқиндан иборат эканлигини кўрсатган эди. Ёруғликнинг тўлқин хусусиятлари Максвелл назарияси асосида тушунтирилар эди. Чунончи, классик тасаввурга биноан ёруғликнинг ўзгарувчи электр майдони сочувчи модда электронларининг мажбурий тебранишини вужудга келтириши керак. Тезланиш олган электронлар эса ўз навбатида иккиламчи нурланиш чиқаради. Иккиламчи нурланиш частотаси, албатта, бирламчи, яъни жисмга тушаётган нурланиш частотасига тенг, чунки нур чиқараётган электронлар тебраниши тебранишни вужудга келтирган ёруғлик частотаси билан юз беради.

Рентген нурларининг электромагнит тўлқин назарияси олдида тушунтириб бўлмас даражадаги қийинчиликлар пайдо бўлди. Жумладан, жуда қисқа тўлқинли

рентген нурлари ёки γ - нурлари учун бирламчи нур йўналиши бўйича сочилган нурланиш интенсивлиги тескари йўналишида сочилган нурланиш интенсивлигидан катта эди. Бу ҳолни миқдорий тушунтириш учун электрон рентген нурлари тўлқин узунлиги билан таққослаб бўладиган ўлчамга эга деб фараз қилинади ва унинг ҳар хил қисмларидан сочилган нурлар интерференцияси ҳақидаги тахмин қўлланилди. Рентген нурларининг жисмларда сочилишига оид тажриба маълумотлари тўплами шуни кўрсатдики, мазкур тахмин бўйича электрон диаметри унга тушаётган нурланиш тўлқин узунлигининг ўзгариши билан ҳар хил қийматга эга бўлади.

Бу қийинчиликка қўшимча равишда А. Х. Комптон сочилган нурланишнинг частота бўйича бирламчи нурланишдан фарқ қилишини кашф қилди. Классик электродинамиканинг бу қийинчиликларини ҳал қилиш ва ўз эксперименти натижаларини тушунтириш учун Комптон нурланиш сочилишини тасвирлашда фотонлар ҳақидаги тушунчани қўлади. Рентген нурлари сочилишининг квант назариясига кўра ҳар бир муайян рентген кванти ўз энергиясини аниқ битта электрон билан ўзаро таъсирлашишда йўқотади. Бу электрон, ўз навбатида, бирламчи нур дастасига бирор бурчак остида йўналган нур сочади. Нурланиш кванти йўналишининг бундай ўзгариши унинг импульсининг ўзгаришига олиб келади, албатта. Натижада нурланиш сочаётган электрон импульс ҳам рентген нури импульсининг ўзгаришига тенг қийматга ўзгаради. Сочилган рентген нурининг энергияси тушаётган нур энергиясидан электроннинг кинетик энергияси ўзгариши айирмасига тенг, яъни камаяди. Сочилган нур ҳам бутун квант бўлини учун унинг частотаси энергия каби камаяди. Шундай қилиб, квант назариясига асосан сочилган рентген нурлари тўлқин узунлигининг тушаётган нурлар тўлқин узунлигидан катта бўлишини кутганимиз лозим.

Комптон рентген нурлари сочилишининг квант ғоясига асосан назарий йўл билан бирламчи нур тўлқин узунлиги билан иккиламчи нур тўлқин узунликлари ўртасида мавжуд бўлган боғланишни миқдорий ифодалади. Сочилишни назарий ҳисоблаш учун энергия ва импульсининг сақланиш қонунидан фойдаланамиз. Бирламчи нур тўлқин узунлигининг λ_0 ва унга мос равишда тушаётган фотон



7- расм. Фотоннинг эркин электрон билан тўқнашувидаги импульс векторлари.

частотасини ν_0 , иккиламчи нур учун эса λ ва ν орқали белгилайлик. Нурнинг сочилиш бурчаги θ бўлсин.

7- расмда тўқнашиш содир бўлгунга қадар тинч ҳолатда бўлган эркин электрон билан фотон тўқнашишининг импульслар диаграммаси келтирилган. Эркин электрон деб, атом билан боғланиш энергияси фотон билан тўқнашиш пайтида олган энергиясидан анча кичик бўлган электронга айтилади. Бирламчи фотон импульсини \vec{p}_0 , иккиламчи фотон импульсини \vec{p} , тинч турган электроннинг тўқнашиш натижасида эга бўлган импульсини \vec{p}_e орқали белгиласак, тўқнашиш жараёнида ўринли бўлган импульс сақланиш қонуни қуйидагича ифодаланadi:

$$\vec{p}_0 = \vec{p} + \vec{p}_e. \quad (2.9)$$

Релятивистик формула бўйича зарранинг массаси, импульси ва энергияси қуйидагича боғланган:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (2.10)$$

Фотонларнинг массаси нолга тенг бўлганлиги сабабли бирламчи ва иккиламчи фотонларнинг импульси (2.10) формуладан осон аниқланади:

$$\left. \begin{aligned} p_0 &= E_0/c = h\nu_0/c, \\ p &= E/c = h\nu/c. \end{aligned} \right\} \quad (2.11)$$

Импульс сақланиш қонунини ифодаловчи (2.9) формулани расмда кўрсатилган координата ўқларига проекцияси

$$\left. \begin{aligned} \frac{h\nu_0}{c} &= \frac{h\nu}{c} \cos \theta + p_e \cos \theta_1, \\ 0 &= \frac{h\nu}{c} \sin \theta - p_e \sin \theta_1 \end{aligned} \right\}$$

бўлади, ёки

$$\left. \begin{aligned} cp_e \cos \theta_1 &= h\nu_0 - h\nu \cos \theta, \\ cp_e \sin \theta_1 &= h\nu \sin \theta \end{aligned} \right\} \quad (2.12)$$

(2.12) тенгламаларнинг ҳар қайсисини квадратга кўтарамиз ва ҳосил бўлган тенгламаларни бир-бирига қўшамиз. Натижада қуйидаги ифодага келамиз:

$$c^2 p_e^2 = (h v_0)^2 - 2h^2 v_0 v \cos \theta + (h v)^2. \quad (2.13)$$

Бу ифодани соддалаштириш учун энергиянинг сақланиш қонунидан фойдаланамиз. Тўқнашиш содир бўлгунга қадар фотон энергияси $h v_0$ га электрон энергияси (2.10) га биноан mc^2 га тенг. Тўқнашув юз бергандан сўнг эса фотон энергияси $h v$ га, электрон энергияси $\sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4}$ га тенг бўлади. Демак, бизнинг ҳол учун энергиянинг сақланиш қонуни қуйидагича ёзилади:

$$h v_0 + mc^2 = h v + \sqrt{p_e^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (2.14)$$

(2.14) тенгликдан $p_e^2 c^2$ ни аниқлаб (2.13) га қўямиз. Натижада

$$h (v_0 - v) mc^2 = h v_0 \cdot h v (1 - \cos \theta) \quad (2.15)$$

ифодага келамиз. (2.15) ифодада частотани $v = c/\lambda$ га кўра тўлқин узунлик билан алмаштирсак, Комптон муносабатини ҳосил қиламиз:

$$\lambda - \lambda_0 = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta) = \frac{2h}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (2.16)$$

Бу муносабат кўрсатадики, сочилиш бурчаги қанча катта бўлса, электронга фотондан бериладиган импульс шунча катта бўлади. Демак, бирламчи фотондан ўзлаштирилаётган энергия шунча катта ва шунинг учун мос равишда, иккиламчи фотоннинг частотаси шунча кичик ёки тўлқин узунлиги узунлашган бўлади. (2.16) Комптон формуласида қавс олдидаги коэффициентдан тузилган

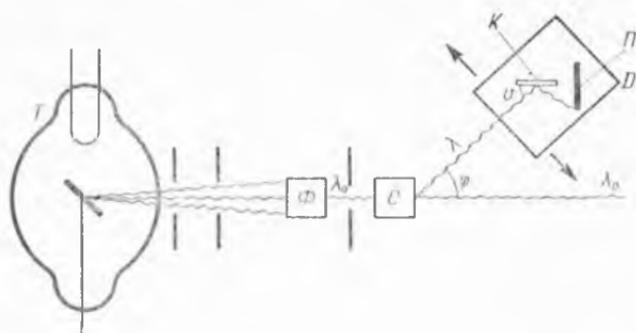
$$\Lambda = \frac{h}{2\pi mc} \quad (2.17)$$

ифода m массали зарранинг *Комптон тўлқин узунлиги* деб юритилади. Масалан, электроннинг Комптон тўлқин узунлиги учун

$$\Lambda_e = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{ см}$$

қийматни ҳосил қиламиз.

Комптон формуласида рентген нурлари сочилаётган модданинг характеристикалари қатнашмайди. Бу эса биз



8- расм. Комптон эффектини кузатиш қурилмасининг схемаси.

кўрган ҳолда рентген нурларининг сочилиши фотонларнинг эркин электронлар билан ўзаро таъсири орқали аниқланишини кўрсатади. Ҳақиқатан ҳам, Комптон эффектида моддага тушаётган фотон энергияси шунчалик юқорики, атомда нисбатан кучсиз боғланган электрон унинг таъсири остида амалда эркин ҳаракатда бўлади.

8-расмда Комптон эффектини кузатиш учун мўлжалланган эксперимент схемаси келтирилган. Рентген нурлари манбаи бўлган рентген трубкаси T анодидан чиқаётган нур даставвал диафрагмалар ва F филтър орқали ўтади. Натижада нур дастасидан маълум λ_0 тўлқин узунлигига эга бўлган нурланиш ажралади. Ажралган нур сочувчи модда C га йўналтирилган. Моддадан сочилган нурланиш спектрларга ажратувчи D детекторда кузатилади. Детектор бирламчи нурга нисбатан φ бурчак остида ўрнатилган. Трубканинг ҳар хил ҳолатда жойлаштириш билан сочилиш бурчаги ўзгартирилади. Комптон эффектини детекторда кузатиш учун сочилган нурланиш тўлқин узунлигини ўлчаш мумкин бўлиши керак. Расмда рентген нурлари кристалл дифракцион спектрометри келтирилган. Спектрометр тажриба вақтида тебранувчи K кристаллдан ва фотопластинка P дан ташкил топган асосий қисмга эга. Кристалдан рентген нурларининг сочилишида Брегг — Вульф формуласи

$$2d \sin \nu = n \lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.18)$$

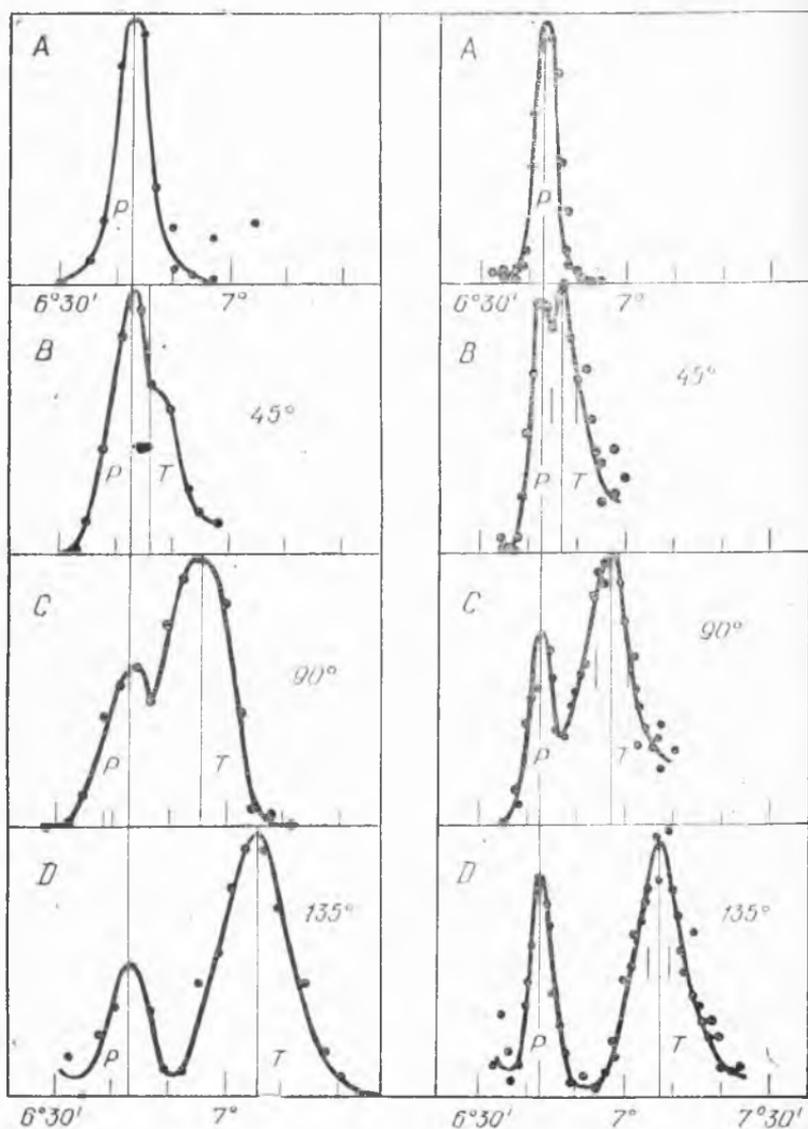
билан аниқланувчи йўналишларда дифракцион максимумлар ҳосил бўлади. (2.18) да d — кристалл атомлари ҳосил қилган қайтарувчи фаразий текисликлари орасидаги масофа, ν — силжиш бурчаги, n — қайтарилган нурлар максимумларининг тартиби.

Пластинка P да қорайиш чизиқларининг ўрнига қараб силжиш бурчаги ν аниқланади. У ҳолда сочилган рентген нурларининг тўлқин узунлиги (2.18) орқали аниқланади.

Комптон ўтказган экспериментда сочувчи модда сифатида графит олинган эди. 9-расмда диафрагма тирқишининг икки хил кенглигида олинган натижалар берилган. Расмдан кўрамизки, бир жинсли рентген нурлари дас-тасини графитда сочилишида нурланиш спектри бири-биридан аниқ фарқ қилувчи икки хил тўлқин узунликли қисмга ажралган (9- B , C , D расм). Ҳар бир эгри чизиқда бирламчи нур спектрининг максимумидан (9- A расм) P чизиқ, спектрнинг сочилган нур тўлқин узунлиги қий-матига мос максимумидан T чизиқ ўтказилган.

Назария билан эксперимент натижаларини мос келиши рентген нурларининг сочилиши квант ҳодиса эканлигини кўрсатади. Мазкур назарияга биноан ҳар бир электрон бутун квантни сочади. Назарияни тасдиқловчи эксперимент натижалари кўрсатадики, нурланиш фотонлари энергия-гагина эга бўлмасдан, импульсга ҳам эга. Бу борада, Комптон эффекти билан боғлиқ бўлган парадоксни эслатиш лозим. Кристалл спектрометр ёрдамида типик тўлқин хусусият — интерференцияни кузатиш билан нурланиш-нинг тўлқин хусусияти — тўлқин узунлиги ўлчанган. Лекин сочувчи модда графитнинг тўлқин характеристикага таъсирини рентген квантлари ўзларини зарра сифатида намоён қилади деб тушунтирилди. Сочилган рентген нури тўлқин узунлигининг ўзгаришини энергия ва импульсга эга фотонлар асосида тушунтирилди.

Шундай қилиб, Комптон экспериментида ёруғликнинг ҳам тўлқин, ҳам корпускуляр хоссага эга эканлиги биринчи бор яққол намоён бўлди. Бу ҳол фанда ёруғлик *дуализм* деб айтилади, яъни ёруғлик реал физикавий объект бўлиб, оддий маънода на тўлқин кўринишига ва на зарра кўри-нишига эга. Умумийроқ хусусиятга эга объект (квант) ни тўлқин ва зарра деб тушунтирилиши мураккаброқ хусу-сиятга эга бўлган объект (квант) нинг тақрибий тавсифлаш



9- расм. Графитда сочилган рентген нурлари (молибденнинг $K\alpha$ чизиғи) интенсивлигининг силжиш бурчаги θ бўйича тасвири:

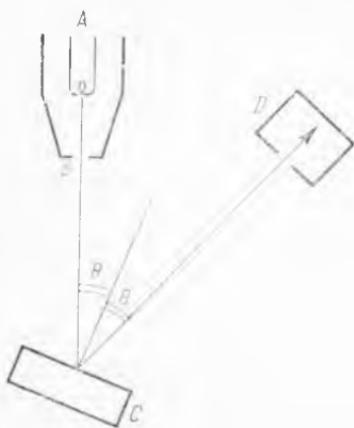
A — бирламчи нурлашнинг характерлағди; *B*, *C*, *D* — сочилиш бурчаги φ нинг мос равишда, 45° , 90° , 135° га тенг ҳолларни тасвирлайди; *P* — силжимаган, *T* — силжиган компоненталар.

усулидир. Умуман, тўлқин ва зарра бир физикавий моҳиятнинг икки формасидир.

10-§ Девиссон ва Жермер тажрибалари

Де-Бройль ғояси уч йилдан сўнг америкалик олимлар К. Д. Девиссон ва Л. Х. Жермерлар томонидан экспериментал тасдиқланди. Олимларнинг айтишича, мазкур экспериментни ўтказишга уларни аспирант де-Бройльнинг дастлаб жуда «ёввойи» ҳисобланган революцион ғояси руҳлантирган эмас, балки тасодиф сабабчи бўлган. Одатдагидек, оддий никель кукунидан иборат нишонда сочилаётган электронларнинг бурчак бўйича тақсимотини ўрганиш устида 1920 йиллардан бери олиб борилаётган уларнинг тажирибаси вақтида нишоннинг қизиб кетишидан суюқ ҳаволи идиш ёрилиб, никель кукун оксидланиб қолади. Нишоннинг оксидланган қатлами юқори температураларда вакуумда буғлантириш йўли билан тозаланиб тажриба яна давом эттирилган. Тажрибанинг янги натижаларида сочилган электронларнинг бурчак бўйича тақсимоти бутунлай ўзгариб қолади. Натижа худди интерференция юз бераётгандек эди. Бу ҳол нишон моддасининг рекристалланиб қолганлигидан деб топилади.

Экспериментнинг тасодифий натижаларига биноан сочилган электронларнинг бурчак бўйича тақсимоти кристалл нишоннинг ориентациясига боғлиқ эди. Тажриба натижалари ҳайрон қоларли даражада электронларнинг кристалда сочилишини рентген нурларининг уч ўлчовли панжарада (моддада) ёки, баъзи натижалар эса, ёруғликнинг икки ўлчовли панжарада сочилишларига айнан эканликларини кўрсатар эди. Бу ўхшашлик сабабли электронлар дифракцион дасталарининг рафторини ва интерференциянинг вужудга келишини нурланишнинг кристалл атомларида сочилиши ва сўнгра уларнинг интерференцияси ҳақидаги тушунча ёрдамида тавсифлаш мумкингина бўлмасдан, энг содда ва табиий ҳол эди. Бу тушаётган электронлар дастаси билан аниқ бир тўлқин узунликини боғлаш мумкин, деган фикрга олиб келади. Натижанинг кўрсатишича, бу тўлқин узунлики де-Бройль тўлқин узунлиги билан қониқарли мувофиқликда эди.



10-расм. Девиссон — Жермер тажрибасининг принципиал схемаси:

A, B — қиздирилган тола ва электрод; *C* — кристалл; *D* — детектор; θ — қайтиш бурчаги.

таллдан сочилган электронлар интенсивлиги θ бурчакнинг функцияси сифатида *D* детектор ёрдамида ўлчанади. Тажриба давомида нишоннинг нисбий ориентацияси ва қайтариш сирти ўзгартириб турилади.

Тажриба натижаларини тушуниш учун, олимларнинг айтишича, электрон дастаси тушаётган кристалда атомлар жойлашишининг аниқ тасаввурига эга бўлишимиз керак. Никель кристалли ёқлари марказлашган кубик структурага эга, яъни кристалл худди учларида ва ёқларининг ўртасида никель атомлари жойлашган куб тасвирини (элементар ячейкани) уч ўзаро перпендикуляр йўналишларда кўп марта такрорланишидан ҳосил бўлади. (Ёқлари марказлашган кубик панжарада атомлар куб учларида ва ёқ марказларида жойлашади.) Никель кристалли панжара кубининг қирраси $3,51 \text{ \AA}$.

Никель кристаллида сочилган 60 эВ энергияли электронлар интенсивлиги тақсимланишининг диаграммасида интенсивлик $\theta = 25^\circ$ га тўғри келган бурчакда максимумга эришади. Берилган потенциаллар фарқида, аммо θ нинг ҳар хил

Бу муҳим ҳодисани чуқур ва аниқ ўрганишда ўтказилган ҳал қилувчи эксперимент буюк экспериментларга хос содда эди. Девиссон ва Жермер тажрибасининг схемаси 10-расмда келтирилган. Электрон пушкада қиздирилган *A* симдан чиқарилаётган электронлар *A* билан *B* электрод ўртасига қўйилган потенциаллар фарқида тезлатилади. *B* электроднинг тешигидан чиққан тезлатилган электронлар эҳтиёткорлик билан тайёрланган *C* никель кристаллидан иборат нишонга урилади. Тезлаткич потенциалнинг ҳар хил қийматларида, яъни электронларнинг ҳар хил энергиясида *C* кри-

қийматларида ўлчанган интенсивлик 11-расмда кўрсатилган. V потенциаллар фарқида тезлатилган электронлар кинетик энергияси $T = eV$ бўлади (e — электроннинг заряди). Агар ҳаракат миқдорини $m_e v = \sqrt{2m_e T}$ эканлигини ҳисобга олсак, V потенциаллар фарқида тезлатилган электронларнинг де-Бройль тўлқин узунлиги (2.2) формулага биноан

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} \quad (2.19)$$

орқали аниқланади. Бу ерда m_e — электроннинг массаси.

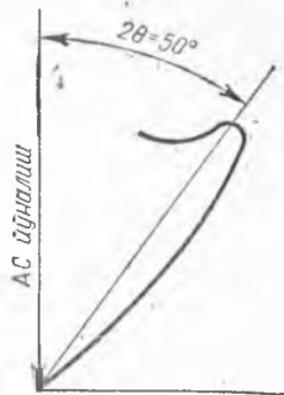
Девиссон ва Жермер тажрибасида потенциаллар фарқи бир неча ўн вольтни ташкил қилган. Агар (2.19) формула бўйича электроннинг $V = 100$ В потенциал фарқида эришадиган де-Бройль тўлқин узунлигини ҳисобласак,

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{2m_e c^2 V e}} = \frac{6,6 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек} \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ см} \cdot \text{сек}^{-1}}{\sqrt{2 \cdot 5 \cdot 10^5 \text{ эВ} \cdot 100 \text{ эВ} \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} \cdot \text{эВ}^{-1}}} = 1,25 \text{ \AA}.$$

Рентген нурлари ҳам худди шундай тўлқин узунликка эга. Демак, электронлар дифракцион манзарасини рентген нурларининг худди шу кристалда сочилиши дифракцион манзарасига ўхшашлиги ажабланарли эмас. Кристалдан қайтган нур интерференцияси максимумларининг вазияти Брегг — Вульф формуласи

$$2d \cos \theta = n \lambda \quad (2.20)$$

орқали аниқланади. Бу ерда $n = 1, 2, \dots$ — бутун сон бўлиб қайтган нур максимумларининг тартибини белгилайди, θ — қайтиш бурчаги. Рентген нурлари билан ўтказилган тажрибада (2.18) орқали панжара доимийси d ни аниқлаш мумкин. Агар (2.20) формулага электроннинг (2.19) формулада берилган де-Бройль тўлқин узунлигини қўйсак, 12-расмда кўрсатилган потенциаллар фарқи



11- расм. Сочилган электронлар интенсивлигининг $\theta = 25^\circ$ даги максимуми.

нинг максимумлар кузатиладиган қийматларини аниқлай оламиз:

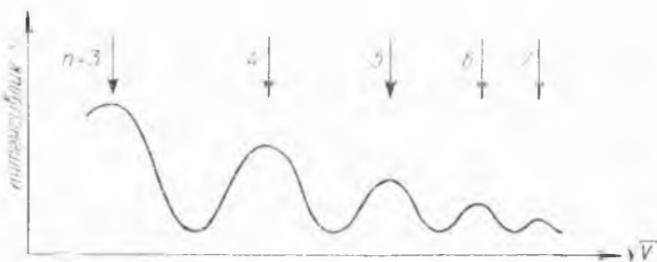
$$\sqrt{V} = \frac{h}{2 \sqrt{2m_e} e d \cos \theta} n. \quad (2.21)$$

12-расмдаги интенсивлик чизигининг чўққилари ора-сидаги масофанинг бир хил эканлиги (2.21) га биноан электронлар ҳақидаги тўлқин тасвир сочилишни тўғри тавсифла-шини кўрсатади.

Девиссон ва Жермер тажрибаларидан кейин бир қанча вақт ўтгач, Ж. Томсон ва ўғли Ж. Томсонлар ва улардан беҳабар ҳолда Тартаковский электрон даста юпқа металл зардан ўтганида дифракцион манзара ҳосил бўлишини кузатдилар. Тажриба натижалари электронларнинг им-пульси ва тўлқин узунлиги ўртасидаги де-Бройль таклиф қилган муносабатни яна бир марта тасдиқлади.

Жавоби олинмаган яна битта савол қолди. Юқоридаги тажрибаларда намоён бўлган тўлқин хоссаси фақат элек-тронлар учунгина хосми ёки модданинг бошқа хил зарра-лари учун ҳам ўринлими? Жавоб 1930 йилда О. Штерн атом ва молекулаларнинг ҳам тўлқин узунлиги де-Бройль фор-муласи билан аниқланувчи тўлқин хоссаларига эга экан-лигини тажрибада кўрсатгандан кейин олинди.

Ҳозирги замонда кристаллларнинг атом тузилишини ўрганишда рентгеноструктура анализи қаторида бирдай муваффақият билан нейтронларнинг дифракцияси ҳам қўлланилади. Нейтронлар дифракцияси кристаллар струк-турасини, айниқса, таркибида водород бўлган органик



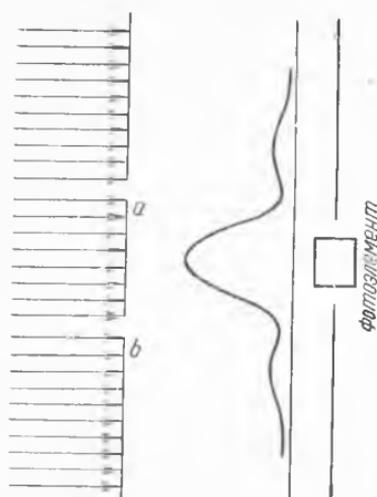
12-расм. Берилган θ да интенсивликнинг потенциаллар фарқига боғлиқлиги,

кристалларни ўрганишда қудратли қуролга айланди. Бундай изланишларда рентген нурларининг ва электронларнинг дифракцияси кам фойдалидир, чунки водород атоми фақат битта электронга ва бир каррали зарядланган ядрога эга. Шунинг учун рентген нурининг ёки электронларнинг водородда сочилиши оғир элементлардаги сочилишга қараганда жуда ҳам кам. Шу сабабли водороднинг кристалл таркибида мавжудлигини сезиш ва рентген нурлари ёки электронлар дифракцияси методи билан водород атомининг кристалда тутган ўрнини аниқлаш мумкин эмас. Аксинча, нейтронлар ядро билан ядро кучлари орқали ва, шунингдек, атом ва нейтроннинг магнит моментлари туфайли ҳам ўзаро таъсирда бўлади. Нейтронларнинг водород билан ўзаро таъсири ҳам кучлидир.

Шундай қилиб, маълум тезликка ва йўналишга эга бўлган материя тўлқин хоссасини ўзида намоён қилади. Ёруғлик дуализми материяга ҳам хосдир. Агар классик тасаввурга кўра тўлқин узлуксиз муҳит ҳаракатининг ҳолатини тасвирласа, квант тасаввурга кўра зарра бирор тўлқинга қарашлидек тарқалади ва интерференцион манзарага тақсимланади. Де-Бройль айтганидек, фазода корпускула бирор аниқ вазиятни эгалламайди. У зарурият билан фазонинг тўлқин эгаллаган соҳасида жойлашади. Берилган нуқтада тўлқин амплитудаси қанча катта бўлса, шу нуқтада заррани сезишга бўлган умид шунча катта.

11-§. Фотонлар ва зарралар ҳаракатининг квант табиати

Микрообъектлар ҳаракатини муфассал ўрганамиз. Даставвал, бир-бирига яқин жойлаштирилган иккита тирқиш орқали фотонлар ҳаракатини (ёруғликнинг тарқалишини) кўрамыз (13-расм). Ёруғлик детектори сифатида алоҳида фотонларни ҳам қайд қилувчи сезгир фотоэлементдан фойдаланамиз. Тирқишлардан ўтган ёруғлик дифракциясини, ёруғлик интенсивлигининг координатага боғлиқлик графигини чизиб осонгина ҳосил қиламиз. Фотоэлементни интерференциянинг бош максимумга ўрнатиб фотоэлементга қайси тирқишдан фотонлар тушишини аниқлашга ҳаракат қилайлик. Бунинг учун аввал бир тирқишни, масалан, a тирқишни беркитиб қўяйлик. Ёруғлик интенсивлиги, яъни фотоэлемент қайд қилган фотонлар сони, b



13- расм. Ёруғликнинг икки тирқиш орқали дифракцияси.

тирқишдан ўтган ёруғлик тўлқини амплитудасининг квадрати A^2 га пропорционал бўлади. Энди a тирқишни очиб, b тирқишни беркитамиз. Ёруғлик интенсивлиги яна аввалгидек амплитуданинг квадрати A^2 га тенг. Агар иккала тирқиш бараварига очиқ бўлганда эди, оптикадан маълумки, фотоэлемент қайд қилган ёруғлик интенсивлиги $(2A)^2 = 4 A^2$ бўларди, яъни интенсивлик ҳар бир тирқишдан ҳосил бўлган дифракцион манзара интенсивликларининг шундайгина йиғиндиси $2A^2$ га тенг бўлмасдан, балки $4A^2$ га тенг.

Агар ҳар бир фотонлар тирқишлардан худди оддийгина зарралар каби, яъни баъзи бирлари a тирқишдан, бошқалари b тирқишдан ўтса эди, ёруғлик интенсивлиги тўрт марта эмас, балки икки марта ортар эди. Демак, рентген нури иккала тирқишдан ўтаётганда фотонларнинг фотоэлементда қайд қилиниш эҳтимоллиги нурнинг ҳар бир тирқишдан алоҳида ўтгандаги эҳтимолликлари йиғиндисига тенг эмас. Бунда, рентген нурининг тарқалишида ҳар бир фотон ҳаракатининг характериға ҳар иккала тирқиш ҳамтаъсир кўрсатади, деган хулоса келиб чиқади. Албатта, бу хулоса зарра ҳаракатининг траекториялари ҳақидаги тасаввурға мутлақо зиддир, чунки тажриба натижасига кўра, ҳар бир фотон, зарра сифатида мавжуд бўлишиға қарамасдан, ҳар иккала тирқишдан бараварига ўтади. Агар, фотоннинг ҳар бир вақт моментида фазодаги ўрни маълум бўлиб, ва у маълум траектория бўйлаб ҳаракатланса, унинг a ёки b тирқишдан ўтгани аниқ бўларди.

Фотон ўрнида электронларни қарасак, электронларни a ва b тирқишдан бараварига ўтиши, яъни уларнинг траекторияға эга эмаслиги бизнинг классик тасаввуримиздан янада узоқдир. Электронлар дастаси учун ҳам дифракция

ҳодисасининг мавжудлиги ҳар бир электроннинг тирқишдан ўтишида ҳам a , ҳам b тирқишнинг бараварига иштирок этишини кўрсатади. Албатта, электрон a ва b тирқишдан икки қисмига бўлиниб ўтади деб тасаввур қилиш нотўғри бўлади, чунки у ҳамма микрзарралар каби доимо яхлит ҳолда массага, зарядга ва бошқа моддий материяга хос характеристикаларга эга ҳолда намоён бўлади. Лекин айни вақтда шу электрон учун унинг фазодаги ўрни ва траекторияси тушунчаларини қўллаб бўлмайди.

Агар биз фотонни сезувчи фотоэлементни ёки электрон учун детекторни дифракцион тасвирнинг минимумига жойлаштирсак, бу ҳулоса янада яққол бўлади. Тирқишларнинг иккаласи очиқ ҳолида экраннинг бу нуқтасида зарралар қайд қилинмайди. Агар икки тирқишдан биттасини ёпиб қўйсақ, минимум силжийди ва унинг аввалги ўрнида зарралар қайд қилина бошлайди. Демак, тирқишнинг иккаласини ёки фақат биттасини очиқ эканлигини зарралар «сезади». Шундай қилиб, электрон ва шунингдек, фотон ҳамма очиқ тирқишлардан бирданига ўтади.

Юқоридаги тажрибадан кўринадики, микрзарралар классик физикага кўра зарраларнинг қайси турига оид бўлмасин, бараварига ҳам зарра, ҳам тўлқин хоссаларга эга. Тўлқин хоссалар айниқса микрзарраларнинг тарқалишида яққол намоён бўлади. Корпускуляр хосса эса зарраларнинг ўзаро таъсири жараёнига тааллуқлидир. Макрзарралардан иборат моддий материяда тўлқин хоссини сезмаймиз. Оптикадан маълумки, ёруғликнинг тўлқин хоссасини характерловчи дифракцияси унинг тўлқин узунлиги билан таққослаб бўладиган ўлчамларга эга тўсиқдан эгилиб ўтишида энг яққол ҳосил бўлади. Тўлқин узунлигининг тўсиқ ўлчамларидан кўп марта кичик қийматларида ёруғликнинг тўлқин хоссалари сезиларсиз бўлади. Шундай, геометрик оптикада тўлқин тасаввурсиз иш тутилади.

Девисон ва Жермер тажрибасида кўрдикки, электроннинг де-Бройль тўлқин узунлиги тартиби жиҳатдан 1 \AA атрофида бўлади. Электронларнинг кристалдан қайтишида уларнинг кристалл атомларида сочилиши юз беради. Кристалл панжарада атомлар орасидаги масофа эса тақрибан 1 \AA ; худди шунинг учун Девиссон ва Жермер тажрибаларида электронларнинг аниқ дифракцион манзараси кузатилган.

Электронларнинг энергиясини орттирсак, уларнинг де-Бройль тўлқин узунлиги камаяди. Масалан, 1 ГэВ гача тезлатилган электронларнинг де-Бройль тўлқин узунлиги (2.21) формулага кўра 10^{-13} см га тенг. Албатта, бундай тўлқин узунликли электронларнинг кристалл панжарадан сочилишида тўлқин хоссалар намоён бўлмайди, чунки $\lambda \ll d$. Агар объект ўлчамлари 10^{-13} см га яқин бўлса, тўлқин хоссалар янада яққолроқ сезилади. Худди шунинг учун ядролар ва ядрони ташкил қилган зарралар — нуклонлар структурасини ўрганишда электронларни тезлаткичларда 1 ГэВ дан юқори энергияларгача тезлатиш зарур.

Биз юқорида массаси 10^{-6} грамм, тезлиги 1 мм/сек бўлган чанг заррасининг тўлқин узунлигини 10^{-20} см деб топган эдик. Демак, унчалик катта ўлчамга эга бўлмаган макроскопик объект — чанг зарраси учун де-Бройль тўлқин узунлиги бениҳоят кичик. Албатта, бу тўлқин ёки тўлқин хоссалар ҳеч қандай шароитда намоён бўлмайди.

12-§. Де-Бройль тўлқинининг хоссалари

Тўлқин функция. Ўтган параграфда кўрдикки, микрозарраларнинг тарқалиши тўлқин ҳаракат билан тасвирланиши мумкин. Масалан, маълум кинетик энергияли электрон ҳаракати учун аниқ қийматга эга де-Бройль тўлқин узунлиги тўғри келади. Шунингдек, оптикадан маълумки, ω частотага ва \vec{k} тўлқин векторига эга ёруғликнинг тарқалиши ясси тўлқин орқали тавсифланади. ω частотага ва \vec{k} тўлқин векторига эга ясси тўлқин қуйидаги кўринишдаги комплекс функция орқали ифодаланади:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}. \quad (2.22)$$

Келтирилган ифодада $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $E = \hbar \omega$, $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ алмаштиришлар ўтказамиз:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}. \quad (2.23)$$

бунда \vec{k} — тўлқин вектори тўлқиннинг тарқалиш йўналишига мос йўналган ва қиймат жиҳатдан тўлқин сонига тенг, яъни $k = 2\pi/\lambda$. Фотон учун (2.23) тўлқин функция

ёруғлик тўлқинидир. Зарра учун эса ясси де-Бройль тўлқинидир. (2.23) функцияни квант физикасида «ПСИ функция» деб атайдилар. Шундай қилиб, энергияси ва импульси

$$E = \hbar \omega, \quad (2.24)$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (2.25)$$

га тенг бўлган зарранинг тўлқин хоссаси (2.23) ясси де-Бройль тўлқини орқали тавсифланади. Ясси де-Бройль тўлқини оптика қонунларига мос ҳолда тарқалади. Интерференция ва дифракция ҳосил қилади. Агар зарра импульси p x ўқи бўйлаб йўналган бўлса, тўлқин фазасининг доимийлик шарти $E t - p x = \text{const}$ кўринишда бўлиб, бу тенгламани вақт бўйича дифференциаллаб, фазавий тезликни аниқлаймиз:

$$\frac{dx}{dt} = v_{\Phi} = \frac{E}{p} = \frac{\omega}{k} = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c}{v} \cdot c. \quad (2.26)$$

Демак, моддий зарра учун де-Бройль тўлқинининг фазовий тезлиги ҳар доим ёруғлик тезлигидан катта бўлади, чунки $v < c$. Бу ҳол нисбийлик назариясига зид келмайди. Нисбийлик назариясига биноан модда тезлиги ҳеч вақт ёруғлик тезлигидан катта бўлолмайди. Нисбийлик назариясининг бу шарти энергия ва массанинг олиб ўтиш билан боғлиқ бўлган жараёнлар учун ўринлидир. Тўлқиннинг фазавий тезлиги, умуман, зарра массаси ва энергиясининг кўчириб ўтилишини характерламайди. Зарра ҳаракатининг тезлиги тўлқиннинг группавий тезлиги билан характерланади.

Фазавий тезлиги бевосита физикавий маънога эга эмас ва у, агар муҳит дисперсияга эга бўлмаса, яъни тарқалишнинг фазавий тезлиги частотага боғлиқ бўлмаса, тўлқиннинг группавий тезлигига тенг бўлади. Бу ҳол вакуумда фотонлар учун ўринлидир. Ҳақиқатан ҳам, фотон учун масса нолга тенг ва энергияси $E = p \cdot c$. У ҳолда (2.26) формуладан вакуумда ёруғлик тўлқини учун фазавий тезлиги ёруғлик тезлигига тенг бўлади:

$$v_{\Phi}^e = \frac{E}{p} = \frac{pc}{p} = c. \quad (2.27)$$

Вакуумдан ташқари ҳолларда ёруғликнинг фақат группавий тезлигини ўлчаш мумкин, холос. Шу нарсани қайд қиламизки, агар $v \ll c$, яъни моддий зарранинг ҳаракати

норелятивистик тезликка эга бўлса, унинг кинетик энергияси $\frac{p^2}{2m}$ га тенг бўлишини ҳисобга олган ҳолда фазавий тезлик учун қуйидагини ҳосил қиламиз:

$$v_{\text{ф}}^{\text{норел.}} = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{mv}{2m} = \frac{v}{2}. \quad (2.28)$$

Бу формуладан кўринишича, норелятивистик зарранинг фазавий тезлиги унинг ҳаракат тезлигига боғлиқ, демак, унинг энергиясига ва частотасига боғлиқ. Де-Бройль тўлқинининг дисперсияси вакуумда нолдан фарқли. Шунинг учун ҳатто вакуумда ҳам де-Бройль тўлқинининг фазавий тезлигини ўлчаб бўлмайди; фазавий тезлигини ҳар доим ҳисоблашлар асосида аниқлаймиз. Бунинг аксича, де-Бройль тўлқинининг группавий тезлигини бевосита аниқлаш мумкин. Масалан, v тезликда ҳаракат қилаётган m массали зарранинг тўла энергияси юқоридаги (2.10) формула билан ифодаланади. Бундай энергияга эга бўлган де-Бройль тўлқинининг частотаси $\nu > E/h$, фаза тезлиги эса $v_{\text{ф}} = \frac{\omega}{\nu} = \lambda\nu$. Тўлқиннинг группавий тезлиги (де-Бройль тўлқинидан ташкил топган тўлқин пакети тезлиги) қуйидагича ҳисобланади:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E}. \quad (2.29)$$

(2.29) формулага асосан фотон учун группавий тезликни ҳисоблаймиз:

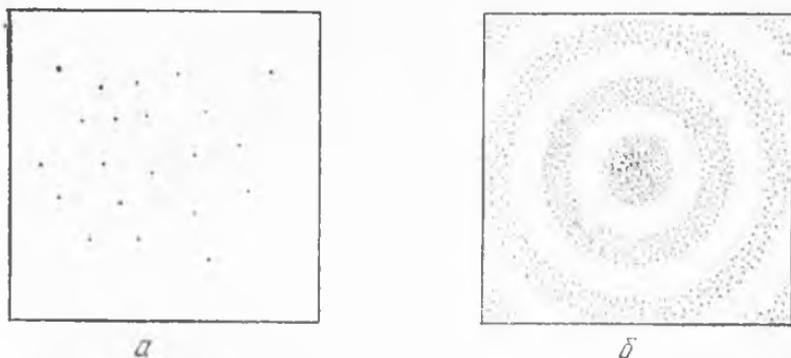
$$v_{\text{гр}}^{\text{фот}} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc^2}{pc} = c. \quad (2.30)$$

Демак, ёруғлик тўлқинининг фазавий тезлиги ҳам, группавий тезлиги ҳам ёруғлик тезлигининг ўзига тенг. (2.29) формуладан норелятивистик зарранинг де-Бройль тўлқини учун группавий тезлигини ҳисоблайлик. Бунинг учун (2.10) формулада кичик қиймат бўлган импульс бўйича тўла энергияни қаторга ёямиз:

$$E = E(0) + E'(0)p + E''(p)p^2 + \dots = mc^2 + \dots \quad (2.31)$$

Тўла энергия учун қаторни биринчи ҳади билан чегараланган ҳолда (2.29) га қўйсақ, норелятивистик зарра учун де-Бройль тўлқинининг группавий тезлигини аниқлаймиз:

$$v_{\text{гр}}^{\text{норел.}} = \frac{pc^2}{mc^2} = \frac{mv}{m} = v. \quad (2.32)$$



14- расм. Электрон ҳаракатининг дифракцион табиати.

Шундай қилиб, норелятивистик зарранинг де-Бройль тўлқини учун группавий тезлик зарра тезлигига тенг.

Де - Б р о й л ь т ў л қ и н и н и н г э ҳ т и м о л - л и к х а р а к т е р и. Зарраларнинг тўлқин хоссалари уларнинг тарқалиш жараёнида кўплигидан эмасмикан, деган саволни туғдиради. Бу саволга жавоб бериш учун Биберман, Сушкин, Фабрикант қуйидагича тажриба қўяди. Алоҳида-алоҳида йўналтирилган электронлар юпқа металл пластинка орқали сочилиб фотопластинкада қайд қилинсин. У ҳолда ҳар бир электрон фотопластинканинг ҳар хил нуқталарида тартибсиз ёйиқ из қолдиради. 14-а расм. Аммо узоқ вақт давомида кўп миқдордаги электронларнинг сочилишида фотопластинкада электронларнинг қайд қилинган нуқталари тўпланининг пластинкадаги тақсимоти интенсивликнинг максимум ва минимум тасвирига эга бўлади. Ҳосил бўлган максимум ва минимумларнинг ўрни дифракцион формулалар асосида ҳисобланиши мумкин.

Электронлар битта-битта сочилган ва қайд қилинган бўлса ҳам, ҳар бирининг ҳаракати тўла дифракцион манзарага биноан аниқланади; ҳар бир электроннинг фотопластинкадаги ўрни дифракцион қонунга биноан у сочилишидан аввал белгиланган. Акс ҳолда дифракцион манзара ҳосил бўлмас эди. Зарранинг бу хил табиатини, яъни зарра билан унинг де-Бройль тўлқини ўртасидаги боғланишни қандай тушунмоқ керак. М. Борн ёруғлик тўлқинининг ёки де-Бройль тўлқини (2.22) нинг амплитудасини фазонинг бирор нуқтасида фотон ёки заррани қайд қилиш

эҳтимоллиги деб таклиф қилди. Шундай қилиб, зарранинг қайд қилиниш эҳтимоллиги $|A|^2$ га тенг. Оптикада $|A|^2$ ни *ёруғлик интенсивлиги* деб юритилади. Кўп миқдордаги фотонлар ёки зарралар дастасини кузатсак, дифракцион манзаранинг бирор нуқтасидаги ёруғлик ёки де-Бройль тўлқини интенсивлиги $|A|^2$ шу нуқтада фотонни ёки заррани қайд қилиш эҳтимоллиги $|A|^2$ га тенг, яъни фотонлар ёки зарралар сони кўп бўлганда бу икки тушунча бирига тенг бўлади.

Де-Бройль тўлқинининг эҳтимоллик характери юқоридаги тажрибада очиқ-ойдин кўришиб турибди. Биз кўрдикки, ҳар бир электроннинг пластинкадаги ўрни дифракцион манзара шартига бўйсунди, лекин эҳтимоллик қонуни билан тавсифланади. Пластинкага келиб тушадиган айрим электроннинг ўрнини олдиндан аниқ айтиш мумкин эмас. Аммо фотопластинкага келиб тушаётган электронлар сони ортиши билан уларнинг фотопластинка бўйлаб тақсимоти эҳтимоллик тақсимоти қонунига яқинлашади, яъни $|A|^2$.

Баъзан пси-функциянинг эҳтимоллик маъноси нотўғри талқин этилади. Классик тасаввурга кўра, микрозарра ҳар доим бирор жойда жойлашгану, лекин биз аниқлай олмаймиз ва тўлқин функция фазонинг ҳар бир нуқтасида зарранинг қайд қилиш эҳтимоллигини беради, деб ҳисоблаш нотўғри бўлади. Газларнинг классик кинетик назариясида худди шундай тасаввурга эгамиз. Вақтнинг ҳар бир momentiда ҳар бир зарра ўз ўрнига эга, лекин зарралар сони кўп ва ҳар бирининг ҳаракатини кузатиш мумкин эмас. Шунинг учун бирдан-бир тўғри йўл — зарраларнинг тақсимот эҳтимоллигини қўллашдир. Бундай нуқтаи назар интерференция ҳодисасига зиддир. Чунки Гюйгенснинг интерференцион принципига кўра тўлқин фазони тўла эгаллаши керак. Зарра жойлашган нуқтадан келаётган тўлқинни зарра йўқ жойдан келаётган тўлқин билан қўшиш маъносиздир. Интерференция ҳамма нуқталарнинг тенг ҳуқуқлилигини талаб қилади.

Электрони пси-функциянинг амплитудасига мос равишда фазода «ёйилган» деб қараш мумкин. Электрон модда билан худди бир нуқтага тўплангандек бир бутун ҳолда ўзаро таъсирда бўлади. Ўзаро таъсирдан сўнг, албатта, у аввалги ψ -функция билан тасвирланмайди. Унинг фа-

зода «ёйилганлиги» кичиклашган, яъни у фотопластинканинг қорайган соҳасидагина намоён бўлади.

Энди биз биламизки, нега классик объектларда бу хил ёйилиб мавжуд бўлиш йўқ. Нима учун электрон икки тирқиш очиқлигини сезади ва улардан бараварига ўтади-ю, классик объект, масалан, бильярд шари бильярд столининг ҳамма лузасига бир вақтда тушмайди? Сабаби шар ҳаракатининг де-Бройль тўлқин узунлиги шар ўлчамларига нисбатан нолга яқинлигидир ва шунинг учун шар ёйилган дея олмаймиз ва ҳеч қандай дифракцион ҳодисани кузатиш мумкин эмас.

Классик механикада зарранинг асосий хоссаси унинг траекторияси мавжудлигидир. Зарра фазонинг бирор нуқтасида ўрнашиб, қолган қисмида намоён бўлмайди, аксинча классик тўлқин оптикاسида тўлқин фазонинг ҳамма қисмида бараварига мавжуддир. Квант назариясининг тасаввурига биноан ҳамма микроразралар худди тўлқин каби бирданига фазонинг ҳамма нуқталарида мавжуд, лекин уни бирор нуқтада қайд қилиниши ўз эҳтимоллиги билан характерланади. Шунинг учун электрон, фотон ва бошқа микроразралар ҳаракатини траектория тушунчаси билан тавсифлаш мумкин эмас. Улар квант характеристикалардан ташқари классик характеристикага — аниқ зарядга, массага, энергияга эгадир.

Микроразра ҳолатига тажрибанинг таъсири. Юқориде электрон билан ўтказилган тажрибага қайтайлик. Ҳар бир электрон сочувчи объектдан ўтганидан сўнг фотопластинканинг бирор соҳасида қайд қилинади. Квант назариясига кўра уларнинг ҳар бири фотопластинка билан ўзаро таъсирда бўлгунга қадар фазода ёйилган эди. Ўзаро таъсир натижасида уларнинг ҳар бири аниқ бир нуқтада қайд қилинди. Демак, электроннинг пси-функцияси ўзаро таъсир натижасида батамом ўзгаради, яъни тажриба электрон ҳолатини ўзгартириб юборади. Тажриба электронни тажрибадан кейинги ўрнини аниқлайди. Пластинка билан ўзаро таъсиргача электроннинг ҳолати ноаниқ. Биз бу тажрибадан электронни ўзаро таъсиргача мураккаб дифракцион манзарага эга ҳолатини аниқлай олмаймиз. Унинг мураккаб дифракцион манзараси ўзаро таъсирдан сўнг фотопластинкада кўп миқдорда қайд қилинган зарралар тақсимланишини кузатиш билан аниқланиши мумкин.

Юқоридаги икки тирқиш билан ўтказилган тажрибани яна бир бор қайтарайлик. Электронни икки тирқишнинг қайси биридан ўтганлигини аниқлашга урниниб кўрайлик. Юқоридаги тирқишни электрон учун шаффоф юпқа пластинка билан беркитиб қўяйлик. Пластинка орқали ўтаётган электрон пластинка электрони билан тўқнашишда бўлади ва унга «тепки» импульси беради. Шу импульсларни қайд қилишимиз мумкин деяйлик. У ҳолда, агар экрандаги детектор ва тирқишдаги импульсни қайд қилувчи детектор бирданига қайд қилса, электрон юқори тирқишдан ўтган, акс ҳолда, яъни фақат экрандаги детектор қайд қилса, электрон пастки тирқишдан ўтган бўлади. Иккала детекторларда бирданига қайд қилинган электронлар тақсимотини кузатсак, у электронларни фақат юқори тирқишдан ҳосил қилган дифракцион манзарасини беради. Бошқа электронлар эса пастки тирқиш берган дифракцион манзарани ҳосил қилади. Электронларнинг экрандаги тақсимоти тубдан ўзгаради. Ҳар бир тирқиш алоҳида-алоҳида дифракцион манзара ҳосил қиляпти.

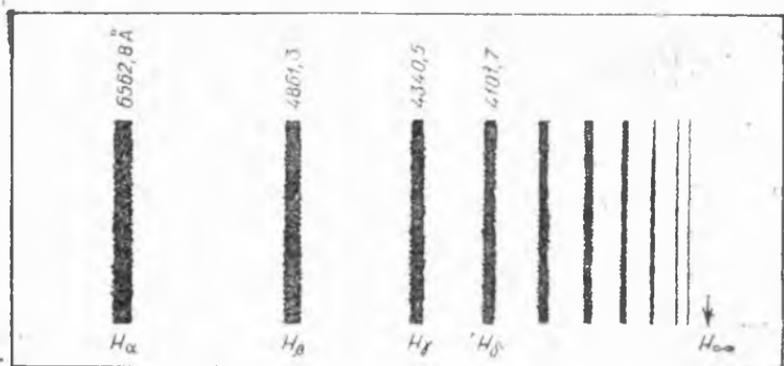
Юқори тирқишга детектор қўйилмаган ҳолда электронлар бирданига иккала тирқишдан ўтиб умумий дифракцион манзара берар эди. Юқори тирқишдаги детектор таъсирида бўлган электронлар ўз ҳаракатларини тепки импульси характерловчи қийматга, уларнинг ҳолат тўлқин функцияси — пси-функция эса фазасини тасодифий ҳолда ўзгартиради. Натижада иккала тирқиш ҳам алоҳида-алоҳида дифракцион манзара ҳосил қилади. Тажриба натижасида биз электронни қайси тирқишдан ўтганлигини аниқлаймиз. Лекин у аввалги икки тирқишдан ўтиб дифракцион манзара ҳосил қилувчи электрон эмас, балки бошқа тажрибада иштирик этаётган электрондир. Микроразрлар физикасида ҳар қандай тажриба, зарра ҳақида бирор маълумот олиш учун бўлган ҳар қандай уриниш зарранинг ҳолатини ва тўлқин функциясини бутунлай ўзгартириб юборади. Макроскопик ўлчамларга эга объектлар ҳолати ҳам улар устида ўтказилаётган тажриба вақтида ўзгаради, лекин ўзгариш шу даражада кичикки, тажриба натижасига қўшадиган ҳиссасини эътиборга олмаса ҳам бўлади. Шундай қилиб, микроразрлар устида тажриба ўтказишда ўлчов асбоблари билан зарра ўзаро таъсири натижасида микроразрлар бошқа квант ҳолатга ўтади.

АТОМ ТУЗИЛИШИ ВА БОР НАЗАРИЯСИ

13- §. Атомнинг чизиқли спектрларидаги қонуниятлар

Чизиқли спектр сериялари. Физикавий ҳодисалар ичида, ҳаддан ташқари равшан ва тугал изланган бўла туриб, тушунтирилиши бениҳоят мушкулликдан иборат бўлган газлар ва буғларнинг ёруғликни чизиқли ютиш ва чиқариш ҳодисасидан бошқа ҳодисани кўрсатиш қийин. Газ ва металл буғларининг яқкалаштирилган атомлари ёки ионлари группа-группа бўлган чизиқли спектрлар чиқаради. Спектрларни термик ёки электрик уйғотиш воситалари билан чиқариш мумкин. Чизиқли спектр группаларига *чизиқлар сериялари* деб аталади. Ҳар бир серияда чизиқлар кетма-кетлиги кичик тўлқин узунликлар соҳасига қараб зичлашиб боради. Янги серия яна сийрак жойлашган чизиқлардан бошланади.

Кўп ҳолларда атомларнинг айни бир хил спектр чизиқлари ҳам ютиш, ҳам чиқариш спектрларида кузатилган. Бу ерда, албатта, Кирхгоф тажрибасини қайта эслаш мумкин. У натрий буғининг битта D чизиғи учун ёруғликнинг чиқариш ва ютиш частотаси тенг бўлишини кўрсатган эди. Спектр чизиқларини ва улар ташкил этган серияларини энг оддий атом — водород атоми спектрида кўришимиз мумкин. 15-расмда водород атомининг чиқариш спектридаги Бальмер чизиқлари кўрсатилган. Чиқариш Бальмер чизиқлари юлдуз атмосфераси спектридаги ютиш чизиқлари — Фраунгофер чизиқлари билан мосдир. Расмда оқ ёруғлик ва унга яқин ультрабинафша соҳасидаги H_α , H_β , H_γ , H_δ , символлар билан белгиланган кўринувчи чизиқлар келтирилган. H_∞ туташ спектр чегарасини кўрсатади. Расмдан кўриниб турибдики, водород атомининг спектр чизиқлари тартибли равишда серияларга ажралган. Чизиқлар қисқа тўлқинлар сари маълум қонуният бўйича зичлашган. Бу қонуниятнинг миқдорий кўринишидаги инфо-



15-расм. Водород атомининг спектрал чизиқлари.

дасини швейцариялик физик олим Бальмер 1885 йилда аниқлаган. У биринчи бўлиб чизиқларнинг тўлқин узунликлари ўртасида n ва m боғлинишни

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - m^2} \text{ \AA} \quad (3.1)$$

формула билан аниқ ифодаланишини кўрсатди. Бу ерда λ_0 — ўзгармас сон, n , m — бутун ўзгарувчи сонлар — $n = 3, 4, 5, \dots$, $m = 2$. Бу серияга кейинчалик *Бальмер серияси* деб ном берилган.

1888 йилда К. Рунге (3.1) формулада тўлқин узунлик ўрнига частотани киритди. 1890 йилда эса, Ридберг водороднинг (3.1) серия формуласига ҳозирги замонда умум қабул қилинган универсал кўриниш берди:

$$\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (3.2)$$

Ушбу Ридберг формуласидаги пропорционаллик коэффициентини R Ридберг доимийси деб аталади ва қуйидаги қийматга тенг:

$$R = 109677,581 \text{ см}^{-1}$$

Баъзан спектр чизиқлари частотасининг (3.2) формуласи *спектрал термлар* деб аталувчи T сонларининг айирмаси сифатида ҳам ифодаланади:

$$\nu = \frac{R}{R^2} - \frac{R}{n^2} = T_m - T_n = \Delta T.$$

Ҳар бир чизиқ частотаси иккита терм айирмасига тенг. Ҳар бир атом термларнинг маълум тўплами билан характерланади. Жумладан, берилган серия учун термлар тўплами битта ўзгармас ва бошқа битта ўзгарувчи термлардан иборат бўлади. Чизиқлар частотасининг ва шунингдек, термларнинг ўлчов бирлиги см⁻¹.

Спектрларни ўрганиш натижасида водород атоми спектрида Бальмер сериясидан ташқари яна бир қанча сериялар мавжудлиги аниқланди. Ҳозирги вақтда водород атомининг қуйидаги бешта серияси маълум:

$$\nu = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 2, 3, 4, \dots \text{ Лайман (1906 йил) серияси,}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, 5, \dots \text{ Бальмер (1885 йил) серияси;}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 4, 5, 6, \dots \text{ Пашен (1908 йил) серияси;}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 5, 6, 7, \dots \text{ Брэккет (1922 йил) серияси;}$$

$$\nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 6, 7, 8, \dots \text{ Пфунд (1924 йил) серияси.}$$

Лайман серияси спектрнинг ультрабинафша қисмида ётади. Бальмер серияси кўринувчи спектрда эканлигини биз юқорида айтган эдик. Қолган сериялар, мос равишда, спектрнинг инфрақизил соҳасида ётади.

Водород атоми спектри чизиқларининг частоталари ўртасидаги боғланишни серияларнинг битта умумий

$$\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = T_m - T_n \quad (3.3)$$

формуласи орқали ифодалаш мумкин. Бу ерда m — бутун сон бўлиб, Лайман серияси учун 1 га, Бальмер серияси учун 2 га ва ҳоказо., ҳар бир серия учун аниқ битта қиймат қабул қилади. (3.3) формулада берилган m учун n сонни $m + 1$ дан бошлаб ҳамма бутун катта сонларни қабул қилади. T_m , T_n — мос равишда m -ва n -термларни билдиреди. (3.3) формула баъзан Бальмернинг *умумлашган формуласи* деб ҳам аталади.

(3.3) формуладаги n сонининг чексиз катта қийматгача ўзгаришида серия чизигининг частотаси ҳар бир серия учун

серия чегараси деб аталувчи $\frac{R}{m^2} = T_m$ чегаравий қийматга интилади. Масалан, Бальмер сериясининг юқорида қайд қилинган чегаравий чизиғи H_∞ орқали белгиланади (15-расм).

Спектр чизиқларининг группа-группа кўринишда жойлашиш қонунияти фақат энг содда атом — водород атоми учунгина хос бўлмасдан, ҳамма атомлар учун характерлидир. Бу умумийлик 1900 йилдаёқ аниқланган. Ридберг сериялар формуласининг умумий структурасини кўрсатган эди:

$$\nu = R \left[\frac{1}{(m+s)^2} - \frac{1}{(n+p)^2} \right]. \quad (3.4)$$

Бу ерда m — аввалгидек, сериялар соҳасида аниқ битта қиймат қабул қилувчи бутун кичик сон, n эса $m + 1$ дан бошлаб m дан катта бутун сонлар қабул қилади; демак, n — ўзгарувчи сон. s, p сонлари n ва m га қўшилувчи ўнли каср сонлардир.

16-расмда яхлит схемада натрий атомининг учта муҳим сериялари келтирилган. Иккиланган чизиқлар (дублет чизиқлар) якка чизиқ билан кўрсатилган. Серия чегараси штрихланган. Бу ҳақда V бобда батафсил тўхталиб ўтамиз.



16-расм. Натрий атомининг учта спектрал серияси.

Спектроскопик ўлчаш бирликлари. Спектроскопияда нурланишни тўлқин узунлик қиймати билан характерлаш қабул қилинган. Спектрнинг оқ ва ультрабинофша соҳаларида тўлқин узунлик ангстремларда ($1\text{Å} = 10^{-8}\text{ см}$) ёки миллимикронларда, инфрақизил соҳаларда эса микронларда ўлчанади. СИ бирликлар системасида тўлқин узунлики нанометрларда ($1\text{ нм} = 10^{-9}\text{ м}$) ўлчаш қулай.

Биз қуйида кўрамизки, спектр қонуниятларини ўрганишда, бу қонуниятларни атом тузилиши билан таққослашда ва қатор бошқа ҳолларда спектр чизиқларининг тўлқин узунлиги ўрнига тўлқин частотаси ёки частотага пропорционал катталиқ билан иш кўриш анча қулайлик туғдиради. Шунинг учун, спектроскопик ўлчашларда тўлқин узунлик билан боғлиқ тўлқин частотаси қўлланилади. Маълумки, ёруғликнинг частотаси ва тўлқин узунлиги ўзаро

$$\nu = \frac{c_{\text{муҳит}}}{\lambda_{\text{муҳит}}} = \frac{c_{\text{вакуум}}}{\lambda_{\text{вакуум}}}$$

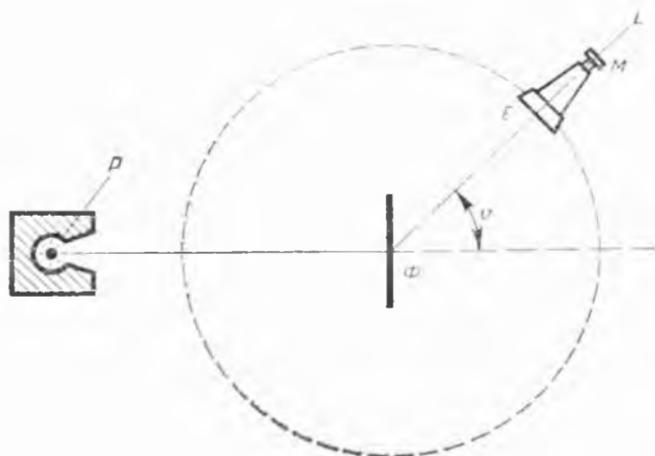
ифода билан боғланган. Бу ерда $c_{\text{муҳит}}$, $c_{\text{вакуум}}$, $\lambda_{\text{муҳит}}$, $\lambda_{\text{вакуум}}$ муҳитда ва вакуумда ёруғликнинг тарқалиш тезлиги ва тўлқин узунлиги. Частотанинг бу ифодасидан оптикавий соҳаларда частота учун ҳаддан ташқари катта сонлар ҳосил бўлади, масалан

$$\lambda = 3000\text{ Å} \text{ да } \nu = \frac{3 \cdot 10^{10}\text{ см/сек}}{3 \cdot 10^{-5}\text{ см}} = 10^{15}\text{ сек}^{-1}.$$

Иккинчи томондан, частотанинг бу қийматларини ҳисоблаш учун ёруғлик тезлигининг аниқ қийматини билиш зарур. Лекин ёруғликнинг тезлиги унинг тўлқин узунлигига қараганда каттароқ нозиклик билан ўлчанади. Шунинг учун, оптикавий спектроскопияда частота ўрнига тўлқин узунлигига тесқари пропорционал бўлган тўлқин сони ν' қўлланилади:

$$\nu' = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{n_{\text{муҳит}} \lambda_{\text{муҳит}}} = \frac{1}{\lambda_{\text{вакуум}}}.$$

Тўлқин сони ν' — 1 см да жойлашган тўлқин узунлик $\lambda_{\text{вакуум}}$ лар сонини билдиради. Тўлқин сони см^{-1} да ўлчанади. Жумладан, юқоридаги тўлқин узунлик $\lambda = 3000\text{ Å}$



17- расм. α -зарраларнинг ядрога сочилишини кузатиш учун қурилма. Φ — металл зар қоғоз; E — экран; M — микроскоп.

Резерфорд тажрибаси. Резерфорд тажрибасининг умумий схемаси 17-расмда келтирилган. Қўрғошин ғиштчаларидан қурилган ковак P ичида α -радиоактив модда жойлаштирилган. Радиоактив манбадан ҳамма томонларга қараб чиқаётган α -зарралар P ковак деворлари — қўрғошинда тўла ютилиб, фақат бир йўналишда — ковакнинг ингичка тирқишидан ингичка нур кўринишидаги α -зарралар дастаси ташқарига чиқа олади. α -зарралар йўлига олтин пуркалган юпқа зар қоғоз Φ қўйилган. θ бурчакка сочилган α -зарралар E экранга тушади ва шу ерда қайд қилинади. Бутун қурилма вакуумга жойлаштирилган.

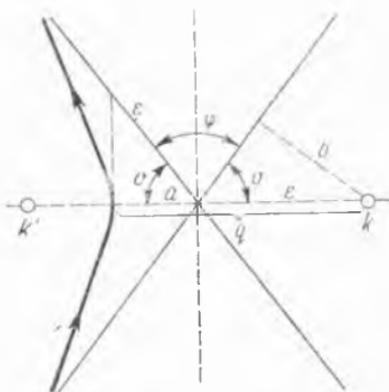
Кўпчилик α -зарралар зар қоғоздан ўтганда дастлабки йўналишларини сақлайди ёки кичик бурчакларга сочилади. Лекин Резерфорд баъзи α -зарраларни ҳаддан ташқари катта бурчакка (150° — 180°) сочилишини сезади. Бу ҳолни мавжуд моделлар асосида тушунтириб бўлмайди. Мавжуд моделларга биноан бу ҳол, Резерфорд айтганидек,

«худди сиз папирус қоғозига қаратиб тўпдан ўн беш фунтли снаряд отганингизда снаряд орқага қайтиб келиб сизни ишкантириши мумкинлигининг юқори даражада эҳтимолсизлиги» каби эди. α -зарралар зар қоғоз сиртидан худди кўзгудан қайтган нур каби қайтаётган эмасмикан, деган тахмин оддий тажриба асосида рад қилинди. Зар қоғозларини пачка қилиб дасталаб Φ ни ўрнига қўйилишида пачкани қалинлаштирилиши билан катта бурчакка сочилган α -зарралар сонининг ортиши кузатилди. Хулоса аниқ эди: α -зарраларнинг зарқоғоздан катта бурчак остида орқага қайтиши сирт ҳодиса бўлмасдан, балки олтин моддаси ёки атоми ичидаги номаълум куч таъсири натижаси эди. Нишон материални қалайга, платинага, кумушга, мисга, темирга, алюминийга ва ҳ. к. алмаштирилиб қўрилди. Металлнинг атом оғирлиги ортиши билан катта бурчакка сочилган α -зарралар сонининг ортиши аниқланди.

Тажрибалар натижасида Резерфорд шундай хулосага келди: α -зарраларнинг зар қоғоздан сочилиши фақат бир нуқтага мужассамланган катта мусбат заряднинг электр майдони таъсирида рўй бериши мумкин. Демак, атомларда жуда катта мусбат заряднинг электр кучи жуда кичик ҳажмга тўпланган экан. Шунинг учун α -зарра олтин атомининг кичик ҳажмида тўпланган катта мусбат заряд билан тўқнаш келгандагина катта бурчакка сочилади. Бу хулосага асосланиб Резерфорд 1911 йилда атомнинг ядро моделини эълон қилди.

Атомнинг ядро модели. Атомнинг ядро моделига асосан атом марказида ядро жойланган. Ядро ўлчамлари 10^{-12} см радиус билан характерланувчи ҳажмга эга. Ядронинг заряди эса миқдор жиҳатдан Ze га тенг бўлиб, мусбат ишорага эга. Ядро атрофида атомнинг қолган ҳажми бўйича эса Z донга электронлар булутига тақсимланган. Атомнинг деярли ҳамма массаси ядрога мужассамланган. Шундай қилиб, атомнинг ядро моделига биноан мазкур жараёндаги асосий ўзаро таъсир икки мусбат зарядли α -зарра билан $+Ze$ зарядли массив ядро ўртасида содир бўлади ва α -зарралар атомнинг массив ядросидан сочилади.

α -зарраларнинг атом ядросида сочилиш назарияси Резерфорд томонидан ишланиб чиқилган. Резерфорд назариясига кўра α -зарра билан атом ядроси ўртасидаги ўзаро таъсир кучи улар ўртасида мавжуд бўлган электростатик



18-расм. α -зарраларнинг ядродан сочилиш геометрияси a ва b — гиперболанинг ярим ўқлари, K — ядро.

тескари пропорционал бўлса, у куч конус кесими бўйича юз берувчи ҳаракатга олиб келади. Ўзаро таъсир кучи итарш кучи бўлса, ҳаракат траекториясининг конус кесими гипербола шаклида бўлади. Расмда α -зарранинг траекторияси йўғон чизиқ билан кўрсатилган гиперболанинг бир шоҳчасидан иборат. Гиперболанинг бир фокуси ядронинг ўрни K билан мос келади. α -зарра ўз йўналишини φ бурчакка ўзгартиради. Ядродан гипербола асимптотасигача, яъни α -зарранинг бошланғич йўналишигача энг қисқа масофа b ни *нишонга олиш параметри* дейилади. Табиийки, b қанча кичик бўлса, сочилиш бурчаги φ шунча катта бўлади. Нишонга олиш параметри билан сочилиш бурчаги ўртасидаги боғланишнинг миқдорий ифодасини аниқлайлик.

Даставвал энергиянинг сақланиш қонунидан фойдаланамиз: кинетик ва потенциал энергиялар йиғиндиси ўзгармасдир. α -зарранинг ядродан етарлича узоқ масофадаги тезлигини v деб белгиласак, унинг шу масофадаги тўла энергияси фақат кинетик энергиядан иборат бўлади. Энди шу энергияни α -зарранинг гипербола учидан ўтаётган моментдаги энергиясига тенглаштирсак, қуйидаги ифодага келамиз:

$$\frac{Mv^2}{2} = \frac{Mv_0^2}{2} + \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 q} \quad (3.6)$$

итарилиш кучи, холос. У ҳолда мазкур жараён учун электростатик Кулон итарш кучи қуйидагича ифодаланади:

$$F = \frac{2eZe}{4\pi\epsilon_0 q^2} \quad (3.5)$$

Бу ерда ϵ_0 — вакуумнинг диэлектрик сингдирувчанлиги, $\epsilon_0 = 8,86 \cdot 10^{12}$ А · сек/В · м, q — альфа-зарра билан ядро ўртасидаги масофа. Ядро билан α -зарра тўқнашуви геометрияси 18-расмда берилган. Механикадан маълумки, агар ўзаро таъсир кучи масофанинг квадратига

Бу ерда M — α -зарранинг ҳаракатсиз ҳолдаги массаси. Теңгламанинг ўнг томонидаги биринчи ҳад α - зарранинг гипербола учидан ўтаётганидаги кинетик энергияси, иккинчи ҳад электростатик итариш кучининг электростатик потенциал энергияси, яъни $F = -\frac{dU}{dr}$. (3.6) нинг икки томонини $Mv^2/2$ га қисқартирамиз ва натижани қўйидаги кўришида ёзамиз:

$$\frac{v_0^2}{v^2} = 1 - \frac{2D}{q}. \quad (3.7)$$

Биз D орқали қўйидаги доимий қийматни белгиладик:

$$D = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 Mv^2}.$$

Классик механиканинг сақланиш қонунларига биноан ядронинг марказий электростатик майдонидаги α -зарра ҳаракатида энергиянинг сақланиши билан бир қаторда ҳаракат миқдори momenti ҳам сақланади, яъни

$$Mvb = Mv_0q$$

ёки

$$\frac{v_0}{v} = \frac{b}{q}. \quad (3.8)$$

Гиперболанинг фокусидан учигача бўлган масофани унинг эксцентриситети e билан асимптотасининг координата ўқига nisbatan ҳосил қилган бурчагини ϑ орқали ифода-лаймиз:

$$q = e(1 + \cos \vartheta).$$

Натижага олиш параметри b билан гиперболанинг эксцентриситети e ўртасидаги боғланишни расмдан осон аниқлаш мумкин:

$$e = b/\sin \vartheta,$$

у ҳолда

$$\frac{b}{q} = \frac{\sin \vartheta}{1 + \cos \vartheta} = \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2}. \quad (3.9)$$

(3.9) ифодадан q нинг қийматини (3.7) га қўйиб, қўйида-гини ҳосил қиламиз:

$$\frac{v_0^2}{v^2} = 1 - \frac{2D}{b} \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2}.$$

Ҳосил бўлган тенгламанинг чап томони (3.8) ва (3.9) га кўра $\operatorname{tg}^2 \frac{\vartheta}{2}$ га тенглигини ҳисобга олсак, нишонга олиш параметрини ϑ бурчак билан қуйидаги боғланишга келамиз:

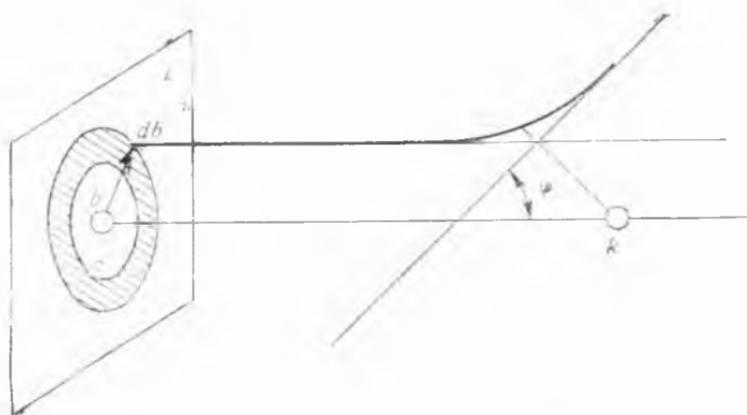
$$b = D \operatorname{tg} \vartheta$$

ёки расмдан $\varphi = \pi - 2\vartheta$, демак,

$$b = D \operatorname{ctg} \frac{\varphi}{2} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 Mc^2} \operatorname{ctg} \frac{\varphi}{2}. \quad (3.10)$$

Биз нишонга олиш параметри, яъни ядродан α -зарранинг чексизликдаги траекториясига туширилган перпендикуляр билан α -зарранинг ядродан сочилиш бурчаги ўртасидаги муносабатни топдик. Энди берилган бурчакка сочилаётган α -зарраларнинг умумий сонини осон аниқласа бўлади. Узоқ масофадан ядрога тушаётган α -зарралар дастасига перпендикуляр текислиқни тасаввур қилайлик. Ядронинг E текисликдаги проекциясини 19-расмдагидек C нуқта билан белгилайлик. У ҳолда φ ва $\varphi + d\varphi$ бурчак интервалида сочилаётган ҳамма α -зарралар радиуслари b ва $b + db$ бўлган айланаларнинг текисликда ҳосил қилган ҳалқаси орқали ўтади. Агар бирлик юздан бирлик вақт ичида ўтган α -зарраларнинг сонини бирга тенг деб ҳисобласак, мазкур ҳалқадан ўтган α -зарралар сони қуйидагича ифодаланади:

$$d\sigma = 2\pi b |db|.$$



19-расм. α -зарралар сочилишининг экранда қайд қилиниши.

Нишонга олиш параметрининг дифференциалини ва ўзини (3.10) формуладан келтириб қўйиб φ ва $\varphi + d\varphi$ бурчаклар ўртасида сочилаётган α -зарралар сонини топамиз:

$$d\sigma = \pi D^2 \left| \frac{\cos \frac{\varphi}{2}}{\sin^3 \frac{\varphi}{2}} \right| \cdot |d\varphi|.$$

φ ва $\varphi + d\varphi$ бурчак остида ядродан сочилаётган зарралар бирлик сферанинг $d\Omega = 2\pi \sin \varphi d\varphi$ фазовий бурчак остидаги ҳалқасида бир текис тақсимланади. φ ва $\varphi + d\varphi$ бурчакда сочилаётган ҳамма зарралар тўла сони $d\sigma$ ни бирлик сферада $d\Omega$ фазовий бурчак ҳосил қилган ҳалқанинг юзига нисбати бирлик сферанинг $d\Omega$ фазовий бурчак остидаги бирлик юзида қайд қилинган зарралар сонини беради.

Бу катталик α - зарраларнинг бирлик фазовий бурчакда сочилиш эҳтимолини беради:

$$W(\varphi) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{D^2}{4 \sin^4 \frac{\varphi}{2}} = \left(\frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\varphi}{2}}. \quad (3.11)$$

Охириги формула якка ядродан α -зарралар сочилишининг Резерфорд формуласидир. Сочилган α -зарралар сонини билган ҳолда (3.11) формула орқали боғланган Z , M , φ , v ўртасидаги ҳар қандай муносабатни аниқлаш мумкин.

Бирлик ҳажмдаги ядролар сони n га тенг бўлсин. Агар ядролар зар қоғозда бир текис тақсимланган ва бир-бирини тўсмайди деб фараз қилсак, сочувчи ядроларнинг ҳаммасини ҳиссаси ҳисобга олиниши учун (3.11) формулани n га кўпайтиришимиз керак. Агар энди тушаётган α -зарраларнинг зичлигини N деб олсак, $d\Omega$ фазовий бурчакка сочилган зарраларнинг ўргача сони қуйидагича аниқланади:

$$n \cdot N \cdot W(\varphi) d\Omega = n \cdot N \left(\frac{Ze^2}{4\pi \epsilon_0 Mv^2} \right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4 \frac{\varphi}{2}}.$$

Бу формуладаги n , N , Z , e , ϵ_0 , M ва v катталиклар тажриба вақтида ўзгармас қолади. Қўришиб турибдики, α -зарранинг бошланғич тезлиги v дан бошқа ҳамма катталиклар доимий. Энди тажриба шароитини ўзгартирмасак, ҳар қандай

табий α -радиоактив манбадан ҳосил бўлаётган α -зарралар деярли бир хил тезликка эга. Шунинг учун охириги тенгликни ҳар икки томонида $\sin^4 \frac{\varphi}{2}$ га кўпайтириб,

$$n \cdot N \cdot W(\varphi) \sin^4 \frac{\varphi}{2} d\Omega = n \cdot N \left(\frac{Zv^2}{4\pi\epsilon_0 Mv^2} \right)^2 d\Omega \quad (3.12)$$

кузатишни фазовий бурчакнинг фақат битта қийматида олиб борсак, (3.12) тенгламанинг ўнг томони ўзгармас сонга айланади:

$$n \cdot N \cdot W(\varphi) \cdot \sin^4 \frac{\varphi}{2} d\Omega = \text{const.} \quad (3.13)$$

Шундай қилиб, Резерфорд формуласида фақат сочилиш бурчаги ўзгарса, у (3.13) кўринишига келади. Тажрибада даставвал (3.13) шартни жуда катта аниқликда бажарилиши аниқланди.

Резерфорд кашфиёти фан олдида янги проблемаларни қўйди. Атомнинг ядро модели классик механика ва электродинамика қонунларига зид эди.

Ньютоннинг ҳаракат қонунларига ва электр кучлари ўзаро таъсири ҳақидаги Кулон қонунига асосланган Резерфорд модели атом барқарорлиги ҳақидаги маълумотга зид эмас. Аммо атомнинг бу хил содда тасвири классик электродинамикага батамом зид келади. Максвелл қонунларига биноан тезланиш билан ҳаракат қилаётган электрон ўзидан электромагнит тўлқиндан иборат нурланиш чиқариши керак. $\frac{v^2}{r}$ (бу ерда r — орбита радиуси) тезланиш билан ҳаракат қилаётган электроннинг нурланиш қуввати классик электродинамикага биноан қуйидаги ифода билан аниқланади:

$$P = 2 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c} \right) \frac{1}{3m_e^2 r^4} = \left(\frac{2288 \cdot 10^{-26}}{r^4} \right) \text{эВ/сек.}$$

Агар атом ўлчамини тахминан 1 \AA деб ҳисобласак, нурланиш қуввати $P = 3 \cdot 10^{10} \text{ эВ/сек}$ га тенг бўлади. Демак, энергия йўқотиш жуда катта тезлик билан рўй берар экан. Электроннинг энергия йўқотиши билан унинг энергияси абсолют қиймати бўйича жуда тез ўсади (чунки электроннинг боғланиш энергияси манфий ва унинг камайиши абсолют қиймати ўсишини вужудга келтиради),

бу эса r нинг тез камайишига ва, натижада, $P \sim r^4$ сабабли электроннинг энергиясини яна тезроқ камайишига олиб келади. Электрон ўз энергиясини йўқотиши оқибатида тахминан 10^{-16} сек да атом ядросига келиб тушади. Бу эса Резерфорд формуласининг асосига қўйилган классик назария қонунилари атом барқарорлиги масаласида нотўғри натижаларга олиб келишини кўрсатади.

Балки Резерфорд формуласи нотўғридир ва марказий ядро, унинг атрофидаги орбита бўйлаб ҳаракатланувчи электрон ҳақидаги атомнинг Резерфорд модели ҳақиқатдан балки узоқдир, деган савол туғилиши мумкин. Резерфорднинг классик ҳисоблашлари тахминан тўғри, унинг атом модели эса чин атом тасавури пойдеворининг синчи эканлигини кўрсатиши учун α -зарраларнинг де-Бройль тўлқин узунлигини аниқлаймиз. Агар радиоактив манбадан чиқётган α -зарраларнинг ўртача тезлигини $2 \cdot 10^9$ см/сек деб ҳисобласак, унинг де-Бройль тўлқин узунлиги

$$\lambda = \frac{h}{Mv} = 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}$$

га тенг. α -зарранинг бу де-Бройль тўлқин узунлиги олтин ядросининг характерли ўлчамлари $3 \cdot 10^{-12}$ см (α -зарранинг ядрога энг яқин кела олиш масофаси) дан 6 марта кичик. Демак, биз α -зарраларнинг ядродан сочилиши масаласида уларни классик зарра сифатида қарашимиз мумкин.

Шундай қилиб, классик физикага асосан ядро атрофида айланаётган электрон ўзидан доимо нурланиш чиқариб энергия йўқотиши оқибатида ядрога тушиши керак, яъни классик физикага асосан Резерфорд модели кўрinishидаги ҳар қандай атом беқарордир.

15- §. Бор постулатлари. Атомнинг энергетик сатҳларини ўрганиш

Борнинг квантлаш шarti Резерфорднинг атом тузилиши моделига асосан электрон атом ядроси атрофида электростатик куч таъсирида ҳаракатланади. Электр зарядли зарралардан ташкил топган атом модели Ньютон механикаси ва Максвелл электродинамикасига зид келар эди. Бу модель атомнинг барқарор мавжудлигини ва унинг

чиқариш ва ютиш чизиқли спектрларини тушунтира олмасди. Иккинчи томондан, ёруғликнинг фотон назарияси классик электродинамикага бўлган ишонччи камайтирган эди. Планкнинг квант ғоясини эслайлик. Квант ғоясида ҳар бир чиқариш ёки ютиш спектр чизигига маълум ν частота билан тебранаётган гармоник осцилляторнинг турғун стационар ҳолати тўғри келади деб фараз қилиниб, абсолют қора жисмнинг нурланиш назарияси яратилган эди. Классик назариядан фарқли равишда квант осцилляторлар энергиянинг квантланган порцияларини ютиши ва чиқариши мумкин.

1913 йил Дания физиги Нильс Бор бу осцилляторларнинг ўзаро бир-бири билан ва атом тузилиши билан боғланишини тушуниш йўлида буюк қадам қўйди. Н. Бор электронларни атом тузилишида Планк ғоясига кўра квазиэластик куч таъсиридаги осцилляторлар сифатида қарашдан иборат нуқтаи назардан воз кечди. У атомнинг барқарорлигига ва ютиш ҳамда чиқариш спектрал чизиқларининг мавжудлигига асосланиб ядро атрофида электроннинг динамик ҳаракатини дискрет стационар ҳолатларда юз беради деб фараз қилди. Бу нурланишнинг дискрет квантлар — фотонлар ғояси билан Резерфорднинг атом тузилиши моделининг уйғунлашуви эди. Нильс Бор атом тузилишининг квант назарияси асосига қўйидаги икки постулатни қўйди:

I. Классик механикага биноан атом ядроси атрофида электронлар учун ўринли бўлган чексиз кўп орбиталардан ҳақиқатда фақат баъзиларигина мавжуд. Бу турғун орбиталар бўйича ҳаракатланаётган электронлар учун нурланиш, яъни энергия йўқотилиши содир бўлмайди. Дискрет энергетик сатҳларга тўғри келувчи турғун орбиталар маълум аниқ квант шартларига бўйсунлади.

Квант шартлари ёки, баъзан айтилишича, барқарорлик шартлари қуйидагича таърифланади: таъсир, яъни импульснинг йўлга кўпайтмаси таъсир кванти h га бутун карралидир.

Электронларнинг атом ядроси атрофидаги орбита бўйлаб ҳаракатида барқарорлик шарти умумий ҳолда умумлаштирилган координаталар орқали қуйидаги кўринишда ифодаланади:

$$\oint p_i dq_i = n_i h, \quad (3.14)$$

Бу ерда q_i — умумлаштирилган координата, p_i — унга мос ҳаракат миқдори моменти, n_i — бутун сон, биз кейинчалик кўрамизки, n_i бош квант сони деб юритилади. \oint белги q_i умумлаштирилган координата ўзгаришининг ҳамма соҳаси бўйича интеграллашни билдиради. (3.14) ҳар қандай даврий ҳаракат учун квантлаш шартини умумий ҳолда тавсифлайди.

II. Электронлар ўз орбиталари бўйича ҳаракатида нурланиш чиқармас экан атомларнинг нурланиш чиқариши ёки ютиши электронларни барқарорлик шартига бўйсунувчи орбиталарнинг биридан иккинчисига ўтишида содир бўлади. Бу постулат электронларнинг бир барқарор орбитадан иккинчисига ўтишида атом томонидан ёруғлик чиқариш ёки ютишини фотон механизми асосига қўяди.

Мисол тариқасида Ze зарядли ядро атрофидаги айланма орбитада бир текис айланаётган битта электроннинг ҳаракатини кўрайлик. Мусбат $+e$ ва манфий $-e$ заряд орасидаги ўзаро таъсир кучи

$$F = \frac{Ze^+ e^-}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{a}{r^2}.$$

Бу ерда r — зарядлар ўртасидаги масофа ёки айлана радиуси.

Айлана бўйлаб v чизилми тезликда ҳаракат қилаётган электрон бу куч таъсирида, классик механикага асосан, марказга интилма тезланиш олади:

$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{a}{r^2}.$$

Ушбу ифодадан орбита радиусини аниқлаймиз:

$$r = \frac{a}{m_e v^2}, \quad (3.15)$$

m_e — электроннинг массаси = $9 \cdot 10^{-31}$ кг. Айланма орбитада электроннинг айланиш частотаси тезликни босиб ўтилган йўлга нисбати кўринишида топилади:

$$\nu^{\text{ор}} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{a}{m_e r^3}}. \quad (3.16)$$

Электроннинг кинетик энергияси эса

$$T_{\text{кин.}} = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{a}{2r}. \quad (3.17)$$

Электронни r масофадан чексизликка кўчириш учун бажарилган ишни ҳисоблаб, электроннинг потенциал энергиясини топамиз:

$$V_{\text{пот.}} = - \int_r^{\infty} F dr = - \int_r^{\infty} \frac{a}{r^2} dr = - \frac{a}{r}.$$

Айланма орбита бўйлаб ҳаракатланаётган электроннинг тўла энергияси эса

$$E = T_{\text{кин.}} + V_{\text{пот.}} = - \frac{a}{2r}. \quad (3.18)$$

Ҳозиргача фақат классик назария нуқтаи назардан иш кўрдик. Энди (3.14) формулада ифодаланган барқарорлик шартини қўллайлик. Электронни айланма орбита бўйлаб текис ҳаракатида $r = \text{const}$ ва биргина умумлаштирилган координата азимут бурчаги φ дир. Бу ўзгарувчи координата φ га мос момент электроннинг ҳаракат миқдори моментидир, яъни $p_{\varphi} = m_e v r$. Электроннинг орбита бўйлаб ҳаракатида φ азимут бурчаги 0 дан 2π гача ўзгаради. Шундай қилиб, бизнинг мисол учун барқарорлик шarti қуйидагича ёзилади:

$$\int_0^{2\pi} m_e v r d\varphi = nh$$

ёки интеграллашни бажарсак,

$$m_e v \cdot 2\pi r = nh. \quad (3.19)$$

Барқарорлик шартининг (3.19) ифодасидан фойдаланиб n -ҳолат турғун орбитасининг радиусини (3.15) формуладан

$$r_n = \varepsilon_0 \frac{h^2}{\pi m_e Z e^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.20)$$

Электроннинг орбита бўйлаб айланиш частотасини (3.16) формуладан

$$\nu_n^{\text{ор}} = \frac{1}{\varepsilon_0^2} \frac{Z^2 e^4 m_e}{4h^3} \frac{1}{n^3}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.21)$$

ва тўла энергиясини (3.17) формуладан

$$E_n = - \frac{1}{\varepsilon_0^2} \frac{Z^2 e^4 m_e}{8h^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.22)$$

аниқлаймиз. Охирги тенглама кўрсатадики, бутун сон n нинг ортиши билан турғун орбитада айланаётган электроннинг тўла энергияси ўзининг максимал қиймати 0 гача ўзгаради.

Электроннинг бир турғун орбитадан иккинчисига, масалан, m ҳолат орбитасидан n га ўтишида энергия порциясининг ютилиши (агар $n > m$) ёки чиқарилиши содир бўлади:

$$\Delta E = E_n - E_m = \frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{Z^2 e^4 m_e}{8h^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (3.28)$$

Н. Бор ғоясига биноан бу энергия монохроматик нурланишга киради ва унинг частотаси Планк доимийси орқали аниқланади:

$$\Delta E = h\nu. \quad (3.24)$$

Ҳосил бўлган ифодани (3.3) билан алмаштирадик, Ридберг доимийси учун қуйидаги тенгликка келамиз:

$$R = \frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{m_e Z^2 e^4}{8h^3}. \quad (3.25)$$

Бу ерда R нинг ўлчов бирлиги сек^{-1} . R ни см^{-1} бирликка ўтказиш учун (3.25) ифодани ёруғлик тезлигига бўлиш керак.

Шундай қилиб, спектр чизиқларнинг формуласи (3.24) ни келтириб чиқаришда Бор назариясида Планк доимийсига икки марта мурожаат қилинди. h нинг биринчи киритилишида атомнинг барқарорлиги таъминланди; h бўйича маълум турғун орбиталар танланди. Электроннинг бир турғун орбитадан иккинчисига ўтишидаги нурланиш частотаси h нинг иккинчи марта киритилишида аниқланди. Атом тузилишининг Бор моделида нурланиш чиқариш ва ютиш механизми ҳақида ҳеч қандай маълумот берилмайди (жуда кичик частотаталарга тааллуқли ҳол бундан мустаснодир). Қўшни жойлашган катта орбиталардаги ўтишни қурайлик, яъни

$$\frac{1}{m^2} - \frac{1}{(m+1)^2} \approx \frac{2}{m^3}.$$

У ҳолда (3.24) дан нурланиш частотаси қуйидагича аниқланади:

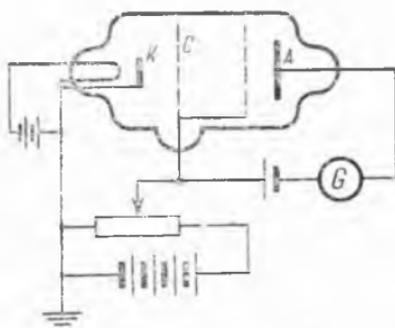
$$\nu = \frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{Z^2 e^4 m_e}{4h^3} \frac{1}{m^3}$$

Бу ифодани водород ҳоли учун (3.21) билан таққосласак, $\nu = \nu^{\text{ор}}$ эканини кўрамиз. Демак, кичик частоталар чегаравий ҳолда чиқарилган ёки ютилган ёруғлик электроннинг айланиш частотаси билан мос келади, яъни диполь тебраниш билан Планк доимийси характерловчи нурланиш механизми чегаравий ҳолда нурланаётган классик диполга тўғри келади.

Д. Франк ва Г. Герц тажрибаси. Резерфорднинг атом ҳақидаги планетар тасаввурига асосланган Н. Бор атом модели—электронларнинг маълум турғун орбиталарда ҳаракатланиши постулат сифатида қабул қилинган эди. Бундан шундай хулоса келиб чиқадики, агар атомда электроннинг аниқ бирор ҳаракат схемасигина мумкин бўлса, атом ситемасининг тўла энергияси бу ҳаракатга мос келувчи маълум қийматгагина эга бўлади. У ҳолда энергиянинг мумкин бўлган қийматлари ўртасида оралиқ, узилиш мавжуд бўлади ва шунинг учун, атомнинг ички энергияси ташқаридан берилаётган энергия ҳисобига фақат маълум дискрет қийматларгагина ўзгара олади. Бу эса биз юқорида таъкидлаган атомнинг чиқариш ва ютиш спектр чизиқлари ҳақидаги экспериментал натижаларга мосдир. Шу билан битта муҳим савол туғилади. Шу спектр чизиқларига мос келувчи ва электронларнинг турғун орбита бўйлаб ҳаракати билан характерланувчи атомнинг дискрет энергетик сатҳи фақат ёруғлик нурланиш жараёнигагина хосми ёки атом ички тузилишининг табиатига хосми? Атом энергетик сатҳлари фақат нурланиш жараёнини характерловчи схема бўлмасдан, унинг ички тузилиш табиатига хос эканлигини текшириш учун атомга нурланиш кўринишида бўлмаган бошқа хил энергия бериб уни бир энергетик ҳолатдан иккинчисига ўтишини кузатиш лозим. Бу фикрни бевосита текшириб кўриш Бор модели учун катта аҳамият касб этади. Атомларни тўғридан-тўғри электронлар орқали бомбардимон қилиб, электронларнинг кинетик энергияси ҳисобига атомлар ички энергиясини

ўзгартиришга ҳаракат қилиш йўли билан мазкур фикрни амалга ошириш мумкин эди.

1914 йилда немис физиклари Жемс Франк ва Густов Герц томонидан моҳирона қўйилган эксперимент атом энергетик сатҳларини кузатишга бағишланган эди. Бу эксперимент ва ундан рағбатланиб амалга оширилган бошқа хил экспериментлар атом энергетик сатҳлари, энергетик сатҳларга мос атом ҳолатлари, уларнинг ва умуман атом



20-расм. Франк ва Герц тажрибасининг схемаси. *A* — анод; *K* — катод; *C* — тўр.

тузилиши ҳақидаги муаммонинг калити бўлди. 20-расмда Франк ва Герц экспериментнинг схемаси берилган. Тажриба қурилмасининг асосий қисми электрон трубкадир.

Трубка текшириладиган атомлар билан тўлдирилган. Трубкадаги ушбу атомлар газининг босими (ёки зичлиги) атомларнинг эркин югуриш йўлини трубка ўлчамига тўғри келадиган қилиб таплаган (Франк ва Герц синмоб буғлари билан иш қўрган). Трубка ичига қиздирилувчи катод *K*, *C* тўр ва *A* анод жойлаштирилган. *C* тўрға катоддан чиқаётган электронларни тезлатувчи V_c потенциал берилади. Тезлатувчи потенциалнинг қиймати реостат орқали бир текис ўзгартирилиши мумкин. Тўр билан анод ўртасида эса тўхтатувчи кичик потенциал берилган.

Юқорида фотоэлектрик эффект ҳодисасини ўрганишга бағишланган Р. А. Милликен тажрибасини баён этишда таъкидланган контакт потенциаллар фарқи бу тажрибада ҳам албатта эътиборга олинган. Тезлатувчи потенциал нолга тенг бўлган ҳолда ҳам ток нолдан фарқли бўлади, чунки анод ва катод материаллари ўзаро айнан бўла олмаганлиги сабабли улар ўртасида электронларни анодга хайдовчи қўшимча контакт потенциаллар фарқи мавжуд. (Тесқари йўналишда ток мумкин эмас, чунки электронлар фақат қиздирилган катоддан чиқади). Худди шу контакт потенциаллар фарқини компенсациялаш учун тормозловчи потенциал бўлиши ва тажриба натижаларини талқин қилишда ҳисобга олиниши керак.

Катод ва тўр орасига қўйилган тезлатувчи потенциал воситасида муайян тезланиш олган электронлар электр майдондан ҳоли соҳага ўтади. Трубкага тўлдирилган газ атомлари билан тезлатилган электронларнинг тўқнашиши асосан худди шу соҳага тўғри келади. Тўқнашишнинг эластик ёки ноэластик характерини аниқлаш учун A анод билан унга яқин тўр ораллигида тўхтатувчи потенциал бўлади.

Шуни эслатиш лозимки, бошланғич кинетик энергиянинг ўзгаришига қараб тўқнашишлар эластик ёки ноэластик турга ажралади. Агар икки зарранинг тўқнашиш жараёнида уларнинг бошланғич кинетик энергияларининг йиғиндиси тўқнашиш содир бўлгандан кейинги кинетик энергиялари йиғиндисига тенг бўлса, гарчи жараёндан кейин энергия бошқача тақсимланган бўлса ҳам, бу жараённи *эластик тўқнашиш* дейилади. Акс ҳолда, агар тўқнашиш жараёнида бошланғич кинетик энергиянинг бир қисми тўқнашувчи зарралардан бирининг ички энергиясини ўзгартиришга сарф бўлса, бундай жараённи *ноэластик тўқнашиш* деб юритилади.

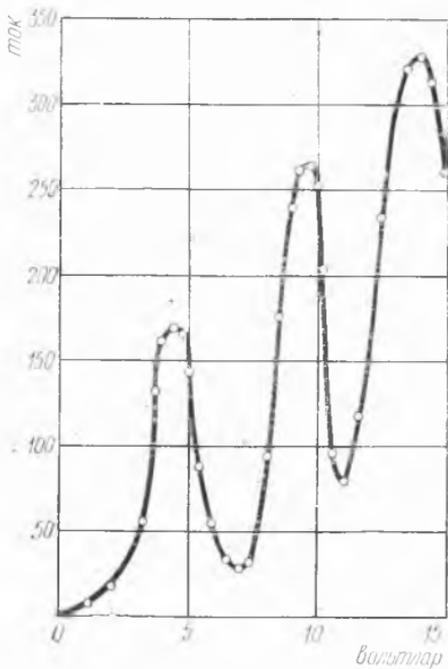
Франк ва Герц тажрибасида электрон билан газ атоми тўқнашувининг эластик ёки ноэластиклигини характерлаш учун тўқнашишдан кейин тезликлар тақсимотини текшириш зарур эди. Бу тўхтатувчи потенциал воситасида аниқланди. Агар тўқнашиш жараёнида электрон бутун кинетик энергиясини йўқотган бўлса, у тўхтатувчи потенциални енга олмайди ва анодга етиб кела олмайди. Кинетик энергияси тўхтатувчи потенциални енгилганга етадиган электронларгина анодга келиб тушади.

Бу ҳол анод занжирида пайдо бўлган токни G гальванометр орқали қайд қилиниши билан аниқланади.

Тўр потенциали V_c нинг ортиши билан катоддан чиқаётган электронларнинг янада кўп қисми анодга етиб кела бошлайди. Анод занжирида ток дастлаб монотон ўсади. Лекин токнинг тўр потенциалига боғлиқ, ўсиши V_c нинг маълум қийматида тўсатдан тўхтайтиди ва сўнг кескин камаяди. 21-расмда берилган анод токининг тезлатувчи потенциал V_c га боғланиши Франк ва Герц тажрибасида аниқланган. Бу тажрибада электронлар билан симоб атомлари бомбардимон қилинган. Анод токининг бошланғич ўсувчи қисми термоэлектрон асбобларнинг вольт-ампер характе-

ристикаси хос типик кўри-нишга эга. Лекин расмдан кўриб турибмизки, $V_c = 4,9$ В да ток кескин пасайган, сўнгра яна монотон ўсган. V_c нинг 4,9 В дан катта маълум қий-матларида токнинг сустроқ сакраши кузатилган.

Франк ва Герц олган эксперимент натижаларини ҳозирги замон атом тасав-вури нуқтаи назаридан қарайлик. Симоб атомлари ва шунингдек, водородсимон ёки умуман ҳамма атомлар дискрет энергетик сатҳларга эга, шунинг учун кам кинетик энергияга эга электронлар уларни уйғота олмайди. Электронлар атомнинг асосий ҳолат энергетик сатҳи билан қўшни юқори энергетик сатҳи ўр-



21- расм. Вольт-ампер характеристика.

тасидаги энергия фарқига тенг $\Delta E = E_2 - E_1$ энергия бера оладиган кинетик энергияга эга бўлганларидagina симоб атомларини уйғота олади. Энергия фарқи ΔE ни электрон зарядига бўлсак, уйғотиш потенциални аниқлаймиз. Электронлар бу энергияга эришганларида симоб атомлари билан ноэластик тўқнашади ва натижада деярли ҳамма энергиясини, тўғривоғи, ΔE га тенг энергиясини атомга беради. Энергияси кескин камайган электрон энди анодга етиб бора олмайди. Шу сабабдан анод токи кескин пасаяди. Юқоридаги расмдан симоб атомининг биринчи уйғониш потенциални 4,9 В га тенглигини кўраимиз. Энергияси 4,9 эВ дан ортиқ электронлар ҳам симоб атомлари билан ноэластик тўқнашишда бўлади. Бу тўқнашишда улар 4,9 эВ энергиясини симоб атомга беради ва ортиқча кинетик энергияси ҳисобига тўхтатувчи потенциални енгиб анодга етиб келиши ҳам мумкин. Шунинг учун V_c нинг 4,9 В қийматидан сўнг ток яна монотон ўсади.

Биринчи уйғониш потенциалли *резонанс потенциал* деб аталади ва у атомнинг энг паст энергетик сатҳидан унга қўшни юқори энергетик сатҳига ўтишга мос келади. Электронлар энергиясининг атом сатҳлари энергия фарқига тенг қийматларидагина электронлар билан тўқнашган атомларнинг уйғониш эҳтимоллиги катта бўлади. Шунинг учун симоб атоми учун токнинг расмда кўрсатилган биринчи сакраши $V_c = 4,9$ В да кескин. Электронлар энергиясининг қиймати икки симоб атомини бирин-кетин уйғотиш учун етарли бўлган $V_c = 9,8$ В потенциалда анод токи сакрашининг кескинлик даражаси сушлашди.

Электронлар билан тўқнашишда пастки энергетик сатҳдан қўшни энергетик сатҳга ўтган, яъни ортиқча энергия олиб уйғонган симоб атоми бу энергияни бирор вақт ўзида сақлайди, сўнгра эса ғалаёнланиш таъсирида ортиқча энергияни нурланиш сифатида қайтариб чиқаради ва ўзининг асосий ҳолатига қайтади. Биламизки, симоб атоми учун сатҳлар энергия фарқи $\Delta E = E_2 - E_1 = 4,9$ эВ га тенг. У ҳолда Н. Борнинг иккинчи постулатига кўра симоб атоми ўзининг асосий ҳолатига ўтишда $4,9$ эВ энергиянинг ҳаммасини монохроматик ёруғликнинг битта кванти тарзида чиқариши керак:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 4,9 \text{ эВ} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}.$$

Бундан λ ни аниқласак,

$$\lambda = hc / \Delta E_2 = \frac{6,6 \cdot 10^{-27} \cdot 3 \cdot 10^{10}}{4,9 \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}} \approx 2520 \text{ \AA}.$$

Демак, Н. Бор атом модели тўғри бўлса, $4,9$ эВ га тенг энергияли электронлар билан бомбардимон қилинаётган симоб атоми фақат битта $\lambda \approx 2520 \text{ \AA}$ ультрабинафша чизикдан иборат спектр бериши керак. Назарий ҳисоб натижасини тажрибада текшириб кўриш мақсадида Франк ва Герц электрон трубкини кварцдан ясашди. Кварц ультрабинафша нурни ютиб қолмайди. Экспериментда шу нарса аниқланди. Тезлаштирувчи потенциал $V_c < 4,9$ В да электрон трубкадаги симоб буғи ҳеч қандай нурланиш бермади. $V_c > 4,9$ В да эса симоб буғи фақат битта $\lambda = 2536 \text{ \AA}$ ультрабинафша чизик характерловчи нурланиш чиқара бошлади.

Франк ва Герц яратган ўлчаш қурилмасида ионлаштириш потенциални ҳам аниқлаш мумкин. Атомни *ионлаштириш потенциали* деб атомдан электронларни ажратиш учун зарур бўладиган ионлаштириш энергиясининг электрон зарядига нисбатини атаймиз. Атомнинг ҳар хил энергетик ҳолатларининг ионлаштириш потенциални ўлчаш атом беқарор (уйғотилган юқори) энергетик ҳолатлари энергияларининг $E_1, E_2, \dots E_n$ қийматларини аниқлашга имкон беради.

Электронлар билан тўқнашиш натижасида ионлашган атомнинг мусбат ионлари токини ўлчаш йўли билан ионлаштириш потенциални аниқлаш мумкин. Бу хил ўлчашларни ўтказиш учун тўр ва анод потенциаллар фарқини катталаштириш керак. У ҳолда тўр билан анод оралиғида электронларни тормозловчи, атомларнинг мусбат ионларини эса тезлатувчи майдон вужудга келади. Бу хил тажрибада G гальванометр фақат ионлаштириш потенциалдан катта V_c нинг қийматларидагина пайдо бўлган анод токини қайд қилади.

Хулоса қилиб шуни айтишимиз лозимки, Франк ва Герц тажрибалари атомларда дискрет энергетик сатҳлар мавжудлигини бевосита исботлади.

16- §. Водород атомининг Бор назарияси

Водород атоми чизиқли спектрлари ва энергетик сатҳларини ўрганишни Бор постулатларининг татбиқи сифатида кўрамиз. Дастлаб водород атомини ўрганиш устида ўтказилган экспериментларнинг натижалари билан қисқача танишамиз. Водород атомининг чиқариш ва ютиш спектри яққол тасвирга эга. Спектрнинг қўшни чизиқлари частоталарининг фарқи частоталарнинг катталашishi билан камайиб боради. Водород спектри чизиқларининг жойлашиш қонунияти математик равишда Бальмер ҳамда Ридберг формулалари билан ифодаланadi.

Водород атоми нурланишини ўрганишда аниқланган Лайман, Бальмер, Пашен, Брэккет ва ҳ. к. спектр сериялари (3.3) дан аёнки $n \rightarrow \infty$ да аниқ чегаравий лимитга интилади. Бу ҳол ҳар бир серия учун ўз частота ўзгариш соҳасини аниқлашга имкон беради. Масалан, электроннинг биринчи квант орбитага ($m = 1$) ўтишини тасвир-

ловчи Лайман серияси учун частота ўзгариш соҳаси $3R/4$ дан R гача. Электроннинг иккинчи квант орбитага ($m = 2$) ўтишини тасвирловчи Бальмер серияси учун эса частота ўзгариш соҳаси $\frac{5}{36} R$ (тўлқин узунлик $\lambda_1 = 6562,8 \text{ \AA}$ га мос келувчи сериянинг биринчи қизил чизиги) дан $\frac{R}{4}$ гача. 22- расмда водород атомининг ҳар хил сериялар чиқариш чизиқлари учун бевосита ўлчанган тўлқин узунлик қийматлари келтирилган.

Тўлқин узунлик (частота) ларнинг ўзгариш қонунияти классик физика қонуниятларига кескин зид. Ҳақиқатан ҳам, классик физикага кўра, агар электроннинг ядро атрофида боғланишида у битта эркинлик даражасига эга десак, унинг спектри битта частотадан ва ҳамда частота обертонларидан иборат бўлиши, агар учта эркинлик даражасига эга десак, у ҳолда электрон учун учта асосий частоталар ва уларнинг обертонлари мавжуд бўлиши керак эди. Ҳақиқатда эса водород атоми спектрининг обертонлари, яъни гармоник қатор ҳосил қилувчи частоталар кузатилмайди.

Водород атомининг Бор назарияси. Биз энди водород атомини тавсифлаш учун Бор постулатларини қўллаймиз.

Бор постулатига кўра электроннинг ҳаракат миқдори (ёки импульс) моменти Планк доимийсига бутун сон каррали бўлган орбиталаргина турғундир. Бу (3.19) формулада ифодаланган эди.

$$m_e v_n r_n = n\hbar, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}.$$

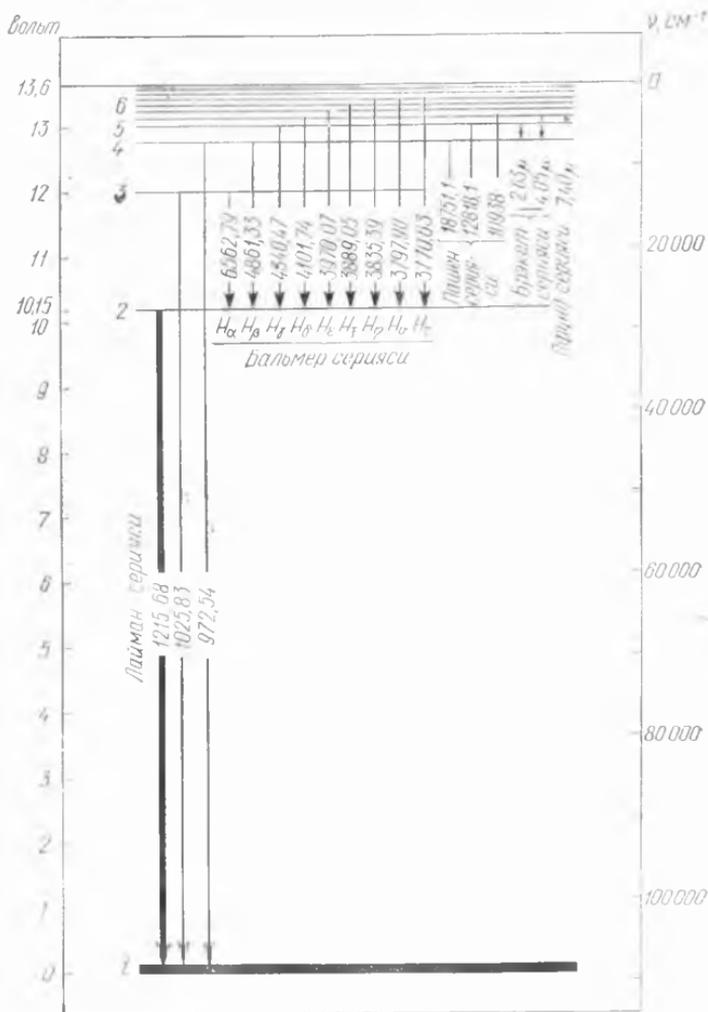
Бу ерда r_n — электроннинг айлана шаклидаги орбитасининг радиуси. Электроннинг ҳаракат миқдори $m_e v$ учун унинг де-Бройль тўлқин узунлиги орқали ифодаси (2.2) ни эсласак,

$$m_e v_n = h/\lambda,$$

юқоридаги (3.19) ифодани

$$2\pi r_n = n\lambda \quad (3.26)$$

кўринишда ёза оламиз. Демак, электрон орбитасининг айлана узунлиги электроннинг де-Бройль тўлқин узунлиги билан бутун каррали боғланган. Бошқача қилиб айтганда, электроннинг айлана шаклидаги орбитасига ётқизилган де-Бройль тўлқин узунлигининг сони бутун сонга тенг.



22- расм. Водород атоми учун энергетик сатҳлар диаграммаси.

Ядро атрофида радиуси r_n га тенг n -квант орбитада v_n тезлик билан ҳаракат қилаётган электроннинг ядро билан барқарор атом ҳосил қилиши учун классик механика шarti қуйидагича ёзилади:

$$m_e v^2 r_n = e^2 / (4\pi\epsilon_0).$$

Бу ифодадан электроннинг орбита бўйлаб ҳаракат тезлиги v_n ни аниқлаб (2.2) дан электроннинг де-Бройль тўлқин узунлиги учун

$$\lambda = \frac{h}{e} \cdot \sqrt{4\pi\epsilon_0 r_n / m_e} \quad (3.27)$$

ни ҳосил қиламиз, сўнгра электроннинг турғун орбитаси радиусини (3.27) ва (3.26) формулалардан аниқлаймиз:

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \cdot n^2. \quad (3.28)$$

Юқоридаги (3.20) ифодага келдик. n -орбитада ҳаракат қилаётган электроннинг тўла энергияси эса (3.22) формуладан аниқланади:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 4, \dots \quad (3.29)$$

Борнинг иккинчи постулатига биноан водород атомининг чиқариш чизиғи частотаси

$$\nu = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{m_e e^4}{8 h^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

формула билан ифодаланади, бу ерда R_H — водород атоми учун Ридберг доимийси:

$$R_H = \frac{e^4 m_e}{8 \epsilon_0^2 h^3}. \quad (3.30)$$

(3.29) формула водород атоми учун n нинг ҳар хил қийматларига тўғри келадиган энергия қийматлари E_n ни ҳисоблашга имкон беради. Бу асосда эса водород атомининг энергетик сатҳларини чизиш мумкин. 22-расмда водород атомининг энергетик сатҳларининг диаграммаси берилган. Стрелкалар билан фотон чиқариш орқали рўй берадиган баъзи ўтишлар кўрсатилган. Худди шу (3.29) формула водород атомининг ионлаштириш потенциали V_1 ни ҳам ҳисоблашга имкон беради. Ҳақиқатан ҳам, ионлаштириш иши eV_1 икки сатҳ энергиясининг фарқига тенг:

$$eV_1 = E_\infty - E_1; \quad (3.31)$$

бу ерда E_1 — ядро ва электрондан иборат система — атомнинг асосий ҳолатдаги энергияси, яъни

$$E_1 = - \frac{m_e c^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = - h R_H = - 13,63 \text{ эВ.} \quad (3.32)$$

E_∞ — ядро ва ундан чексиз узоқда жойлашган электрондан иборат системанинг энергияси, яъни (3.18) га кўра $r \rightarrow \infty$ да $E_\infty = 0$. Демак, водород учун ионлаштириш потенциаллари

$$V_1 = \frac{m_e c^3}{8\epsilon_0^2 h^2} = 13,63 \text{ В.} \quad (3.33)$$

Водород атомининг ионлаштириш потенциаллари учун Бор назарияси берган бу қиймат тажриба натижаларига тўғри келади.

Бор назарияси водород атомининг ўлчамларини ҳисоблашга ҳам имкон беради. $n = 1$ да (3.28) дан $d_1 = 2a_1 = \frac{2\epsilon_0 h^2}{\pi m_e e^2} \sim 1 \text{ \AA}$, бу ерда a_1 — водород атоми учун биринчи Бор орбитасининг радиуси.

Агар Бор назарияси асосида аниқланган Ридберг доимийсининг сон қийматини $R_H = 3,292 \cdot 10^{15} \text{ сек}^{-1}$ (ёки $109737,32 \text{ см}^{-1}$) эксперимент натижалари билан солиштирсак, кичик бўлса ҳам, тафовут мавжуд эканлигини пайқаймиз. Бу тафовутнинг сабабини кўрайлик. Биз юқорида (3.30) ни келтириб чиқаришимизда электронни қўзғалмас ядро атрофида ҳаракатланади, деб ҳисоблаган эдик. Аслида, электрон ва ядро ўзларининг умумий оғирлик маркази атрофида ҳаракатланади. Ядронинг массасини чексиз катта деб ҳисобласак, оғирлик маркази ядро билан устма-уст тушган бўлар эди, албатта. Агар электроннинг массасини m_e , водород атоми ядросининг массасини M , оғирлик марказидан электронгача масофани r , ядрога масофани эса R орқали белгиласак, классик механиканинг оғирлик марказини аниқлаш, яъни параллел кучларни қўшиш қонидасига биноан улар ўртасида қуйидаги боғланиш мавжуд:

$$MR = m_e r. \quad (3.34)$$

Электрон билан ядро ўртасидаги масофани ρ орқали бел-

гиласак, у ҳолда $\rho = R + r$ га тенг бўлади. Энди R ва r ўртасидаги бу икки хил боғланишдан

$$\left. \begin{aligned} R &= \rho \frac{m_e}{m_e + M} \\ r &= \rho \frac{M}{m_e + M} \end{aligned} \right\}$$

келиб чиқади. Ядро ва электрондан иборат системанинг барқарорлик шартига кўра электронга ва ядрога таъсир кўрсатувчи марказдан қочма кучларнинг ҳар бири электрон ва ядро ўртасидаги Кулон тортишиш кучига тенг:

$$m_e r_n \omega_n^2 = M R_n \omega_n^2 = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 \rho_n^2}.$$

Юқорида (3.35) да берилган R ва r нинг ифодасини эътиборга олсак, барқарорлик шартини қуйидагича ёзишимиз мумкин:

$$\frac{M m_e}{m_e + M} \rho_n \omega_n^2 = \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 \rho_n^2}.$$

Электрон ва ядродан иборат системанинг тўла ҳаракат миқдори momenti электрон ва ядро ҳаракат миқдори моментларининг йиғиндисидан иборат:

$$m_e v_{я} r_n + M v_{я} R_n = m_e r_n^2 \omega_n + M R_n^2 \omega_n = \frac{M m_e}{m_e + M} \rho_n^2 \omega_n.$$

Атомнинг бу тўла ҳаракат миқдори моментини (3.19) га биноан $n \frac{h}{2\pi}$ га тенглаштирамиз.

$$\frac{M m_e}{M + m_e} \rho_n^2 \omega_n = n \frac{h}{2\pi}; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.36)$$

(3.36) билан (3.19) ни солиштирсак, ядро ҳаракатини ҳисобга олиш дастлабки (3.19)—(3.33) формулалардаги электрон массасини электрон ва ядродан иборат системанинг келтирилган массаси

$$m' = \frac{m_e M}{m_e + M} \quad (3.37)$$

билан алмаштиришга олиб келади. Шунинг учун R_n , E^n ларни ҳисоблашда m_e ни m' билан алмаштирилади, яъни

$$R_n = \frac{e^4 m_e M}{8 \epsilon_0^2 h^3 (m_e + M)} = R_\infty \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}}. \quad (3.38)$$

Бу ерда R_∞ орқали R_n нинг $\frac{M}{m_e} \rightarrow \infty$ тўғри келадиган ва (3.30) да ифодаланган қиймати белгиланган.

Водород учун $\frac{m_e}{M} = \frac{1}{1836,5}$, шунинг учун

$$R_n = 109737,32 \frac{1}{1 + \frac{1}{1836,5}} = 109677,57 \text{ см}^{-1}.$$

Ридберг доимийсининг водород учун Бор назарияси берган қиймати эксперимент натижасини тўла қаноатлантиради.

Бор назарияси янги квант қонуниятларни тушунишда катта қадам бўлди. У микродунё физикаси олдида пайдо бўлган атомларнинг нурланишига боғлиқ бутун бир катта муаммони ечди ва шу билан бирга классик физика қонунларини атом ҳодисаларига қўллаш мумкин эмаслигини, атом квант қонунларининг эса асосий ролини кўрсатди. Лекин бошданоқ Бор назариясининг жиддий камчиликлардан холи эмаслиги аён бўлди. У ярим классик, ярим квант назария эди.

Юқорида кўрдикки, Бор назарияси водород атомининг спектрал чизиқлари частоталарини тўғри тавсифлаб бера олади. Лекин шу чизиқлар интенсивлигини ҳисоблаш имконини кўрсатмади. Бу назария ишқорий металллар спектрларининг дублет характерини ва мураккаб атомлар спектрларини тўғри тушунтира олмади. Даврий системанинг водород атомидан кейин жойлашган гелий атоми учун Бор назариясига биноан олиб борилган ҳисоблашлар айниқса мураккаб ва эксперимент натижаларига мутлақо зид хулосаларга олиб келади.

Бор назарияси ўзининг камчиликларига қарамасдан табиат ҳақидаги бизнинг тасаввуримизни янги поғонага кўтарди. Бор моделининг ўрнига келган квант механикаси энергетик сатҳлар ҳақида бу модель киритган тушунчани тасдиқлади ва асослади. Ҳозирги вақтда атом тузилишининг Бор модели фан тараққиёти йўлида муҳим бир тарихий давр бўлиб қолди.

IV БОБ

КВАНТ МЕХАНИКАСИ

17- §. Тўлқин функция

Биз юқорида квант ғоясининг қандай пайдо бўлганлиги ва микрозарралар ҳаракати, ҳолатларини тавсифлашда унинг босиб ўтган мураккаб йўли билан танишдик. Бу революцион ғоянинг тараққиёт йўлини яқунлаб хулоса сифатида қуйидагиларни таъкидлаймиз.

1. Микрообъект ҳолатларини характерловчи физикавий катталиклар узлукли дискрет қийматлар қабул қилади. Атом ўлчамларидаги ҳодисалар билан боғлиқ ҳамма муаммоларнинг ечилиши асосида $E > hv$ ва $\lambda > h/mv$ муносабатлар қўйилган.

2. Микрообъектлар бир вақтнинг ўзида ҳам зарра (корпускула), ҳам тўлқин хоссаларига эга бўлади. Шунинг учун улар, классик маънода, на зарра ва на тўлқиндир.

3. Микрозарра ҳолатлари тўлқин функция орқали тавсифланади.

Эркин ҳаракат қилаётган зарранинг тўлқин, яъни пси-функцияси де-Бройль ясси тўлқинидир.

4. Микрозарралар классик маънода аниқ траекторияларга эга эмас. Лекин заряд, масса ва ҳоказо каби классик зарра характеристикалари микрозарраларни ҳам характерлайди.

5. Микродунёнинг ўзгача хусусияти тажрибани янги нуқтаи назардан тушунишни тақозо қилади. Микрозарра устида тажриба ўтказиш зарраларнинг тажрибагача ҳолатини ўзгартириб демакдир. Зарраларнинг тажрибагача тўлқин функцияси тажрибадан кейинги тўлқин функциясидан мутлақо фарқ қилади.

Шундай қилиб, юқорида биз танишган тажрибаларга ва улардан келиб чиқадиган хулосаларга асосланган янги квант назарияси керак эди. Шу мақсадни кўзда тутган Борнинг атом назарияси қатор муаммоларни ечишда кам-

чилиқдан холи эмас эди. Бу камчиликларни ўрганиш атом масштабидаги ҳодисалар учун янада умумий ёндашиш лозимлигини кўрсатди. Худди шу ёндашишни Эрвин Шредингер 1926 йилда тақлиф қилди. Квант физикаси қатор физик олимлар томонидан ривожлантирилди. 30-йилларнинг бошида квант механикаси ёрдамида ядро, атом, молекула ва қаттиқ жисмлар физикасига тааллуқли кенг доирадаги масалалар ечилди.

Биз юқорида 16-§ да кўрдикки, Борнинг квантлаш шартидан электрон учун Бор турғун орбитаси айланасининг узунлиги электроннинг де-Бройль, тўлқин узунлигига бутун сон карралидир. У ҳолда момент учун шу квантлаш шартининг маъноси нимадан иборат? Агар ихтиёрий тўлқин узунликка эга тўлқиннинг айланма орбита бўйлаб тарқалишини кўз олдимизга келтирсак, орбитанинг ихтиёрий нуқтасидан бошланғич фаза билан тарқалаётган тўлқин шу айлана бўйлаб тарқалишида маълум вақтдан кейин шу нуқтага қайтиб келади, лекин бошқа фазада келади дейлик. У ҳолда ихтиёрий бир нуқтага маълум аниқ фазани мос қўя олмаймиз. Агар тўлқин узунлик айлана бўйлаб бутун сон карралаи жойлашса, бутунлай бошқа тасвирга келамиз, орбитанинг ҳар бир нуқтасида тўлқин фазасини аниқлай оламиз. Орбита бўйлаб тарқалаётган тўлқиннинг узунлиги квантлаш шартини қаноатлантириши сабабли у орбитани тўла ўтиб бошланғич нуқтага даставвалги фазаси билан келади. Бу ҳолда тўлқин ҳаракат аниқ бир қийматли бўлади; тўла айланиш эса ҳеч қандай ўзгаришга олиб келмайди. Демак, квантлаш шarti билан тўлқин жараёни тавсифловчи тўлқин функциянинг бир қийматлилик шarti айнан. Шунинг учун янги умумий квант назариясида Борнинг ақлга сизмас квантлаш шартини тўлқин функция учун оддий бир қийматли (яъни чекли қийматли) лик шarti билан алмаштиришимиз керак.

Юқоридаги мулоҳазалардан ҳар қандай зарра учун де-Бройль тўлқин функциясининг чекли бир қийматлилик хоссасига эга бўлиши зарурлиги ҳақидаги шартга келамиз. (2.22) формула билан ифодаланувчи пси-функция умумий ҳолда x , y , z ва t нинг функцияси, яъни $\Psi(x, y, z, t)$ эди. Борнинг квантлаш шартига эквивалент бўлган бир қийматлилик шартига кўра эса Ψ -функция фазонинг ҳар бир нуқтасида ва вақтнинг ҳар қандай моментиди аниқ чекли

битта қийматга эга бўлади. Янги назарияда шу тўлқин функция микроразрларнинг ҳар қандай ҳолатини тавсифлаши керак. Тўлқин функция ўзича ҳеч қандай физикавий маънога эга эмас, лекин вақтнинг маълум моментда фазонинг бирор нуқтаси учун ҳисобланган пси-функция абсолют қийматининг квадрати эса, M . Борнинг кўрсатишича, вақтнинг худди шу моментда фазонинг худди шу нуқтасида заррани қайд қилиш эҳтимоллигига пропорционалдир. Демак, янги квант назариясининг асосий масаласи ташқи куч таъсирида ҳаракатланаётган микроразра тўлқин функциясини аниқлашдан иборат бўлиши керак.

Юқориди қўйилган бир қийматлилик талабига бўйсинувчи тўлқин функция Ψ нинг баъзи хоссаларига батафсил тўхталиб ўтайлик. Биринчидан, вақтнинг бирор моментда фазонинг бирор нуқтаси учун ҳисобланган $|\Psi|^2$ вақтнинг шу моментда фазонинг шу нуқтасида шу тўлқин функция тавсифловчи зарранинг қайд қилиниш эҳтимоллигига пропорционал. Бу эса $|\Psi|^2$ дан бутун фазо бўйича олинган интегралнинг чекли бўлишини талаб қилади. Чунки зарра ҳар қандай ҳолда ҳам фазонинг бирор соҳасида мавжуддир, яъни бошқача айтганда, фазонинг ҳамма соҳасида зарра албатта, бор. Агар, фазо элементини dV орқали белгиласак, қуйидаги интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 0 \quad (4.1)$$

бўлса, умуман зарра ҳеч қаерда йўқ, деган жавобга келамиз. Агар

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = \infty \quad (4.2)$$

бўлса, зарра бир вақтнинг ўзида фазонинг ҳамма қисмида мавжуд. Бу ҳол, албатта, ҳақиқатдан узоқ. $|\Psi|^2$ нинг таърифига кўра $|\Psi|^2$ нинг қийматлари на мавҳум ва на манфий қиймат қабул қила олади. Шунинг учун $|\Psi|^2$ дан бутун фазо бўйича олинган интеграл чекли бўлиши керак, чунки зарра берилган вақт моментда фазонинг бирор нуқтасидагина мавжуд.

Одатда, $(\Psi)^2$ нинг қийматини зарранинг қайд қилиниш эҳтимоллигига тенг деб ҳисоблаш қулай. Агар $|\Psi|^2$ нинг қийматини берилган вақт моментида фазонинг берилган нуқтасида Ψ функция тавсифловчи зарранинг қайд қилиниш эҳтимоллигига тенг деб қарасак, бутун фазо бўйича $|\Psi|^2$ дан олинган интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1 \quad (4.3)$$

бўлиши керак, чунки математика тили билан айтилганда бутун фазо бўйлаб зарранинг қайд қилиниш эҳтимоллиги бирга тенг. (4.3) муносабатга бўйсинувчи тўлқин функцияга *нормаланган функция* дейилади. Биз қуйида кўрамизки ҳар қандай чекли функцияни чекли миқдорга кўпайтириб нормалаш мумкин. Фазонинг ҳар бир нуқтасида зарранинг қайд қилиниш эҳтимоли аниқ бир қийматга эга бўлиши учун тўлқин функция ҳам нормаланувчи, ҳам бир қийматли бўлиши зарур. Ψ -функция ва унинг хусусий ҳосилалари $\partial\Psi/\partial x$, $\partial\Psi/\partial y$, $\partial\Psi/\partial z$ фазонинг ҳар қандай нуқтасида узлуксиз бўлиши шарт.

Тўлқин функцияга нисбатан ёзилган квант назариясининг тенгламаси — Шредингер тенгламаси тўлқин тенглама бўлиб микродунё механикаси — квант механикасида худди классик механикадаги Ньютоннинг иккинчи қонунини ифодаловчи ҳаракат тенгламаси каби фундаментал тенгламадир. Тенглама берадиган натижаларни тажриба билан қуйидагича таққосланади. Тенглама ечими — тўлқин функция аниқланади, унинг ёрдамида эса микроразра ҳаракатининг характеристикаларидан — энергияси, импульси ва ёки берилган нуқтада заррани мавжудлик эҳтимоли ҳисобланади. Тўлқин функция тажрибада аниқланмайди, у микродунё ҳолатини тавсифлашда ёрдамчи роль ўйнайди.

18- §. Шредингер тенгламаси

Шредингер тенгламаси норелятивистик квант механикасининг постулатидир. Ҳақиқатан ҳам, ҳар қандай тубдан янги назария эски тушунчалар асосида келтириб

чиқарилиши мумкин эмас. Лекин шунга қарамасдан, Шредингер тенгламасига олиб келувчи баъзи мулоҳазалар ўтказишимиз мумкин.

Маълумки, ҳар қандай микрозарра де-Бройль тўлқин хоссасига эга ва унинг ҳалатлари тўлқин функция (2.22) ёки (2.23) орқали тавсифланади. (2.23) ифода E энергияга ва \vec{p} импульсга эга ва \vec{r} йўналишда ҳаракатланувчи зарранинг математик тўлқин тасвиридир. (2.23) тўлқин функцияни радиус вектор бўйича икки марта дифференциаллаймиз.

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} = \vec{\nabla}^2 \Psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi = -p^2 \Psi / \hbar^2 \quad (4.4)$$

ва бир марта вақт бўйича дифференциаллаймиз:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -iE \Psi / \hbar. \quad (4.5)$$

Ёруғлик тезлигига нисбатан кичик тезликларда зарранинг тўла энергияси унинг кинетик энергияси $p^2/2m$ ва потенциал энергияси V нинг йиғиндисига тенг. (Умумий ҳолда зарранинг потенциал энергияси V зарранинг фазодаги ўрнига ва вақтга боғлиқ функциядир)

$$E = p^2/2m + V. \quad (4.6)$$

(4.6) тенгликнинг иккала томонини ҳам тўлқин функция Ψ га кўпайтирамиз:

$$E\Psi = (p^2\Psi/2m + V\Psi). \quad (4.7)$$

(4.4) ва (4.5) формулаларга кўра

$$p^2\Psi = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 \Psi \quad (4.8)$$

ва

$$E\Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (4.9)$$

$E\Psi$ ва $p^2\Psi$ учун бу ифодаларни (4.7) формулага қўйсак,

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi - V\Psi \quad (4.10)$$

тенгламага келамиз. (4.10) тенглама микрозарранинг вақт — фазодаги ҳолатини тавсифловчи Шредингернинг вақтга боғлиқ тенгламаси деб аталади. Қўйидаги

$$\vec{\nabla}^2 \Psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Psi + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi \quad (4.11)$$

ифодада

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (4.12)$$

орқали Лаплас оператори $\Delta = \vec{\nabla}^2$ ва унинг Декарт координаталаридаги ифодаси берилган. Бундан буён биз тенгламада Лаплас операторини учратганимизда ундан ўнгда турган ҳар қандай ифодадан ҳамма координаталар бўйича иккинчи тартибли хусусий ҳосила бажарилиш кераклигини тушунамиз. (4.10) тенгламада биз шу Лаплас операторининг $\vec{\nabla}^2$ кўринишдаги белгисини ишлатдик. Кўпчилик адабиётларда Лаплас операторининг $\vec{\nabla}^2$ кўринишдаги симболи ўрнига янада қисқачароқ Δ символ ишлатилган. Биз ҳам Лаплас операторининг шу қулай Δ симболидан фойдаланамиз. V ҳолда (4.10) Шредингер тенгламаси қўйидаги кўринишда ифодаланadi:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - V\Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi. \quad (4.13)$$

Юқоридаги тенгламаларда $\hbar = h/2\pi$ — Планк доимийсининг 2π га бўлиниши, $i = \sqrt{-1}$ — маъхум сон, $V = V(x, y, z, t)$ зарранинг потенциал энергияси, m — унинг массаси.

Биз юқорида баён этганимиздек, зарра тўлқин функцияси учун қўйилган чекли бир қийматлилик талаби Борнинг турғун орбиталар ҳақидаги постулатига айнан. Ҳозир биз буни исботлашимиз мумкин. (2.23) тўлқин функциядан радиус вектор бўйича биринчи тартибли ҳосила оламиз:

$$\frac{\partial}{\partial r} \Psi = \vec{\nabla} \Psi = \frac{i}{\hbar} \vec{p} \Psi.$$

Ҳосил бўлган ифодани икки томонини $\hbar i$ га кўпайтириб, $\vec{p} \Psi$ учун

$$\vec{p} \Psi = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi \quad (4.14)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Бизга шу дифференциал тенглама берилган бўлиб, унинг ечимини аниқлаш талаб қилинсин. Зарранинг тўғри чизиқли ҳаракат ҳоли учун тўлқин функция (2.23) орқали берилиб, бу ечим зарранинг ҳамма координаталар бўйича $-\infty$ дан $+\infty$ гача соҳадаги ҳаракатини тасвирлайди.

Соддалик учун (4.14) тенгламани координата ўқларига проекциялар кўринишида ёзиб ҳосил бўлган учта тенгламадан иборат системанинг x ўқига тўғри келадиган биринчисидан фойдаланамиз (қолган тенгламалар учун ҳам қуйидаги мулоҳазалар тўғри бўлади).

$$p_x \Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi. \quad (4.15)$$

Агар зарра x ўқи бўйлаб ҳаракатланса, унинг тенгламаси (4.15) орқали берилади. Тенгламанинг ечими эса

$$\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \quad (4.16)$$

орқали ифодаланади. Шундай қилиб, зарра x ўқи йўналишида $-\infty$ дан $+\infty$ соҳада ҳаракатланса, унинг ҳаракат тенгламаси (4.15) нинг ечими (4.16) кўринишида бўлади.

Агар зарра узунлиги l га тенг орбита айланасида ҳаракат қилаётган бўлса, у ҳолда x ёй координатаси хизматини ўтайди, яъни зарранинг бошланғич ўрнига тўғри келувчи айланадаги нуқтадан бошлаб айлана ёйи бўйлаб ўзгаради. x ўзгарувчининг қабул қилиши мумкин бўлган қийматлари 0 билан $l = 2\pi r$ (r — айлана радиуси) оралиғидаги соҳада бўлади. x нинг қиймати l га ўзгаргандан зарра орбитада бошланғич нуқтага келади. Зарранинг бундан кейинги ҳаракатида унинг координатаси x даврий равишда яна 0 дан бошлаб $2\pi r$ гача ўзгаради. Зарра ҳаракат ҳолатини тасвирловчи унинг (4.16) пси-функцияси траекториясининг ҳар қандай нуқтасида бир қийматли бўлиши учун координата x нинг $l = 2\pi r$ га ортишида тўлқин функция ўзгармаслиги керак. x нинг $l = 2\pi r$ га ортишида (4.16) функция $e^{i p_x l / \hbar}$ га тенг бўлади. Функциянинг бу қиймати $x = 0$ қийматига тенг бўлиши керак. Демак,

$$e^{\frac{i}{\hbar} p_x l} = 1.$$

У ҳолда даражадаги ифода $i p_x l / \hbar = 2\pi i r$, яъни

$$p_x = p_{xn} = \frac{\hbar n}{l} = \frac{\hbar n}{2\pi r}. \quad (4.17)$$

Ҳосил бўлган муносабатга кўра, агар зарра айлана бўйлаб ҳаракатланса, (4.15) тенглама импульснинг баъзи дискрет қийматларидагина ечимга эга бўлар экан. Импульснинг дискрет қийматлари эса (4.17) тенгламадан аниқланади. Ўз навбатида (4.17) Борнинг квантлаш шартининг ўзги-насиدير.

Шундай қилиб, биз Бор постулатини ўз ичига олган ва тўлқин хоссасига эга бўлган микрозарра ҳаракатини тасвирловчи (4.10) тенгламага келдик. Шредингернинг бу тенгламасини ҳосил қилишда биз эркин ҳаракат қилаётган зарранинг тўлқин функциясидан фойдаландик. Потенциал энергия $V = 0$ доимий бўлгандаги эркин зарранинг Шредингер тенгламасини вақт — фазода ихтиёрий ўзгарувчи $V = V(x, y, z, t)$ майдондаги зарра ҳаракати тенгламасига умумлаштириш тўғри бўлишлигини исботлашимиз керак, албатта. Бунинг учун Шредингер тенгламасини тўғри деб фараз қилиб, уни ҳар хил физикавий масалаларни ечишга қўллаймиз ва назарий натижаларни эксперимент натижалари билан таққослаб кўрамиз. Агар таққослаш ижобий натижа берса, Шредингер тенгламаси қандай йўл билан келиб чиқмасин тўғри деб қабул қилинади. Бошқача қилиб айтганда, Шредингер тенгламасини фақат классик тушунчалар асосида келтириб чиқариб бўлмайди.

Биз кейинчалик кўрамизки, ҳақиқатда Шредингер тенгламаси ечимининг натижалари экспериментга жуда тўғри келади. Демак, (4.10) тенглама ҳаракатнинг норелятивистик соҳасида энг тўғри тенгламадир. Унинг бир қийматли чекли ечимлари норелятивистик соҳада физика ҳодисаларини тўғри акс эттиради.

Кўп масалалар учун Шредингер тенгламасини содда-лаштириш мумкин. Агар потенциал энергия фақат координатларнинг функциясигина бўлса, яъни $V = V(x, y, z)$, у ҳолда (4.10) тенгламада ўзгарувчиларни ажратамиз, тўлқин функцияни эса

$$\Psi = \vec{\psi}(r, t) = \psi(\vec{r}) \varphi(t) \quad (4.18)$$

кўринишда ёзамиз. Бу ерда $\psi(\vec{r})$ — фақат координаталарнинг функцияси, $\varphi(t)$ — фақат вақтнинг функцияси. (4.18) ни (4.13) га қўйиб, $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} \psi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) \varphi(t) - V \psi(\vec{r}) \varphi(t)$ тенгламага келамиз. Ҳосил бўлган тенгламанинг икки томонини $\psi(\vec{r}) \varphi(t)$ га бўлсак,

$$\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - V$$

тенгламага келамиз. Бу тенгламанинг чап қисми фақат вақтга, ўнг қисми эса фақат координатага боғлиқ. Демак, тенгламанинг чап томони фақат вақтга боғлиқ функцияга ёки ўзгармас катталиқка тенг бўлиши мумкин. Тенгламанинг ўнг томони эса аксинча фақат координатанинг функцияси ёки ўзгармас бўла олади. Лекин иккала томон бир-бирига тенг бўлгани учун, бирдан-бир имконият, иккала томонни ўзгармасга тенг бўлишидир. Бу ўзгармасни (4.9) тенгликнинг икки томонини Ψ га бўлиб аниқлаймиз:

$$E = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\psi}{\psi \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t}. \quad (4.19)$$

Шундай қилиб, қуйидаги тенгламага келамиз:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + (E - V) \psi(\vec{r}) = 0 \quad (4.20)$$

(4.19) тенгламани қуйидаги кўринишда ёзиб,

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E \varphi$$

ечимини осон аниқлаймиз:

$$\varphi = e^{-\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (4.21)$$

(4.20) тенглама зарранинг стационар ҳолатларини тавсифловчи Шредингернинг стационар тенгламаси ёки қисқача *стационар ҳолат учун Шредингер тенгламаси* деб аталади.

Атом соҳасидаги бирор масалага тааллуқли Шредингер тенгламасини ечиш билан биз мазкур жараёни тавсифловчи тўлқин функциясини аниқлаймиз. (4.10) тенгламанинг ечими — тўлқин функция массаси m га тенг ва

V потенциал майдон таъсиридаги ҳар қандай зарранинг квантомеханик тавсифини беради. Бу функция фазонинг зарра жойлашиш эҳтимоли катта бўлган нуқтасида ўзининг энг катта қийматига эришади ва фазонинг бошқа нуқталарида аксинча, нолга яқин бўлади.

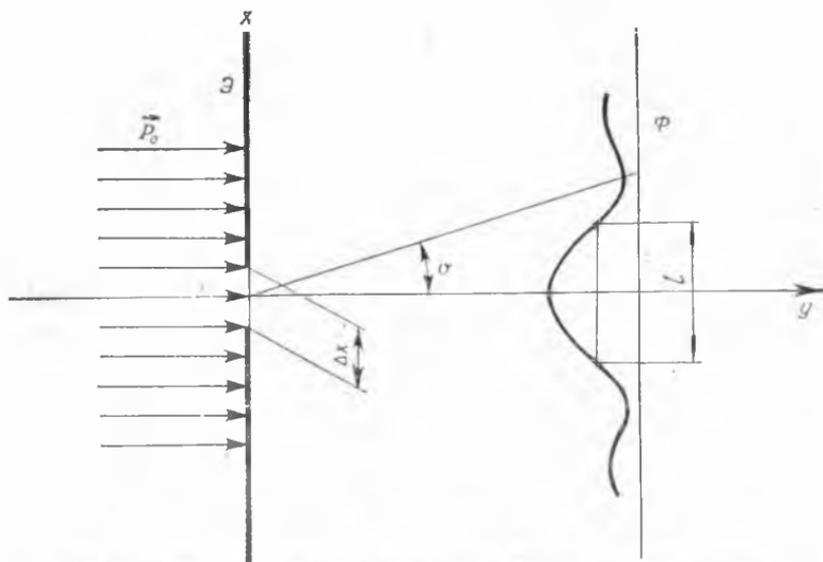
19- §. Микродунёнинг ноаниқлик принципи

Биз энди биламизки, микрообъект ҳақидаги масалаларда классик тасаввуримизни қўллаб бўлмайди. Чунончи, ҳаракатланаётган микрозарраларга аниқ бирор траектория белгилан, яъни вақтнинг ҳар бир қўшни моментларида зарранинг координаталарини аниқлаш мумкин эмас. Квант назарияси зарранинг ўрни ҳақида фақат эҳтимолий маълумотгина беради. Бор моделида киритилган орбита янги назарияда инкор қилинади. Квант назарияси асосида ётган бу ноаниқлик заруриятми, деган савол туғилади. Агар ноаниқлик янги назарияда заруран пайдо бўлса, бу квант назариянинг нуқсоними ёки афзаллигимми? Квант назариясининг ноаниқлик хоссаси микродунёнинг ажралмас хоссаси эканлигини кўрсатамиз. Бунинг учун электрон координатасини имкони борича тўғри аниқлаш нимага олиб келишини кўрайлик.

Экран тирқишидан ўтаётган электронларнинг Φ фотопластинкага тушишида ҳосил бўлган дифракцион манзарани кузатайлик. 23-расмда кўрсатилганидек, электронлар экрангача бўлган соҳада \vec{p}_0 импульсга эга бўлсин. Экран x ўқи йўналишида жойлашган ва электронлар унга перпендикуляр y ўқи бўйлаб экранга келиб тушади, дейлик. У ҳолда электронлар импульси экрангача бўлган соҳада аниқ маълум ($\vec{p}_0, p_x = 0, p_y = p_0$). Бу хил электронлар биз биламизки де-Бройлнинг ясси тўлқини билан тавсифланади. Тўлқин сони электрон импульси билан маълум муносабат орқали боғланган:

$$\vec{k}_0 = \vec{p}_0 / \hbar.$$

Ясси тўлқин бутун фазо бўйлаб тақсимланган, шунинг учун ҳар бир электрон ҳам фазо бўйича «ёйилиб» кетган бўлади. 12-§ да кўрганимиздек, тирқишдан ўтган электронлар ясси тўлқин билан тавсифланмайди, уларга энди



23- расм. Электронларнинг тирқишдан ўтишидаги дифракцияси.

тарқалувчи (узоқлашувчи) тўлқин мос келади. Тарқалувчи тўлқин интенсивлиги йўналишнинг мураккаб функцияси бўлади. Расмдан кўришиб турибдики, тўлқиннинг тирқишдан кейинги соҳада тарқалиши ҳар хил йўналишларда содир бўлиб аниқ тўлқин сони \vec{k}_0 га эга эмас. Шунинг учун тирқишдан ўтган электронларнинг импульси p_0 га тенг эмас. Электронларнинг тирқишдан ўтишида импульснинг экрангача соҳада нолга тенг p_x проекцияси энг катта қийматга ўзгаради. Биз экрангача соҳада электроннинг импульсини аниқ p_x га тенглигини масалан, $p_x = 0$, $p_y = p_0$ билардик. Лекин ушбу электронлар координатасини бутунлай билмас эдик. Электроннинг тирқишдан ўтишида эса биз унинг координатасини энди аниқлай оламиз, масалан, x координатасини тирқиш кенглиги Δx аниқлик билан, y координатасини эса тирқишнинг y ўқидаги жойи билан аниқлаймиз. Аммо энди электроннинг импульси ҳақида ҳеч нарса билмаймиз. Демак, электроннинг координатасини аниқлаш жараёнида биз унинг импульси ҳақидаги аниқ маълумотдан айрилдик.

Тирқишдан ўтган электрон импульси учун x ўқи йўналишидаги ҳосил бўлган ноаниқликни баҳолайлик. Кенглиги Δx га тенг тирқишдан ўтган бирор электронни кузатайлик. Бу электронни Φ фотопластинканинг қайси бир нуқтасига келиб тушишини олдиндан айтиб бўлмайди. Аммо фотопластинканинг ҳар бир нуқтасига электроннинг келиб тушиши эҳтимоллигини расмда келтирилган дифракцион манзара асосида аниқласа бўлади. Электронларнинг кўпчилиги бош максимумнинг марказий соҳасига тушади. Бу соҳанинг кенглиги марказий максимум кенглигига тенг деб қаралади. Максимум кенглиги эса интенсивлик баландлигининг ярим сатҳидан ёки бош максимум чўққисидан биринчи минимумгача масофадан аниқланади. Биринчи минимум ϑ бурчакда жойлашсин.

Тирқишдан ўтган электрон ҳаракатини тавсифловчи тўлқиннинг тарқалиш ўлчами сифатида бош максимумдан биринчи минимумгача бўлган бурчак оралигини олаемиз. Агар тирқиш кенглиги Δx га, тўлқин узунлиги λ га тенг бўлса, тирқишдан ҳосил бўлган дифракцион манзара учун биринчи минимумга тўғри келган бурчак

$$\Delta x \sin \vartheta = \lambda \quad (4.22)$$

нинг қаноатлантиради. Бизнинг тажрибамизда электрон импульсидаги ноаниқлик импульсининг p_x ташкил этувчисининг ноаниқлиги билан характерланади. Расмга кўра Δp_x қуйидаги ифода билан аниқланади:

$$\Delta p_x = p_0 \sin \vartheta. \quad (4.23)$$

(4.22) ва (4.23) ифодалардан

$$\Delta p_x = p_0 \frac{\lambda}{\Delta x}$$

келиб чиқади. Импульс билан тўлқин узунлиги ўртасидаги (2.2) муносабатни ҳисобга олсак,

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = 2\pi \hbar \quad (4.24)$$

муносабатга келамиз. Электрон тарқалишда тирқишдан ҳосил бўладиган дифракцияси учун келтириб чиқарилган (4.24) муносабат микродунё соҳасида умумийлик характерга эга ва *Гейзенбергининг ноаниқлик муносабати* деб аталади. Бу муносабатга кўра электрон координатасини қанча аниқроқ аниқламоқчи бўлсак (тирқишнинг кенглигини ки-

чиклаштириб), электрон импульсининг шу координата ўқидаги проекцияси шунча ноаниқлашади.

Зарранинг координатасини ва импульсини бир вақтда аниқлаш йўлида вужудга келган координата — импульс ноаниқлиги электроннинг тўлқин функцияси, яъни ўзи ҳақиқатан ҳам Δp ва Δx соҳада ёйилганлиги сабабли юзага келади.

Координата бўйича ноаниқлик юқоридаги тажрибада тирқиш кенлиги билан характерланади. Импульс бўйича ноаниқликни фақат дифракцион манзара асосидагина эмас, балки тўғридан-тўғри ўлчаш ҳам мумкин. Бунинг учун фотопластинка ўрнига электрон импульсини ўлчайдиган асбоб ўрнатиш кифоя.

(4.24) муносабат умумий ҳолда импульсининг ҳамма ташкил этувчилари учун ўринли:

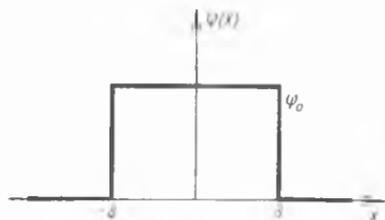
$$\left. \begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\simeq 2\pi\hbar, \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\simeq 2\pi\hbar, \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\simeq 2\pi\hbar. \end{aligned} \right\} \quad (4.25)$$

Гейзенберг ноаниқлик муносабати зарра координатаси ва импульсини унга мос бўлмаган ташкил этувчилар билан, масалан, x координатани ва p_y , p_z ни бир вақтдаги ўлчаш аниқлигига ҳеч қандай чегара қўймайди. Умуман, бир вақтда аниқ ўлчаш мумкин бўлган физикавий катталиклар тўпламига системани характерловчи *тўла тўплам* дейилади.

Шундай қилиб, микродунё ҳодисаларини тасвирловчи квант назариясида микрообъектлар ҳаракати, фазодаги ўрни, импульси ҳақидаги классик тасаввурдан бутунлай воз кечиш керак экан. Бу ҳол 1927 йилда Вернер Гейзенберг томонидан очилган ва квант механикасининг асосий

принципларидан ҳисобланган микродунёнинг ноаниқлик принципида ўз мазмунини топган. Ноаниқлик принципнинг математик мазмунини кўрайлик.

Электроннинг координатасини бирор тажриба йўли билан аниқлаш мумкин бўлсин. Электрон жойлашган



24-расм. Тўлқин функция.

нуқтага координата бошини кўчирайлик. Агар электрон координатасини ўлчаш δ аниқлик билан ўтказилган бўлса, унинг пси-функцияси x ўқи бўйлаб тахминан $-\delta$ дан $+\delta$ соҳада нолдан фарқли бўлади. $-\delta$ ва $+\delta$ соҳада нолдан фарқли пси-функция координатанинг ўлчаш усули билан қатъий боғлиқ бўлган ҳолда умуман ҳар хил кўринишга эга. Осонлик учун биз пси-функцияни $-\delta$ ва $+\delta$ соҳада 24-расмда берилган кўринишда оламиз. Электроннинг координатасини ўлчашга тааллуқли 23-расмдаги тажриба натижасида электроининг тўлқин функцияси шу хил кўринишга эга бўлади.

Электронни берилган соҳада қайд қилиш эҳтимоли P пси-функция орқали

$$P(\delta) = |\psi(x)|^2 dx$$

кўринишда аниқланади. Координатанинг $-\infty$ дан $+\infty$ гача ихтиёрий соҳада электронни қайд қилиш эҳтимоли esa

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx$$

ифода орқали аниқланади. Бу эҳтимоллик бирга тенг, чунки электронни $-\infty$ дан $+\infty$ гача соҳада қайд қилиниши муқаррар ҳолдир, яъни

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (4.26)$$

Умумий ҳолда, ҳар қандай тўлқин функция эҳтимолликнинг амплитудаси бўлганлиги учун (4.26) шартга ўхшаш юқорида қайд қилинган (4.3)

$$\iiint |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1 \quad (4.27)$$

шартни қаноатлантириши керак. (4.3) ёки (4.27) шартларини баъзан пси-функцияни нормалаш шarti ҳам деб айта-миз. Мазкур ҳол учун ёзилган (4.26) интегрални осон ба-жаришимиз мумкин:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\delta}^{+\delta} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\delta}^{+\delta} \psi_0^2 dx = 2\psi_0^2 \delta = 1,$$

демак,

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\delta}}. \quad (4.28)$$

Шундай қилиб, мазкур функция координата x нинг функцияси сифатида

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & \text{агар } +\delta < x < -\delta, \\ \frac{1}{\sqrt{2\delta}} & \text{агар } -\delta \leq x \leq +\delta, \end{cases} \quad (4.29)$$

қийматлар қабул қилади. Албатта, (4.29) функция де-Бройль тўлқин функцияси e^{ikx} эмас. Шунинг учун ҳам, тажрибадан сўнг электроннинг импульси ноаниқдир. Аммо (4.29) пси-функцияни Фурье интегралига ёйишимиз, яъни уни де-Бройль тўлқинлари суперпозицияси кўринишида тасвирлашимиз мумкин. Фурье теоремасига кўра пси-функцияни

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) e^{ikx} dk \quad (4.30)$$

кўринишда тасвирлашимиз мумкин. Бу ерда $f(k)$ де-Бройл-нинг ҳар хил тўлқинларининг мазкур тўлқин функцияга ҳиссасини белгилайди. Маълумки, де-Бройль тўлқини электроннинг аниқ импульсга эга ҳолатини тасвирлайди. Шунинг учун ҳам (4.30) ифода мазкур тўлқиннинг импульс бўйича тақсимотини тасвирлайди. (4.30) формуланинг физикавий маъносига кўра электроннинг тўлқин сонини k ва $k + dk$ оралиқда ва демак, унинг импульсини $\hbar k$ ва $\hbar(k + dk)$ оралиқда бўлиш эҳтимоли

$$|f(k)|^2 dk \quad (4.31)$$

га тенг. Шундай қилиб, умумий ҳолда координата бўйича тақсимот, яъни $\psi(x, y, z)$ орқали импульс бўйича тақсимот аниқланади. Координата ва импульс тақсимотлари ноаниқлик принципи билан боғланган.

Фурье интегрални назариясига кўра (4.30) ифодадан импульс тақсимоти функцияси $f(k)$ ни аниқлай оламиз:

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (4.32)$$

(4.29) ни ҳисобга олсак, (4.32) да интеграллашни бажаришимиз мумкин:

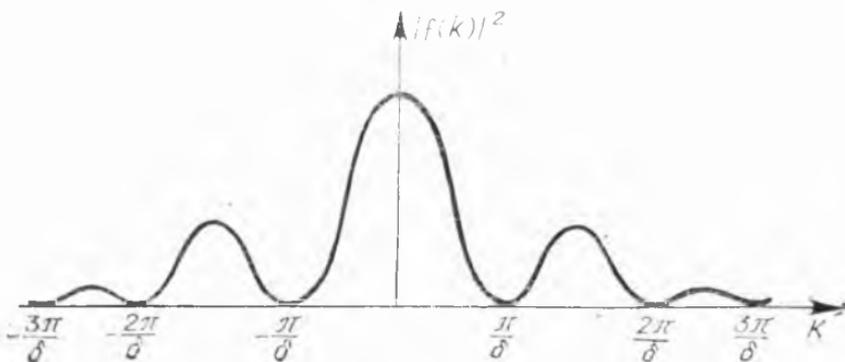
$$\begin{aligned} f(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\delta}} \int_{-\delta}^{\delta} e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi\delta}} \left(-\frac{1}{ik} \right) (e^{-ik\delta} - e^{ik\delta}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\delta\pi}} \frac{1}{k} \sin k\delta. \end{aligned}$$

Демак, электрон импульсининг $\hbar k$ ва $\hbar(k + dk)$ оралиқда бўлиш эҳтимоли, яъни (4.31) ифода учун

$$|f(k)|^2 dk = \frac{1}{\pi\delta} \frac{\sin^2 k\delta}{k^2} dk \quad (4.33)$$

ни ҳосил қиламиз. Агар (4.33) функция графигини чизсак, электрон импульсининг тақсимоти учун оддий дифракцион манзарага хос 25-расмдаги тасвирга келамиз. Илгаридек, тақсимот «кенглиги» учун максимум чўққисидан қўшни минимумгача масофани қабул қиламиз, яъни $\Delta k \approx \pi/\delta$. Демак, (2.19) га биноан

$$\Delta p = \hbar \Delta k = \hbar \frac{\pi}{\delta}$$



25- расм. Импульс тақсимоти графиги.

ҳосил бўлади. Мазкур тажрибада координата δ аниқлик билан аниқланган эди. Шунинг учун x бўйича тақсимоти учун

$$\Delta x = 2\delta$$

бўлади. Бу ифодадан $\delta = \Delta x/2$ ни юқоридаги ифодага қўйиб яна ноаниқлик муносабатига келамиз.

Квант механикасининг ноаниқлик принципи, умуман, маълум ўзгарувчи физикавий катталиклар жуфтани бир вақтда ўлчаш масаласига тааллуқли. Микрозарранинг, масалан, электроннинг импульсини ва координатасини бир вақтда ўлчаш билан боғлиқ ноаниқликни юқорида кўрдик. Худди шу ноаниқлик принципи таъсирига тушган физикавий катталикларнинг иккинчи жуфти зарра энергияси ва энергияни ўлчаш учун кетган вақтдир:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx 2\pi\hbar. \quad (4.34)$$

(4.34) муносабат зарра энергиясини ΔE аниқликда ўлчаш учун камида $\Delta t \sim \hbar/\Delta E$ вақт ўтишини кўрсатади. Бошқача айтганда, агар система ўлчаш жараёнида Δt вақт давомида бирор ҳолатда мавжуд бўлса, унинг бу ҳолатдаги энергияси $\hbar/\Delta t$ дан кам бўлмаган ноаниқлик билан ўлчанган. (4.34) муносабатга биноан, агар ўлчаш учун кетган вақт Δt кичик бўлса, система энергиясини ўлчашдаги ноаниқлик катта бўлади.

Квант механикасининг ноаниқлик принципига физикавий маъно бериш мақсадида 1928 йилда Н. Бор *тўлдирувчилик принципини* таклиф этди. Бу принципга кўра бир-бирини тўлдирувчи қатор классик катталиклар ўзаро бир-бирларини рад қилади ва уларнинг атомлар соҳасидаги ҳодисаларни тавсифлаши бир-бирини тўлдирмайди. Эксперимент нуқтан назардан қатор жуфт физикавий катталикларни ўлчашдаги аниқлик ноаниқлик принципи шартидан юқори бўлмайди. Бу ҳол тажрибанинг мукамаллигига боғлиқ, бўлмасдан, балки микродунёга хос хусусиятдир.

Гейзенберг ноаниқлигига биноан, энди биз фазонинг бирор нуқтасида заррани мавжуд бўлиши ҳақидаги фикрдан қайтишимиз лозим. Аксинча, энди заррани ўзининг де-Бройль тўлқини эгаллаган фазо қисмининг ҳаммасида бир вақтда мавжуд деб қарашимиз керак.

Спектрал ёйиш принципига биноан зарранинг тўлқин функциясини (4.30) кўринишда бир қанча элементар тўл-

қин e^{ikx} ларга ёйиш мумкин. Ҳар бир элементар тўлқин кузатиш давомида тезлик учун мумкин бўлган қийматнинг аниқланиш эҳтимолини характерлайди.

Зарранинг тезлигини билолмаймиз, фақат тезликнинг эҳтимолий қийматлари тўпламига эга бўлдик. Ноаниқлик принцинга кўра ўлчаш ўтказилишига қадар зарра аниқ тезликка эга эмас, балки бир вақтнинг ўзида қатор тезликларга эга. Ҳар бир тезлик эса кузатилиш эҳтимолига эга. Бу ҳол заррани корпускуляр сифатидаги классик тасаввуримизга мутлақо зиддир. Иккинчи томондан эса заррани тўлқин деб ҳам бўлмайди, чунки уни кузатиш давомида, локаллаб, яъни бир нуқтага йиғиб бўлмайди. Шундай қилиб, яна қайд қиламизки, зарра, масалан, электрон на зарра ва на тўлқин эмас, у бир вақтнинг ўзида иккаласидан келиб чиққан. Чунки Н. Борнинг айтишича, квант механикасида объектив мавжуд физикавий катталиклар қийматларининг тақсимот эҳтимолини ҳисобламаймиз, балки биз тажриба имконидан кутиладиган қиймат билан иш кўрамиз, қисқача айтганда, зарра ўзининг тўлқин функцияси нчига олган тажриба имкониятлари тўпламидир.

20- §. Ўртача қиймат. Операторлар

Муайян физикавий шароитдаги зарра учун Шредингер тенгламасини ечиш билан зарра ҳолатининг ноаниқлик принципи йўл қўйган информацияга эга тўлқин функцияси $\psi(x, y, z, t)$ ни аниқлаймиз. Бу информация албатта, эҳтимолий характерга эга. Фараз қилайлик, $\psi(x, t)$ тўлқин функция билан тавсифланувчи бирор зарранинг x ўқига нисбатан вазияти учун ўрта қиймат x ни ҳисоблаш керак бўлсин. Бу қийматни ҳолатлари бир хил тўлқин функция орқали тавсифланадиган кўп сондаги зарранинг x ўқига нисбатан ўрнини берилган вақт моментидан аниқлаб, ҳосил бўлган қийматларни ўртачалаш йўли билан аниқлашимиз мумкин.

Айтилганларни яққолроқ тасаввур қилиш учун классик механикада оғирлик марказини тониш усулини эслайлик. Фараз қилайлик, N та заррадан иборат тўғри чизиқ шаклидаги механикавий системанинг оғирлик (ёки масса) марказини аниқлаш лозим. Ҳар бир зарранинг оғирлигини, осонлик учун, бир граммдан деб ҳисоблаймиз. Агар, масалан,

механикавий система x ўқи бўйлаб x_1 нуқтада N_1 заррадан, x_2 нуқтада N_2 заррадан ва ҳ. к. x_n нуқтада N_n заррадан иборат кўринишда тақсимланган бўлса, механикавий системанинг оғирлик маркази, ёки кўп миқдордаги (N та) зарраларнинг x ўқига нисбатан ўртача ўрни (\bar{x}) қуйидаги

$$\bar{x} = \frac{N_1 x_1 + N_2 x_2 + \dots + N_n x_n}{N_1 + N_2 + \dots + N_n} = \frac{\sum N_i x_i}{\sum N_i} = \frac{\sum N_i x_i}{N} \quad (4.35)$$

формула орқали аниқланади.

Биз кўраётган масалада зарра битта. Бу ҳолда x_i нуқтадаги зарралар сони N_i ни x_i атрофидаги dx ораликда зарранинг қайд қилиниш эҳтимоли \mathcal{P}_i билан алмаштиришимиз керак:

$$\mathcal{P}_i = |\psi_i|^2 dx, \quad \psi_i = \psi(x_i, t). \quad (4.36)$$

Мазкур алмаштиришни (4.35) да бажариб ва йиғиндидан интегралга ўтсак, якка зарранинг x ўқига нисбатан ўрнининг ўрта қийматини аниқлаш учун қуйидаги формулага келамиз:

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx}. \quad (4.36)$$

(4.36) ифодага биноан x га тўғри келган «нуқта» $|\psi|^2$ нинг масса марказида бўлади, яъни $\bar{x} |\psi|^2$ нинг x ўқи билан ҳосил қилган юзасининг мувозанат марказидир. Агар тўлқин функция ψ нормаланган бўлса, (4.36) ифоданинг махражи $x = -\infty$ дан $x = \infty$ гача соҳанинг бирор нуқтасида зарранинг мавжудлик эҳтимолига, яъни бирга тенг. Демак,

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx. \quad (4.37)$$

Бу ифода одатда ўзига тенг кучли бўлган қуйидаги:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx \quad (4.38)$$

кўринишда ёзилади. (4.38) да ψ^* — ψ га нисбатан комплекс қўшма функция.

Уртача қийматни ҳисоблашнинг бу усулидан зарранинг импульси ва унинг энергияси каби динамик катталикларни аниқлашда тўғридан-тўғри

$$\bar{p}_x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* p_x \psi dx \quad (4.39)$$

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* E \psi dx. \quad (4.40)$$

(4.38) кўринишда фойдаланиб бўлмайди. Чунки $\psi(x, t)$ билан интеграллашни бажариш учун p ва E ларни ҳам x ва t нинг функцияси кўринишда ифодалашимиз керак. Зарранинг импульсини ва энергиясини x ва t нинг функцияси $p(x, t)$ ва $E(x, t)$ кўринишида ёзишимиз учун x ва t аниқланган бўлиши керак. x ва t аниқланган заҳотиёқ, ноаниқлик принципига биноан p ва E ни тўғри аниқлай олмаймиз. Шундай қилиб, юқоридаги формулаларга p ва E нинг аниқ қийматларини қўймоқчи бўлсак уларнинг x ва t параметрлари ноаниқ. Шунинг учун, одатда, p ва E ни аниқлаш эркин зарранинг де-Бройль тўлқин функцияси

$$\psi(x, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

ни x ва t бўйича дифференциаллаш йўли билан амалга оширилади. Дифференциаллаш натижасида

$$E \psi(x, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t), \quad (4.9)$$

$$p_x \psi(x, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \quad (4.15')$$

ифодаларни ҳосил қиламиз. (4.9') ҳамда (4.15') дан ва уларнинг асли (4.9) ҳамда (4.15) формулалардан p_x ва E динамик катталикларга $(-i\hbar) \partial/\partial t$ ва $(i\hbar) \partial/\partial x$ каби операторлар мос қўйилиши кўришиб турибди, яъни

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (4.41)$$

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (4.42)$$

Квант механикасида, одатда, операторни қалпоқчали ҳарф орқали тасвирлаш қабул қилинган. Жумладан, (4.41) ва (4.42) да \hat{p} ва \hat{E} орқали импульс ва энергия операторлари белгиланган.

Бинобарин, (4.41) ва (4.42) ифодалар эркин зарра ҳоли учун келтириб чиқарилган бўлса-да, умумий ҳол учун ҳам тўғри. Умумий ҳолда зарранинг тўла энергияси унинг кинетик ва потенциал энергиясининг йиғиндисига тенг, яъни $E = T + V(x)$. Бу тенгликни, расмий равишда, мос оператор тенглик билан алмаштиришимиз мумкин:

$$\hat{E} = \frac{\hat{p}_x^2}{m} + \hat{V}. \quad (4.43)$$

Агар (4.43) да импульс ва энергия операторлари ўрнига уларнинг (4.41), (4.42) ифодасини қўйсақ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \quad (4.44)$$

расмий тенгламага келамиз. Энди бу тенгламани иккала томонини $\psi(x, t)$ функцияга кўпайтириб ўзимизга яхши таниш Шредингер тенгламасини ҳосил қиламиз:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi.$$

Демак, импульс ва энергия операторлари ҳақидаги (4.41) ва (4.42) каби постулат квант механикасининг Шредингер тенгламаси ҳақидаги постулатга эквивалент.

Квант механикасининг математик аппарати асосида тажрибада кузатиладиган ҳар қандай ҳақиқий физикавий катталikka Эрмит оператор қўйилиши ётади. Бошқача айтганда, импульс ва энергияга (4.41) ва (4.42) операторлар мос қўйилади. Демак, у ҳолда импульс ва энергиянинг ўрта қиймати учун (4.39), (4.40) ифодада p ва E ўрнига уларнинг операторларини ишлатишимиз лозим:

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx, \quad (4.45)$$

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{E} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx. \quad (4.46)$$

Шуни қайд қилиш лозимки, оператор ўрта қийматини ҳисоблашда, албатта, (4.39) ва (4.40) кўринишда ёзиш шарт. Чунки, акс ҳолда

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \hat{p} \psi^* \psi dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} (\psi^* \psi) dx = -i\hbar (\psi^* \psi) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

ёки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \hat{p} dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \frac{\partial}{\partial x} dx$$

каби нотўғри ёки маъносиз натижага келамиз. Агар оператор бирор функцияга кўпайтириш амалидан иборат бўлса, (масалан, x ёки $V(x)$ каби), операторнинг ўрни аҳамиятга эга эмас. Импульснинг учта проекцияси ва импульс вектори оператори (4.41) га мос равишда

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (4.41)$$

$$p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad (4.47)$$

$$p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \quad (4.48)$$

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (4.49)$$

кўринишда ёзилади.

Демак, квант механикасида микрообъектни характерловчи ҳар бир кузатилувчи физикавий катталиқка математик оператор мос қўйилади. Физикавий катталиқларнинг сон қийматлари ўртасидаги боғланишни берувчи классик физика формулалари квант механикасида шу катталиқлар операторлари ўртасидаги боғланиш сифатида қаралади.

21- §. Хусусий қиймат ва хусусий функция

Квант механикасида энергиянинг сақланиш қонунига биноан, агар система бирор квант ҳолатда энергиянинг аниқ қийматига эга бўлса, бу қиймат вақт ўтиши билан сақланади. Системанинг бундай ҳолатлари стационар ҳо-

латлар деб аталади. Стационар ҳолатга албатта, ёпиқ система эга бўлади. Квант системасининг стационар ҳолатларига оид масала математиканинг хусусий қиймат ва хусусий функция (вектор) масаласига олиб келади. Худди шу масалага оид Шредингернинг стационар тенгламаси билан юқорида 18-§ танишган эдик. (4.20) формула билан ифодаланувчи стационар тенгламага операторлар тушунчаси орқали бошқа йўл билан ҳам келишимиз мумкин.

Системанинг тўла энергияси $E = T + V$ ни шу физикавий катталикларга мос операторлар орқали ифодалаб (4.43) кўринишда ёзамиз. Стационар масалада потенциал энергия V вақтга боғлиқ эмас, тўла энергия E эса юқорида айтганимиздек ўзгармас. Шунинг учун тўла энергия оператори \hat{E} оддий сон $\hat{E} = E$. Потенциал энергия оператори, илгаригидек, $\hat{V} = V(x)$. Демак, тўла энергиянинг ўзгармас ҳоли учун $E = T + V$ муносабатга

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x^2} + V \quad (4.50)$$

кўринишдаги оператор тенгламаси мос келади. (4.50) нинг икки томонини ўнгдан $\psi(x)$ функцияга кўпайтурсак, бир ўлчовли стационар ҳаракатнинг Шредингер тенгламасига келамиз:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi. \quad (4.51)$$

Умумий ҳолда Шредингернинг стационар тенгламаси (4.20) орқали берилади. Тўла энергиянинг (4.50) кўринишдаги оператор тенгламаси умумий ҳолда *Гамильтон оператори* дейилади ва қуйидагича ёзилади:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^2 + V(x, y, z), \quad (4.52)$$

\hat{H} — орқали Гамильтон оператори белгиланган. Шундай қилиб, стационар ҳолатлар учун Шредингер тенгламаси қуйидаги кўринишда ёзилиши мумкин:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (4.53)$$

Шредингернинг (4.53) стационар тенгламаси тўла энергиянинг фақат маълум қийматлари учунгина ечимга эга.

(4.53) ечимга эга энергиянинг бу қийматлари \hat{H} операторининг *хусусий қийматлари* деб аталади. Хусусий қийматларга эга ҳолат, яъни (4.53) нинг ечими \hat{H} учун хусусий функция бўлади.

(4.53) тенглама тажрибада кузатилувчи бирор физикавий катталиқ масалан, энергия аниқ, қийматга эга ҳолат (4.53) тенгламанинг ечими пси-функция орқали тавсифланади деган квант механикасининг фундаментал даъвосини ифодалайди. Муайян система учун (4.53) Шредингер тенгламасини ечиш — тенгламани ва қўйилган чегаравий шартларни қаноатлантирувчигина эмас, балки тўлқин функциясига қўйилувчи бир қийматлиқ, чеклиқ, функциянинг ва унинг ҳосилаларининг узлуксизлиқ талабларига ҳам жавоб берувчи тўлқин функцияни аниқлаш демакдир. Агар шундай функцияни топиш мумкин бўлмаса, система стационар ҳолатда бўла олмайди. Шундай қилиб, физикавий катталиқларни, масалан, энергияни квантлаш квант механикаси назариясининг табиий мазмунидир. Микро-объектлар дунёсида энергиянинг квантланиши эса ҳар қандай турғун системага характерли хоссадир.

Бундан буён биз хусусий қийматларни E_n , хусусий тўлқин функцияларни ψ_n орқали белгилаймиз. У ҳолда Шредингернинг стационар ҳолати тенгламаси (4.53) қуйидаги кўринишга келади:

$$\hat{H} \psi_n = E_n \psi_n. \quad (4.54)$$

Энди қўйилган масалани (4.54) тенглама тўғри ҳал қилишлигини исботлайлик. Бунинг учун системанинг ψ_i функция орқали тавсифланувчи бирор ҳолати энергиясининг ўрта қийматини ҳисоблаймиз:

$$\bar{E} = \int \psi_i^* \hat{H} \psi_i dx dy dz = E_i \int \psi_i^* \psi_i dx dy dz = E_i. \quad (4.55)$$

Ҳисоблаш вақтида интеграл ости ифодада $\hat{H} \psi_i$ ни (4.54) га биноан $E_i \psi_i$ билан алмаштирдик ва тўлқин функция учун нормалаш шarti (4.3) дан фойдаландик.

Энергия квадрати учун ҳам ўрта қийматни ҳисоблайлик. Бунинг учун оператор \hat{H} нинг квадратини аниқлаймиз:

$$\hat{H}^2 = (\hat{H})^2 = \hat{H} \cdot \hat{H}.$$

У ҳолда

$$\begin{aligned}\overline{E^2} &= \int \psi_i^* \hat{H}_i^2 \psi_i dx dy dz = \int \psi_i^* \hat{H} \cdot \hat{H} \psi_i dx dy dz = \\ &= E_i \int \psi_i^* \hat{H} \psi_i dx dy dz = E_i^2 \int \psi_i^* \psi_i dx dy dz = E_i^2.\end{aligned}$$

Биз бу ҳисоблашда икки марта (4.54) дан фойдаландик. Шундай қилиб мазкур ҳол учун $\overline{E} = E_i$; $\overline{E^2} = E_i^2$ экан. Демак, ψ_i ҳолатдаги системанинг энергияси E_i га тенг якка-ю ягона қийматга эга ва E_i қийматдан фарқлашнишни характерловчи

$$E_i = \overline{E}_i + \Delta_i \text{ даги}$$

қўшимча қиймат Δ_i ҳам, шунингдек

$$\overline{E_i^2} = (\overline{E}_i)^2 + \Delta_i^2$$

даги ўртача қиймат тақсимоти Δ_i^2 ҳам нолга тенг.

Юқорида айтилганлардан хулоса қилиб квант механикасининг энг асосий постулатини таърифлаймиз: агар системанинг тўлқин функцияси хусусий қиймат — хусусий функция учун ўринли бўлган (4.54) каби

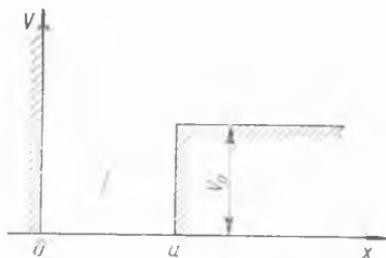
$$\hat{G} \psi_n = G_n \psi_n$$

тенгламани қаноатлантирса, G_n хусусий қийматга мос G физикавий катталикини ўлчаш натижасида фақат хусусий функция ψ_n га мос келувчи битта ҳолатгагина эга бўламиз. Агар ҳолатлари бир хил хусусий функция ψ_n билан тавсифланувчи кўп сонли бир хил системалар устида ўлчаш олиб борилса, ҳар бир ўлчаш натижасида ягона G_n қиймат ҳосил бўлади.

22- §. Тўғри бурчакли потенциал ўра

Келгуси параграфда Шредингер тенгламасини бир неча сунъий масалаларни ечишга қўллаймиз. Бу масалалар математик жиҳатдан етарлича содда бўлса ҳам, аслида атомдаги электрон ҳаракати ҳақидаги масалаларга ўхшашдир. Бу хил оддий масалаларни ечишдан мақсад Шредингер тенгламасининг математик аппаратини эгаллашдир. Дастлаб, зарранинг бир ўлчовли оддий ҳаракатини кўраимиз.

Зарранинг потенциал энергияси $V(x)$ x ўқининг $0 \leq x \leq a$ оралиғида нолга, $x < 0$ соҳада чексизга ва $x > 0$ соҳада маълум ўзгармас V_0 мусбат катталиқка тенг дейлик. Потенциал энергияси шу тарзда аниқланган зарранинг ҳаракати 26-расмда тасвирланган потенциал ўрада юз беради. Агар зарранинг тўла энергияси $E < V_0$ бўлса, зарра потенциал ўрада



26- расм. Потенциал ўра.

да ҳаракатланади деймиз. Бу масала бизни асосан уч жиҳатдан қизиқтиради: 1) чеклаб қўйилган ҳолдаги зарра ҳаракатининг Шредингер тенгламасини қандай ечиш; 2) шу тенглама ечимининг характерли хоссалари; 3) масалани квант механикаси ҳамда Ньютон механикаси ёрдамида ечишларда ҳосил бўлган натижаларни ўзаро таққослаш.

Мазкур потенциал ўрада классик зарранинг ҳаракатини кўрайлик. У $0 \leq x \leq a$ оралиқда ўзгармас кинетик энергия билан ва демак, ўзгармас тезлик билан ҳаракатланади (чунки заррага $0 \leq x \leq a$ оралиқда ҳеч қандай ташқи таъсир кучи қўйилмаган, яъни унинг ҳаракати эркин ҳаракатдир). Потенциал ўрадаги классик зарранинг энергияси эса ихтиёрий қийматга тенг бўлиши мумкин. Агар зарранинг тўла энергияси $0 \leq E \leq V_0$ бўлса, у потенциал ўрадан чиқиб кета олмайди, чунки, акс ҳолда, агар зарра потенциал ўрадан чиқиб кета олса эди, потенциал ўрадан ташқари соҳада унинг потенциал энергияси тўла энергиясидан катта ва унинг кинетик энергияси эса манфий қийматга тенг бўлар эди. Бу, албатта, классик зарра ҳаракати учун мумкин бўлмаган ҳол, чунки ҳеч қандай зарра манфий кинетик энергия билан ҳаракат қила олмайди. Шунинг учун потенциал ўра чеккасига етган классик зарра потенциал ўра деворидан қайтади, сўнгра, тескари йўналишда ҳаракатланади, ўранинг қарама-қарши деворига етиб яна орқага қайтади ва ҳ. к. Шундай қилиб, классик физика қонунларига биноан зарра потенциал ўра ташқарисида бўла олмайди ва ўра ичида ҳар қандай нуқтада бир хил эҳтимол билан қайд қилиниши мумкин.

Квант механикасига бўйсунувчи зарранинг потенциал ўрадаги ҳаракати бутунлай бошқача ўтади. Квантлашнинг асосий шартига кўра зарра ҳаракатининг тўлқин функцияси узлуксиз, бир қийматли бўлиши керак. Демак, зарранинг тўлқин функцияси x ўқининг мусбат йўналиши бўйлаб координатанинг $x > 0$ соҳасида текис ўзгариши учун потенциал ўранинг ўнг деворидан ташқи қисмига ҳам давом этиши керак. Потенциал энергия чексиз катта бўлган ҳолида, яъни потенциал ўранинг чап деворидан ташқи қисмида зарранинг ҳаракатини қандай рўй беришини қуйида кўрамиз. Шредингер тенгламасини ечмасдан туриб зарранинг чап девордан ташқи соҳадаги ҳаракати ҳақида шундай изоҳ беришимиз мумкин. Классик нуқтаи назардан зарранинг мутлақо ўтиб бўлмайдиган $x < 0$ соҳага кира олиш эҳтимоли зарра қанча массив бўлса, яъни қанча классик заррага яқин бўлса, шунча кичик бўлади.

Потенциал ўрадаги зарра ҳаракатига доир Шредингер тенгламасини ечишдан аввал бу масала учун чегаравий шартларни ифодалаймиз. Бир ўлчовли ҳаракат учун Шредингер тенгламаси қуйидаги кўринишга эга бўлади:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0. \quad (4.56)$$

Потенциал энергия $V(x)$ x нинг поғонали функцияси бўлгани учун x нинг мусбат йўналишдаги ўзгариш соҳасини иккига ажратамиз. У ҳолда (4.56) тенгламани ечиш осонлашади, чунки ўзгарувчи x нинг бу икки соҳасининг ҳар бирида $V(x)$ ўзгармас қийматга тенг, яъни

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{агар } 0 \leq x \leq a, \\ +V_0, & \text{агар } x > a. \end{cases} \quad (4.57)$$

x нинг $0 \leq x \leq a$ соҳасини I соҳа деб атаймиз ва бу соҳада (4.56) нинг ечимини I индекс билан белгилаймиз. Худди шундай, $x > a$ — II соҳа ва шу соҳага тегишли ечимларни II индекс билан белгилаймиз. Ҳар бир соҳада (4.56) нинг ечимлари ψ ни аниқлаймиз ва x нинг бутун соҳасида тўлқин функция узлуксиз ва бир қийматли бўлиши учун бу иккала ечимни $x = a$ нуқтада «тикамиз».

Шредингер тенгламаси биринчи соҳа учун

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k^2 \psi_1 = 0, \quad (4.58)$$

иккинчи соҳа учун эса

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} - \kappa^2 \psi_{II} = 0 \quad (4.59)$$

кўринишга эга. Бу тенгламаларда

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad (I) \quad \kappa^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad (II)$$

каби белгилашлар киритдик. k^2 , κ^2 — мусбат катталиклар. Тўлқин тенглама кўринишдаги (4.58) тенгламанинг умумий ечими ҳам турғун тўлқин характерига эга бўлади:

$$\psi_I(x) = A \sin(kx + \delta). \quad (4.60)$$

(4.59) тенгламанинг чексизликда нолга айланувчи ечими экспоненциал характерга эга. Шунинг учун бу тенгламанинг умумий ечими қуйидаги кўринишда бўлади:

$$\psi_{II}(x) = B e^{-\kappa x}. \quad (4.61)$$

Юқоридаги A , B , δ — ихтиёрий ўзгармас катталиклар.

Потенциал ўра чегарасида бу икки ечим бир-бирига тенг бўлиши учун уларни $x = a$ да тенглаштирамиз, яъни $\psi_I(a) = \psi_{II}(a)$

$$A \sin(ka + \delta) = B e^{-\kappa a}. \quad (A)$$

Иккала ечимни $x = a$ да бир-бирига текис ўтишини таъминлаш учун уларга $x = a$ нуқтада ҳосилаларининг тенг бўлиш

$$\left. \frac{d\psi_I}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=a}$$

шартини қўямиз. Бу шартга кўра

$$kA \cos(ka + \delta) = -\kappa B e^{-\kappa a} \quad (B)$$

муносабат ҳосил бўлади. (A) ва (B) ифодаларни бир-бирига бўлиб қуйидаги тенгламани ҳосил қиламиз:

$$\operatorname{tg}(ka + \delta) = -\frac{k}{\kappa}. \quad (4.62)$$

Потенциал ўранинг чап деворига тааллуқли $V \rightarrow \infty$ ҳолини кўрамиз. Зарранинг потенциал энергиясини чексиз катталашишида k ўзгармайди, κ эса пропорционал:

равишда катталашади. Шунинг учун $V \rightarrow \infty$ да k/x нисбат нолга интилади. Демак, чексиз баланд потенциал деворда ечимларнинг узлуксизлик ва текислик шартини (4.62) дан қўйидаги

$$\operatorname{tg}(ka + \delta) = 0$$

қўринишга келади. Бу тенгликни бажарилиши учун $\sin(ka + \delta)$ ва демак, $\psi_1(a)$ нолга тенг бўлиши керак. Шундай қилиб, потенциал энергия чексиз мусбат катта қийматга тенг нуқтада, яъни деворда зарранинг тўлқин функцияси нолга айланади. Деворнинг орқасида эса функция нолдан бошланиши ва (4.61) га кўра экспоненциал камайиб бориши керак. Бошқача айтганда девор орқасида зарра функциясининг нолга тенглиги ўзгармай қолади. Аммо тўлқин функция ҳосиласи $d\psi_1/dx$ чексиз деворда ҳам нолга тенг эмас. Демак, потенциал энергия нолдан бирданига чексизга айланган нуқтада зарранинг тўлқин функцияси нолга айланади, узлуксизлик шартини қаноатлантиради, аммо шу нуқтада унинг текислиги бузилади, яъни $d\psi_1/dx \neq d\psi_{II}/dx$. Бу айтилган мулоҳазалар тамомила потенциал ўранинг чап деворига тааллуқли, яъни

$$\psi_1(0) = 0, \quad \psi_1(x < 0) = 0.$$

ψ_1 функция $x = 0$ да нолга тенглигидан $\delta = 0$ келиб чиқади.

Биз қўйида кўрамизки, ψ_1 тўлқин функция дискрет энергетик сатҳларга мос келувчи хусусий функциялардир ($k \sim \frac{n\pi}{a}$). Шунинг учун ψ_1 функция нормаланган бўлади. Нормалаш шартига биноан

$$\int_0^a \psi_1^* \psi_1 dx = A^2 \int_0^a \sin^2 kx dx = A^2 \frac{a}{2} = 1.$$

номаълум коэффициент A учун қўйидаги қиймат ҳосил бўлади:

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Шундай қилиб, тўлқин функцияга қўйилган бу талабни ҳисобга олсак (4.60) ечим қўйидаги кўринишга келади:

$$\psi_1 = A \sin(kx) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(kx). \quad (4.63)$$

У ҳолда (4.62) тенглама

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\kappa} \quad (4.64)$$

кўринишга келади. Энди (4.64) тенгламада битта ҳам ихтиёрий ўзгармас қиймат қатнашмайди. У заррани потенциал ўрадаги ҳаракатини характерловчи катталиклар орасидаги муносабатни ифодалайди. Потенциал ўра кенглиги a шу тенгликка биноан, k ва κ лар эса (I) ва (II) формулалар орқали аниқланади. Потенциал ўранинг кенглиги a ва чуқурлиги V_0 берилса, (4.64) тенгламада қатнашувчи E нинг мумкин бўлган қийматлари аниқланади. Лекин (4.64) трансцендент тенглама бўлганлиги сабабли унга асосан E нинг қийматларини қидириш ноқулай. Шунинг учун даставвал (4.64) ни содда кўринишга олиб келувчи ҳолни кўриб чиқамиз.

Агар потенциал ўранинг иккала деворини чексиз баланд деб қарасак, (4.64) тенглама

$$\operatorname{tg}(ka) = 0 \quad (4.65)$$

оддий кўринишга келади. Тенглама аргументининг

$$ka = (n + 1)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.66)$$

қийматларида қаноатлантирилади. Расмий равишда (4.66) тенглама $k = 0$ ечимга ҳам эга. Лекин бу ҳолда Шредингер тенгласининг ечими айнан нолга $\psi = 0$ айланади (яъни зарранинг ўзи ҳеч қаерда йўқ). Ҳақиқатан, $k = 0$ да ψ_I ва u билан бирга ψ_{II} ҳам нолга айланади. Бошқача айтганда, пси-функция ҳамма соҳада нолга тенг. k учун аниқланган бу ифодани (I) га қўйсак, тўла энергиянинг қийматларини берувчи

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n + 1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.67)$$

формулага келади. Агар зарра потенциал ўрада «қамоқда» бўлса, унинг энергияси (4.56) тенгласининг маълум дискрет хусусий қийматларигагина тенг қийматлар қабул

қила олар экан. Зарра энергиясининг бу қийматлари энергетик сатҳлар деб аталади. Шундай қилиб биз кўрдикки, чексиз чуқур ўрадаги зарранинг энергия сатҳларини ҳисоблаш осонлик билан охирига етказилиши мумкин. Умумий ҳолда эса, энергетик сатҳлар (4.64) трансцендент тенглама орқали аниқланади.

Энди потенциал ўрада стационар ҳолатдаги зарранинг энергиясининг квантланиши сабабини кўрайлик. Фазонинг ҳар хил соҳасида Шредингер тенгламалари (4.58) ва (4.59) ни ечиш билан биз квантланган энергияга келмаймиз, албатта. Энергиянинг квантланиши ҳар хил соҳадаги тенглама ечимларини соҳа чегарасида «тикиш» натижасида юз берди. Квант механикасининг умумий теоремасига кўра агар система чексизликка кета олмаса, унинг энергияси квантланган, аксинча, агар система чексизликка кета олиш қобилиятига эга бўлса, энергияси квантланмаган бўлади. (4.64) тенгламанинг икки томонини k га бўламиз:

$$\frac{1}{k} \operatorname{tg} ka = -\frac{1}{\kappa}.$$

Ҳосил бўлган тенгламанинг ўнг томони манфий, чунки $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ ва биз қараётган ҳолда $E < V_0$. Тенгламанинг чап томони ҳам манфий бўлишлиги учун тригонометрик функция аргументи қуйидаги соҳада ўзгариши керак:

$$\pi \left(\frac{1}{2} + n \right) < ka < \pi (1 + n), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

яъни иккинчи чоракда ва тўртинчи чоракда. Демак, тригонометрик функция аргументининг мумкин бўлган энг кичик қиймати

$$ka > \frac{\pi}{2}$$

бўлиши керак. Бу тенгсизликнинг икки томонини ҳам квадратга кўтариб ва k^2 ни E орқали ифодаси (I) дан фойдаланиб,

$$\frac{2mE}{\hbar^2} a^2 > \frac{\pi^2}{4}$$

тенгсизликка келамиз ёки

$$E > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Иккинчи томондан, биламизки, масаланинг шартига кўра $E < V_0$, демак,

$$V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Охирги тенгсизликдан потенциал ўрадаги зарра энергияси учун дискрет сатҳларнинг пайдо бўлиш шартига келамиз:

$$V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}. \quad (4.68)$$

Бу тенгсизликнинг ўнг томонида фақат ўзгармас доимий катталиклар қатнашади, чап томони эса потенциал ўра чуқурлигининг ва кенглигининг функциясидир. Агар (4.68) шарт бажарилмаса, яъни потенциал ўра ўта тор ёки ўта саёз бўлса, унда битта ҳам энергетик сатҳ жойлашмайди. Бу ҳолда потенциал ўрада боғланган ҳолатлар йўқ ва ўра заррани тутиб тура олмайди.

Энди (4.64) трансцендент тенгламани ечишга ўтамиз. Бунинг учун қуйидаги алмаштиришларни ўтказамиз:

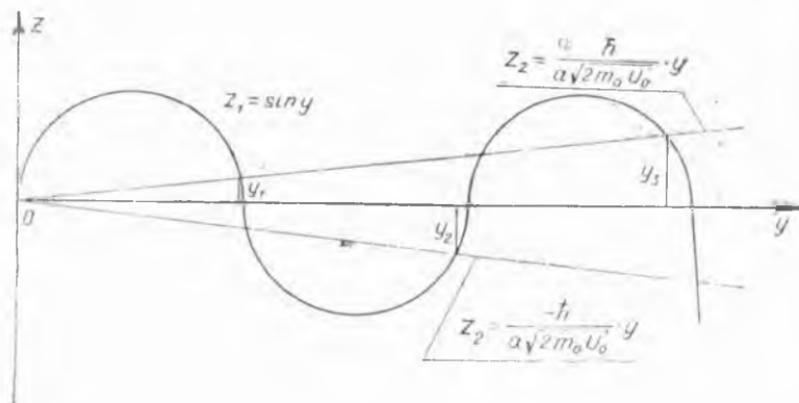
$$\begin{aligned} \sin(ka) &= \frac{1}{\sqrt{1 + 1/\operatorname{tg}^2(ka)}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\kappa}{k}\right)^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{V_0 - E}{E}}} = \\ &= \sqrt{\frac{E}{V_0}} = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}. \end{aligned}$$

$y = ka$ белгилаш киритиб (4.64) тенгламага эквивалент қуйидаги тенгламага келамиз:

$$\sin y = \frac{\hbar}{a\sqrt{2mV_0}} y.$$

Охирги тенгламанинг ечимини $z_1 = \sin y$ ва $z_2 = \frac{\hbar y}{a\sqrt{2mV_0}}$

функциялар эгри чизиғининг кесишган нуқталарини аниқлаш орқали қидирамиз. z_1 ва z_2 функциялар графиги 27-расмда тасвирланган. z_1 ва z_2 эгри чизиқлар кесишиш нуқталарининг ҳаммаси ҳам дискрет энергетик сатҳларни тасвирламайди. Кесишиш нуқталарининг фақат (4.64) нинг ишорасини қаноатлантирадиган, яъни иккинчи ва



27-расм. Энергиянинг хусусий қийматларини аниқлаш.

тўртинчи чоракдагиларигина дискрет энергетик сатҳларни тасвирлайди. Сони чекли бўлган бу нуқталар ($y_n = ka$) га қуйидаги энергетик сатҳлар тўғри келади:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} y_n^2.$$

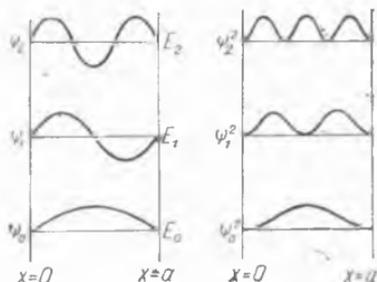
Энергетик сатҳларнинг пайдо бўлиш шarti ҳақидаги суҳбатимизни яқунлашдан олдин шу нарсани таъкидлаб ўтатишимизки, потенциал ўрада боғланган ҳолатни пайдо бўлиш шarti (4.68) соф квант хоссадир, чунки классик механикага биноан зарра ҳар қандай потенциал ўрада боғланган ҳолат ҳосил қилади.

Энди потенциал ўра ичида пси-функция кўринишини аниқлаймиз. Чексиз чуқур потенциал ўрада асосий энергетик сатҳ учун (4.66) га биноан $n = 0$, $k = \frac{\pi}{a}$ ва тўлқин функция эса $\psi_0 = A \sin \frac{\pi}{a} x = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{a} x$. Юқори сатҳларнинг тўлқин функциялари эса қуйидагича аниқланади:

$$n = 1, \quad k = 2 \frac{\pi}{a}, \quad \psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin 2 \frac{\pi}{a} x;$$

$$n = 2, \quad k = 3 \frac{\pi}{a}, \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin 3 \frac{\pi}{a} x \text{ ва ҳоказо.}$$

Бу ечимларнинг кўриниши 28-расмда тасвирланган. n сони ўрадаги тўлқин функциянинг ноллари сонига тенглиги расмдан яққол кўриниб турибди. Демак, ҳаракат чекланган бўлса, системанинг ҳамма ҳолатларини ва мос равишда энергетик сатҳларини тартиб билан номерлаб чиқиш мумкин.



28- расм. Потенциал ўрадаги зарранинг тўлқин функцияси ва эҳтимоллик зичлиги.

Зарранинг ҳар қандай нуқтада қайд қилиниш эҳтимоли $|\psi|^2$ га пропорционал. 28-расмда $n = 0, 1, 2$ ҳоллари

учун $|\psi|^2$ нинг кўриниши келтирилган. Расмдан кўрамизки, энг паст (асосий) энергетик сатҳда, яъни $n = 0$ ҳолида, заррани энг катта эҳтимол билан потенциал ўра ўртасида топамиз, потенциал ўранинг чеккаларида эса заррани қайд қилиш эҳтимоли аксинча нолга яқин. Зарранинг бу хил ҳаракати биз юқорида кўрган классик зарранинг ҳаракатидан мутлақо фарқ қилади. Зарранинг минимал энергияси (4.67) га биноан $n = 0$ да $E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ мутлақо нолдан фарқли. Классик зарра эса аксинча ўра тубида ҳаракатсиз, яъни энергияси нолга тенг ҳолатда ҳам бўла олади. Квант механикасида эса зарранинг энг кичик энергияси ҳам нолдан катта. Бунинг сабабини ноаниқликлар муносабатидан кидиришимиз керак, чунки заррани ўрага жойлаб биз унинг координатасини чекладик. Бу эса ўз навбатида импульс қийматида ноаниқлик ҳосил қилади. Импульс ноаниқлигига мос келган энергия қийматининг тартибини ҳисоблаб кўрайлик. Бизнинг ҳолда зарра координатасининг ноаниқлиги тартиб жиҳатдан a га тенг десак бўлади, яъни $\Delta x = a$, у ҳолда импульс ноаниқлиги учун

$$\Delta p \cong \frac{2\pi\hbar}{\Delta x} \cong \frac{2\pi\hbar}{a}$$

ни ҳосил қиламиз. Зарра энергиясини эса тақрибан қуйидагича аниқлаймиз:

$$E = \frac{p^2}{2m} \cong \frac{(\Delta p)^2}{2m} \cong 4\pi^2 \frac{\hbar^2}{a^2} \cdot \frac{1}{2m} = 2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}.$$

Бу натижани E_0 билан солиштирсак, ҳақиқатан ҳам уларнинг тартиб жиҳатдан тенглигини кўрамиз.

28-расмга яна назар ташлайлик, потенциал ўрада маълум нуқтада зарранинг қайд қилиш эҳтимоли n нинг ўзгариши билан кескин ўзгаради. Масалан, ўра ўртасида ψ_n^2 максимал қийматга тенг бўлса, $|\psi_1|^2$ нолга тенг.

Энергетик сатҳлар ўртасидаги оралиқ катталигини баҳолаймиз. Бунинг учун (4.67) дан логарифмик ҳосила ($\Delta E/E$ кўринишда) оламиз:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = 2 \frac{\Delta n}{n+1}.$$

Ҳосил бўлган бу тенгликдан ΔE учун

$$\Delta E_n = 2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma} (n+1)^2 \frac{\Delta n}{(n+1)}$$

ифода келиб чиқади. Энергетик сатҳлар ўртасидаги фарқ n сонининг катталашиши билан ортиб боради.

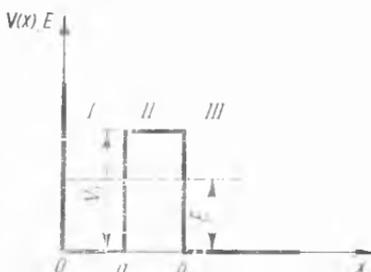
Энди потенциал ўра деворининг чекли бўлган ҳолига қайтайлик. Иккинчи соҳадаги ечимнинг ифодаси (4.61) га биноан зарра $x > a$ соҳада ҳам мавжуд экан. Классик физикага кўра зарра бу соҳага ўта олмайди, чунки $E < V$ бўлганлигидан зарранинг кинетик энергияси (T) манфийга айланади. Квант механикасида эса зарра $E < V$ соҳага ҳам ўтиши мумкин. Квант механикасида $E = T + V$ тенгликни миқдор жиҳатдан тушунмоқ керак эмас, балки уни *оператор тенглиги* деб тушуниш керак. Миқдор жиҳатдан уларнинг ўрта қийматларигина $\bar{E} = \bar{T} + \bar{V}$ каби боғланган.

$x > a$ соҳада (4.61) тўлқин функция $e^{-x \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar}$ га пропорционал. x нинг катталашиши билан ψ_n тўлқин функция экспоненциал камаяди ва демак, зарранинг қайд қилиниш эҳтимоли ҳам камаяди.

23- §. Потенциал тўсиқ. Туннель эффекти

Зарранинг бир ўлчовли ҳаракатининг муҳим ҳолидан бири унинг потенциал тўсиқдан ўтишидир. 29-расмда тасвирланган потенциал ўрани кўрайлик. Дастлаб, $0 < x < a$ соҳада бир неча зарра берилган бўлсин. II соҳанинг чеккаси $x = b$ да экспоненциал ечим нолдан фарқли бўлиши

мумкин ва шунинг учун зарраларни III соҳага ўтиш эҳтимоли мавжуд бўлади. $x > b$ бўлган III соҳага ўтиб зарралар чексизликка кетади, яъни бу хил потенциал ўрада маълум бирор вақтдан сўнг ҳеч қандай зарра қолмайди. Зарраларнинг потенциал тўсиқдан ўтишига *туннель эффекти* деб аталади. Зарранинг расмда кўрсатилган



29- расм. Потенциал тўсиқ.

$$V(x) \begin{cases} 0, & \text{агар } 0 < x < a; \\ V_0, & \text{агар } a \leq x \leq b; \\ 0, & \text{агар } x > b, \end{cases}$$

потенциал тўсиқдан ўтиш эҳтимолини ҳисоблаймиз. I соҳада зарра ҳаракати (4.58) тенглама орқали тавсифланади. Тенгламанинг ечимини қулайлик учун (4.60) кўринишда эмас, балки

$$\psi_I(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$$

кўринишда ёзамиз. II ва III соҳада ечимлар қуйидагича ёзилади:

$$\psi_{II}(x) = C_3 e^{-\kappa x} + C_4 e^{\kappa x},$$

$$\psi_{III}(x) = C_5 e^{ikx} + C_6 e^{-ikx},$$

ўзгармас k ва κ ларни E ва V_0 билан боғланиши юқоридегидек

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}; \quad (I) \quad \kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \quad (II)$$

кўринишда бўлади. $C_1 e^{ikx}$ ва $C_2 e^{-ikx}$, мос равишда, потенциал тўсиққа тушаётган ва қайтаётган тўлқинларни, $C_5 e^{ikx}$ ва $C_6 e^{-ikx}$ эса тўсиқдан ўтган ва чексизликдан қайтган тўлқинларни ифодалайди. Биз кўраётган ҳолда чексизликдан тўлқин қайтмайди, шунинг учун $C_6 = 0$ бўлиши керак. Туннель эффектини қиймат жиҳатдан характерлаш мақсадида потенциал тўсиқнинг шаффофлигини кўрсатувчи ўтиш коэффициенти D ни киритамиз. D катта-

лик тўсиқдан ўтган зарралар оқими зичлигини тўсиққа тушаётган зарралар оқими зичлигига нисбатига тенг. У ҳолда D учун тўсиқдан ўтган ва тушган тўлқинлар амплитудаларининг модуллари квадратининг нисбати ҳосил бўлади:

$$D = \frac{|C_5|^2}{|C_1|^2}.$$

Худди шундай, тўсиқдан қайтган ва унга тушган тўлқинлар амплитудаларининг модуллари квадратларининг нисбати

$$R = \frac{|C_2|^2}{|C_1|^2}$$

зарранинг потенциал тўсиқдан қайтиш коэффициентини деб аталади.

Юқоридаги ψ_I , ψ_{II} , ψ_{III} ечимларни ва уларнинг ҳосилаларини $x = a$ ва b нуқталарда тенг бўлиш шартидан C_1 , C_2 , C_3 , C_4 , C_5 коэффициентлар учун тенгламалар системасига эга бўламиз. Шу тенгламалар ёрдамида C_5 ва C_1 коэффициентлар нисбатини аниқлаб шаффофлик коэффициентининг тўсиқ параметрлари билан боғланишини ҳосил қиламиз. Лекин биз бу кўп вақтни олувчи математик амалларни бажариб ўтирмасдан қуйидаги оддий физикавий мулоҳазалар ёрдамида D нинг ифодасини аниқлаймиз.

Потенциал тўсиқнинг $x = a$ даги деворига чапдан келиб тушган $C_1 e^{ikx}$ тўлқин тўсиқ ичида $e^{-\kappa x}$ кўринишдаги экспоненциал қонун бўйича камаяди, яъни

$$\psi_{\text{тушувчи}} \sim e^{-\kappa(x-a)}.$$

Тўсиқнинг $x = b$ нуқтадаги иккинчи деворига бу тўлқин дастлабки қийматига нисбатан

$$C \sim e^{-\kappa(b-a)}$$

марта заифлашиб етиб келади, яъни потенциал тўсиқдан ўтган тўлқин тўсиққа келиб тушган тўлқиндан C кўпайтувчи коэффициентини билан фарқ қилади. Оқим зичлиги ёки заррани қайд қилиш эҳтимоли тўлқин функция модули-

нинг квадратига пропорционал. Шунинг учун тўсиқ орқасида оқим зичлиги тўсиқ олдидаги оқим зичлигидан

$$D = e^{-2\kappa(b-a)} = e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}(b-a)/\hbar} \quad (4.69)$$

кўпайтувчи билан фарқланади. (4.69) формула тўғри бурчакли потенциал тўсиқ учун ўтиш коэффициенти ёки тўсиқнинг шаффофлиги деб аталади.

Ихтиёрий шаклдаги потенциал тўсиқдан ўтиш коэффициенти умумий ҳолда қуйидаги кўринишга эга:

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m[V(x) - E]} dx\right]. \quad (4.70)$$

Ўтиш коэффициентининг (4.70) формуласи ихтиёрий потенциал тўсиқ $V(x)$ ни тўғри бурчакли чексиз кўп потенциал тўсиқлар йиғиндиси орқали тасвирлашдан келиб чиқади. У ҳолда тўла ўтиш коэффициенти тақрибан ҳар бир тўғри бурчакли тўсиқдан ўтиш коэффициентлари кўпайтмаси тарзида ифодаланади.

Хотимада зарра энергиясига изоҳ берамиз. Зарра (тўлқин) потенциал тўсиқдан ўтишида ўз энергиясини йўқотмайди деб ҳисобланади. Зарранинг тўсиққа тушгунча энергияси қанча бўлса, тўсиқдан ўшандай энергия билан чиқади. Демак, потенциал тўсиқдан ўтаётган зарраларнинг сонигина камаяди. Тўсиқдан ўтишни баъзан образли қилиб туннель эффекти дейилади: зарра тўсиқдан ўтиши учун унинг чуққисига чиқмайди, балки у тўсиқ орқали худди туннелдан ўтган сингари ўтади.

24- §. Туннель эффектига доир мисоллар. Совуқ эмиссия

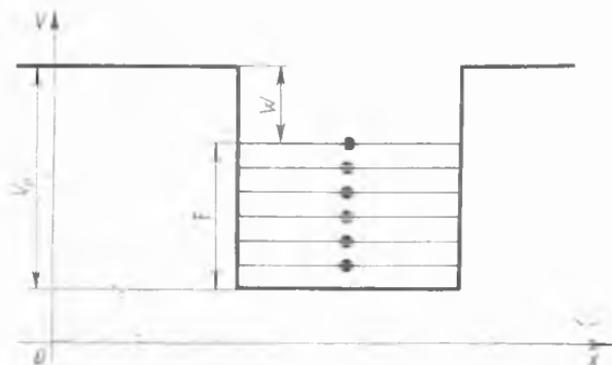
Микрозарранинг потенциал тўсиқдан ўтиш ҳодисаси қатор эксперимент натижаларини тушунтиришда асос бўлди. Буларга биринчи навбатда электронларнинг металлдан совуқ эмиссияси, яъни электронларнинг металлдан электр майдон таъсирида исталган паст температураларда ҳам чиқиши ва контакт потенциаллар фарқининг вужудга келиши ҳамда ядроларнинг радиоактив α -емирилиши ҳодисалари киради.

Металл учун потенциал ўра модели. Металлардаги кучли электр ўтказувчанлик электронларнинг металл кристалл панжараси бўйлаб деярли эркин ҳаракат қилишини кўрсатади. Лекин электронларнинг металлдан вакуумга чиқиши маълум чиқиш иши бажарилишини талаб қилади, яъни металдаги электронларнинг потенциал энергияси вакуумдаги электронлар потенциал энергиясидан кичик. Бу эса потенциал ўрада, яъни металл ичида потенциал энергияси шартли равишда нолга тенг ва демак, шартли равишда эркин ҳаракатланаётган электронлар газидан иборат бўлган металнинг содда моделини тасаввур қилишга имкон беради. Металнинг бу содда тасвирига биноан металл ичидаги электронларнинг тўла энергияси уларнинг фақат кинетик энергиясидан иборатдир. Потенциал ўрадан чексизликка кета олмайдиган электронларнинг энергияси, биз юқорида кўрганимиздек, фақат дискрет қийматларга эга бўлиши мумкин. Чекли ўлчамларга эга бўлган металл парчаси учун потенциал ўра энергия сатҳлари орасидаги масофа чексиз кичик бўлади. Паули принцига биноан (бу принцип билан кейинроқ батафсил танишамиз) металл потенциал ўрасидаги энергетик сатҳларнинг ҳар бирида фақат иккитадан электрон жойлашган бўлади. Электронлар энергетик сатҳларни энг пастки сатҳдан бошлаб тўлдиради. Абсолют температурадаги металнинг тўлдирилган энергетик сатҳларининг энг юқори сатҳини *Ферми сатҳи* деб аталади. Ферми сатҳи абсолют температурадаги металнинг тўлдирилган ва бўш сатҳларини бир-биридан ажратиб туради (30-расм). (Абсолют температурадан юқори температураларда энергетик сатҳлар тўлдирилишининг бу тартиби бузилади. Энди электронлар Ферми сатҳидан юқори сатҳларда ҳам жойлаша олишга етарли бўлган кинетик энергияга эга бўлади.)

Демак, электрон металдан чиқиши учун унга энг камида потенциал ўра чуқурлиги V_0 ва Ферми сатҳи энергияси ξ орасидаги фарққа тенг бўлган энергия керак.

$$W > V_0 - \xi.$$

Ташқи фотоэффект жараёнида металл электрони ёруғликнинг $h\nu$ энергиясини олади ва у олган энергияси етарли бўлса, металдан вакуумга чиқади. Электроннинг максимал



30- расм. Чиқиш иши ва ички потенциал.

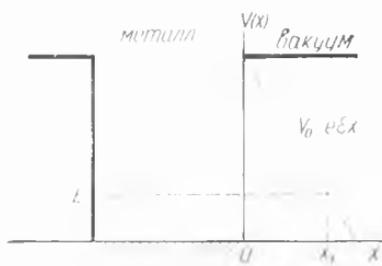
кинетик энергияси (2.6) формулага биноан чиқиш ишига боғлиқ:

$$T_{max} = h\nu - e\phi = h\nu - W.$$

Демак, чиқиш иши электрон энергиясининг потенциал ўра баландлигидан катта бўлиши учун зарур бўлган минимал энергияга тенг.

Агар металдаги электрон газининг температураси абсолют нолдан юқори бўлса, электронлар Ферми сатҳидан анча юқори сатҳларни ҳам тўлдиради. Металл температурасининг кўтарилишида баъзи электронларнинг тўла энергияси потенциал ўра баландлигидан юқори энергияга эга бўлиши ҳам мумкин. Бу ҳолда термоэлектрон эмиссия ҳодисаси юз беради. Термоэммиссия электрон лампаларда ўз татбиқини топган.

С о в у қ э м и с с и я. Агар металл сирти яқинида кучли электр майдон мавжуд бўлса, электронлар паст температурада ҳам металдан чиқа бошлайди. Бу ҳодисага *совуқ эмиссия* деб ном берилган. Совуқ эмиссия ҳодисасини классик назария нуқтаи назардан тўла тушунтириб бўлмайди. Электр майдон металл ичига ўта олмайди ва шунинг учун фақат металл сирти потенциал энергиясини 31-расмда кўрсатилган пунктиргача ўзгартиради. Потенциал ўра деворининг бундай ўзгариши қуйидагича тушунтирилади.



31- расм. Металлдаги электроннинг потенциал энергияси (ўра) ни ташқи электр майдон таъсирида Δ ўзгариши (штрих чизиқ).

Металл сиртидаги (потенциал ўрада жойлашган) электронга ташқи электр майдондан ташқари электр «таъсир кучи» ҳам таъсир кўрсатади. Электрон металл сиртидан кичик x масофага чиқиши мумкин, у ҳолда унга металл сиртидан гўё $-x$ масофадаги ички нуқтада $+e$ заряд (электроннинг электр таъсири) тургандек металл сиртидаги (x масофадаги) электронга электростатик индукцион куч таъсир кўрсатади.

Шундай қилиб, электронга таъсир кўрсатувчи тўла электростатик куч

$$F(x) e\phi = \frac{e^2}{(2x)^2}$$

га тенг бўлади. Бу куч майдонида электроннинг эффектив потенциал энергияси қуйидаги

$$V_{\text{эф}}(x) = V_0 - e\phi x - \frac{e^2}{4x}$$

формула орқали ифодаланadi. $V_{\text{эф}}(x)$ нинг максимуми x_0 нуқтада бўлади.

$$\frac{\partial V_{\text{эф}}(x)}{\partial x} = -e\phi + \frac{e}{4x^2} = 0;$$

экстремал шартдан x_0 ни аниқлаймиз:

$$x_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{e}{\phi}}$$

Демак, потенциал ўра деворининг баландлиги $V_{\text{max}} = V_0 - \sqrt{e^3\phi}$ га пастлашар экан. У ҳолда чиқиш иши ҳам ўзгаради:

$$W' = V_{\text{max}} - \xi = V_0 - \sqrt{e^3\phi} - \xi = W - \sqrt{e^3\phi}.$$

Чиқиш иши $W' = 0$ холда ток максимумга эришади. Ма-
салан, вольфрам учун чиқиш ишини нолга айлантирадиган
ташқи қўйилган электр майдон кучланганлиги

$$\mathcal{E} = \frac{W^2}{e^3} = 2 \cdot 10^8 \text{ В/см}$$

қийматга тенг бўлади. Аммо максимал токни вужудга кел-
тирувчи ташқи майдон кучланганлигининг классик назар-
рияга асосан ҳисобланган, бу қиймати Милликен тажри-
баининг $\mathcal{E} = 4 \cdot 10^8 \text{ В/см}$ натижасига мутлақо тўғри
келмайди. Шундай қилиб, классик назарияга асосан совуқ
эмиссияни тушунтириб бўлмайди.

Металдан электроннинг совуқ эмиссиясини квант тун-
нель эффекти асосида тушунтириш мумкин. Потенциал
тўсиқ орқали ўтаётган электроннинг потенциал энергия-
сига индукцион электр «тасвир кучи» қўшган ҳиссасининг
кичиклиги сабабли уни эътиборга олмаймиз. У ҳолда по-
тенциал энергиянинг тасвири 31-расмдаги кўринишга эга
бўлади. Расмдан кўриниб турибдики, ташқи электр майдон
потенциал тўсиқ кенглигини кичиклаштиради. Туннель
эффектига биноан электрон бу чекли кенгликка эга потен-
циал девордан ўта олади. Деворнинг электрон учун шаф-
фолиги

$$D = \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx \right\}.$$

Бу ерда $V(x) = V_0 - e\mathcal{E}x$, E — электроннинг потенциал
ўрадаги энергияси. Интегралнинг юқори чегараси $x = x_1$
қуйидаги шартдан аниқланади:

$$E = V_0 - e\mathcal{E}x_1, \quad \text{яъни } x_1 = \frac{V_0 - E}{e\mathcal{E}}.$$

У ҳолда

$$\begin{aligned} \int_0^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx &= \int_0^{x_1} \sqrt{V_0 - e\mathcal{E}x - E} dx = \\ &= \sqrt{e\mathcal{E}} \int_0^{x_1} \sqrt{x_1 - x} dx = \frac{2}{3} \sqrt{e\mathcal{E}} x_1^{3/2} = \frac{2(V_0 - E)^{3/2}}{3e\mathcal{E}}. \end{aligned}$$

Потенциал тўсиқ шаффофлиги учун қуйидагини ҳосил қиламиз:

$$D = \exp \left[-\frac{4}{3} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - E)^{3/2}}{e\hbar\mathcal{E}} \right] = e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}}, \quad (4.71)$$

бу ерда $\mathcal{E}_0 = \frac{4}{3} \sqrt{2m} \frac{(V_0 - E)^{3/2}}{e\hbar}$ деб белгиладик. Эмиссия

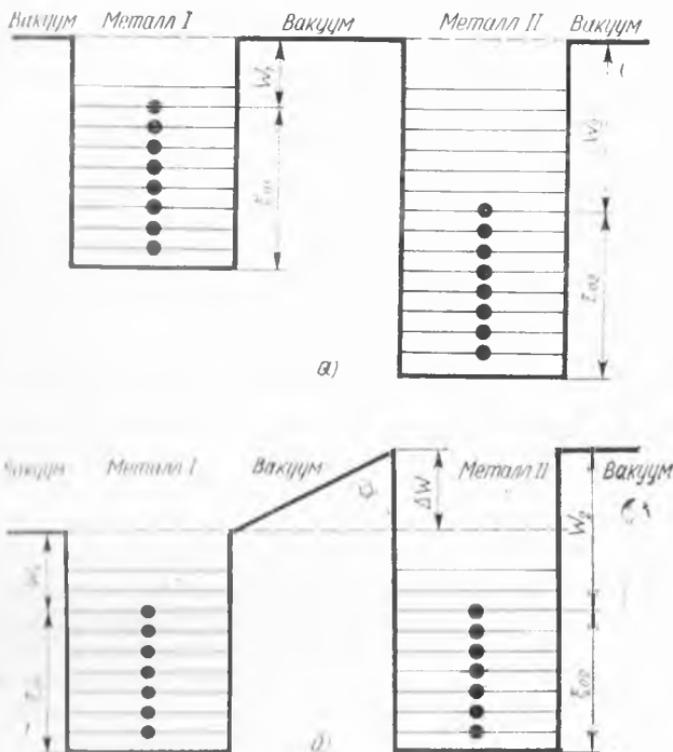
токи тўсиқдан ўтиш коэффициентига пропорционал бўлганлиги сабабли эмиссия токининг электр майдон кучланганлигига боғлиқлиги

$$j = j_0 e^{-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}}$$

кўринишга эга бўлиши керак. Совуқ эмиссия токининг ташқи майдон кучланганлигига бу хил боғланиши тажрибада тасдиқланди.

Контакт потенциаллар фарқи. Ҳар хил чиқиш ишига эга бўлган турли табиатли икки метални бир-бирига теккизганда вужудга келадиган контакт потенциаллар фарқини ҳам туннель эффекти асосида тушунтириш мумкин. Контакт потенциаллар фарқи икки метални бир-бирига атом ўлчамлари (A) тартибда яқинлаштиришда, контакт соҳада ташқи потенциал фарқига қўшимча равишда пайдо бўлади. Бу ҳодисани Вольта очган эди. Ҳозир эса унинг асосида туннель эффекти ётишлиги исботланган.

Агар металлларнинг чиқиш иши ҳар хил бўлса, металл потенциал ўрасида энергетик сатҳларнинг электронлар билан тўлдирилиши ҳам ҳар хил бўлади. Чунончи, абсолют ноль температура шароитида икки металл тегишли потенциал ўраларининг электрон жойлашган энг юқори энергетик сатҳи — Ферми сатҳи ҳам потенциал ўра тубидан ҳар хил баландликда бўлади. 32-расм. Энди бу икки метални бир-бирига тахминан A масофага яқинлаштирсак, икки потенциал ўра бир-биридан чекли кенгликдаги потенциал тўсиқ билан ажралган тасвир вужудга келади. Иккала металда ҳам Ферми сатҳидан юқори энергетик сатҳларда электронлар бўлмаганлиги сабабли Ферми сатҳи нисбатан юқори бўлган потенциал ўрада электронларнинг бир қисми қўшни потенциал ўранинг бўш энергетик сатҳларидан



32- расм. Икки металнинг контактлашгунга қадар (а) ва контактлашгандан кейинги (б) потенциал ўралари:

а) W_1 ва W_2 — чиқиш ишлари, ζ_{01} ва ζ_{02} — тўлдирилган сатҳларнинг юқори чегаралари (Ферми сатҳи); б) Контакт потенциаллар фарқининг вужудга келиши.

юқори жойлашган бўлади (32-а расм). Бу электронлар ўз энергетик сатҳидан наст бўлган қўшни потенциал ўра сатҳларини тўлдириши мумкин. Потенциал тўсиқдан электронларнинг туннель ўтиши сабабли I потенциал ўрадан II потенциал ўрага электронлар тўлдирилган энергетик сатҳлар тенглашгунча ўтади (32-б расм). Электронларнинг иккинчи потенциал ўрадан I га ўтиши мумкин эмас, чунки бу электронлар эгаллаши мумкин бўлган

сатҳлар бўш эмас ва бўш сатҳларни эгаллаши учун эса уларнинг энергияси кам.

Электронларнинг бу хил туннель ўтиши сабабли ортиқча электронларга эга бўлган II металл манфий зарядланади ва аксинча I металл электрон йўқотгани учун мусбат зарядланади. Иккала металл ўртасида термодинамик мувозанат вужудга келгандан сўнг, яъни металлларнинг Ферми сатҳлари тенглашганидан кейин, электронларнинг I металдан II га ўтишида вужудга келган электр токи тўхтайтиди. Аммо металллар ўртасида чиқиш ишлари $W_2 - W_1$ фарқига пропорционал бўлган контакт потенциаллар фарқи вужудга келади:

$$\frac{W_2 - W_1}{e} = \varphi_2 - \varphi_1 = \Delta\varphi. \quad (4.72)$$

$\Delta\varphi$ контакт потенциаллар фарқи деб аталади.

Р а д и о а к т и в а л ь ф а - е м и р и л и ш. Зарраларнинг потенциал тўсиқдан туннель ўтиш ҳодисаси радиоактив ядроларнинг α -емирилишини ҳам тушунтириши мумкинлигини кўрамыз. Тажрибалардан маълумки, кўпчилик оғир элементлар ядроси ўз-ўзидан (спонтан равишда) α -зарраларни, яъни икки протондан ва икки нейтрондан иборат, заряди $+2e$ га тенг бўлган гелий атомининг ядросини чиқаради. α -зарранинг чиқарилиши иккиламчи ҳосилавий ядро Кулон майдонининг таъсирида янада тезлашади. α -емирилиш потенциал тўсиқдан зарраларнинг туннель ўтиш назарияси сифатида Шредингер квант механикасининг классик масаласига айланди. α -емирилиш тамомила ядронинг ички хусусиятларига боғлиқ ва ташқи шароит нуқтаи назардан спонтан юз беради. Вақтнинг dt оралиғида емирилган ядролар сони қуйидагича ифодаланади:

$$dN_i = -\lambda N(t) dt,$$

$N(t)$ — вақтнинг t momentiда емирилиши мумкин бўлган ядроларнинг умумий сони, λ — емирилиш доимийси. Бу тенгламани интеграллаб, Кюрининг радиоактив емирилиш қонунини ҳосил қиламыз:

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (4.73)$$

бу ерда N_0 — вақтнинг бошланғич momentiда ($t = 0$) радиоактив ядролар сони, $N(t)$ — вақтнинг t momentiда

келиб радиоактив емирилиши мумкин бўлган ядролар сони λ — емирилиш эҳтимоли маъносига эга ва емирилиш ярим даври $T_{1/2}$ билан боғланган. $T_{1/2}$ вақт оралиғида дастлаб мавжуд бўлган ядроларнинг ярми емирилади, яъни

$$N_0 e^{-\lambda T_{1/2}} = \frac{1}{2} N_0 = N_0 e^{-\ln 2}$$

Демак,

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}.$$

Таърибаларда кузатилган Кюри қонунини квант механикаси яратилгандан кейин туннель эффектига асосланиб тушунтириш мумкин бўлди. Заряди $+2e$ га тенг α -зарранинг мусбат зарядли ҳосилавий ядро майдонидаги потенциал энергиясини узоқ масофаларда Кулон итаришиш қонуни билан яхши тасвирлаш мумкин:

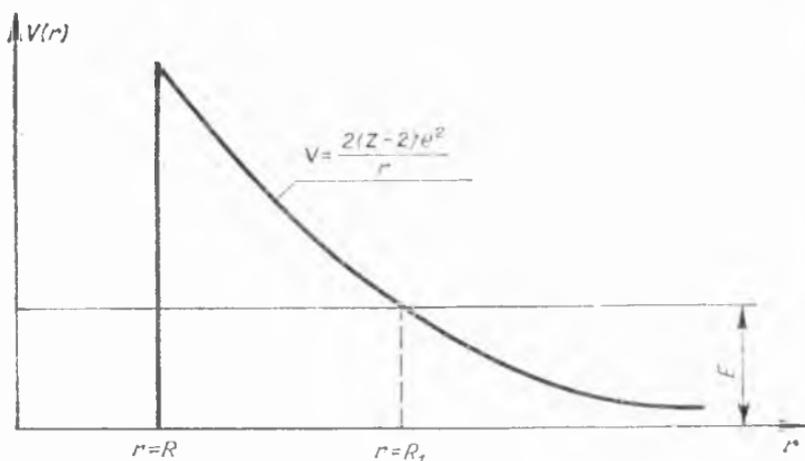
$$V = \frac{2(Z-2)e^2}{r}.$$

Агар Кулон итариш кучидан бошқа куч бўлмаганда эди α -зарралар ядрога бир он ҳам мавжуд бўла олмас эди. Уларнинг ядрога ушлаб турилишини жуда кучли ядро кучлари асосида тушунтирилади. Ядро тортилиш кучлари таъсир доираси ядро ўлчамлари билан характерланади. Кучли ядро тортилиш кучлари натижасида α -зарранинг потенциал энергияси ядродан кичик масофаларда кескин ўзгаради ва потенциал ўра ҳосил қилади. 33-расмда потенциал энергиянинг қуйидаги

$$V(r) = \begin{cases} \frac{2(Z-1)e^2}{r}, & \text{агар } r > R; \\ 0, & \text{агар } r < R; \end{cases} \quad (4.74)$$

тақрибий ифодаси тасвирланган.

Емирилиш доимийси λ ва потенциал тўсиқ шаффофлиги D орасидаги боғланишни аниқлаймиз. α -заррани ядрога ҳаракатланишида у потенциал тўсиқ девори билан тўқнаш келади. Потенциал тўсиқ девори билан бир марта тўқнашишда туннель ўтишининг эҳтимоли D га тенг. Бирлик вақтдаги тўқнашишлар сони (n) тахминан α -зарранинг тезлиги v_0 ни ядро радиуси R га нисбатига тенг, яъни $n \approx v_0/2R$. Агар ядроларнинг умумий сони N га тенг бўлса, у ҳолда dt вақт оралиғида потенциал тўсиқдан



33- расм. α -зарранинг радиоактив ядро майдонидаги потенциал энергияси.

α -зарраларнинг ўтиши натижасида α -емирилган ядролар сони dN қуйидагича аниқланади:

$$dN = -\lambda N dt = -n D N dt. \quad (4.75)$$

Бундан

$$[\lambda = nD = \frac{v_0}{2R} D = \frac{v_0}{2R} e^{-\frac{2}{\hbar} \int_R^{R_1} \sqrt{2M} \sqrt{V-E} dr}. \quad (4.76)$$

Бу ерда M — α -зарранинг массаси, V — (4.74) потенциал энергия.

R_1 — қуйидаги шартдан аниқланади:

$$\frac{2(Z-2)e^2}{R_1} = E. \quad (4.77)$$

E — α -зарранинг потенциал ўрадаги (ядрога) тўла энергияси. Энди (4.76) формуладаги экспонента кўрсаткичини ҳисоблаймиз:

$$\begin{aligned} I &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{2M} \int_R^{R_1} \sqrt{V-E} dr = \frac{2}{\hbar} \sqrt{2M} \int_R^{R_1} \sqrt{\frac{ER_1}{r} - E} dr = \\ &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{2ME} \int_R^{R_1} \sqrt{\frac{R_1}{r} - 1} dr. \end{aligned}$$

Охирги интегралда ўзгарувчини $r = R_1 \sin^2 \varphi$ га алмаштириб, интеграллашни бажарамиз:

$$I = \frac{2 \sqrt{2ME}}{\hbar} 2R_1 \int_{\varphi_0}^{\frac{\pi}{2}} \cos^2 x dx = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} R_1 (\pi - 2\varphi_0 - \sin 2\varphi_0).$$

Одатда $R \ll R_1$ эканлигини ҳисобга олсак,

$$\varphi_0 \sim \sin \varphi_0 = \sqrt{\frac{R}{R_1}} \text{ ва } I = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar} R_1 \cdot \left(\pi - 4 \sqrt{\frac{R}{R_1}} \right)$$

булади. Охирги ифодадан R_1 ни (4.77) ёрдамида чиқариб ташласак ва қуйидаги

$$a = \ln \frac{v_0}{2R} + \frac{8e}{\hbar} \sqrt{MR(Z-2)},$$

$$b = + \frac{2\pi}{\hbar} (Z-2) e^2 \sqrt{2M}$$

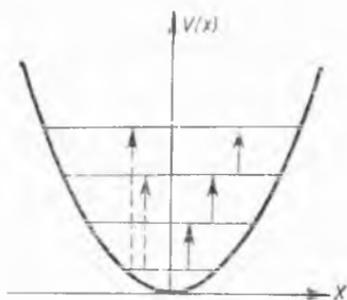
белгиланшларни киритсак, емирилиш доимийсининг логарифми учун

$$\ln \lambda = a - b/\sqrt{E} = \ln \ln 2 - \ln T_{1/2} \quad (4.78)$$

ифодага келамиз. (4.78) формула α -зарранинг чиқишдаги энергияси билан емирилиш доимийсининг (ёки ярим даврининг) логарифми ўртасидаги боғланишни беради. Бу экспериментал аниқланган — Гейгер — Неттол қонуни деб аталади. Гейгер — Неттол қонунига кўра, α -зарранинг ядродан чиқишида энергияси қанча юқори бўлса, ядронинг ярим емирилиш даври шунча кичик. Бу формула бир радиоактив оилага мансуб ядроларнинг ярим емирилиш даври ўртасида мавжуд катта фарқни тушунтиради.

25- §. Чизиқли гармоник осциллятор

Гармоник (ёки эркин) тебраниш деб системанинг ўз мувозанат ҳолати атрофида юз берадиган тебранишга айтилади. Системанинг гармоник тебранишига мисол тариқасида пружинага осилган ёки суюқлик юзида сузиб юрувчи жисмнинг ёки кристалл панжара атомининг тебранишини келтириш мумкин. Системанинг мувозанат ҳолатда гар-



34-расм. Чизиқли гармоник осциллятор потенциал энергияси.

моник тебраниши унинг потенциал энергиясининг минимум қиймати атрофида рўй беради. Бир ўлчовли кичик тебранишдаги системанинг потенциал энергиясини минимуми атрофида қаторга ёй-сак,

$$V(x) = V(0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right) x^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 V}{\partial x^3} \right) x^3 + \dots$$

ифода ҳосил бўлади. Бу ерда x — мувозанат нуқтадан оғиш. Потенциал энергия $V(x)$ нинг x бўйича биринчи ҳосиласи нолга тенг, чунки у $V(x)$ функциянинг экстремал нуқтасидаги ҳосиласидир. Агар мувозанат нуқтасини ҳисоб боши деб қабул қилсак, $V(0)$ ҳам нолга айланади. Агар зарра мувозанат нуқта атрофида кичик тебранишда бўлса, қаторнинг x^2 га пропорционал биринчи нолдан фарқли ҳадига нисбатан кейинги ҳадлари нолга чексиз яқин бўлади. Шунинг учун гармоник тебранаётган системанинг потенциал энергиясини қуйидаги кўринишда оламиз (34-расм):

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (4.79)$$

Бу ерда

$$\left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right)_{x=0} = m\omega^2.$$

Агар биз молекулалар ёки кристалл панжара атомлари тебранишига оид атом физикаси масалаларини ҳал қилмоқчи бўлсак, квант механикасининг ушбу масаласини қўллаймиз. Квант назариясида (4.79) формула тавсифловчи гармоник тебраниш учун Шредингер тенгламаси

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi = E \psi \quad (4.80)$$

кўринишда ёзилади. (4.80) тенгламада қуйидаги ўлчамсиз ўзгарувчига

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}; \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (4.81)$$

ўтсак, тенглама содда кўринишга келади:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \psi + (\lambda - \xi^2)\psi = 0. \quad (4.82)$$

Тўлқин функциянинг асимптотикасини аниқлаш мақсадида (4.82) тенгламада x нинг жуда катта ($\xi \gg 1$) бўлган чегаравий ҳолини қараймиз. У ҳолда (4.82) тенгламада ξ^2 га нисбатан λ ни эътиборга олмасак ҳам бўлади:

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\xi^2} - \xi^2\psi_\infty = 0. \quad (4.83)$$

Ҳосил бўлган тенгламанинг ечими Гаусснинг хатоликлар кўринишида бўлади:

$$\psi_\infty = a_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}} = a_0 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} \quad (4.84)$$

(4.83) тенгламанинг мусбат ишорали экспонентага пропорционал ечимини тўлқин функцияга қўйилган чеклилик шартига биноан ташлаб юбордик.

Тўлқин функциянинг (4.84) каби асимптотик кўринишини эътиборга олган ҳолда (4.82) тенгламанинг умумий ечимини қуйидаги

$$\psi(\xi) = N\psi_\infty(\xi) H(\xi) \quad (4.85)$$

кўринишда қидирамиз. Пси-функция чекли бўлиши учун номаълум функция $H(\xi)$ (4.84) кўринишдаги ψ_∞ функциядан тез ўсмаслиги керак, яъни

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} H(\xi) < \exp(\xi^2/2).$$

(4.85) ечимни (4.82) Шредингер тенгласига қўямиз:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \frac{d^2}{d\xi^2} (e^{-\xi^2/2} H(x)) = \left[-H(\xi) - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + \xi^2 H(\xi) + \frac{d^2 H(\xi)}{d\xi^2} \right] x e^{-\xi^2/2}$$

ни ҳисобга олиб, номаълум функция учун

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1) H = 0 \quad (4.86)$$

тенгламага эга бўламиз. (4.86) тенгламанинг ечими бўлган H функцияни ўзгарувчининг даражасидан иборат қатор кўринишда қидирамиз, яъни

$$H_l(\xi) = \sum C_k \xi^k = C_0 + C_1 \xi + C_2 \xi^2 + \dots \quad (4.87)$$

Тўлқин функциянинг чеклилик хоссасидан, масалан, координата бошида, (4.87) қаторнинг даражаси фақат мусбат даражадан иборат бўлиши келиб чиқади. $H(\xi)$ учун (4.87) ифодани (4.86) га қўйиб, қуйидаги

$$\sum_{k=2} k(k-1) C_k \xi^{k-2} + \sum_{k=0} (\lambda - 1 - 2k) C_k \xi^k = 0$$

муносабатга келамиз. Биринчи йиғиндидаги индекс k ни $l+2$ га, иккинчисидан эса l га алмаштирамиз ва ўзгарувчининг бир хил даражаларини тўплаб қуйидаги

$$\sum \xi^l [C_{l+2} (l+2)(l+1) - C_l (2l+1-\lambda)] = 0$$

кўринишдаги муносабатга келамиз. Бу тенгликнинг бажарилиши учун ξ^l нинг коэффициентлари нолга тенг бўлиши керак, натижада коэффициентлар C_l учун рекуррент формулага эга бўламиз:

$$C_{l+2} = \frac{2l+1-\lambda}{(l+2)(l+1)} C_l \quad (4.88)$$

Гармоник осцилятор энергетик сатҳлари. Агар (4.87) қаторнинг биринчи ва иккинчи ҳадининг коэффициенти маълум бўлса, (4.88) рекуррент формула коэффициентларни бирин-кетин ҳисоблашга имкон беради, натижада бутун қаторни тиклашимиз мумкин. Мазкур рекуррент формулага биноан (4.87) қатор икки қатордан: жуфт даражалар қаторидан

$$(C_0 + C_2 \xi^2 + C_4 \xi^4 + \dots + \sum_{k=1} C_{2k} \xi^{2k}) \quad (\text{Ж})$$

ва тоқ даражалар қаторидан

$$(C_1 \xi + C_3 \xi^3 + C_5 \xi^5 + \dots + \sum_{k=1} C_{2k+1} \xi^{2k+1}) \quad (\text{Т})$$

ташқил топган. Бу икки қатор (4.86) тенгламанинг ўзаро бир-бирига боғлиқ бўлмаган икки хусусий ечимидир. Қаторларнинг ҳадлар сони чексизликка интилса ёки, яъни $k \rightarrow \infty$ улар экспонента, масалан, биринчиси — e^{ξ^2} , иккинчиси — $\xi e^{-\xi^2}$ каби тутати. Маълумки,

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots$$

ёки бинобарин,

$$\begin{aligned} e^{x^2} &= 1 + \frac{x^2}{1!} + \frac{x^4}{2!} + \frac{x^6}{3!} \dots + \frac{x^n}{\left(\frac{n}{2}\right)!} + \frac{x^{n+2}}{\left(\frac{n}{2} + 1\right)!} + \dots + = \\ &= b_0 + b_2 x^2 + b_4 x^4 + \dots + b_n x^n + b_{n+2} x^{n+2} + \dots \end{aligned}$$

$n + 2$ - даражали ҳад коэффициентини n - даражали ҳад коэффициентига нисбати

$$\frac{b_{n+2}}{b_n} = \frac{1}{\left(\frac{n}{2} + 1\right)!} \cdot \left(\frac{n}{2}\right)! = \frac{1}{\frac{n}{2} + 1}$$

га тенг. Етарлича катта n учун ушбу нисбат

$$\frac{b_{n+2}}{b_n} \approx \frac{2}{n}$$

га тенг бўлади. Бу эса (4.88) рекуррент формулага биноан (Ж) қатор ҳадлар сонининг етарлича катта бўлган ҳолида мос ҳадлари коэффициентларининг нисбати кабидир, яъни

$$\frac{C_{n+2}}{C_n} = \frac{2n + 1 - \lambda}{(n+2)(n+1)_{n \rightarrow \infty}} = \frac{2}{n} \approx \frac{b_{n+2}}{b_n}$$

Демак, (Ж) қатор ҳақиқатан ҳам ξ нинг e^{ξ^2} каби функцияси. У ҳолда бу хусусий ечимга мос (4.85) пси-функция қуйидагича ифодаланadi:

$$\psi = e^{-\xi^2/2} H_{\text{ж}}(\xi) = e^{-\xi^2/2} \cdot e^{\xi^2} = e^{\xi^2/2},$$

яъни асимптотикада $\psi(\xi \rightarrow \infty) = \infty$ бўлади. Бу ҳол пси-функцияга қўйилган чеклилик шартига зид келади. Хуллас, қаторнинг ҳадлар сони чекли бўлиши керак, яъни қатор бирор чекли даражали полином бўлиши керак, чунки шу ҳолдагина пси-функция чеклилик талабини қаноатлан-

тиради. Энди (Ж) қаторни бирор ($n=0, 2, 4, 6 \dots$) ҳадда узайлик. Бунинг учун

$$\lambda = 2n + 1 \quad (4.89)$$

шартни қўямиз. У ҳолда $C_0, C_2, \dots, C_n \neq 0$ ва C_n -дан юқори коэффициентлар эса

$$C_{n+2} = C_{n+6} = \dots = 0,$$

(4.89) ни (4.81) га қўйсак, дискрет спектрнинг мумкин бўлган қийматлари учун

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.90)$$

формулага келамиз.

(4.89) шартни киритишимиз билан иккинчи хусусий ечим бўлган (Т) қаторнинг b_{n+1}, b_{n+3} ва ҳоказо коэффициентлари нолга айланмайди. Бу қаторнинг иккита қўшни коэффициентлари нисбати (4.88) га кўра $n \rightarrow \infty$ да,

$$\frac{C_{2n+1}}{C_{2n-1}} = \frac{2(2n+1) + 1 - \lambda}{(2n+3)(2n+2)} \approx \frac{1}{n}$$

қийматга интилади. Маълумки, n сонини жуфт эмас деб ҳисоблаб

$$\begin{aligned} x e^{x^2} &= x \left(1 + \frac{x^2}{1!} + \frac{x^4}{2!} + \dots + \frac{x^{2n}}{n!} + \frac{x^{2n+2}}{(n+1)!} + \dots \right) = \\ &= a_1 x + a_3 x^3 + a_5 x^5 + \dots + a_{2n+1} x^{2n+1} + \\ &\quad + a_{2n+3} x^{2n+3} + \dots \end{aligned}$$

га келамиз. У ҳолда

$$\frac{a_{2n+3}}{a_{2n+1}} = \frac{1}{(n+1)!} \cdot n! = \left(\frac{1}{n+1} \right)_{n \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{n} \sim \frac{C_{2n+3}}{C_{2n+1}}$$

Демак, (Т) қатор ξ нинг ξe^{ξ^2} каби функцияси сифатида ифодаланadi, яъни (4.85) функция асимптотик узоқлашади. Шунинг учун, (Ж) қатор чекли даражадаги полином бўлса, (Т) қаторни ташлаб юборишимиз керак (яъни n жуфт ҳолида), аксинча агар (Т) қатор чекли полином деб қаралса, (4.89) шартни энди тоқ n лар қаноатлантиради ва (Ж) қаторни ташлаб юборамиз. Шундай қилиб,

умумий ҳолда (4.90) формулада n (4.89) ни қаноатлантирувчи бутун сон, яъни

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.90)$$

Осциллятор энергиясининг (4.90) каби квантланиши ҳам тўлқин функциянинг бутун фазода чекли бўлишлиги табиий шартининг натижасидир.

Қутилгандек, квант осциллятор энергиясининг энг кичик қиймати нолдан фарқли, яъни $n = 0$ да $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} E_0$ нинг қиймати «нолинчи энергия» деб аталади. Квант зарра параболик (34-расм) чексиз потенциал ўралигида жойлаша олмайди. Худди шунингдек, зарра тўғри бурчакли ёки бошқа шаклдаги чекли кенгликдаги потенциал ўралигида ҳам жойлаша олмайди. (4.90) ифодани (4.67) билан таққослаб осциллятор сатҳлари энергияси квант сони n нинг биринчи даражасига, тўғри бурчакли потенциал ўра сатҳлари энергияси эса n нинг квадратига пропорционал эканлигини кўрамиз. Шу сабабдан осциллятор учун энергетик сатҳлар бир-биридан бир хил узоқликда (эквидистант) жойлашган. Бу энергетик сатҳлар 34-расмда тасвирланган. Квант осциллятор шу тасвирланган энергетик сатҳларнинг ҳар қандай ихтиёрий биттасида жойлаша олиши мумкин. Бирор қўшни энергетик сатҳга осцилляторни кўчириш учун унга

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega. \quad (4.91)$$

энергия бериш керак. Агар энергия узатиш фотонлар воситасида юз берса, фотон

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} \quad (4.92)$$

частотага эга бўлиши керак.

Маълумки, классик осцилляторда тебраниш амплитудасининг тебрантирувчи куч частотаси билан боғланиши кескин резонанс характерга эга; классик осциллятор фақат ўз частотасига тенг бўлган биттагина частотани сезади.

Аксинча, биринчи қарашдан квант осциллятор худди (4.92) частотага каррали бўлган бутун бир частоталар тўпламига мос (4.91) энергияни ютиши ва шунинг натижа-

сида нолинчи сатҳдан юқори сатҳларнинг бирортасига ўтиши мумкиндек туюлади.

Мавжуд микроскопик осцилляторларда энергия ютилиши (ёки чиқарилиши) ҳақиқатда қандай юз беришлигини кузатиш учун микроскопик осциллятор, масалан, кристалл панжарасидаги атом билан ёруғлик (фотон) нинг ўзаро таъсир жараёнини ўрганиш лозим. Бунинг учун ўзаро таъсир жараёни давомида ўз ҳолатларини ўзгартирувчи системалар учун тенглама ёзишни ва ечишни ўрганишимиз лозим. Бу хил масалалар яхши ўрганилган ва биз унга кейинроқ қисман тўхталиб ўтамиз. Ҳозир олдиндан бўлса ҳам шу масала борасида қуйидаги хулосани қайд қилмоқчимиз. Аниқ ҳисоблашлар кўрсатадики, ёруғлик билан ўзаро таъсирда бўлувчи микроскопик осцилляторда фақат қўшни энергетик сатҳларга ўтишгина юз беради: бошқа хил ҳолат ўтишлар маълум шартларга кўра ман этилади.

Бу натижани қуйидагича тушуниш мумкин. Квант механикасининг Н. Бор томонидан таклиф қилинган мослик принципига асосан классик механика квант механикасининг чегаравий хусусий ҳолидир. Шунинг учун ушбу мулоҳазани юритамиз: квант сони n нинг (яъни энергиянинг) жуда катта қийматларида квантомеханик ечим классик ечим билан мос бўлиши керак. Аммо биламизки, классик натижа резонанс частотанинг бирдан-бир қийматига олиб келади. Бу эса жуда бўлмаганда юқори энергетик сатҳлар учун бир неча сатҳларни ташлаб ўтишни ман қилувчи ҳолида бўлишини кўрсатади. Энергия сатҳларининг тасвири (34-расм) n нинг қийматига боғлиқ эмаслигидан эса бу ҳоидани ҳар қандай n учун ҳам ўринли бўлиши келиб чиқади.

Юқорида кўрдикки, квант осциллятор учун мумкин бўлган минимал энергия нолдан фарқли. Классик ва Бор назариясига асосан эса осциллятор энергияси нолга тенг ҳам бўлиши мумкин. Ҳақиқатан, классик осцилляторнинг ҳаракат тебраниш тенгламаси

$$x = a \cos \omega t \quad (4.93)$$

куринишда ифодаланади. Бу ерда a — тебраниш амплитудаси. Осцилляторнинг тўла энергияси учун эса

$$E = T + V = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega^2}{2} x; \quad \dot{x} = \frac{dx}{dt}$$

ифодани ёзишимиз мумкин. Бу ерда потенциал энергия (4.79) га биноан ёзилган. Агар (4.93) ни эътиборга олсак, осцилляторнинг тўла энергиясини қуйидагича аниқлашимиз мумкин:

$$E = \frac{m\omega^2 a^2}{2} \sin^2 \omega t + \frac{m\omega^2 a^2}{2} \cos^2 \omega t = \frac{m\omega^2 a^2}{2}; \quad (4.94)$$

яъни классик осциллятор энергияси ихтиёрый, шунингдек ноль қиймат ҳам қабул қилиши мумкин.

Н. Борнинг (3.14) квантлаш шартидан эса даврий ҳаракатланувчи чизикли осциллятор учун

$$\oint p_x dx = 2\pi \hbar n, \quad (4.95)$$

ифодага келамиз. Бу ерда умумлашган импульсни

$$p_x = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

дан аниқлаймиз. Интеграл остидаги ифода учун эса (4.93) га биноан

$$p_x dx = m\dot{x} \frac{dx}{dt} dt = m\omega^2 a^2 \sin^2 \omega t \cdot dt = 2E \sin^2 \omega t \cdot dt$$

ни ҳосил қиламиз. Интеграллаш эса тўла давр бўйича бажарилди; натижада (4.95) да интеграллашни бажариб осциллятор энергияси спектри учун

$$E = n\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.96)$$

формулани ҳосил қиламиз.

Демак, классик физика ва Бор назариясига биноан тебранаётган зарра потенциал ўра тубида нолга тенг энергия билан ҳаракатсиз ҳолда ҳам бўлиши мумкин. Аммо квант назариясида зарранинг координатаси ва импульсини классик осциллятор ҳолидагидек бир вақтда аниқ билишимиз мумкин эмас. Заррани нолга тенг импульс билан потенциал ўра тубида аниқ жойлашишига квант механикасининг ноаниқлик принципи йўл қўймайди.

Осцилляторнинг минимал энергиясини (яъни система-нинг абсолют ноль температурадаги энергиясини) нолга тенг эмаслигини экспериментда кузатиш ҳам мумкин. Бунинг учун кристалларда температура ўзгариши бўйича ёруғлик сочилишининг ўзгариш характерини кузатиш лозим.

Кристалл панжара атомларида ёруғликнинг сочилиши асосан атомларнинг тебраниши натижасида рўй беради. Кристалл температураси камайиши билан атомлар тебраниши амплитудаси кичиклашади, натижада ёруғлик сочилиши йўқола бошлаши керак. Классик назарияга асосан абсолют ноль температурада ёруғлик сочилиши бутунлай тўхташи лозим. Квант назарияси нуқтаи назаридан эса температура камайиши билан ўртача тебраниш амплитудаси нолга эмас, балки бирор қийматга интилиши керак. Абсолют ноль температурадаги ўртача амплитуданинг қиймати тебранишнинг нолиничи энергияси орқали характерланади. Шунинг учун, температуранинг абсолют нолга яқинлашишида ёруғлик сочилиши бирор чегаравий қийматга интилади. Ёруғлик сочилишининг температура бўйича ўзгариши худди шундай тўйиниш кўринишига эга эканлиги тажрибада кузатилади.

Гармоник осцилляторнинг тўлқин функцияси. Осциллятор учун Шредингер тенгламасини ечиш давомида осциллятор энергиясининг ҳар бир хусусий қийматига (4.90) га қ.)

$$\Psi_n = N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$$

хусусий функция (4.85) га қ.) мос келишини иқорида аниқладик. Бу ерда N_n — ўзгармас нормаловчи кўпайтувчи, $H_n(\xi)$ — (4.87) ва (4.88) формулалар орқали аниқланган ва (4.89) шартга бинози чекли n -даражали полиномга тенг бўлган функция. (4.88) рекуррент формуладан $H(\xi)$ нинг жуфтлиги n сонининг жуфтлиги билан мос эканлиги келиб чиқади. Шунинг учун $H(\xi)$ полином қуйидаги кўринишига эга:

$$H_n(\xi) = C_n \xi^n + C_{n-2} \xi^{n-2} + \dots + \begin{cases} C_0, & \text{агар } n \text{ жуфт бўлса,} \\ C_1 \xi, & \text{агар } n \text{ тоқ бўлса.} \end{cases} \quad (4.97)$$

Пси-функциянинг нормаловчи кўпайтувчиси ҳозирча аниқ-мас, шу сабабли ($H_n(\xi)$) полиномнинг C_n коэффициентини ихтиёрый сонга, масалан, 2^n га тенг деб олишимиз мумкин, яъни

$$C_n = 2^n, \quad n=0, 1, 2, 3, \dots$$

У ҳолда (4.88) рекуррент муносабатдан $\lambda = 2n + 1$ ҳоли учун полином коэффициентларини аниқлаймиз. C_n коэффициент учун (4.88) қуйидаги кўринишда ёзилади:

$$C_n = \frac{2(n-2)+1-\lambda}{[(n-2)+2][(n-2)+1]} C_{n-2}$$

ёки

$$C_{n-2} = \frac{n(n-1)}{2(n-2)+1-(2n+1)} C_n = -\frac{n(n+1)}{2 \cdot 2} C_n = \\ = -\frac{n(n-1)}{1!} 2^{n-1}$$

$$C_{n-4} = -\frac{(n-2)(n-3)}{2 \cdot 4} C_{n-2} = \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} 2^{n-4}$$

каби аниқланади. (4.87) полином, агар $a_n = 2^n$ ва $\lambda = 2n + 1$ бўлса, Эрмит полиноми деб аталади ва $H_n(\xi)$ орқали белгиланади. Демак, чекли даражали Эрмит полиноми (4.97) қуйидагича ёзилади:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} + \\ + \dots + \begin{cases} C_0 \text{ агар } n \text{ жуфт бўлса,} \\ C_1 \xi, \text{ агар } n \text{ тоқ бўлса,} \end{cases}$$

Жумладан, охири ифодага кўра қуйидаги полиномларни ҳосил қиламиз:

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \quad H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \text{ ва ҳ. к.}$$

Эрмит полиноми $H_n(\xi)$ ни умумий ҳолда қуйидагича ихчам ифода кўринишида ёзиш мумкин:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{+\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (4.98)$$

(4.85) хусусий функциянинг нормаловчи кўпайтувчиси N_n ни тўлқин функцияга қўйилган шарт (4.3) орқали аниқлаймиз:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n|^2 dx = N_n^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1.$$

Интеграл остидаги Эрмит полиномларининг биттасини ўрнига (4.98) ифодасини қўйиб, охириги тенгликни қўйидагича ёзамиз:

$$\frac{1}{N_n^2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} H_n \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi.$$

Эрмит полиноми учун (4.97) ифодани эътиборга олсак,

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n! \quad \text{ва} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$$

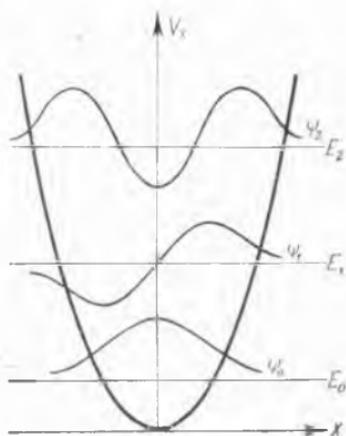
тенгликларни ҳосил қиламиз ва нормаловчи кўпайтувчи учун

$$N_n = \frac{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}}{\sqrt{2^n \cdot n!} \sqrt{\pi}}. \quad (4.99)$$

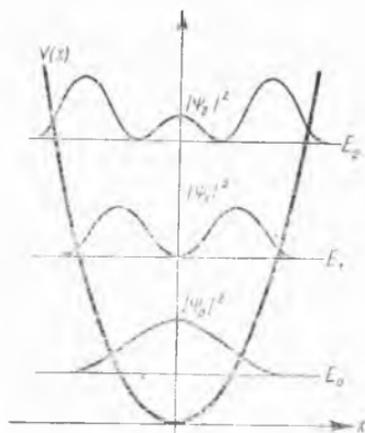
Кичик квант сонлар соҳаси, масалан, $n = 0, 1, 2$ учун хусусий қийматларга мос хусусий функциялар тасвири 35-расмда келтирилган:

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar\omega}{2}, & \Psi_0 &= N_0 e^{-1/2\xi^2}; \\ E_1 &= 3 \frac{\hbar\omega}{2}, & \Psi_1 &= N_1 2\xi e^{-1/2\xi^2}; \\ E_2 &= 5 \frac{\hbar\omega}{2}, & \Psi_2 &= N_2 (4\xi^2 - 2) e^{-1/2\xi^2}. \end{aligned}$$

Тасвирланган тўлқин функция эгри чизиқлари потенциал ўра тўлқин функциясига ўхшашдир. 36-расмда эса шу ҳолатлар учун эҳтимоллар зичлиги $|\psi|^2$ нинг тақсимот эгри чизиғи тасвирланган. Потенциал ўра ҳоли каби осцилляторда ҳам классик зарранинг қайд қилиниши эҳтимоли максимал бўлган соҳа потенциал деворларига, яъни



35-расм. Осцилляторнинг хусусий функцияси ва хусусий қиймати тасвири.



36-расм. Осциллятор учун потенциал энергия ва эҳтимоллик зичликлари $|\psi_0|^2$, $|\psi_1|^2$, $|\psi_2|^2$ учун абсцисса ўқи сифатида $n = 0, 1, 2$ даги $E = h\nu(n + \frac{1}{2})$ сатҳлар олинган.

классик зарранинг тезлиги нолга яқин бурилиш соҳасидир. Кичик квант сонлари $n = 0, 1, 2$ учун расмдан кўрамизки, квант осциллятори мутлақо ўзини бошқача тутди. Квант осциллятори учун қайд қилиш эҳтимоли максимал соҳа тўлқин функциянинг максимумлар соҳасида бўлади. Лекин квант сони n нинг катта қийматларида эса эҳтимоллар зичлигининг тақсимот эгри чизиғи классик осцилляторга секин-аста яқинлашади.

Юқорида тасвирланган тўлқин функциянинг ва унинг квадратининг эгри чизиқлари потенциал девори орқасига, яъни классик зарра ҳаракати мумкин бўлмаган соҳада ҳам нолдан фарқли. Тўлқин функциясининг бу хил табиати юқорида қайд қилганимиздек, унинг ва ҳосиласининг бутун соҳада узлуксиз бўлиш хоссасининг натижасидир.

26-§ Марказий куч майдонидаги ҳаракат

Марказий куч майдонидаги зарранинг ҳаракатини ўрганиш квант механикасининг асосий масаласини ташкил қилади. Худди шу масала, масалан, водород атоми назария-

сининг асосига қўйилган. Марказий куч майдонида ҳаракатланаётган зарранинг потенциал энергияси фақат масофанинг функцияси бўлади, яъни:

$$V = V(|\vec{V}|) = V(r) \quad (4.100)$$

марказий-симметрик майдон ҳосил қилади. Бу майдонда ҳаракатланаётган зарранинг стационар (турғун) ҳолати қуйидаги

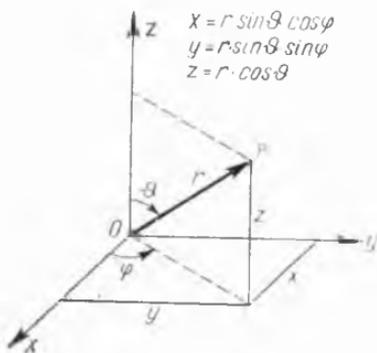
$$\nabla^2 \psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0 \quad (4.101)$$

Шредингер тенгламаси орқали тавсифланади. $V(r)$ — юқорида айтганимиздек, заррадан куч марказигача бўлган масофанинг функцияси.

Ўзгарувчиларни ажратиш. (4.101) тенгламани Декарт координаталарида ифодалайлик:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi(x, y, z) = 0. \quad (4.102)$$

Тенгламадан кўришиб турибдики, Лаплас оператори ва пси-функция x, y, z га боғлиқ, аммо потенциал энергия $V(r)$ x, y, z нинг эмас, балки r масофанинг функциясидир. Тенгламани ечиш учун икки йўл бор: масофа r ни $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ билан алмаштириб, V ни Декарт координаталари орқали ифодалаш ёки Шредингер тенгламасини, тўғрироғи, Лаплас операторини сферик координаталарда (37-расм) ифодалаш. Потенциал энергиянинг (4.100) кўришидаги марказий симметрик ҳоли учун сферик координаталар r, ϑ, φ га ўтиш тенгламани ечишни осонлаштиради. 37-расмда тасвирланган сферик координаталар қуйидагилар: $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$; r — координата бошидан P нуқтагача ўтказилган радиус-векторнинг узунлиги;



37-расм. Сферик координаталар.

$$\vartheta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$$

ϑ — радиус-вектор билан z ўқ ташкил қилган бурчаги;

$$\varphi = \arctg \left(\frac{y}{x} \right),$$

радиус-векторнинг (xy) текислигига проекциясини x ўқи билан ташкил қилган (азимут) бурчаги.

Шоедингернинг (4.102) тенгламасини сферик координаталарда ёзиш учун Лаплас операторининг сферик координаталардаги ифодасидан фойдаланамиз:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_0}{\hbar} [E - V(r)] \psi = 0.$$

Потенциал [энергиянинг (4.100) ифодасидан фойдаланиб ва ушбу тенгламани $r^2 \sin^2 \vartheta$ га кўпайтириб,

$$\sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_0 r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0 \quad (4.103)$$

ни ҳосил қиламиз. Зарранинг тўлқин функцияси ψ умумий ҳолда учта координата функциясидир. $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$. Сферик координаталардаги (4.103) тенгламанинг қулай томони уни учта тенглама орқали ёзиш мумкинлигидир. Бунинг учун (4.103) нинг ечими $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ ни учта функция кўпайтмаси тарзида ифодалаймиз:

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\theta(\vartheta)\Phi(\varphi), \quad (4.104)$$

бу ерда $R(r)$ — r ва φ нинг ўзгармас бир қийматида пси-функциянинг радиус-вектор бўйича ўзгаришини характерлайди; $\theta(\vartheta)$ — r ва φ нинг ўзгармас қийматида марказий майдон сфераси меридиани бўйлаб тўлқин функция ψ нинг зенит бурчаги ϑ га боғлиқ ўзгаришини тавсифлайди, $\Phi(\varphi)$ — r ва ϑ нинг ўзгармас қийматида ψ нинг мазкур сфера параллели бўйлаб ўзгарувчи азимут бурчаги φ га боғлиқ ўзгаришини характерлайди.

Тўлқин функциянинг (4.104) ифодасини (4.103) тенгламага қўйиб ва тенгламани $R\theta\Phi$ га бўлиб,

$$\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\theta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \theta}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} +$$

$$+ \frac{2m_0 r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} (E - V) = 0$$

ифодани ҳосил қиламиз. Учинчи ҳад фақат азимут бурчаги φ нинг функциясидир. Шунинг учун уни тенгламанинг ўнг томонига ўтказиб ёзамиз:

$$\begin{aligned} \frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \theta}{\partial \theta} \right) + \frac{2m_0 r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} (E - V) &= \\ &= -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

Ҳосил бўлган тенглик икки томонини фақат бир ўзгармасга тенг бўлган ҳолдагина ўринлидир. Бу ўзгармасни қулайлик учун m_l^2 орқали белгиласак, азимут функцияси учун

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = m_l^2 \quad (4.105)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Юқоридаги Шредингер тенгламасининг ўнг томонига m_l^2 ни қўямиз ва тенгламанинг икки томонини $\sin^2 \vartheta$ га бўлиб зенит бурчаги ϑ га боғлиқ ҳадларни ўнг томонга ўтказамиз:

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_0 r^2}{\hbar^2} (E - V) = \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \vartheta \frac{d\theta}{d\theta} \right)$$

Яна икки томони ҳар хил ўзгарувчиларнинг функцияси бўлган тенгламани ҳосил қилдик. Тенгламанинг икки томони ҳам битта ўзгармасга тенг бўлиши керак. Кейин равшан бўладиган сабабларга кўра бу ўзгармасни $l(l+1)$ орқали белгилаймиз. У ҳолда θ ва R функциялар учун

$$\frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \vartheta \frac{d\theta}{d\theta} \right) = l(l+1) \quad (4.106)$$

ва

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m_0 r^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = l(l+1) \quad (4.107)$$

тенгламаларни ҳосил қиламиз. Шундай қилиб, Шредингер тенгламаси учта тенгламага ажралади. Бу учта тенглама одатда қуйидаги қулай кўринишда ёзилади:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi = 0, \quad (4.108)$$

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\theta}{d\vartheta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \theta = 0, \quad (4.109)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \left[\frac{2m_0}{\hbar^2} (V(r) - E) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (4.110)$$

Бу тенгламаларнинг ҳар бири битта функциянинг оддий дифференциал тенгласи бўлиб, битта ўзгарувчига боғлиқ. Шундай қилиб, марказий майдон учун Шредингер тенгласини учта оддий дифференциал тенгламага ажратдик.

Хусусий функциялар. (4.104) функция Шредингер тенгласининг ечими сифатида чекли, узлуксиз ва бир текис ўзгарувчи хоссаларга эга. Стационар ҳолатни тавсифлаши учун нормаланган ҳам бўлиши керак, яъни

$$\int \psi^* \psi dx dy dz = \int_0^{\infty} R^2 r^2 dr \int_0^{\pi} \theta^2 \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi^2 d\varphi = 1.$$

Бу шартдан R , θ , Φ функциянинг ҳар бири учун алоҳида-алоҳида

$$\int_0^{\infty} R^2 r^2 dr = 1, \quad (4.111)$$

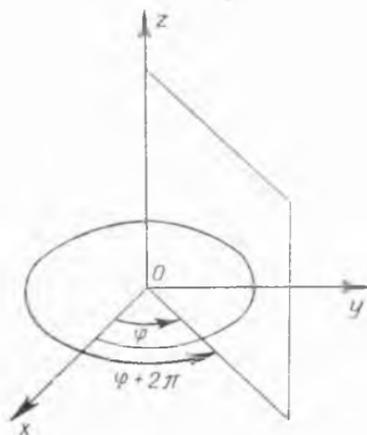
$$\int_0^{\pi} \theta^2 \sin \vartheta d\vartheta = 1, \quad (4.112)$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi^2 d\varphi = 1 \quad (4.113)$$

шартлар келиб чиқади. Юқоридаги (4.108) тенглама жуда осон ечилади. Унинг ечими одатда

$$\Phi(\varphi) = N_{\varphi} \cdot e^{im_l \varphi} \quad (4.114)$$

кўринишда ёзилади, N_{φ} — нормаловчи коэффициент. Квантлаш шартига биноан тўлқин функция фазонинг ҳар қан-



38-расм. Азимутал бурчакнинг 2π га ўзгариши.

дай нуқтасида чекли ва бир қийматли ҳамда бир текис бўлиши керак. Шунинг учун пси-функциянинг бир қисми бўлган Φ ҳам худди шу хоссаларга эга бўлади. 38-расмдан кўрамизки, бирор меридиандан ўтган текисликка φ ва $2\pi + \varphi$ бурчаклар тўғри келади. Бошқача айтганда, $\Phi_1(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$ муносабат ўринли бўлиши керак, яъни

$$\Phi(\varphi) = e^{im_l \varphi} = e^{im_l (\varphi + 2\pi)} \quad (4.115)$$

Бир қийматлилиқ шартининг натижаси бўлган (4.115) шартнинг бажарилиши учун $m_l = 0$ ёки $\pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ каби мусбат ёки манфий бутун сон қийматлар қабул қилиши лозим. m_l катталиқни *магнит квант сони* деб аталади.

Азимут бурчаги учун ёзилган (4.109.) дифференциал тенглама мураккаб ечимга эга. Тенгламани ечиш учун унда ўзгарувчиларни алмаштирамиз. $x = \cos \vartheta$ орқали янги ўзгарувчи киритамиз. У ҳолда (4.109) тенглама

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d\theta}{dx} \right] + \left(\lambda - \frac{m_l^2}{1-x^2} \right) \theta = 0, \quad \lambda = l(l+1) \quad (4.116)$$

кўринишга келади. Бу тенгламада $x = \pm 1$ нуқта махсус нуқта бўлиб ҳисобланади, чунки $x = \pm 1$ да θ функция олдидаги коэффициент чексизга айланади. $x = \pm 1$ нуқта муҳиммас махсус нуқтадир. Шунинг учун тенгламанинг ечимини қуйидаги кўринишда излаймиз:

$$\theta = (1-x^2)^{\frac{m_l}{2}} \sum_{k=0}^m a_k x^k = (1-x^2)^{\frac{m_l}{2}} U(x). \quad (4.117)$$

Бу ерда $m = \pm |m_l|$, a_k — аниқланиши керак бўлган коэффициент. (4.116) тенгламанинг ечими, албатта, $|m_l|$ га боғлиқ бўлади, чунки тенгламага магнит квант сонининг квадрати m_l^2 кирган. (4.117) ни (4.116) га қўйиб номуайин функция U учун

$$(1-x^2) \frac{d^2 U}{dx^2} - 2x(m+1) \frac{dU}{dx} + [\lambda - m(m+1)] U = 0 \quad (4.118)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. U функция учун ёзилган бу тенглама махсус нуқтага эга эмас. Унинг ечимини (4.117)

лаги қатор кўринишида излаймиз. Қатор коэффициентлари учун қуйидаги муносабатга келамиз:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{ k(k-1) a_k x^{k-2} + [\lambda - (k+m)(k+m+1)] a_k x^k \} = 0.$$

Бир хил даражали x лар қатнашган ҳадларни йиғиб

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{ (k+2)(k+1) a_{k+2} + [\lambda - (k+m)(k+m+1)] a_k x^k \} = 0.$$

ифодага келамиз. Охириги тенглик x нинг ҳамма қийматларида тўғри бўлиши учун x ларнинг олдидаги коэффициентлар (k ни $k=0,1, \dots$ ўзгаришида) алоҳида-алоҳида полга тенг бўлиши зарур, яъни

$$(k+2)(k+1) a_{k+2} + [\lambda - (k+m)(k+m+1)] a_k = 0. \quad (4.119)$$

(4.119) рекуррент муносабат (4.117) қаторнинг ҳамма коэффициентларини боғлайди. (4.119) рекуррент муносабатга мувофиқ U жуфт ёки тоқ функциядир. x нинг ҳамма қийматларида ҳам $\theta(x)$ чекли бўлиши учун (4.117) қатор чекли ҳадлар йиғиндисидан ташкил топган бўлиши зарур. Бошқача айтганда (4.117) қатор бирор максимал даража $k=q$ билан чегараланган полином бўлиши керак. У ҳолда

$$a_k = a_q = 0, \quad a_{k+2} = a_{q+2} = 0.$$

(4.119) рекуррент муносабатга асосан эса (k ни q га алмаштириб)

$$\lambda = (q+m)(q+m+1), \quad q=0, 1, 2, 3, \dots$$

келиб чиқади. Юқорида λ ни l орқали $\lambda = l(l+1)$ каби белгиланган эдик. Демак, l катталиқ *азимутал (орбитал) квант сон*и бўлиб,

$$l = q + m \quad (4.120)$$

га тенг. l сон q ҳамда m каби нолдан бошлаб фақат мусбат бутун сонлар қабул қилади. (4.120) га биноан

$$l \geq m, \quad (4.121)$$

яъни

$$m_l = -l, \quad -l+1, \dots, l-1, l. \quad (4.122)$$

$$\begin{aligned} [\theta = (1 - \cos^2 \theta) \frac{m_l}{2} \sum_{k=0,1}^q a_k \cos^k \theta = \sin^{m_l} \theta \sum_{k=0,1}^{l-m_l} a_k \cos^k \theta = \\ = P_l^{m_l}(\cos \theta). \end{aligned}$$

Бу ерда $P_l^{m_l}(\vartheta)$ — Лежандр бирлаштирилган полиномлари. Шундай қилиб, (4.116) тенгламанинг ечими умумий ҳолда қуйидагича ифодаланади:

$$\theta_l^{m_l} = C_l^{m_l} P_l^{m_l}(\cos \vartheta). \quad (4.123)$$

$C_l^{m_l}$ ва N_φ коэффициентлар (4.112), (4.113) шартлардан аниқланади. Даставвал N_φ ни аниқлайлик:

$$N_\varphi^2 \int_0^{2\pi} e^{im_l \varphi - im_l \varphi} d\varphi = N_\varphi^2 2\pi = 1,$$

демак,

$$N_\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}; \quad \Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi}. \quad (4.124)$$

$C_l^{m_l}$ коэффициентни аниқлаш учун (4.112) шартни қуйидагича ёзамиз:

$$\int_0^\pi \theta_l^{m_l} \theta_l^{m_l} \sin \vartheta d\vartheta = \int_{-1}^1 \theta_l^{m_l}(x) \theta_l^{m_l}(x) dx = 1.$$

Интегрални ҳисоблаш учун Лежандр бирлаштирилган полиноми хоссасидан фойдаланамиз:

$$\int_{-1}^1 P_l^{m_l}(x) P_{l'}^{m_l}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m_l)!}{(l-m_l)!} \delta_{ll'}$$

Бу ерда

$$\delta_{ll'} = \begin{cases} 0, & \text{агар } l \neq l' \\ 1, & \text{агар } l = l' \end{cases}$$

$C_l^{m_l}$ коэффициентлар учун қуйидаги:

$$C_l^{m_l} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}}$$

ифодани ҳосил қиламиз. Натижада $\theta_l^{m_l}$ функция

$$\theta_l^{m_l} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos \vartheta) \quad (4.125)$$

кўринишда тасвирланади.

Шундай қилиб, (4.101) Шредингер тенгламаси ечими (4.104) бурчак қисми қуйидаги

$$\begin{aligned} Y_{l, m_l}(\vartheta, \varphi) &= \theta_l^{m_l}(\vartheta) \Phi(\varphi)_l = \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos \vartheta) e^{im_l \varphi} \end{aligned}$$

шар функциялар экан. Шар функциялар $Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$ нормаланган функциялардир. Ҳақиқатан, агар $d\Omega$ орқали фазовий бурчак элементини белгиласак,

$$\begin{aligned} \oint (Y_{l, m_l})^* Y_{l, m_l} d\Omega &= \text{const} \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} P_l^{m_l} \times \\ &\times P_l^{m_l} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m_l - m_l)\varphi} = \delta_{l, l} \cdot \delta_{m_l, m_l} \end{aligned}$$

Қуйида мисол тариқасида кичик квант сонларига тўғри келувчи бир неча нормаланган шар функцияларнинг ошкор формулалари келтирилган:

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta; \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i \varphi}; \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1); \\ Y_{2,\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{\pm i \varphi}; \\ Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i \varphi}; \end{aligned}$$

(4.110) тенгламани ечиб, радиал функция $R(r)$ ни аниқлаш учун потенциал энергия $V(r)$ нинг ошкор формуласини билишимиз зарур. Келгуси бобда $R(r)$ радиал функцияга мисол тариқасида водород ядросининг марказий-симметрик Кулон майдонида ҳаракатланаётган электрон масаласини кўрамиз. Ядронинг Кулон майдонида битта электрон ҳаракатини ўрганиш атом тузилиши физикасига йўл очади.

ВОДОРОДСИМОН АТОМЛАР

Квант механикасининг яратилиши биланоқ, атомнинг квантомеханик назарияси ривожлантирилди. Атомнинг квант назарияси табиат ва унинг тузилиши ҳақидаги билимимизни тубдан ўзгартирди ва Менделеевнинг элементлар даврий системасининг келиб чиқиш негизини, барқарор молекулалар тузилишида атомлар ўзаро таъсирининг характерини, қаттиқ жисмлар электр, магнит ҳамда механик хоссаларини ва бошқа кўп микродунё муаммоларини тушунишга имкон берди. Келгуси параграфлар ва бобларнинг асосий мазмуни худди шу масалаларга бағишланган, даставвал, биз водород ва водородсимон атом квант назариясига бутун эътиборимизни қаратамиз.

Водород ва водородсимон атомлар, яъни ядро майдонда биттагина электрон бўлган атомлар элементларнинг Менделеев даврий системасидаги энг содда атом системаларига мансуб. Водородсимон атомга бир каррали ионланган заряд сони $Z = 2$ га тенг гелий атоми He, икки каррали ионланган ва заряд сони $Z = 3$ га тенг литий атоми Li^{++} ва ҳоказо киради. Атом системалари ичида энг соддаси, албатта, водород атоми ҳисобланади. Водород атоми электр заряди $+e$ га тенг зарра — протондан иборат бўлган ядродан ва $-e$ манфий зарядли электрондан тузилган. Протон ва электрон ўртасида электростатик тортишиш кучи таъсир қилади. Протоннинг массаси электронникига нисбатан жуда кўп марта катта. Шунинг учун, масалани осонлаштириш мақсадида протонни, яъни водород атоми ядросини турғун деб қараш мумкин.

27- §. Водород атоми

Водород атоми учун Шредингер тенгламаси. Кулон тортишиш кучи таъсиридаги битта электроннинг потенциал энергияси

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (5.1)$$

Бу ерда Ze — ядронинг заряди, водород атоми учун $Ze = 1e$ га тенг, r — ядро билан электрон орасидаги масофа, ϵ_0 — вакуумнинг диэлектрик киритувчанлиги. У ҳолда, водород атоми ҳолида протон майдонида ҳаракатланаётган электрон учун Шредингернинг уч ўлчовли стационар тенгламаси

$$\Delta^2 \psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0 \quad (5.2)$$

кўринишда бўлади. (5.2) тенгламанинг ечими система-нинг даврий стационар ҳолатини тавсифлаши учун бир қийматли, узлуксиз ва текис ўзгарувчан бўлиши лозим.

Потенциал энергиянинг (5.1) ифодаси сферик-симметриялидир. Шунинг учун (4.2) тенгламани сферик координаталарда ечиш мақсадга мувофиқ. У ҳолда тўлқин функция учта сферик координата r , ϑ , φ лар функцияси бўлади $\psi = \psi(r, \vartheta, \varphi)$. Лекин марказий симметрик майдонда стационар ҳаракат қилаётган электроннинг энергетик сатҳлари тўлқин функциянинг радиал қисми учун ёзилган (4.110) тенгламани ечиш билан аниқланади:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (5.2a)$$

(Умумийлик учун бу тенгламада ва бундан кейин ҳам ядро зарядини $+Ze$ га тенг деб қабул қиламиз. Шу билан биз биттагина электрон сақланиб қолган $Z > 1$ мусбат ионнинг ҳам энергетик сатҳларини аниқлаган бўламиз. Энергетик сатҳ учун аниқланган охириги ифодада $Z = 1$ деб водород атомининг энергетик сатҳини аниқлай оламиз). Бу тенгламани ечишни янада осонлаштириш мақсадида (5.2) нинг сферик симметрияли ечимлари билан кифояланамиз, яъни $l = 0$ деб ҳисоблаймиз ($l \neq 0$ ҳолига кейинроқ қайтаемиз). Шундай қилиб, биз қуйидаги

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_0}{dr} \right) + \frac{2m_l}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] R_0 = 0 \quad (5.3)$$

шаклдаги Шредингер тенгламасини кўрамиз. Тенгламани соддалаштириш учун белгилашлар ва ўзгарувчиларни алмаштиришлар ўтказамиз:

$$\beta = \frac{2m_l Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}; \quad k^2 = -\frac{2m_l E}{\hbar^2}; \quad R_0(r) = \frac{U(r)}{r} \quad (5.4)$$

У ҳолда (5.3) тенглама қуйидаги содда кўринишга келади:

$$\frac{d^2 U}{dr^2} + \beta \frac{U}{r} = k^2 U. \quad (5.5)$$

Сферик — симметрияли ечим. Даставвал (5.5) тенглама ечимининг асимптотасини ўрганамиз. Радиус-вектор r нинг чексизликка интилишида (5.5) тенгламада $k^2 U$ ҳадга нисбатан $\beta \frac{U}{r}$ ҳадни чексиз кичик қиймат сифатида ташлаб юбориш мумкин. Бинобарин, етарлича катта r учун (5.5) тенгламани қуйидагича ўзгартириш мумкин:

$$\frac{d^2 U_\infty}{dr^2} = k^2 U_\infty.$$

Бу тенгламанинг ечими

$$U_\infty = A \cdot e^{-kr} + B \cdot e^{kr}$$

кўринишга эга. A ва B — доимийлар. Тўлқин функцияга қўйилган чеклилик талабига кўра U_∞ ечим r нинг ҳамма қийматларида ва шу билан $r \rightarrow \infty$ да ҳам чекли бўлиши шарт, яъни $B = 0$. Демак.

$$U_\infty = A \cdot e^{-kr}. \quad (5.6)$$

(5.6) функция (5.5) тенгламанинг ечими бўла олмаса ҳам изланаётган ечимни чексизликда тасвирлайди. Шунинг учун (5.5) тенгламанинг ечимини қуйидаги кўринишда излаймиз:

$$U = e^{-kr} f(r). \quad (5.7)$$

Бу ерда номаълум $f(r)$ функциянинг ошкор тасвири асимптотада e^{-kr} дан тез ўсмайдиган бўлиши керак. (5.7) ечимни (5.5) тенгламага қўйсақ, f функция учун дифференциал тенглама ҳосил бўлади:

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} - 2k \frac{df}{dr} + \frac{\beta}{r} f = 0. \quad (5.8)$$

(5.8) тенгламанинг ечими f функциянинг ошкор кўринишини, юқоридаги шартга кўра, даражали қатор сифатида излаймиз:

$$f(r) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n r^n. \quad (5.9)$$

У ҳолда (5.9) ни (5.8) га қўйиб,

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n n (n-1) r^{n-2} - 2k \sum_{n=1}^{\infty} a_n n r^{n-1} + \beta \sum_{n=1}^{\infty} a_n r^{n-1} = 0$$

ни ҳосил қиламиз. Ҳосил бўлган учта йиғинди ҳадларнинг биринчисида n ни $n+1$ га алмаштирамиз. Биринчи йиғиндида $n=1$ ҳад нолга айланишини ҳисобга олган ҳолда тенгликни қўйидагича ёзишимиз мумкин:

$$\sum_{n=1}^{\infty} [a_{n+1} (n+1) n - 2k a_n \cdot n + \beta a_n] r^n = 0. \quad (5.10)$$

(5.10) тенглик радиус-векторнинг олдида турган коэффициентлар алоҳида-алоҳида нолга тенг бўлгандагина ўринлидир. Бу талабдан қўйидаги рекуррент формула келиб чиқади:

$$a_{n+1} = \frac{2kn - \beta}{n(n+1)} a_n. \quad (5.11)$$

Рекуррент формуладан кўрамизки, (5.9) қатор k ва β ўзгармаслар ўртасидаги муносабатга боғлиқ равишда чексиз даражали ёки чекли даражали, яъни полином каби қаторга айланади. Агар қатор узилмаса $n \rightarrow \infty$ да

$$a_{n+1} = \frac{2k - \frac{\beta}{n}}{n+1} a_n \simeq \frac{2k}{n+1} a_n \quad \text{ёки} \quad \frac{a_{n+1}}{a_n} \simeq \frac{2k}{n+1}$$

бўлади. Бу ҳил рекуррент формула экспонента кўринишдаги функциялар учун ўринли. Ҳақиқатан,

$$e^{2kr} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (2kr)^n = \sum_{k=1}^{\infty} b_n r^n.$$

қаторнинг r^n ва r^{n+1} ҳадлари олдидаги коэффициентларининг нисбати

$$\frac{b_{n+1}}{b_n} = \frac{(2k)^{n+1}}{(n+1)!} \cdot \frac{n!}{(2k)^n} = \frac{2k}{n+1}$$

га тенг. Демак, (5.9) қатор чекли бўлмаса, n нинг катта қийматларида $f(r)$ ни тавсифловчи қатор e^{2kr} функция каби ўзгаради ва r нинг чексизга интилишида чекли бўлиш

шарти қўйилган радиал функция R_0 узоқлашувчи асимптотикага эга бўлади, яъни $r \rightarrow \infty$ да $R_0 \rightarrow \frac{\exp(kr)}{r}$ каби ўзгаради. Физик ҳақиқатни экс эттира олмаганлиги сабабли бу ечим ташлаб юборилади.

Энди (5.9) қатор бирор n - ҳадида узилишга тўғри келадиган шартни аниқлайлик. Қатор узилиши учун (5.11) рекуррент формулага кўра бирор мусбат бутун сон n дан бошлаб (5.11) нинг ўнг томонидаги каср сурати нолга айланиши лозим, яъни

$$2k \cdot n - \beta = 0.$$

ёки

$$k = \frac{\beta}{2n}.$$

Энергетик сатҳлар. Охириги ифода (5.12) га k ва β нинг (5.4) даги қийматларини қўйиб водородсимон атомлар учун мумкин бўлган энергетик сатҳларни аниқлаймиз:

$$E_n = - \frac{m_e \cdot Z^2 \cdot e^4}{32 \cdot \pi^2 \epsilon_0^2 \cdot \hbar^2} \frac{1}{n^2} = - \frac{R_H \cdot h Z^2}{n^2} \quad (5.13)$$

Бу ерда n — бутун мусбат сон бўлиб, у бош квант сони деб аталади, R_H — водород учун Ридберг доимийси:

$$R_H = \frac{m_e \cdot e^4}{8 \epsilon_0^2 \hbar^3}.$$

Шу нарсани алоҳида қайд қилиш керакки, водород атоми электронининг стационар ҳолатлари энергияси учун квант механикаси асосида аниқланган (5.13) ифода шу ҳол учун Бор назариясидан аниқланган (3.22) га аниқ тўғри келади. (5.13) формуладан n нинг бир неча қийматлари учун водород атоми энергетик сатҳларини аниқлайлик:

$$E_1 = -13,6 \text{ эВ},$$

$$E_2 = -13,6 \cdot \frac{1}{2^2} = -3,4 \text{ эВ},$$

$$E_3 = -13,6 \cdot \frac{1}{3^2} = -1,51 \text{ эВ},$$

$$E_4 = -13,6 \cdot \frac{1}{4^2} = -0,85 \text{ эВ},$$

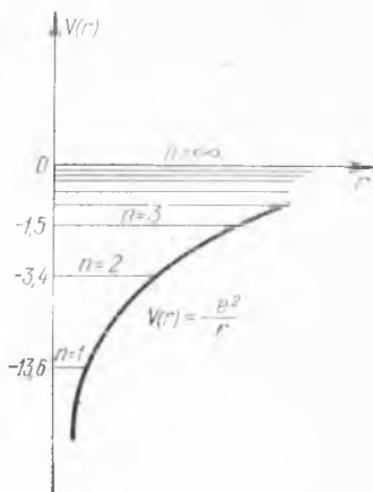
$$E_5 = -13,6 \cdot \frac{1}{5^2} = -0,544 \text{ эВ}.$$

Энергия полга яқинлашиши билан энергетик сатҳлар зичлиги ортишини кузатамиз. $E > 0$ да электрон эркин ҳаракат қилади ва бу ҳолда тўлқин функция (2.23) чекли бўлмаганлиги сабабли энергетик сатҳлар квантланмайди. Эркин электрон энергияси дискретмас тугаш спектри ҳосил қилади. Водород атоми электронининг энергетик сатҳлари 39-расмда тасвирланган.

Водород атоми учун Шредингер тенгламасини юқоридагидек ечишимизга боғлиқ муҳим низоҳ берамиз. Умуман олганда, биз аниқлаган ечим

$$R_{n^*} = U/r = \frac{e^{-kr}}{r} f(r) = \sum_{n=1}^{l+1} a_n r^n \quad (5.14)$$

ечимларининг тўла тўпламини ташкил қилмайди. Чунки водород атоми учун Шредингер тенгламасини ечишда биз тўлқин функциянинг ψ ва ϕ бурчакларга боғлиқлигини ҳисобга олмадик. Шунинг учун биз аниқлаган энергетик сатҳлар (5.13) аслида ψ ва ϕ бурчакларга боғлиқ бўлмаган ҳолатлар энергетик сатҳлардир. Биз радиал тенгламада орбитал квант сонини $l = 0$ деб олдик. Натижада биз аниқлаган энергетик сатҳлар билан характерланадиган ҳолатлар учун $l = 0$, яъни ҳаракат миқдори моментига эга эмас. Жумладан, шунини айтиш керакки, $l \neq 0$ деб аниқланган энергетик сатҳлар биз аниқлаган энергетик сатҳлардан фарқ қилмайди. Бу ҳол нуқтавий заряд электр майдонига хос хусусиятдир. Яъни нуқтавий заряд электр майдони ўзига хос шундай хусусиятга эгаки, ҳаракат миқдори momenti ноль бўлмаган ҳолат учун (5.2а) тўла тенгламанинг ечими янги энергетик сатҳларнинг пайдо бўлишига олиб келмайди. Шунинг учун (5.13) да водород атоми электронининг ҳамма энергетик сатҳлари бор.



39- расм. Водород атоми учун электронининг потенциал энергияси ва атом энергетик сатҳлари:

$n^* = 1$ — асосий ҳолат, $n = 2$ ва $n = 3$ — уйғотилган ҳолат.

Классик назария нуқтаи назаридан ҳаракат миқдори моменти ноль бўлган электроннинг тургун ҳолати мавжуд эмас. Чунки агар ҳаракат миқдори моменти ноль бўлса, электроннинг ядро атрофида ҳеч қандай (Бор нуқтаи назардан айтганда) айланма ҳаракати йўқ. У ҳолда электрон ядрога тушиш керак. Квант механикаси нуқтаи назардан эса бундай ҳол ҳеч қачон рўй бермайди. Чунки, электроннинг ядрога яқинлашишида унинг координатаси ноаниқлиги камаяди. Бу эса ноаниқликлар муносабатига биноан электроннинг импульсини тез катталашшига олиб келади. Натижада ядрога яқинлашаётган электрон ядрога қанча яқин келса, унинг кинетик энергияси — $\frac{(\Delta p)^2}{2m_e}$ шунча катта бўлади. Бу эса электроннинг тўла энергиясини ошишига олиб келади, чунки электронни ядрога яқинлашишидаги потенциал энергияси (5.1) нинг камайишидан кўра кинетик энергияси тезроқ ошади. Биламизки, электроннинг тўла энергияси асосий ҳолатда минимал қийматга эга бўлади. Электроннинг ядрога яқин келишида эса электроннинг энергетик фойдасиз ҳолати юз беради. Шундай қилиб, квант зарра — электрон ядрога «тушиб» кета олмайди.

28- §. Водородсимон атомлар спектри

Водород атоми спектри. Водородсимон атом электрони учун квант механикасида ҳосил қилинган (5.13) формула Бор назарияси асосида олинган (3.22) формуладан мутлақо фарқ қилмайди. Шу сабабдан водород атоми электроннинг квант механикаси берган энергетик сатҳлар схемаси Бор назариясидан олинган сатҳлар схемаси билан тўла мос келади. Водород атоми нурланиш частоталари ва спектрининг ҳар хил сериялари квант механикаси ва Бор назариясида айнан ўхшаш формулалар орқали тавсифланади.

Водород атомининг асосий ҳолати квант механикасига биноан $n = 1$ квант сони билан характерланади. Агар Бор назариясида $n = 0$ ҳолининг ташлаб юбориш сабаби номаълум қолган бўлса, квант назариясида эса $n = 0$ ҳолатнинг йўқлиги тўлқин функцияга қўйилган чеклилик (айни ҳолда координата бошида) шартига кўра табиий равишда келиб чиқади. Шундай қилиб, (3.22) ёки (3.29)

на (5.13) да $n = 1, 2, 3, \dots$ каби ўзгариши ҳолат тўлқин функциясига қўйилган талабнинг маҳсули экан.

(5.13) формуладан фойдаланган ҳолда водород атоми спектр чизиқлари энергияси учун ифодани келтириб чиқариш мумкин. Бунинг учун (5.13) да $Z = 1$ деб ҳисоблаб, ҳар хил квант сатҳларга тўғри келадиган энергияларни бир-биридан айнириб қуйидагини ҳосил қилиш мумкин:

$$\Delta E = h \nu = E_n - E_m = R_n h \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (3.24)$$

(3.23) га қ.). Водород атомининг бу сатҳлари, биз юқорида кўрган, 22- расмда тасвирланган эди. Водород атоми учун Ридберг доимийси R_n — (3.30) орқали берилади. Шу нарсага яна эслатамизки, Ридберг доимийсининг биз келтирган ифодаларида R вақтга тескари бирлик (сек^{-1}) билан ўлчанади. Эксперимент натижалари эса одатда тўлқин узунлигининг тескари бирлиги (см^{-1}) да берилади. Биз келтирган Ридберг доимийсини тажриба билан таққослаш учун юқоридаги ифодаларни ёруғлик тезлигига бўлиш керак, яъни

$$\begin{aligned} R_{\text{вис}} = R_{n/c} &= \frac{2}{16\pi^2 \epsilon_0^2} \cdot \frac{c^4 m_e}{4\pi \hbar^3 c} = \frac{1}{(4\pi)^3} \frac{1}{\epsilon_0^2} \cdot \frac{m_e c}{\hbar} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 = \\ &= \frac{1}{(4\pi)^3} \cdot \frac{1}{\epsilon_0^2} \frac{\alpha^2}{\Lambda} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Λ — электроннинг Комптон тўлқин узунлиги. α -нозик структура доимийси. Нозик структура доимийси билан кейинроқ батафсил танишамиз.

Ридберг доимийсининг водород атоми учун (5.15) ифодаси эксперимент натижасини аниқ тавсифламайди. Бунинг сабаби водород ядроси — протоннинг массасини чексиз катта деб қабул қилиб протон ва электрондан иборат системанинг Шредингер тенгламасини (5.2) орқали ифодалашимиздир. Ҳақиқатда эса протоннинг массаси чекли ва у ҳаракатда бўлади. Бу эса Ридберг доимийси учун яна (3.38) каби қайта аниқловчи формулага олиб келади.

Биз кўрдикки, Бор назариясида энергетик сатҳлар электронларнинг турғун орбиталардаги ҳаракатига мос қўйилади. Квант механикасида эса электроннинг орбита бўйлаб ҳаракати ҳақида ҳеч қандай тасаввур бўлмайди.

Бунинг сабабини энди биламизки, квант механикасида микрозарранинг ҳаракатини тавсифлаш эҳтимоллик хараактерига эга. Электроннинг орбита бўйлаб ҳаракати тушунчаси ўрнига унинг тўлқин функцияси тавсифловчи ҳаракат ҳолати ҳақидаги тушунчасига келамиз. Масалан, ҳаракат миқдори моменти нолга тенг ($l = 0$) асосий ҳолатдаги $n = 1$ электроннинг ҳаракати (5.14) да $R_{n1} = R_{10}$ тўлқин функция орқали тавсифланади. Классик нуқтаи назардан бу ҳолатда электрон фақат радиус бўйлаб ҳаракатланиши, яъни ядрога тушиши керак. Албатта классик нуқтаи назардан бундай ҳаракат мумкин эмас. Квант механикасида эса электроннинг $l = 0$ орбитаси — S -ҳолати ўринли. Бу ҳолатдаги электрон булутининг тақсимланиши сферик симметриялидир. Жумладан, асосий ҳолатдаги электроннинг орбитал ҳаракат миқдори моменти нолга тенглиги $l = 0$ тажрибада кузатилади.

Бор назарияси нуқтаи назарига биноан электроннинг бир орбитадан иккинчисига ўтиши квант механикасида электроннинг бир ҳолатдан иккинчисига ўтиши каби таърифланади. Бор назариясида электроннинг орбиталараро ўтиши фазовий кўчиш каби тасаввур этилса, квант механикасида электроннинг бир ҳолатдан иккинчисига ўтиши фазовий кўчишга ўхшаш бирор яққол тасвирга эга эмас.

Спектр чизиқларининг изотопик силжиши. Маълумки, табиатда водород атомининг енгил изотопидан ташқари яна иккита оғир изотопи мавжуд. Булар дейтерий D ва тритий T дир. Дейтерий атомининг ядроси битта протон битта нейтрондан иборат икки ядровий заррадан ташкил топган системадир. Тритий ядросида эса битта протондан ташқари яна иккита нейтрон мавжуд. Водород атомининг оғир изотоплари спектри ҳам (3.24) формула орқали ифодаланadi. Фақат R_H ўрнига R_D ва R_T ларни қараш керак. Бунинг учун, мос равишда (3.38) да протон массасини иккига ва учга кўпайтириш лозим холос. U ҳолда

$$R_D = 109707,4 \text{ см}^{-1}; \quad R_T = 109717,5 \text{ см}^{-1}$$

қийматларга эга бўламиз. R_H, R_D, R_T ларнинг ўзаро фарқи водороднинг ҳар хил изотоплари спектрида бир хил чизиқлар тўлқин узунликларининг қийматлари ўртасидаги тафовутга олиб келади. Биринчи жадвалда водород ва дейтерий спектрларидаги Лайман серияси чизиқларининг

биринчи учтаси учун тўлқин узунликлар қиймати келтирилган.

I жадвал

Водород спектрида Бальмер сериясининг айрим чизиқлари — H_{α} H_{β} H_{γ}

чизиқ	$\lambda_{\text{эксп.}} \cdot \text{Å}$	$\lambda_{\text{теор.}} \cdot \text{Å}$
H_{α}	6562,78	6561,7
H_{β}	4861,32	4862,7
H_{γ}	4340,64	4341,7

Муайян элементнинг ҳар хил изотоплари спектрида айнан чизиқларнинг тўлқин узунликларини фарқ қилиши спектр чизиқларининг изотопик силжиши деб аталади. Водород ва дейтерий спектрларидаги жадвалда келтирилган изотопик силжишлар шунчалик каттаки, оддий спектр асбобларда ҳам сезини мумкин. Водород ва дейтерий спектр чизиқлари тўлқин узунликларидаги изотопик силжиш Бальмер серияси учун япада каттадир. Масалан, водород ва дейтерий спектрининг Бальмер сериясидаги биринчи бош чизиқ учун тўлқин узунликлар фарқи $1,7 \text{ Å}$ ни ташкил қилади.

Водородсимон ионлар. Битта электрони қолгунча ионланган атомларнинг спектрларини кўрамиз. Бир каррали ионланган гелий атоми учун спектр формуласини ёзамиз.

$$\begin{aligned} \Delta E = h\nu = E_n - E_m &= R_{\text{He}} Z_{\text{He}}^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \\ &= 4 \frac{R_{\infty}}{1 + \frac{m_e}{M_{\text{He}}}} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \end{aligned}$$

R_{∞} — (3.38) формулада таърифланган.

Спектр чизиқларининг частоталари ўртасидаги бу формула берадиган муносабат ҳам даставвал тажрибалар асосида аниқланган эди. Уни фақат квант механикаси-гина тушунтира олди.

Айнан худди шу йўл билан қатор бошқа ионлар, масалан, Li^{++} , Be^{+++} ва ҳоказолар учун ҳам спектр формула-

ларини ёзишимиз мумкин. Бу ионлар спектри учун Лайман сериясининг биринчи чизиқлари атомлар спектрининг ультрабинафша соҳасида ётади.

29- §. Спектр чизиқларининг кенглиги

Шредингер тенгламасини водород атоми, потенциал ўра, гармоник осцилляторлар учун ечиб, биз мазкур системалар энергиясининг мумкин бўлган қийматлари дискрет тўплам ҳосил қилишини кўрдик. Ҳар бир энергия сатҳининг аниқ қийматга эга бўлиши энергия сатҳларининг кенгликка эга эмаслигини билдиради. Бу ҳақиқатга тўғри келмайди, чунки биз тегишли масалалар учун Шредингер тенгламасини ёзганимизда баъзи соддалаштиришлар ўтказган эдик.

Атом бир энергетик сатҳдан иккинчисига ўтишда фотон чиқариши ёки ютиши керак. Шу жараёни тавсифловчи тўғри тенгламада, албатта, атомнинг электромагнит майдон билан ўзаро таъсири ҳам ҳисобга олинган бўлиши зарур. Нурланишгача ёки нурланиш жараёнида вужудга келувчи электромагнит майдон билан атомнинг ўзаро таъсирини Шредингер тенгламасида ҳисобга олиш атом энергетик сатҳларининг маълум ΔE кенгликда ёйилишини вужудга келтиради. Маълумки, ёруғлик нурланиши узунлик тартиби тахминан метрларга тўғри келадиган кетма-кет тўлқинлар «кесмаси» сифатида юз беради. Ҳар бир тўлқин «кесмаси» монохроматик тузилмасдан, ҳар доим маълум бир частоталар оралиғи билан характерланади, демак, тўлқин кесмасига тегишли квант ҳам аниқ частотага мос бўлмасдан энергияси маълум ноаниқликка эга бўлади. Нурланиш тўлқини энергиясининг бу ноаниқлиги фақат уйғотилган сатҳ энергиясининг ноаниқлигидан, яъни энергия сатҳининг кенгликка эга эканлигидан вужудга келади.

Квант энергиясининг ноаниқлигини баҳолайлик. Фараз қилайлик, ёруғлик тезлиги (c) билан ҳаракат қилаётган тўлқин «кесма» чекли τ вақт ичида нурланган ва у бутун узунлиги бўйича Ω частотали аниқ синусоида сифатидаги тасвирга эга бўлсин. Одатда, нурланишнинг спектрал таркибини аниқлаш мақсадида тўлқинни Фурье интегралига

сўйлади. Тўлқин, «кесма» си сифатидаги ёруғлик нурланишининг тавсифловчи $F(t)$ функция киритайлик, яъни

$$F(t) = \begin{cases} Ae^{i\Omega t}, & \text{агар } -\frac{\tau}{2} < t < \frac{\tau}{2}, \\ 0, & \text{бошқа ҳолларда.} \end{cases}$$

$F(t)$ функцияни Фурье интегралига ёямиз:

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) e^{i\omega t} d\omega,$$

бу ерда $f(\omega)$ Фурье интеграллари ҳақидаги теоремага асосан

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt$$

га тенг $f(\omega)$ функцияни баҳолайлик:

$$f(\omega) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} Ae^{i\Omega t} dt = \left\{ \frac{A}{i(\Omega - \omega)} \left(e^{i(\Omega - \omega)\frac{\tau}{2}} e^{-i(\Omega - \omega)\frac{\tau}{2}} \right) \right\}.$$

Демак,

$$f(\omega) = A\tau \frac{\sin(\Omega - \omega)\frac{\tau}{2}}{(\Omega - \omega)\frac{\tau}{2}}$$

Ω ва ω частоталар бир-бирига яқинлашишида тебраниш амплитудаси катталашади ва аксинча $(\Omega - \omega)$ нинг катталанишида амплитуда кичиклашади. Тақсимот кенглигини баҳолаш мақсадида бош максимумдан биринчи минимумгача масофани аниқлайлик. Биринчи минимум

$$\Delta\omega = (\Omega - \omega) = \frac{2\pi}{\tau}$$

га вужудга келади. Охириги тенгликни τ га кўпайтирсак,

$$\Delta\omega\tau = 2\pi \quad (5.16)$$

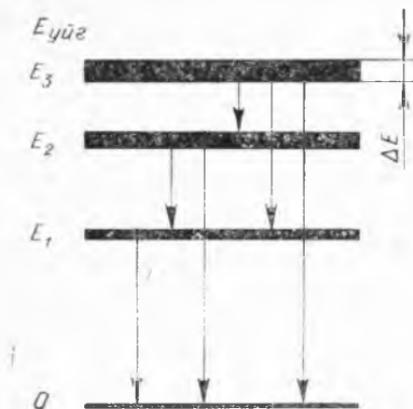
га келамиз. Бу ерда τ — ёруғлик чиқарилиши учун кетган вақт. Квант механикасида ёруғликни «секин-аста» нурланиши мумкин эмас. Нурланиш тўла ҳолда бир зумда юз беради. Бошланғич ва сўнгги квант ҳолатлари ўртасида ҳеч қандай оралиқ ҳолатга ўрин йўқ.

Шунинг учун, ҳар қандай реал нурланиш жараён атомнинг бошланғич ва охири ҳолатларини аниқ ва тўла тавсифловчи тўлқин функциялар суперпозициясидан иборат бўлган функция воситаси билан аниқ квантомеханик тавсифга эга бўлади. Суперпозицияни ташкил қилувчи тўлқин функциялар маълум коэффицент билан қатнашади. Бошланғич ҳолат тўлқин функцияси олдидаги коэффицент экспоненциал равишда камаяди, охири ҳолат тўлқин функцияси олдидаги коэффицент эса мос равишда ўсади. Бошқача айтганда, бошланғич ҳолат тўлқин функцияси ғойиб бўлишга «маҳкум» этилган, ўрнига охири ҳолат тўлқин функцияси тикланади. Бошланғич ҳолатни батамом тугаш вақти, яъни атомнинг уйғотилган ҳолатда яшаш вақти нурланиш давомида тўлқин «кесмаси» нинг вужудга келиш вақтини билдиради. Биз юқорида киритган τ вақт тўлқин «кесмаси» ни вужудга келиш вақтини характерлайди, яъни тўлқин «кесмаси» нинг узунлигини $\tau \cdot c$ га тенг деб қабул қилдик.

(5.16) тенгликни \hbar га кўпайтирамиз:

$$\Delta \omega \hbar \tau = \Delta E \tau = 2\pi \hbar. \quad (5.17)$$

Бу ерда ΔE — уйғонган сатҳ кенглиги, τ — атомнинг уйғонган ҳолатда яшаш вақти. (5.17) муносабат



40- расм. Уйғотилган сатҳлар кенглиги. Спектр чизиғининг кенглиги уни вужудга келтирувчи сатҳлар кенглигининг йиғиндисига тенг.

атомлар системасининг уйғонган ҳолатдан асосий ҳолатга ўтишида нурланувчи фотонлар ΔE оралиқ билан характерланувчи энергияга эга бўлишини кўрсатади. Фотон энергиясини аниқ дискрет қийматга эга эмаслиги уйғонган атомнинг яшаш вақтини чекли бўлишлиги билан боғлиқ. Нурланиш энергиясининг ΔE ноаниқлиги уйғонган атом энергетик сатҳининг чекли кенгликка эга бўлишини кўрсатади.

Уйғотилган атомларнинг ўртача яшаш вақти, одат-

да, уйғотиш энергиясининг катта қиймати учун кичиклашадди, яъни атом системаси қанча «кучли» уйғотилган (электрон қанча юқориноқ энергетик сатҳга кўчирилган) бўлса, система шунча кам вақт яшайди. Демак, сатҳларнинг юқориланиши билан атомнинг юқори энергетик сатҳлари кенглиги ортади. Бу ҳол 40- расмда тасвирланган. Атомнинг асосий ҳолати, яъни уйғонмаган ҳолати стационар ҳолат деб аталади. Атом стационар ҳолатда чексиз узоқ вақт яшайди. Шунинг учун, асосий ҳолат энергетик сатҳининг кенглиги $\Delta E = 0$. Уйғонган ҳолатларни атомнинг квазистационар ҳолатлари деб атаймиз. Квазистационар ҳолатлар квазидискрет энергетик сатҳларни пайдо қилади.

30- §. Ядро ҳаракатининг ҳиссаси

Ҳозиргача биз водород атомининг квантомеханик масаласига сферик-симметрияли марказий майдон таъсиридаги электрон ҳаракати сифатида қарадик. Бунинг учун ядро, яъни протон массасини чексиз катта деб ҳисобладик. Батдан протон массасини чекли деб қараш зарур бўлганда биз буни сунъий равишда амалга оширдик. Аслида атом учун Шредингер тенгламасини ёзишдан бошлаб ядро массасининг чекли эканлигини ҳисобга олишимиз керак эди. Бинобарин, ядронинг массаси чекли экан, у ҳолда электрон ва ядродан иборат системани уларнинг иккаласи учун умумий масса маркази атрафида ҳаракатланади деб қараш зарур. Ядронинг ҳаракатланиши сезиларли даражада (аммо кичик) атом спектрига таъсир кўрсатади.

Электроннинг координатасини \vec{r}_1 радиус-вектор, ядронинг эса \vec{r}_2 радиус-вектор орқали белгилаймиз. У ҳолда электрон ва ядродан иборат атом системаси учун Шредингер тенгламаси система энергиясининг ушбу классик ифодаси

$$\frac{1}{2m_e} p_1^2 + \frac{1}{2m_n} p_2^2 + V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) = E$$

га мос равишда қуйидаги

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_{\vec{r}_2}^2 + V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) - E \right\} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (5.18)$$

тўлқин тенглама орқали ифодаланади. Бу ерда m_e ва m_n — мос равишда электрон ва ядронинг массаси. Потенциал энергия V фақат электрон билан ядро орасидаги масофа-

нинг функцияси холос. (5.18) тенгламада, қулайлик учун, \vec{r}_1 ва \vec{r}_2 радиус-векторлардан бошқа ўзаро эркин иккита радиус-вектор: инерция маркази вектори \vec{r}_M ва ўзаро масофа вектори \vec{r} дан иборат ўзгарувчиларга ўтамыз.

$$r_M = \frac{m_e \vec{r}_1 + m_j \vec{r}_2}{m_e + m_j},$$

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1.$$

У ҳолда радиус-вектор бўйича дифференциаллаш оператори учун

$$\vec{\nabla}_{r_1} = \vec{\nabla}_r + \frac{m_e}{m_e + m_j} \vec{\nabla}_{r_M}, \quad \vec{\nabla}_{r_2} = -\vec{\nabla}_r + \frac{m_j}{m_e + m_j} \vec{\nabla}_{r_M}$$

ҳосил қиламыз, демак,

$$\frac{1}{m_e} \vec{\nabla}_{r_1}^2 = \frac{1}{m_e} \vec{\nabla}_r^2 + \frac{2}{m_e + m_j} \vec{\nabla}_r \cdot \vec{\nabla}_{r_M} + \frac{m_e}{(m_e + m_j)^2} \vec{\nabla}_{r_M}^2,$$

$$\frac{1}{m_j} \vec{\nabla}_{r_2}^2 = \frac{1}{m_j} \vec{\nabla}_r^2 - \frac{2}{m_e + m_j} \vec{\nabla}_r \cdot \vec{\nabla}_{r_M} + \frac{m_j}{(m_e + m_j)^2} \vec{\nabla}_{r_M}^2.$$

(5.18) тенгламадаги дифференциаллаш операторларини юқоридаги ифодалар билан алмаштириб, оддий ҳисоблашлардан сўнг Шредингер тенгласининг янги ўзгарувчилардаги қуйидаги кўринишига келамиз:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{\mu} \cdot \nabla_r^2 + \frac{1}{m_M} \nabla_{r_M}^2 \right) \right] + V(r) \right\} \psi(\vec{r}, \vec{r}_M) = E \psi(\vec{r}, \vec{r}_M). \quad (5.20)$$

Бу ерда

$$\nabla_r^2 = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}; \quad \nabla_{r_M}^2 = \frac{d^2}{dx_M^2} + \frac{d^2}{dy_M^2} + \frac{d^2}{dz_M^2},$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_j} = \frac{m_e + m_j}{m_e m_j}; \quad m_M = m_e + m_j,$$

μ — электрон ва ядродан иборат атом системасининг келтирилган массаси, m — электрон ва ядро массаларининг йиғиндиси (тахминан атом массасига яқин катталиқ). (5.20) тенгламанинг иккита мустақил қисмлардан иборат эканлиги яққол кўриниб турибди. Шунинг учун тўлқин функ-

цияни иккита функциянинг қуйидаги кўпайтмаси шаклида ифодалаймиз:

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_M) = \varphi(\vec{r}_M) \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_M \cdot \vec{r}_M} \psi(\vec{r}). \quad (5.21)$$

$\varphi(\vec{r}_M)$ функция массаси m га тенг бўлган инерция марказининг текис эркин ҳаракатини тавсифлайди, $\psi(\vec{r})$ функция эса электрон ва ядронинг нисбий ҳаракатини худди $V(|\vec{r}|)$ марказий майдонда μ массали зарранинг ҳаракати сифатида тавсифлайди. (5.21) ифодани (5.20) тенгламага қўйиб $\psi(\vec{r})$ функция учун

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - E_M - V(r)] \psi(\vec{r}) = 0 \quad (5.22)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Тенгламада E_M орқали инерция марказининг

$$E_M = \frac{\hbar^2 k_M^2}{2m}$$

га тенг кинетик энергияси белгиланган. Агар (5.22) тенгламада саноқ бошини инерция марказига кўчирсак, яъни электрон ва ядродан иборат системанинг оғирлик марказини ҳаракатсиз деб ҳисобласак, тенглама

$$\nabla^2 \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] \psi = 0 \quad (5.23)$$

кўринишга келади. Охириги тенглама массаси μ га тенг зарранинг марказий майдон $V(r)$ таъсиридаги ҳаракатини ифодаловчи Шредингер тенгламаси (4.101) га шаклан ўхшаш. Шунинг учун, (4.102) тенглама асосида ёзилган (5.3) тенгламани ечишдан олинган ҳамма натижалар m_e ни μ га алмаштириш билан ўз кучини сақлайди. Жумладан, водородсимон атомлар стационар ҳолатлари энергияси учун (5.14) формула ўрнига

$$\begin{aligned} E_n &= - \frac{\mu \cdot Z^2 \cdot e^4}{32\pi^2 \cdot \epsilon_0^2 \cdot \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = - \frac{m_e Z^2 \cdot e^4}{32\pi^2 \cdot \epsilon_0^2 \cdot \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_n}} = \\ &= - \frac{m_e Z^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \cdot \left(1 - \frac{m_e}{m_n}\right) = - RZ^2 \cdot \frac{h}{n^2} \quad (5.24) \end{aligned}$$

формулага келамиз. Бу формула шуни кўрсатадики, нурланиш спектри чизигининг частотаси ядро массасини чексиз деб (яъни ядрони ҳаракатсиз деб, чунки $m_{\text{я}} \rightarrow \infty$ да (5.18) да $\frac{1}{2m_{\text{я}}} \nabla_r^2 \psi$) ҳисобланган ҳолдаги қийматига

нисбатан ўзгарган бўлади, бошқача айтганда чизиқларнинг спектрдаги ўрни силжийди. Бу ўзгариш ядро массасига боғлиқ, албатта. Шунинг учун муайян атомнинг ҳар хил изотоплари учун нурланиш спектрининг чизиқлари бири-бирига нисбатан силжиган бўлади. Бу хил изотопик силжишлар ҳақида ўтган 28-§ да батафсил тўхталган эдик.

Атом нурланиш спектри чизиқларининг частотаси атом ядросининг массасига боғлиқлиги сабабли спектроскопия методлари билан атом оғирлигини ўлчаш учун имкон туғилади. Жумладан, мазкур боғлиқлик асосида оғир водороднинг, бир каррала ионлашган гелий атомининг мавжудлигини амалий исботлаш мумкин бўлди. Қислород атоми оғирлигига нисбатан химиявий методлар орқали аниқланган водород атоми оғирлигига водород атомининг табиий аралашмаси дейтерий ҳам ҳисса қўшади. Масс-спектроскопияда эса атомлар спектр чизиқларини атом оғирлиги бўйича даражалаш йўли билан атом оғирлиги аниқланиши сабабли тоза водород атомининг оғирлигини ўлчаш мумкин.

Спектроскопия методлари бўйича кузатишлар дейтерий изотопининг мавжудлигини тасдиқлади. Масалан, водород атоми спектрининг Бальмер сериясида (5.18) бўйича $m = 2$

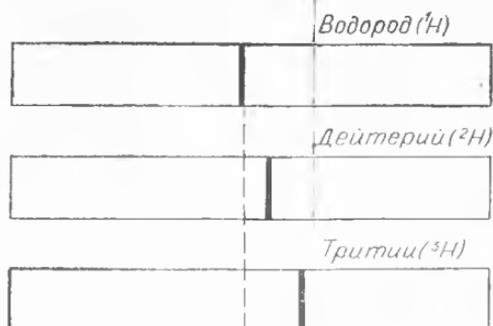
$$\nu_{\text{H}} = R_{\infty} \left(1 - \frac{m_e}{m_{\text{я}}}\right) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{1840}\right) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

чизиқлари қаторида ядро массасини икки марта ошишига тўғри келадиган

$$\nu_{\text{D}} = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{2 \cdot 1840}\right) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

чизиқлар ҳам экспериментда кузатилган. Шунингдек, тритий атоми спектрининг масалан, Бальмер сериясининг

$$\nu_{\text{T}} = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{3 \cdot 1840}\right) \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$



41- расм. Водород изотоплари учун спектр чизиқларининг силжиши.

чизиқлари янада кўпроқ силжиган бўлади. 41- расмда водород атоми ва унинг изотоплари учун спектр чизиқларининг инсбнй жойлашиш схемаси тасвирланган.

31- §. Энергетик сатҳларнинг Кулон айниши

Биз юқорида 27- § да водородсимон атом энергияси (5.13) ни аниқлашда Шредингер тенгламаси (5.2) да орбитал квант сони l ни нолга тенг деб ҳисоблаган эдик. Ҳозир орбитал квант сони l ни нолдан фарқли деб (5.2) тенгламани ечамиз. Бунинг учун (5.2) да қуйидагича алмаштиришлар ўтказамиз:

$$B = \frac{\mu \cdot Z \cdot e^2}{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}; \quad A = -\frac{2 \mu E}{\hbar^2}; \quad \rho = 2 \sqrt{A} \cdot r. \quad (5.25)$$

(Биз электрон массаси ўрнига келтирилган массани ёздик. Бу билан биз ядро ҳаракатини ҳам ҳисобга оламиз.) (5.25) ўзгартиришлар ўтказиб (5.2) тенгламадан

$$\frac{d^2 R_{nl}}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_{nl}}{d\rho} + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right\} R_{nl} = 0 \quad (5.26)$$

га келамиз. Стационар ҳолатлар тўлқин функциясига қўйиладиган чеклилик зарурий шартдан мазкур тенгла-

манинг $\rho \rightarrow 0$ ва $\rho \rightarrow \infty$ ечимлари монотон камаювчи функциялар бўлади. R_{nl} нинг асимптотик кўринишини аниқлайлик. Агар $\rho \rightarrow \infty$ бўлса, (5.26) тенгламада $1/\rho$ ва $1/\rho^2$ га пропорционал ҳадларни ташлаб юбориш мумкин. У ҳолда (5.26) нинг асимптотик кўриниши қуйидагича бўлади:

$$\frac{d^2 R_\infty}{d\rho^2} - \frac{1}{4} R_\infty = 0. \quad (5.27)$$

Демак, $\rho \rightarrow \infty$ ҳолида (5.26) нинг ечими

$$R_\infty = C_1 e^{-\rho/2} + C_2 e^{\rho/2}$$

функция кўринишида бўлади. Бизни қизиқтирувчи чексизликда нолга айланадиган ечимни биринчи ҳад ифодалайди. C_1 коэффициентни тўлқин функция R нинг умумий нормаловчи кўпайтувчисига қўшиб юбориш мумкин. Шунинг учун биз $C_1 = 1$ деб қабул қиламиз. Натижада (5.26) тенглама ечимининг асимптотик кўриниши учун

$$R_\infty = e^{-\rho/2} \quad (5.28)$$

ифодага эга бўламиз.

ρ нинг кичик қийматларида чеклилик зарурий шартни қаноатлантирувчи ечим кўринишини

$$\frac{d^2 R_0}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_0}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R_0 = 0 \quad (5.29)$$

тенгламадан қидирамиз. Биз $\rho \rightarrow 0$ да (5.26) да $-\frac{1}{4}$ ва $B/(\sqrt{A} \cdot \rho)$ ҳадларни ташлаб юбордик. (5.29) нинг $\rho \rightarrow 0$ да чеклилик шартини қаноатлантирувчи ечимини

$$R_0 = \rho^S$$

кўринишда қидирамиз. У ҳолда (5.29) дан

$$S(S-1) + 2S - l(l+1) = 0$$

муносабатга келамиз. Охирги тенгликни

$$S^2 + S - l(l+1) = 0$$

кўринишда ёзиб тенгламани қаноатлантирувчи S нинг қийматларини аниқлаймиз:

$$S_{1,2} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1)} = -\frac{1}{2} \pm \left(l \pm \frac{1}{2}\right) = \begin{cases} l \\ -l-1 \end{cases}$$

Демак, R_0 учун

$$R_0 = C_3 \rho^l + C_4 \rho^{-l-1}$$

ифодага эга бўламиз. $C_4 = 0$ деб ҳисоблашимиз керак, акс ҳолда $\rho \rightarrow 0$ да R_0 ечим чеклилик шартини қаноатлантирмайди. Бу ерда ҳам $C_3 = 1$ деб R_0 учун

$$R_0 = \rho^l \quad (5.30)$$

кўринишни ҳосил қиламиз. Радиал функциянинг бу икки чегаравий кўринишини эътиборга олган ҳолда (5.32) нинг ечимини

$$R_{nl} = R_0 R_\infty U(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} U(\rho) \quad (5.31)$$

кўринишда ёзамиз. (5.31) ни (5.26) га қўйиб $U(\rho)$ учун

$$\rho \frac{d^2 U}{d\rho^2} + [2(l+1) - \rho] \frac{dU}{d\rho} + \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 \right) U = 0 \quad (5.32)$$

тенгламага келамиз.

Радиал ечимнинг $\rho \rightarrow 0$ ва $\rho \rightarrow \infty$ даги асимптотаси (5.30) ва (5.28) каби характерга эга бўлиши учун (5.31) даги U функция чексизликда $\exp(\rho/2)$ дан секин ўсиши, $\rho = 0$ да эса нолга ёки ўзгармасга тенг бўлиши керак. Шунинг учун (5.32) тенгламанинг ечимини

$$U = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (5.33)$$

қатор шаклида излаймиз. (5.33) ни (5.32) га қўйиб

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - k \right) a_k \rho^k + \sum_{k=1}^{\infty} [2(l+1) + (k+1)] a_k \rho^{k-1} = 0$$

муносабатга келамиз. Иккинчи йиғиндида йиғувчи индекс k ни $k+1$ га алмаштириб

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - k \right) a_k + (k+1)(2l+2+k)a_k + 1 \right\} \rho^k$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Тенглик бажарилиши учун қатор коэффициентлари

$$a_{k+1} = \frac{k + l + 1 - \frac{B}{\sqrt{A}}}{(k + 1)(k + 2l + 2)} \cdot a_k \quad (5.34)$$

рекуррент формулани қаноатлантириши керак. Рекуррент формулани қуйидаги нисбат кўринишида ёзамиз:

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{1}{k+1} (1 - \sigma_k), \quad \sigma = \frac{l + 1 + \frac{B}{\sqrt{A}}}{k + 2l + 2}. \quad (5.35)$$

Индекс k нинг бирор етарлича катта қийматини k_0 орқали белгилаб

$\exp\{(1 - \sigma_{k_0})\rho\}$ функция

$$e^{(1 - \sigma_{k_0})\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(1 - \sigma_{k_0})^k}{k!} \rho^k \quad (5.36)$$

қаторининг $k + 1$ -ҳад коэффициентининг k -ҳад коэффициентига нисбатини ёзайлик

$$\frac{(1 - \sigma_{k_0})^{k+1}}{(k+1)!} : \frac{(1 - \sigma_{k_0})^k}{k!} = \frac{1}{k+1} (1 - \sigma_{k_0}). \quad (5.37)$$

Агар $k \rightarrow \infty$ да $\sigma_k \rightarrow 0$ ни, яъни $(1 - \sigma_k) > (1 - \sigma_{k_0})$ эканлигини эътиборга олсак, k нинг k_0 дан катта қийматларидан бошлаб

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{1}{k+1} (1 - \sigma_k) > \frac{1}{k+1} (1 - \sigma_{k_0})$$

тенгсизлик ўринли бўлиши келиб чиқади. Демак, $k = k_0$ дан бошлаб (5.33) қатор ҳадлари (5.36) экспоненциал функциядан тезроқ ўсар экан. (5.36) функцияда қатнашувчи σ_k ни исталганча кичик сонга тенг қилиб танлаш мумкин, у ҳолда агар (5.33) кўринишдаги U ни чексиз кўп ҳадли қатор деб қарасак (5.31) функция $\rho \rightarrow \infty$ чексизликка айланади, яъни радикал тўлқин функциянинг чеклиги бузилади. Бу ҳолдан қутулиш учун (5.33) қаторни чекли даражали полиномга айланишини талаб қилиш керак бўлади. (5.34) рекуррент формуладан кўриниб турибдики, (5.33)

қаторни k -даражали полиномга айланиши, яъни $a_k \neq 0$; $a_{k+1} = 0$; $a_{k+2} = 0$; ... бўлиши учун

$$k + l + 1 - \frac{B}{\sqrt{A}} = 0$$

бажарилиши керак. Бу тенгликдан

$$n = k + l + 1 = \frac{B}{\sqrt{A}} = \frac{\mu \cdot Z \cdot e^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar} \cdot \frac{1}{\sqrt{-2\mu E}} \quad (5.38)$$

шартга келамиз. (5.38) формуладан водородсимон атом энергетик сатҳи учун

$$E_n = - \frac{\mu \cdot Z^2 \cdot e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = - RZ^2 \frac{h}{n^2} \quad (5.39)$$

ифодага келамиз. Бу ерда n — бутун сон бўлиб аввалгидек бош квант сони деб аталади. Бош квант сони n қуйидаги бутун сон қийматлар қабул қилувчи

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

орбитал квант сонидан ва

$$n_r = k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

радиал квант сонидан бир бирликка каттадир. (5.38) га биноан бош квант сони

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

каби мусбат бутун қийматларга тенг.

Шундай қилиб, умумий ҳолда ҳисоблашлар кўрсатадики, Кулон майдонида электрон энергияси фақат бош квант сонига боғлиқ бўлади. Электрон энергияси орбитал ва радиал квант сонларининг ҳар бирига алоҳида-алоҳида мутлақо боғлиқ эмас, уларнинг йиғиндисига, яъни $n = n_r + l + 1$ га боғлиқ. Биз юқорида кўрган сферик симметрияли ечимлар ($l = 0$ ҳоли) учун $n = n_r + 1$. (5.38) дан кўрамизки $n = 1$ да $l = n_r = 0$ бўлиши керак. Бош квант сонининг бирдан катта ҳар қандай қийматларида эса l бўйича фарқланувчи ҳолатларнинг

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1 \quad (5.40)$$

таси мумкин. Ушбу n та ҳолатларнинг ҳаммасининг энергияси битта қиймат (5.39) га тенг.

Агар биз, тўлқин функция умумий ҳолда $\Psi_{nlm_l} = R_{nl} Y_{lm_l}$ каби n , l , m_l квант сонларига алоҳида-алоҳида боғлиқ эканлигини эсласак n нинг маълум бир қиймати билан характерланувчи энергия сатҳига l бўйича n та ва ҳар бир l учун m_l бўйича ($-l$) дан $(+l)$ гача ўзгарувчи тўлқин функциялар тўғри келади, бошқача айтганда n -нчи энергия сатҳига

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m_l=-l}^{+l} m_l = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (5.41)$$

ҳолатлар мос келади.

m_l квант сони бўйича айниш ҳар қандай марказий куч майдони учун характерлидир. Бу ҳол координата бошидан ўтувчи ҳар қандай йўналишларнинг тенг ҳуқуқлилигини билдиради. Орбитал квант сони l бўйича айниш фақат Кулон майдони учунгина хосдир. Бошқа хил марказий симметрик майдонлар учун l бўйича айниш кузатилмайди, яъни n нинг берилган қийматида энергия сатҳлари n та l лар қийматида хос сатҳчаларга ажралади. Агар бундай система марказий симметрияни йўқотувчи ташқи майдон (масалан, магнит майдон) таъсирида жойлаштирилган бўлса, m_l бўйича айниш ҳам йўқолади, яъни ҳар бир энергетик сатҳ n^2 сатҳчаларга ажралади.

32- §. Водородсимон атомнинг тўлқин функцияси

Тўлқин функцияга қўйилган чеклилик шартидан (5.32) тенгламанинг ечимини чекли даражали полином бўлиши келиб чиқади. (5.38) ни эътиборга олган ҳолда (5.32) тенгламани қўйидагича ёзамиз:

$$S \frac{d^2 U}{d\rho^2} + (2l+2-\rho) \frac{dU}{d\rho} + (n-l-1)U = 0. \quad (5.42)$$

Лагеррнинг қўшма полиномини қаноатлантирувчи қўйидаги

$$\rho \frac{d^2 L_a^P(\rho)}{d\rho^2} + (P+1-\rho) \frac{dL_a^P(\rho)}{d\rho} + (q-P)L_a^P(\rho) = 0$$

тенгламани (5.42) билан таққослаб (5.42) нинг ечими Лагерр полиноми эканлигига ишонч ҳосил қиламиз. Демак,

водородсимон атом тўлқин функциясининг радиал қисми (5.31) га биноан

$$R_{nl}(\rho) = N_P^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho). \quad (5.43)$$

Бу ерда N — нормаловчи коэффициент. У тўлқин функциянинг радиал қисми учун нормалаш шарти (4.41) га биноан аниқланади, яъни

$$\int_0^{\infty} R_{nl}(r) r^2 dr = \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{2\sqrt{A}} \right)^3 N^2 \rho^{2l} e^{-\rho} \left[L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \right]^2 \rho^2 d\rho = 1. \quad (5.44)$$

Агар $\sqrt{A} = B/n$ ни эътиборга олиб B учун (5.25) даги ифодасини қўлласак,

$$\frac{1}{\sqrt{A}} = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{\mu Z e^2} n = \frac{a_1}{Z} \cdot n$$

га келамиз. Бу ерда a_1 — массаси μ га тенг зарранинг Кулон майдонидаги биринчи Бор орбитаси — (3.28) формулада $n = 1$ бўлган ҳол. (5.44) ни ҳисоблаш учун $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ полиномнинг яратувчи функциясидан фойдаланиш керак.

Шундай қилиб, радиал функция учун

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{n^4[(n+l)!]^3}} \left(\frac{Z}{a_1} \right)^{3/2} \left(\frac{2\rho}{n} \right)^l e^{-\rho/n} L_{n+l}^{2l+1}(2\rho/n) \quad (5.45)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бу ерда

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2}, \quad \rho = \frac{Z}{a_1} r, \quad L_{n+l}^{2l+1}(r) = \\ &= r^{-(2l+1)} \frac{d^{(n-l-1)}}{dr^{(n-l-1)}} (r^{n+l}). \end{aligned}$$

Юқорида 26- § да аниқланган шар функцияларни ҳисобга олган ҳолда водород ва водородсимон атомларнинг қуйида нормаланган хусусий функциясига келамиз:

$$\begin{aligned} \Psi_{nlm_l} &= R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi) = e^{im_l \varphi} \sqrt{\frac{(2l+1)(n-l-1)!(l-m_l)!}{\pi n^4(l-m_l)!(n+l)!^3}} \times \\ &\times P_l^{m_l}(\cos \vartheta) \cdot \left(\frac{Z}{a_1} \right)^{3/2} \left(\frac{2\rho}{n} \right)^l e^{-\rho/n} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2\rho}{n} \right). \quad (5.46) \end{aligned}$$

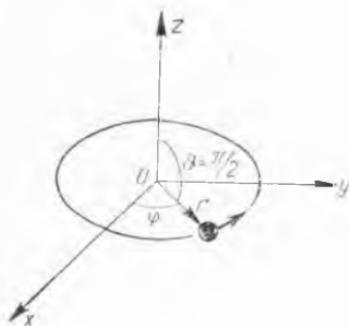
Тўлқин функциянинг охириги ифодасида учта параметр, яъни учта квант сонлари n , l , m_l мавжуд. Лекин шу ҳо-

латга тўғри келадиган энергиянинг хусусий қиймати, яъни (5.13) ифода фақат n га боғлиқ. Шунинг учун ҳар бир энергия сатҳини, (5.41) га кўра, n^2 тўлқин функция тавсифлайди.

33- §. Электроннинг фазовий тақсимоти

Бор моделига кўра маълумки, электрон ядро атрофида турғун орбиталар айланаси бўйлаб ҳаракатланади. Бор тасвирига биноан, электронни ҳар доим ядродан $r = a_1 n^2$ масофада қайд қилишимиз мумкин (n — бош квант сони, a_1 — Бор орбитаси радиуси). Электроннинг айланиш текислиги $\vartheta = 90^\circ$ ни ташкил қилади. Азимут бурчак φ вақт бўйича ўзгаради. 42- расмда худди шу водород атомининг Бор модели келтирилган.

Водород атомининг квант механикасига кўра эса r , ϑ , φ катталикларни аниқ бирор қийматларга тенг бўлиши эҳтимолий характерга эгадир. Фазонинг ҳар хил соҳасида электроннинг қайд қилиниши эҳтимолийдир. Водород атоми электроннинг ҳолатини тавсифловчи хусусий функция $\psi = R \cdot \theta \cdot \Phi$ дан иборат. Хусусий функция модулининг квадрати $|\psi|^2$ ядрога нисбатан электроннинг тақсимланишини беради. $|\psi|^2$ вақтга боғлиқ эмас ва фазо бўйлаб фазонинг ҳар бир соҳасига нисбатан қатъий қиймат қабул қилган ҳолда ўзгаради. Шунинг учун, электроннинг массасини ва зарядини атом ядроси атрофидаги фазода тақсимлангандек тасвирлаш ҳам мумкин. У ҳолда электрон массаси ва зарядининг фазонинг ҳар бир нуқтасидаги зичлиги фазонинг худди шу нуқтасида электроннинг мавжуд бўлиш эҳтимолига пропорционал бўлади. Шу сабабдан, баъзан, электрон булутида (масса ва заряд каби) зичлик тақсимоти ҳақида фикр юритилади.



42- расм. Водород атомида электрон ҳаракатининг Бор тавсифи.

Электрон булутида зичлик тақсимотининг физикавий маъносини қуйидагича тушунишимиз мумкин. Фараз қилайлик, ай-

нан бир хил ҳолатдаги жуда кўп сонли водород атомларининг ҳар бирида электроннинг ўрнини аниқлаш бўйича ўлчашлар ўтказилсин. У ҳолда, фазонинг у ёки бу элементида электроннинг қайд қилинишлари сони фазонинг шу элементида электроннинг мавжуд бўлиш эҳтимолига пропорционал бўлади. Электрон булутида зичлик тақсимоти ёки эҳтимоллик зичлиги шундай физикавий талқинга эга ва худди шундай тажриба орқали текшириб кўрилиши мумкин.

Марказий куч майдонида ҳаракат қилаётган электроннинг фазодаги ўрнини характерловчи эҳтимоллик зичлигини қуйидагича ёзишимиз мумкин:

$$P = |\psi|^2 = |R_{nl}|^2 \cdot |\theta_{lm_l}|^2 \cdot |\Phi_{m_l}|^2. \quad (5.47)$$

Азимут бурчаги φ нинг бирор маълум қийматида электроннинг қайд қилиниш эҳтимоли, яъни эҳтимолликнинг азимутал зичлигини ўзгармас эканлигини ва φ га боғлиқ эмаслигини осон кўрсатиш мумкин. Φ нинг (4.124) ифодасига кўра

$$|\Phi_{m_l}|^2 = \Phi_{m_l} \cdot \Phi_{m_l}^* = \frac{1}{2\pi} e^{im_l \varphi} \cdot e^{-im_l \varphi} = \frac{1}{2\pi}. \quad (5.48)$$

Ҳосил бўлган натижа кўрсатадики, z ўқига нисбатан электрон учун эҳтимоллик зичлиги симметрик бўлиб, унинг квант ҳолатига боғлиқ эмас, яъни электрон қандай ҳолатда бўлмасин қайд қилиш эҳтимоллиги φ нинг ҳар қандай қийматида бир хил.

Электрон булутининг радиал йўналиш бўйича ($l = 0$ ҳол) ёки (умумий ҳол) шар қатламининг ($r, r + dr$) қалинлиги бўйича тақсимланишини кўрайлик. Агар dV_r орқали шар қатлами ҳажмини белгиласак, dV_r учун

$$dV_r = 4\pi r^2 dr$$

ифодага келамиз. У ҳолда ядродан r масофада ($r, r + dr$) қатламда электроннинг мавжуд бўлиш эҳтимоллиги

$$D = 4\pi r^2 |R_{nl}|^2 \quad (5.50)$$

функция билан характерланади. Зичликнинг радиал йўналиш бўйича тақсимланиши эса (5.14) га кўра

$$4\pi r^2 |R_{n_0}|^2 = 4\pi r e^{-kr} \sum_{n=1}^{\beta/2k} a_n r^n \quad (5.51)$$

ифода билан тавсифланади. Водород атоми асосий ҳолати, яъни $n = 1$ учун радиал тўлқин функцияни аниқлайлик. n нинг бу қийматини (5.12) формулага қўйсак, $k = \beta/2$ га келамиз. a_1 нинг қийматини (4.111) шартга кўра ёки (5.45) дан l га ноль, n га бир қиймат бериб аниқлашимиз мумкин. $k = \beta/2$ ни (5.11) га қўйсак, (5.14) қаторнинг a_2 дан бошлаб ҳамма ҳадларининг нолга айланишини кўраимиз. Агар, осонлик учун $a_1 = 1$ деб олсак,

$$R_{10} = e^{-kr} = e^{-\beta r/2}. \quad (5.52)$$

Бу ерда

$$k = \frac{\beta_n}{2} = \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{m_e c}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\alpha}{\Lambda},$$

Λ — электроннинг Комптон тўлқин узунлиги ((2.17) формулага қаранг) α — нозик структура доимийси.

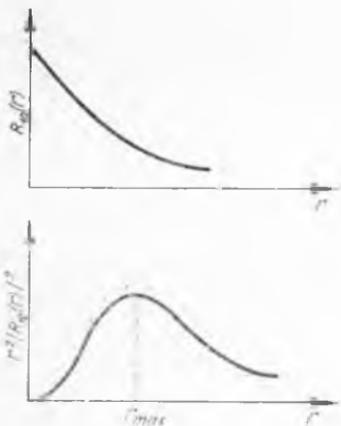
Шундай қилиб, водород атомининг асосий ҳолати функцияси (5.52) экспонента кўринишида бўлиб, максимуми координата бошига, яъни ядро жойлашган соҳага тўғри келади. Классик нуқтаи назардан электрон координата бошидагина энг кичик энергияга эга бўлади. Квант меха-

никасига биноан электроннинг радиал йўналишда мавжуд бўлиш эҳтимоли (5.52) ва (5.51) га кўра $P \approx r^2 e^{-\beta r}$ га тенг экан, қуйидаги 43-расмда (5.52) ва $r^2 |R_{10}|^2$ функцияларнинг графиги келтирилган.

Водород атомининг асосий ҳолатида электроннинг фазовий тақсимотини характерловчи $R_{10}^2 r^2$ функция

$$R_{10}^2 r^2 = r^2 e^{-\beta_n r} \quad (5.53)$$

координата бошида r^2 каби нолга айланади ва r нинг катта қийматларида эса экспоненциал равишда нолга интилади. (5.53) функциянинг



43-расм. Водород атомининг асосий ҳолати учун радиал тўлқин функцияси ва r , $r + dr$ фазовий сфералар соҳа-сида электроннинг мавжуд бўлиш эҳтимолиги.

максимум қийматига тўғри келувчи r ни аниқлайлик. Бунинг учун (5.53) функциянинг r бўйича биринчи ҳосиласини нолга тенглаштирамиз

$$2re^{-\beta_n r} - \beta_n r^2 e^{-\beta_n r} = 0.$$

Демак, асосий ҳолат функцияси ўзининг максимумига r нинг

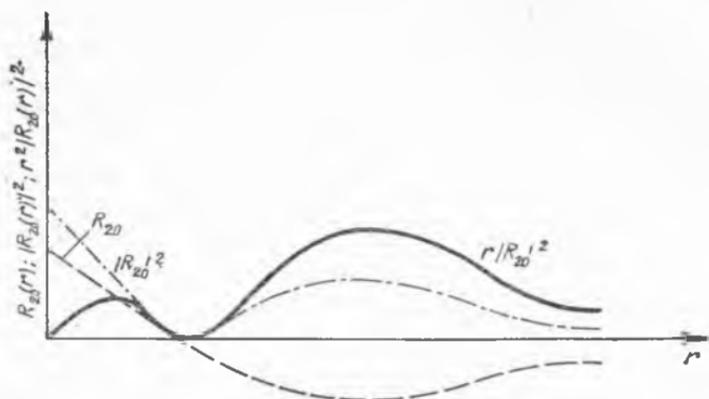
$$r_{1max} = \frac{2}{\beta_n} = 4\pi\epsilon_0 \frac{\Lambda}{\alpha} \quad (5.54)$$

га тенг қийматида эришади. Ҳосил бўлган ифодани (3.28) орқали берилган Бор орбитаси радиуси формуласининг $n = 1$ ҳоли билан солиштирсак, уларнинг бир-бирига тенг эканлигига ишонч ҳосил қиламиз. Шунинг учун ҳам, (5.54) ифодага тенг $a_1 = r_{1max}$ катталик водород атомининг биринчи Бор орбитаси деб аталади. (Аслида, юқорида таъкидлаганимиздек, атомларда электронларнинг ҳеч қандай орбитаси бўлиши мумкин эмас.) Сон жиҳатдан биринчи Бор орбитаси асосий ҳолатдаги атомининг ўлчамларини беради.

Водород атомининг биринчи уйғонган ҳолати ($n = 2$) учун тўлқин функциясини кўрайлик. $n = 2$ да $k = \beta_n / 4$ га тенг. (5.9) ёки (5.14) қатор эса иккинчи ҳадида тугайди. Шунинг учун (5.14) радиал тўлқин функция қуйидаги кўринишга эга бўлади:

$$R_{20}(r) = e^{-\frac{\beta_n r}{4}} \left(1 - \frac{\beta_n r}{4}\right). \quad (5.55)$$

Қуйидаги 44-расмда $R_{20}(r)$, $|R_{20}(r)|^2$ ва $|R_{20}(r)|^2 r^2$ функциялар тасвирланган. Жумладан, $|R_{20}(r)|^2 r^2$ функция ядро атрофидаги радиуси r га тенг бўлган фазовий сферада электроннинг мавжуд бўлишини характерлайди. 44-расмдан кўрамизки, $n = 2$ ҳолида электроннинг бу тақсимланиши $n = 1$ ҳолидагига қараганда етарлича мураккаб кўринишга эга. n квант сонининг катта қийматларига тўғри келувчи тақсимланишлар янада мураккаблашади. Лекин, ҳамма ҳол учун тақсимланишларнинг битта умумий хоссаси мавжуд. У ҳам бўлса, [электроннинг ядрога жуда яқин ёки жуда узоқ соҳаларда мавжуд бўлиш эҳтимолининг кичиклигидир.



44-расм. Водород атомининг биринчи уйғотилган ҳолати учун радиал тўлқин функция, радиал йўналишда эҳтимоллик зичлиги ва r , $r + dr$ сферик қатлам соҳасида электроннинг қайд этилиш эҳтимоллиги.

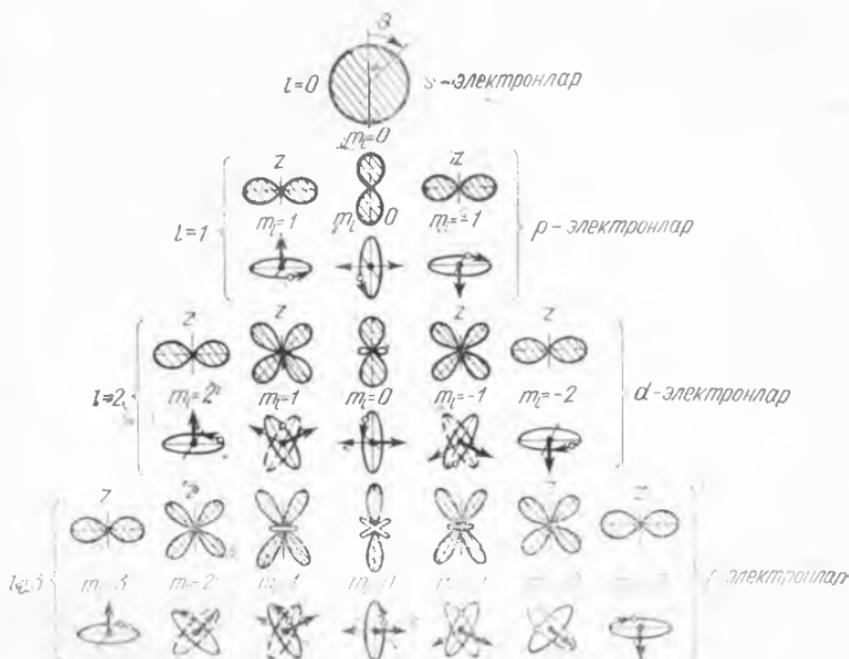
Умумий ҳолда радиал функция (5.45) ифода ёки (5.31) га биноан

$$R_{nl}(r) = \rho^l e^{-\rho/2} \sum_{k=0}^{n-l-1} a_k \rho^k, \quad \rho = 2 \sqrt{-\frac{2m_l E}{\hbar^2}} r$$

қатор кўринишида тасвирланади.

Тўлқин функциянинг зенит бурчаги ϑ га боғлиқлигини тавсифловчи θ функция l ва m_l квант сонларининг $l = m_l = 0$ дан ташқари ҳамма қийматларида ϑ бурчакнинг қийматига боғлиқ бўлади. $l = m_l = 0$ га мос S -ҳолат учун $|\theta|^2$ эҳтимоллик зичлиги ўзгармас ва $1/2$ га тенг. Шу сабабдан S -ҳолат учун ядродан ҳамма йўналишлар бўйича муайян r масофада электрон зичлиги бир хил, яъни марказида ядро жойлашган радиуси r га тенг сфера бўйлаб электрон бир хил тақсимланган. Бу ҳол 45-расмда ($l = 0$) тасвирланган.

Квант сонлари l ва m_l нинг бошқа қийматларида электрон тақсимотининг зенит бурчаги ϑ га боғлиқлиги мураккаб тасвирга эга бўлади. Ҳисоблашлар кўрсатадики, n ва l нинг муайян қийматларида m_l нинг мумкин бўлган ҳамма



45- расм. Ўзгармас радиал зичликда азимутал эҳтимоллик зичлиги электрон булuti зичлигининг аксиал-симметрик тақсимланиши

$(-l, -l + 1, \dots, +l)$ қийматлари учун натижавий эҳтимоллик ҳам θ га боғлиқ эмас, яъни

$$\sum_{m_l=-l}^{+l} |\theta(\theta)|^2 = \text{const.}$$

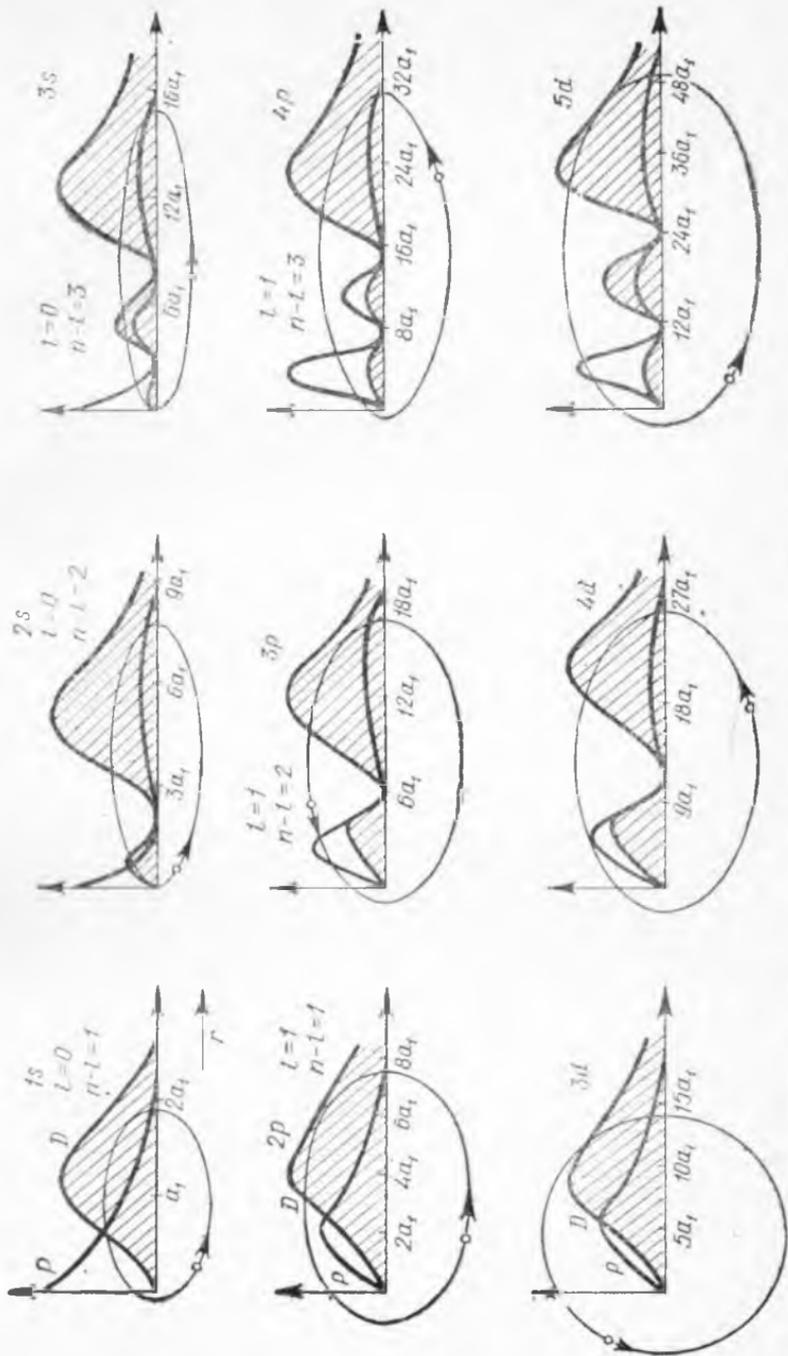
n ва l квант сонлари бир хил ҳолатларни электроннинг эквивалент ҳолатлари деб аталади ва уларнинг электрон булутларининг йиғиндиси сферик-симметрияли электрон булутини бериши II жадвалдан кўриниб турибди.

Ядро атрофидаги фазода эҳтимоллик зичлиги тақсимоти ҳақида тўла тасаввурга эга бўлиш учун R^2 , θ^2 ва Φ^2 лар тақсимотларни йиғиш керак. Биз кўрдикки, $\Phi^2 = \text{const}$ ва фазовий тақсимотида R^2 ва θ^2 асосий аҳамиятга эга. 46- расмда бош квант сонининг $n = 1, 2, 3, 4$,

Эквивалент электронлар булутининг сферик симметриклиги

	l	m_l	$\theta^2 m_l$	$\sum \theta ^2$
	0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
p	1	± 1 0	$\frac{3}{4} \sin^2 \vartheta$ $\frac{3}{2} \cos^2 \vartheta$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \frac{3}{2}$
d	2	± 2 ± 1 0	$\frac{15}{16} \sin^4 \vartheta$ $\frac{15}{4} \sin^2 \vartheta \cos^2 \vartheta$ $\frac{5}{8} (3 \cos^2 \vartheta - 1)^2$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} \frac{5}{2}$

5 қийматлари учун орбитал квант сони $l = 0, 1, 2$ га тенг ҳолатларда эҳтимолликнинг фазовий зичлиги P ва радиал зичлиги D тасвирланган. Расмдан кўрамизки, фазовий ва радиал зичлик бир-бирига мутлақо ўхшаш эмас. Масалан, D зичлик координата бошида, яъни ядро жойлашган соҳада ҳамма ҳолатларда ҳам нолга тенг ва у $n - l$ марта максимумга эришади. Бир максимумдан иккинчисига нолга тенг минимум орқали ўтади. Берилган n учун l нинг қабул қиладиган $0, 1, \dots, n - l$ қийматларининг камайишида максимумлар сони мос равишда ўсади. Демак, муайян n учун l нинг қабул қилувчи қийматлари сони қанча бўлса, максимумлар сони ҳам энг кўпи билан шунча, яъни n та. Масалан, расмда $n = 3$ учун $l = 0, 1, 2$ га тенг ҳолларда D нинг мос равишда, 3 та, 2 та ва 1 та максимумларга эришиши тасвирланган. Шу билан бирга кўрамизки, максимумлар сонини ошиши билан биринчи максимумнинг ядрога яқинлашиши ва кичиклашиши ҳамда охириги максимумнинг эса, аксинча, ядродан узоқлашиши ва катталлашиши кузатилади. Классик нуқтани назардан бу ҳол,



46-расм. Водород атомининг $n = 1, 2, 3, 4, 5$ ва $l = 0, 1, 2$ ҳолатлари учун радиал йўналишида эҳтимолилик зичлиги ва сферик катлам соҳасида кайд этилиш эҳтимолиниги.

орбиталарнинг айлана шаклидан чўзилиб борувчи эллипс шаклига ўтиб боришини акс эттиради. Электрон эллипс шаклидаги орбита бўйлаб ҳаракатланишда қисқа вақт давомида ядрога жуда яқин келиши ва сўнгра узоқ вақт давомида ядродан катта масофада бўлиши мумкин.

Электрон зичлигининг тақсимланиши химия учун катта аҳамиятга эга. У ёрдамида молекулалардаги қўшни атомлар ўзаро таъсирининг характери, йўналган валентлик назариясида химиявий боғланишларнинг вужудга келиши ва ҳоказолар тушунтирилади.

ҲАРАКАТ МИҚДОРИ ВА МАГНИТ МОМЕНТЛАРИ

34- §. Ҳаракат миқдори (импульс) моменти ва унинг проекциясининг квантланиши

Айрим зарранинг ёки бир бутун ёпиқ системанинг энг муҳим характеристикаларидан бири ҳаракат миқдори (импульс) моментиدير. Ҳамма йўналишлар ўзаро тенг кучли бўлган изотроп фазо бўйлаб ёпиқ система ёки яккаланган зарра ҳаракатида уларнинг ҳаракат миқдори моменти сақланади. Ташқи майдонда ҳаракатланаётган система ёки зарранинг ҳаракат миқдори моменти эса умуман сақланмайди. Лекин, айрим ҳолда, масалан, марказий симметрик майдонда импульс моменти сақланиши мумкин. Чунки марказий симметрик майдонда марказдан чиқувчи ҳамма йўналишлар ўзаро бир хил бўлади ва шунинг учун системанинг бундай майдондаги ҳаракатида майдон марказига нисбатан импульс моменти сақланади. Худди шунингдек, бирор ўққа нисбатан симметрик майдонда импульс моменти-нинг симметрия ўқиға проекцияси сақланади.

Марказий симметрик майдонлар кўпинча атом системаларида учрайди. Биз юқорида водород ва водородсимон атомларда ягона электрон ядро Кулон кучларининг марказий майдонида ҳаракатланишини кўрган эдик. Мураккаб атомларда электронларга таъсир кўрсатувчи электр майдони, қатъий айтганда, марказий симметрияға эга бўлмайди, чунки ҳар бир электрон марказий ядро майдони билан бирға бошқа электронлар вужудға келтирган майдон таъсирида ҳам ҳаракат қилади. Аммо биринчи яқинлашишда бу ҳолда ҳам, муайян электронға таъсир этувчи бошқа электронлар ва ядро электр майдонини сферик симметрияли деб қараш мумкин. Шундай қилиб, классик физикадагидек квант механикасида ҳам импульс моменти-нинг сақланиш қонуни муҳим роль ўйнайди.

Импульс моменти. Классик механикада зарранинг ҳаракат миқдори моменти деб куч (майдон) марказидан зар-

рагача ўтказилган радиус-вектор \vec{r} нинг зарра импульсига (ҳаракат миқдорига) вектор кўпайтмаси тушунилади, яъни

$$\vec{M} = [\vec{r}, \vec{p}] = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}. \quad (6.1)$$

Бу ерда \vec{p} — зарра импульси, p_x, p_y, p_z — унинг мос равишда x, y, z координата ўқларидаги проекциялари. Квант механикасида қабул қилингандек, (6.1)ни оператор кўринишида қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\hat{M} = [\hat{r}, \hat{p}],$$

бунда \hat{r} — координаталар (x, y, z) оператори, \hat{p} — импульс оператори. Унинг классик проекцияларига мос қўйилувчи проекциялари — $i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$, $-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$. Импульс momenti оператори проекцияларининг ошкор кўринишидаги ифодаси қуйидагича ёзилади:

$$\begin{aligned} \hat{M}_x &= y \hat{p}_z - z \hat{p}_y = i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right); \\ \hat{M}_y &= z \hat{p}_x - x \hat{p}_z = i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ \hat{M}_z &= x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (6.2)$$

Бу тенгламаларда Декарт координаталари x, y, z дан, улар билан

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \vartheta \end{aligned}$$

ифодалар орқали боғланган сферик координаталар r, ϑ, φ ларга ўтамиз. Масалан,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi} &= \frac{\partial x}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \cdot \frac{\partial}{\partial z} = -r \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x} + \\ &+ r \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial y} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}, \end{aligned}$$

худди шу йўсинда импульс моменти проекцияларининг сферик координаталардаги ифодасини аниқлашимиз мумкин:

$$\begin{aligned}\hat{M}_x &= +i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\vartheta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right), \\ \hat{M}_y &= +i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\vartheta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right), \\ \hat{M}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}.\end{aligned}\quad (6.4)$$

Оператор \hat{M}_z нинг кўриниши импульс проекцияси операторларининг Декарт координаталаридаги кўринишига жуда ўхшаш. Бунинг ажабланарли жойи йўқ, чунки классик механикада φ ва M_z лар умумлашган координата ва умумлашган импульс вазифасини бажаради. Биз ҳосил қилган ифода худди умумлашган импульс M_z нинг умумлашган координатадаги тасвири каби ифодадир.

Энди ҳаракат миқдори моментининг квадрати учун ифодани аниқлаймиз. Классик механикада импульс моментининг квадрати унинг координата ўқларидаги проекциялари квадратининг йиғиндисига тенг:

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2.$$

Квант механикасида эса бу тенгликка тегишли операторларни боғловчи формула сифатида қараш керак, яъни

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2.$$

(6.3) ни эътиборга олган ҳолда импульс моментининг квадрати учун

$$\hat{M}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] = -\hbar^2 \nabla_{\vartheta\varphi}^2 \quad (6.5)$$

ифодани ҳосил қиламиз.

Импульс моментининг квантланиши. Импульс моменти ва унинг проекциясини квантлаш қоидаси момент квадрати ва момент проекциялари операторларининг хусусий қийматларини аниқлашга келтирилади. Импульс моменти проекциялари орасидаги коммутация қоидасини, яъни

$$\begin{aligned}
 \hat{M}_y \hat{M}_z - \hat{M}_z \hat{M}_y &= i\hbar \hat{M}_x, \\
 \hat{M}_z \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}_z &= i\hbar \hat{M}_y, \\
 \hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x &= i\hbar \hat{M}_z,
 \end{aligned}
 \tag{6.6}$$

муносабатларни осонлик билан исботлаш мумкин. Коммутация қондасига биноан момент проекцияларининг операторлари ўзаро коммутатив эмаслигини кўрамиз. Демак, уларни бир вақтда ўлчаш мумкин эмас. Квант механикасида иккита A ва B катталиқ бир вақтда аниқ қийматга эга бўлиши учун уларнинг операторлари коммутатив бўлиши зарур, яъни $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$.

Айни вақтда импульс моменти проекциясининг ҳар бири момент квадрати билан коммутативдир:

$$\begin{aligned}
 \hat{M}_x \hat{M}^2 - \hat{M}^2 \hat{M}_x &= 0, \\
 \hat{M}_y \hat{M}^2 - \hat{M}^2 \hat{M}_y &= 0, \\
 \hat{M}_z \hat{M}^2 - \hat{M}^2 \hat{M}_z &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{6.7}$$

(6.7) нфодалар импульс моментининг квадрати билан шу момент проекцияларининг исталган бирини бир вақтда аниқ ўлчаш мумкинлигини кўрсатади. Шунинг учун момент квадрати билан унинг проекцияларидан бирини кўрамиз. Импульс моментининг квадрати учун хусусий қийматларни аниқловчи

$$\hat{M}^2 \psi = M^2 \psi \tag{6.8}$$

тенгламанинг ечими $\psi = \psi(\vartheta, \varphi)$ функция бўлади. (6.5) га биноан (6.8) ни қуйидагича ёзамиз:

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \lambda \psi = 0 \tag{6.9}$$

Бу ерда M^2/\hbar^2 ни λ орқали белгиладик. Ҳосил бўлган тенглама шар функцияларининг тенгласидир. Ечимнинг $0 \leq \vartheta \leq \pi$ ва $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ ораллиқларда чекли, бир қийматли ва узлуксиз бўлиши учун λ қуйидаги шартни қаноатлантириши керак:

$$\lambda = l(l+1), \tag{6.10}$$

бу ерда l — бутун мусбат сон, $l = 0, 1, 2, \dots, l$ сонинг ҳар бир қиймати учун (6.9) тенгламанинг ечими $(2l + 1)$ та илдиэларга эга бўлади:

$$\Psi_{lm_l}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l + \lambda)(l - m_l)!}{4\pi(l + m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos \vartheta) e^{im_l \varphi} \quad (6.11)$$

$\lambda = l(l + 1)$ дағина (6.8) ечимга эга бўлади. Бинобарин, импульс моменти квадрати операторининг хусусий қийматлари

$$M^2 = \hbar^2 l(l + 1) \quad (6.12)$$

бўлади. Юқоридаги (6.11) ва (6.12) ифодалардан импульс моментиининг квадрати $2l + 1$ даражали айниганлигини кўраимиз. Бу айнишнинг моҳиятини тушуниш осон. \hat{M}^2 операторининг хусусий функциялари бир вақтнинг ўзида \hat{M}_z операторининг ҳам хусусий функциясидир, яъни

$$\hat{M}_z \Psi_{lm_l} = M_z \Psi_{lm_l},$$

ёки

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{lm_l}}{\partial \varphi} = M_z \Psi_{lm_l}.$$

Демак,

$$M_z = \hbar m_l, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \quad (6.13)$$

(6.13) кўрсатганики, импульс моменти вектори танланган z йўналиши бўйича $2l + 1$ та йўсинда жойланган бўлар экан. (6.12) ва (6.13) тенглик ҳаракат миқдори моменти квадратини ва z проекциясини квантлаш қондасини беради.

Шу параграфни яқунлашдан олдин шуни таъкидлаймизки, импульс моменти ва унинг проекциялари ҳақидаги ҳамма хулосалар умумий характерга эга ва зарра ҳаракатланаётган майдонга боғлиқ эмас.

35- §. Ҳаракат миқдори моментларини қўшиш

Бу масалани \vec{l} орқали белгиланувчи орбитал ҳаракат миқдори моментиини қўшиш мисолида кўраимиз. Ҳар бирининг орбитал ҳаракат миқдори моменти, мос равишда, \vec{l}_1 ва \vec{l}_2 га тенг иккита заррадан иборат ёпиқ системани,

яъни ҳолати ўзаро бир-бирига боғлиқ бўлмаган \vec{l}_1 ва \vec{l}_2 моментлар билан характерланувчи системани кўрайлик. Икки моментнинг бир-бирига боғлиқ эмаслиги уларнинг ўзаро коммутативлигини билдиради (\vec{l}_1 нинг ҳамма ташкил этувчилари \vec{l}_2 нинг ҳамма ташкил этувчилари билан коммутатив ва \vec{l}_1, \vec{l}_2 нинг ҳар бири учун алоҳида-алоҳида равишда (6.6) қоида ўринли). Айтилганлардан, бу икки моментни ўзаро эркин зарраларга тааллуқли ёки муайян бир зарранинг орбитал momenti билан хусусий (ўз ўқиға nisbatan) моментларини тасвирлайди деб тушунамиз. Мазкур системанинг тўла, яъни жамланган ҳаракат миқдори momenti \vec{L} учун мумкин бўлган қийматларни аниқлаймиз. Ҳаракат миқдори momenti вектор катталикдир ва улар векторларни қўшиш қондаси бўйича қўшилади. Тўла момент \vec{L} нинг абсолют қиймати ташкил этувчи \vec{l}_1 ва \vec{l}_2 моментларнинг ўзаро вектор йўналишиға боғлиқ бўлади.

Квант механикасида моментларнинг вектор характери сақланади, лекин қўшиш қондасини келтириб чиқариш учун момент \vec{L} ни ҳам, проекцияси L_z ни ҳам маълум қоида бўйича квантланади деб тушунимоқ керак:

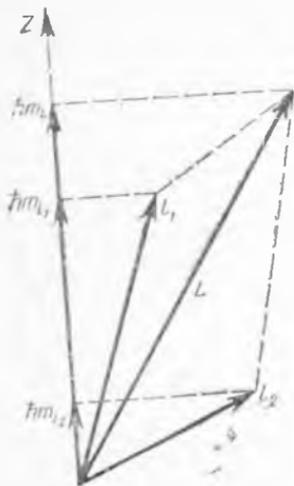
$$|\vec{L}|^2 = \hbar^2 L(L+1), \quad (6.14)$$

$$L_z = \hbar m_L, \quad (6.15)$$

бу ерда L — системанинг орбитал квант сони, умумий ҳолда $0, 1, 2, \dots$ бутун мусбат сон қийматлар қабул қилади. $m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$ — момент L нинг Z ўқиға проекциясини тасвирловчи магнит квант сони.

Шунни таъкидлаймизки, \vec{l}_1 ва \vec{l}_2 лар ҳам худди шу (6.14), (6.15) каби квантланади.

Системанинг орбитал L ва магнит m_L квант сонлари билан унинг ташкил қилган зарралар орбитал l_1, l_2 ва магнит m_{l_1}, m_{l_2}



47- расм. \vec{l}_1 ва \vec{l}_2 моментларни қўшиш.

квант сонлари ўртасидаги боғланишни аниқлаймиз. Бу-нинг учун, аввал, 47-расмда тасвирлангандек ҳаракат миқдори моментларининг Z ўқига проекциясини кўра-миз. Векторларнинг одатдаги қўшиш қондасига биноан мо-мент проекцияси учун қўшиш қондасини осон келтириб чиқарамиз, яъни $\hbar m_L$ катталиқ $\hbar m_{l_1}$ ва $\hbar m_{l_2}$ лар йиғин-дисига тенг:

$$m_L = m_{l_1} + m_{l_2}. \quad (6.16)$$

Орбитал квант сони L нинг мумкин бўлган қийматларини аниқлайлик. Бу ҳол учун қўшиш қондаси юқоридагидек содда бўлмайди.

Маълумки, (6.14) га мос равишда L бутун сон қиймат-лар қабул қилади. L нинг қиймати l_1 ва l_2 ларнинг ўзаро йўналишига боғлиқ, албатта. L квант сони учун мумкин бўлган энг кичик ва энг катта қийматлар аниқланиши билан қўйилган масала тугал ечилади, чунки L нинг қолган қийматларини унинг ушбу чегаравий қийматларидан фа-қат бир сонига кетма-кет ўзгариш йўли билан келтириб чиқариш мумкин. Агар, энди m_{l_1} ва m_{l_2} квант сонлари-нинг мумкин бўлган энг катта қийматларини, мос равиш-да, l_1 га ва l_2 га тенг бўлишини эсласак, m_L учун мумкин бўлган энг катта қиймати (6.16) га биноан аниқлаймиз.

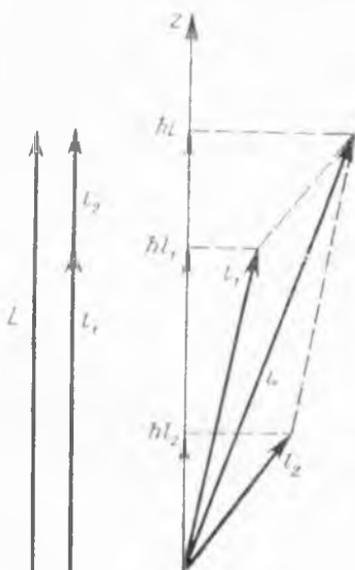
$$m_{L_{\max}} = m_{l_{1\max}} + m_{l_{2\max}} = l_1 + l_2. \quad (6.17)$$

Иккинчи томондан, худди шу қиймат L нинг максимал қийматига тенг, чунки магнит квант сонининг таърифи га кўра у полдан $\pm L$ гача ўзгаради. Демак,

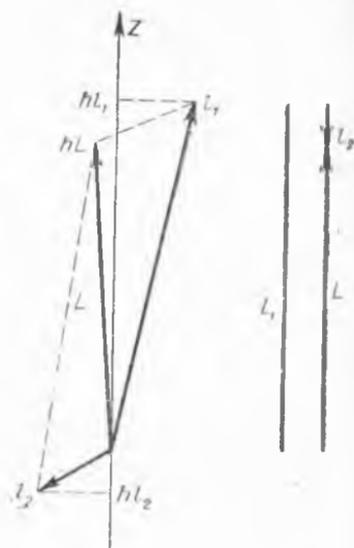
$$m_{L_{\max}} = L_{\max} = l_1 + l_2 \quad (6.18)$$

L_{\max} учун аниқланган ифоданинг геометрик маъносини кўрайлик. Қўшилувчи вектор \vec{l}_1 ва \vec{l}_2 ларнинг каттасини танлаймиз. Масалан, $l_1 > l_2$ бўлсин. Z ўқини шундай йўналтирамизки, бу ўққа \vec{l}_1 нинг проекцияси максимал бўлсин. 48-расмда \vec{l}_1 векторнинг Z ўқи билан мумкин бўл-ган энг кичик бурчак ҳосил қилган ҳоли тасвирланган.

Энди \vec{l}_2 векторни ҳам мазкур Z ўқига максимал проекция берадиган ҳолда йўналтирамиз. Шундай қилиб, Z ўқида $l_{1z \max} = \hbar m_{l_1 \max} = \hbar l_1$ ва $l_{2z \max} = \hbar m_{l_2 \max} = \hbar l_2$ проек-цияларга эга бўлдиқ. Мумкин бўлган максимал қиймат



48-расм. Максимал йўғинди момент.



49-расм. Минимал йўғинди момент.

берувчи бу ҳол параллел векторларни қўшишга мос келади.

Қўшилувчи икки векторнинг мумкин бўлган минимал натижавий қиймати уларнинг қарама-қарши йўналган — антипараллел ҳолида ҳосил бўлади. Моментларнинг вектор диаграммасида натижавий минимал қиймат вектор \vec{l}_1 ва \vec{l}_2 ларнинг Z ўқига проекцияси максимал, лекин қарама-қарши ишора берадиган йўналишида ҳосил бўлади. Бунинг учун \vec{l}_1 векторни аввалги йўналишида қолдириб \vec{l}_2 векторни 49-расмда тасвирланганидек ўзига қарама-қарши йўналтириш кифоядир. \vec{l}_2 векторнинг Z ўқига проекцияси энди $-hl_2$ га тенг. Шунинг учун,

$$m_{L \min} = L_{\min} = l_1 - l_2.$$

Ҳосил бўлган муносабат фақат $l_1 > l_2$ ҳол учун тўғри. $l_1 < l_2$ ҳолда проекция $L_{\min} = m_{L \min} = (l_1 - l_2) < 0$ ман-

қийматга тенг бўлади. Лекин биламизки, $L \geq 0$. Шунинг учун

$$L_{\min} = |l_1 - l_2| \quad (6.19)$$

қийматга тенг. (6.18) ва (6.19) га биноан L квант сонининг ўзгариш соҳаси учун қуйидаги шартга келамиз:

$$|l_1 - l_2| \leq L \leq l_1 + l_2 \quad (6.20)$$

(6.20) шартдан L қабул қиладиган қийматлар тўла сонини аниқлаш осон. Агар $l_1 > l_2$ бўлса, L квант сони $2l_2 + 1$ та, $l_1 < l_2$ бўлса, $2l_1 + 1$ та қиймат қабул қилади.

L нинг берилган қийматида m_L квант сони $2L + 1$ та қиймат қабул қилади. Аниқлик учун $l_1 > l_2$ деб ҳисоблайлик. У ҳолда ўзгариш соҳаси (6.20) бўйича аниқланган L квант сони учун m_L нинг қабул қиладиган қийматлари умумий сони

$$\sum_{l=l_1-l_2}^{l_1+l_2} (2L+1)$$

га тенг бўлади. Биз ҳадлар айирмаси 2 га тенг бўлган арифметик прогрессияга келдик. $(2l_2 + 1)$ та ҳаддан иборат ушбу йиғиндини арифметик прогрессия йиғиндисини сифатида қараймиз:

$$\sum_{l=l_1-l_2}^{l_1+l_2} (2L+1) = \frac{2(l_1-l_2)+1+2(l_1+l_2)+1}{2} \cdot (2l_2+1) = (2l_1+1)(2l_2+1). \quad (6.21)$$

Худди шу йўл билан $l_1 < l_2$ ҳоли учун ҳам мазкур натижага келамиз. Демак, иккита ўзаро эркин заррадан иборат ёпиқ системанинг мумкин бўлган ҳолатлари умумий сони ҳар бир зарра учун мумкин бўлган ҳолатлар сони $(2l_1 + 1)$ ва $(2l_2 + 1)$ нинг кўпайтмасига тенг. Шундай қилиб, агар зарралар ўзаро таъсирда бўлмаса, системанинг натижавий моментнинг ҳар бир қийматларига мос энергетик сатҳлар

$$E = E_{l_1} + E_{l_2}$$

га тенг бўлади. Ушбу ҳолда системанинг тўла энергияси натижавий моментнинг қийматларига боғлиқ эмас ва $(2l_1 + 1) \cdot (2l_2 + 1)$ даражали айнишга эга бўлади.

Агар зарралар ўртасида ўзаро таъсир мавжуд бўлса, L квант сонига нисбатан система ҳолатининг айниши йўқолади, яъни ҳар бир энергетик сатҳ L нинг маълум битта қиймати билан характерланади. Аввалги сатҳлар энди L нинг қабул қиладиган қийматлар сонига тенг сатҳларга ажралади. Агар $l_1 > l_2$ бўлса, $(2l_2 + 1)$ та, $l_1 < l_2$ бўлса, $(2l_1 + 1)$ та сатҳларга ажралади юз беради. Бу янги сатҳларнинг айниш даражаси $(g)m_L$ нинг қийматлар сонига тенг бўлади, чунончи:

$$\begin{aligned} L = l_1 + l_2 & & g = 2(l_1 + l_2) + 1, \\ L = l_1 + l_2 - 1 & & g = 2(l_1 + l_2 - 1) + 1, \\ L = l_1 - l_2 & & g = 2(l_1 - l_2) + 1. \end{aligned}$$

Ушбу ҳолда ҳам система квант сонларининг қабул қиладиган қийматлари тўплами, системани ташкил этувчи қисмларининг ўзаро таъсирда бўлишига қарамасдан яна $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ га тенг. Бу Эренфестнинг машҳур теоремасини тўла исботлайди, яъни системанинг боғланиш шартларини чексиз секин адиабатик виртуал ўзгаришида системанинг квант сонлари ўзгармайди.

Шундай қилиб, (6.20) қоида икки зарранинг йиғинди ҳаракат миқдорининг мумкин бўлган қийматларини тўла аниқлайди, (6.20) қоидага асосан бир вақтда икки ўқ бўйича доиравий ҳаракатдаги зарранинг умумий ҳаракат миқдори моменти ҳам аниқланади.

Агар система иккидан ортиқ зарралардан ташкил топган бўлса, зарралар орбитал ҳаракат миқдори моменти векторларининг йиғиндисидан иборат натижавий момент вектори

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3 + \dots \quad (6.22)$$

ни аниқловчи орбитал квант сони L зарралар моментларининг жуфти учун (6.20) қоидани кетма-кет қўллаш йўли билан топилади.

36- §. Орбитал магнит моменти

Атом магнетизми маъбаи. Атом магнетизми электронларнинг орбита бўйлаб ҳаракати, электроннинг хусусий магнит моменти, ядронинг хусусий магнит моменти каби уч

сабабга кўра вужудга келади. Электроннинг орбита бўйлаб ҳаракатида, биз юқорида кўрганимиздек, орбитал механик моменти юзага келади. Электрон массага ва зарядга эга бўлганлиги сабабли унинг орбитал ҳаракатида механик момент билан бирга магнит момент ҳам вужудга келади. Ҳақиқатан ҳам, ядро атрофида ҳаракатланаётган электрон микроскопик ток ҳалқасини намоён қилиб магнит майдон вужудга келтиради.

Электрон ва ядронинг магнит моментларини уларнинг спини — ўз ўқлари атрофидаги ҳаракати вужудга келтиради. Бу ҳақда биз спин тушунчасини баён қилишда тўла тўхталиб ўтамиз.

Орбитал магнит моменти. Электроннинг ядро атрофида орбита бўйлаб ҳаракатланиши худди ток кучи

$$i = -\frac{e}{cT} = -e\frac{v'}{c} = -ev'$$

га тенг айланма токка ўхшашдир (бу ерда e — электроннинг заряди, T — унинг айланиш даври, v , v' — частоталар).

Айланма токнинг магнит майдони, маълумки, моменти

$$\mu = S \cdot i = \frac{eS}{cT} \quad (6.23)$$

га тенг магнит диполининг майдонига эквивалент бўлади. Бу ерда S — айланма ток қамраган юз. Агар координатлар системасининг маркази атом ядроси билан устма-уст деб ҳисобласак, ядро атрофида ҳаракатланаётган электрон орбитаси қамраган эллипсимон юз қутб координатларида (r , φ)

$$S = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} r^2 d\varphi$$

ифода билан аниқланади. Иккинчи томондан, марказий куч майдонида орбитал ҳаракат миқдори моментининг сақланиши

$$m_e r^2 \frac{d\varphi}{dt} = M_l = \text{const}, \quad \vec{M}_l = m_l \left[\vec{r}, \vec{\varphi} \right]$$

каби ифодаланади. Бу тенгликдан $d\phi$ ни аниқлаб интеграл остига келтириб қўямиз:

$$S = \frac{1}{2} \int_0^T r^2 \frac{M_l}{m_e r^2} dt = \frac{M_l}{2m_e} T.$$

Электрон орбитаси қамраган юз учун келтириб чиқарилган бу ифодани (6.23) га қўйсақ, электрон ҳаракати юзага келтирган орбитал магнит момент учун классик назария берадиган

$$\mu_l = - \frac{e}{2m_e c} \cdot M_l \quad (6.24)$$

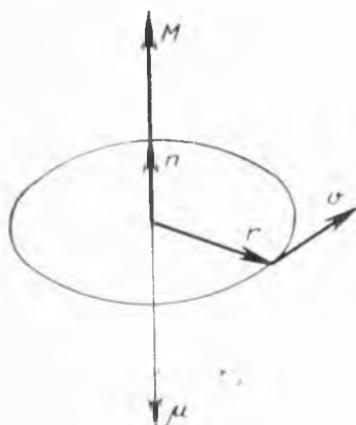
формулани ҳосил қиламиз. Орбитал механик ва магнит моментлар вектор катталиқ бўлиб, мусбат зарядланган зарра учун бир хил йўналишга манфий зарядланган зарра учун эса қарама-қарши йўналишга эга. Биз (6.24) ифодани келтириб чиқаришда электроннинг манфий зарядини ҳисобга олган эдик. Энди моментларнинг векторлигини ҳисобга олсак,

$$\vec{\mu}_l = - \frac{e}{2m_e c} \vec{M}_l. \quad (6.25)$$

Демак, ясси орбита бўйлаб ҳаракатланаётган электроннинг орбитал магнит momenti, 50-расмда тасвирлангандек, унинг ҳаракат миқдорининг орбитал механик momentига тескари йўналган. Электроннинг орбитал ҳаракати учун магнит momentнинг механик momentга нисбати

$$\frac{\mu_l}{M_l} = - \frac{e}{2m_e c} = - \gamma. \quad (6.26)$$

электрон орбитал ҳаракатининг *гиромагнит ёки магнитомеханик* нисбати деб аталади.



50-расм. Механик ва магнит моментларнинг қарама-қарши йўналиши.

Квант механикасида момент тушунчасига ўтиш учун классик физиканинг миқдорий тенгликларини оператор тенгликларига алмаштириш керак. (6.25) формула орбитал ҳаракат миқдори моменти \vec{l} нинг орбитал магнит моменти μ_l билан боғланишини беради, яъни

$$\hat{\mu}_l = - \frac{e}{2m_e c} \hat{l}. \quad (6.25')$$

Шубҳасизки, механик ва магнит моментларнинг Z ўқига проекциялари ўртасидаги муносабат

$$\hat{\mu}_{lz} = - \frac{e}{2m_e c} \hat{l}_z \quad (6.25'')$$

операторлар ўртасидаги боғланишни беради. Энди ҳаракат миқдори моменти ва унинг проекцияси учун (6.12), (6.13) формулаларни эсласак, орбитал магнит моменти ва унинг проекцияси учун квантлаш қонидасини ҳосил қиламиз.

$$\begin{aligned} \mu_l &= - \frac{e}{2m_e c} \hbar \sqrt{l(l+1)} = - \gamma \hbar \sqrt{l(l+1)} = \\ &= - \mu_B \sqrt{l(l+1)}, \end{aligned} \quad (6.27)$$

$$\mu_{lz} = - \frac{e}{2m_e c} \hbar m_l = - \gamma \hbar m_l = - \mu_B m_l. \quad (6.28)$$

Шундай қилиб, орбитал ҳаракат миқдори моменти ҳам ва у билан (6.25) боғланишга эга магнит момент ҳам битта умумий l квант сони орқали, худди шунингдек, моментларнинг проекциялари ҳам битта умумий m_l квант сони орқали аниқланади. Шунинг учун ҳам m_l нинг магнит квант сони деб ном олиши бежиз эмас. Механик момент ва унинг проекцияси билан магнит момент ва унинг проекцияси ўртасида ўлчов бирликларидагина фарқ бор. Механик моментлар \hbar бирлигида ифодаланса, магнит моментлар Бор магнетони деб аталувчи

$$\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_e c} \quad (6.29)$$

бирликда ўлчанади. Бор магнетони ифодасига универсал доимийлар: c — ёруғлик тезлиги, \hbar — Планк доимийси ва e — электрон зарядидан ташқари электрон (зарра) массаси

m_e ҳам киради. Гаусс бирликлар системасида $\mu_B = 0,927 \times 10^{-20}$ эрг·Гс га тенг.

37- §. Электроннинг спини

Ўтган параграфларда биз баён қилган квант назарияси ўзининг аниқ ва соддалигига қарамасдан камчиликдан холи эмас. Шу камчиликлардан иккитасини мисол тариқасида кўрамиз. Атом спектр чизиқларини ўрганишда кўпгина спектр чизиқларининг аслида бир-бирига жуда яқин жойлашган иккита чизиқлардан тузилиши аниқланди. Водород атоми Бальмер сериясининг биринчи чизиғи бу хил нозик структурага мисол бўла олади. Юқорида ўрганилган назарияга биноан водород атомининг $n = 3$ ва $n = 2$ сатҳларидаги ўтишда тўлқин узунлиги 6563 Å га тенг яқка чизиқ ҳосил бўлиши керак эди. Аммо, аслида ўзаро 1,4 Å масофада жойлашган иккита чизиқ мавжуд.

Квант назарияси билан тажриба натижалари ўртасида мавжуд бўлган иккинчи муҳим тафовут кейинги параграфларда баён қилинадиган Зеemannнинг аномал эффектидир. Спектр чизиқларининг нозик структурасини ва Зеemannнинг аномал эффектини тушунтириш учун 1925 йилда Гаудсмит ва Уленбек қуйидаги гоёни ўртага ташлади. Электрон, орбитал ҳаракат миқдори моментидан ташқари хусусий ҳаракат миқдори моментига ҳам эга. Гаудсмит ва Уленбек электронни чекли ўлчамларга эга ва зарядланган жисм сифатида тасвирлайдилар. Албатта, у ҳолда электрон ҳар қандай чекли ўлчамли жисмлар каби учта илгарилама ҳаракати билан бир қаторда уч йўналиш бўйича айланиш эркинлик даражасига ҳам эга бўлиши мумкин. Ҳар қандай чекли ўлчамли жисмнинг айланишида яна қўшимча ҳаракат миқдори ва унга мос магнит momenti юзага келади. Агар бу қўшимча эркинлик даражасига тўғри келадиган квант сонини m_s орқали белгиласак, электроннинг энергетик сатҳларини умумий ҳолда уч квант сонига боғлиқ деб қараш мумкин:

$$E = E_{nl m_s}$$

Электроннинг хусусий механик ҳаракат миқдори моментини унинг *спини* деб аталади. Спин термини инглиз

сўзи spin дан олинган бўлиб, ўз ўқи атрофида айланиш деган маънони беради. Спин тушунчасининг киритилиши позик структура ва Зееман эффектларини тушунтиришдагина муваффақиятли бўлиб қолмасдан қатор кенг доирадаги атом ҳодисаларини ҳам тўғри қарашга имкон берди.

Электрон хусусий механик моментининг қиймати атом спектрларини ўрганиш борасида олинган тажриба натижаларидан бевосита келиб чиқади. Спин зарранинг ҳаракат миқдори бўлганлиги сабабли у ҳам ҳар қандай ҳаракат миқдори моменти (6.12) каби квантланиши керак. Танланган (ташқи магнит майдони) йўналишга проекцияси эса (6.13) каби квантланади. Шунинг учун агар \hbar бирлигида механик спин моментининг қиймати S га тенг бўлса, фазовий квантланиш қоидасига биноан у учун z ўқига нисбатан $(2S + 1)$ та йўналиш мумкин бўлади. Демак, айтилганлардан

$$S^2 = \hbar^2 S(S + 1) \quad (6.30)$$

келиб чиқади. Танланган z йўналиши бўйича спиннинг $(2S + 1)$ та проекцияларининг қиймати бир-биридан бир birlikка фарқ қилиши керак:

$$S_z = \hbar m_s;$$

m_s — механик спин моменти проекциясини аниқловчи магнит квант сони. Тажриба натижаларидан маълумки, масалан, водород атомининг биз юқорида келтирган 6563 \AA спектр чизиги каби дублет чизиқлар вужудга келади. Бу эса спин фақат мумкин бўлган икки йўналишгагина эга деган хулосага олиб келади, яъни $2S + 1 = 2$ ёки $S = \frac{1}{2}$. У ҳолда, мумкин бўлган ушбу икки йўналиш спиннинг z ўқига проекциялари билан характерланади, яъни танланган йўналишда спиннинг проекцияси иккитагина қийматга эга:

$$\begin{aligned} S_z = \hbar m_s, \quad m_{s_{\max}} = +S = +\frac{1}{2}, \quad m_{s_{\min}} = \\ = -S = -\frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Шундай қарашдан ярим бутун квант сонларининг ҳосил бўлиши ҳаракат миқдори моментини квантланиши (6.12), (6.13) ҳақидаги бизнинг тасаввуримизга мутлақо

зид бўлиб кўринади. Аслида, спин механик momenti учун ҳаракат миқдори моментининг (6.12) қоидага олиб келган классик тасаввурини қўллаб бўлмайди. Электроннинг спин моментини электроннинг ўз ўқи бўйлаб ҳаракатидан бўлиши керак деган классик тасаввурга асосланиб тушунтириб бўлмайди. Чунки, бу ҳолда чекли ўлчамларга эга электроннинг айрим сирт қисмларининг тезлиги ёруғлик тезлигидан катта бўлади. Ҳақиқатан ҳам, электрон учун айланма моментининг максимал қиймати унинг ҳамма массаси сирт қисмида жойлашганида ҳосил бўлади. У ҳолда, сирт қисми тезлигини аниқлаш учун $m_e v r_0 = |\vec{S}|$ момент формуласидан фойдаланамиз. Бу ерда m_e — электроннинг массаси, r_0 — унинг радиуси, тақрибан 10^{-13} см га тенг деб оламиз. Спин қийматини (6.30) формуладан аниқлаб электрон сирт қисмининг тезлигини аниқлаймиз:

$$v = \frac{|\vec{S}|}{m_e r_0} \approx \frac{10^{-34}}{10^{-30} \cdot 10^{-13}} = 10^{11} \text{ м/сек.}$$

Ёруғлик тезлигини $c = 3 \cdot 10^8$ м/сек га тенг эканлигини эсласак, электрон спинининг мавжудлигини классик тасвирда тушунтириш учун унинг сирт қисмини ёруғлик тезлигидан катта тезликка эга бўлади деб ҳисоблашга тўғри келади. Бу эса нисбийлик назариясига зиддир.

Эксперимент натижаларини тушунтириш учун механик спин momenti билан бир қаторда у билан

$$\vec{\mu}_S = \frac{e}{m_e c} \vec{S} = 2\gamma \vec{S} = \gamma_S \vec{S} \quad (6.32)$$

кўринишда боғланган магнит моментини ҳам мумкин деб ҳисоблаш керак бўлади. Электроннинг спини билан боғлиқ гиромангнит нисбат орбитал ҳаракат билан боғлиқ гиромангнит нисбатдан расо икки марта катта экан. (6.31) ва (6.32) формулаларга кўра электроннинг магнит momenti $\vec{\mu}_S$ бирор ихтиёрий йўналган ўққа нисбатан икки хил йўналиши мумкин. Ихтиёрий йўналишга нисбатан спин проекцияларини (6.31) каби деб ҳисобласак, магнит момент проекциялари шу йўналишда

$$\mu_{S_z} = \pm \frac{e\hbar}{2m_e c} = \pm \mu_B \quad (6.33)$$

га тенг бўлади.

Спин моментларини қўшиш қондаси. Моментларни қўшиш қондаси спин momenti учун ҳам ўз кучини тўла сақлайди. N та электрондан иборат системанинг тўла спин моментини аниқлаш керак бўлсин. Ҳар бир электроннинг спинини s_i ($i = 1, 2, \dots$), (системанинг) атомнинг тўла спинини \vec{S} орқали белгилаймиз. У ҳолда системанинг тўла спин momenti айрим электронлар спинининг вектор йингиндиси

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{s}_i$$

бўлади. Ҳар бир электроннинг спини s_i каби тўла спин вектори учун ҳам (6.12) ёки (6.30) квантлаш шarti ўринли бўлади, яъни

$$|\vec{S}| = \hbar \sqrt{S(S+1)},$$

бу ерда S — тўла спин квант сони. S квант сони қабул қиладиган қийматлар моментларнинг қўшиш қондаси (6.20) га асосан

$$S = \begin{cases} \frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, \dots, 0, & \text{агар } N \text{ жуфт бўлса,} \\ \frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, \dots, \frac{1}{2}, & \text{агар } N \text{ тоқ бўлса,} \end{cases}$$

тўплани ҳосил қилади. Ҳақиқатан ҳам,

$$S_{\max} = \sum_{i=1}^N s_i = \underbrace{\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{2}}_N = \frac{N}{2}.$$

S_{\min} ни эса S_{\max} дан ҳар доим бир бирликни кетма-кет айирини йўли билан ҳосил қиламиз.

z ўқига тўла спин проекциясининг мумкин бўлган қийматлари қуйидаги формула орқали ҳисобланади:

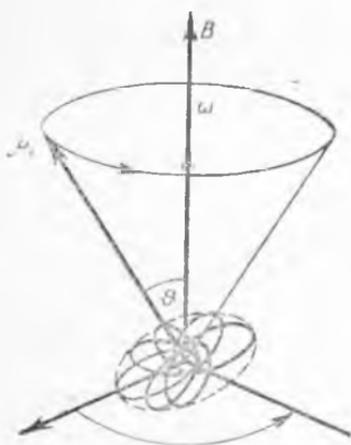
$$S_z = -\hbar m_s, \quad m_s = -S, -S+1, \dots, S-1, S.$$

Демак, тўла спиннинг мумкин бўлган йўналишларининг тўла сони $2S + 1$ га тенг.

38- §. Фазовий квантланишнинг экспериментда кузатилиши

Ўтган параграфларда биз \vec{l} орбитал ҳаракат миқдори momenti натижасида электроннинг $\vec{\mu}_l$ магнит моментга эга бўлишини аниқлаган эдик. Электроннинг спинга эга бўлишидан эса у орбитал магнит моментдан ташқари хусусий магнит момент $\vec{\mu}_s$ га эга бўлишини ҳам кўрдик. Ҳозир биз шу вектор катталикларни фазода фақат маълум йўналишларгагина эга бўлишини, яъни фазовий квантланишини кўрамиз.

Бир жинсли бўлмаган магнит майдонда ҳаракатланаётган зарранинг магнит momenti. Классик электродинамикадан маълумки, магнит моментга эга зарра магнит майдонда қўшимча энергияга эга бўлади. Масалан, \vec{L} ҳаракат миқдори momentига пропорционал $\vec{\mu}_L$ магнит моментга эга бўлган атомга бир жинсли \vec{B} магнит майдон \vec{B} ҳамда $\vec{\mu}_L$ (ва демак, \vec{L}) га перпендикуляр йўналишда айлант



51-расм. Ташқи магнит майдонда (B) электрон орбитал бурчак тезлик векторининг прецессияси — Лармор прецессияси. Атом магнит momenti ҳам шундай прецессияда бўлади.

орбитал момент қийматига ва улар орасидаги бурчакка боғлиқ. Атомда орбита бўйлаб ҳаракатланаётган электронга ташқи магнит майдон таъсири, 51-расмда тасвирланганидек, электрон орбитасининг майдон йўналиши атрофида бир текис айланишини, яъни электроннинг $\vec{\mu}_L$ магнит momenti прецессиясини вужудга келтиради. Атом учун эса электронларга мос прецессияларнинг натижаси сифатида μ_L атом магнит момент прецессияси вужудга келади. Квант механикасига кўра магнит momentнинг майдон йўналишидаги проекцияси (6.25°) да ифодаланганидек

$$\mu_{L_z} = -\gamma \hbar m_L, \quad m_L = L, L-1, \dots, 0, \dots, -L \quad (6.34)$$

каби квантланади. Шунинг учун, \vec{B} ва $\vec{\mu}_L$ орасидаги бурчак ϑ ҳам

$$\cos \vartheta = \frac{\mu_{L_z}}{\mu_L} = \frac{-\gamma \hbar m_L}{-\gamma |\vec{L}|} = \frac{\hbar m_L}{\hbar \sqrt{L(L+1)}} = \frac{m_L}{\sqrt{L(L+1)}} \quad (6.35)$$

дискрет қийматларга тенг бўлади, яъни бурчакнинг косинуси

$$\cos \vartheta = \frac{L}{\sqrt{L(L+1)}}, \dots, 0, \dots, \frac{-L}{\sqrt{L(L+1)}} \quad (6.36)$$

қийматлар қабул қилади.

Агар ташқи магнит майдон бир жинсли бўлмаса, у магнит моментъ μ_L га тенг атомга

$$\vec{F} = (\vec{\mu}_L \cdot \vec{\nabla}) \vec{B} = \mu_{L_x} \frac{\partial \vec{B}}{\partial x} + \mu_{L_y} \frac{\partial \vec{B}}{\partial y} + \mu_{L_z} \frac{\partial \vec{B}}{\partial z} \quad (6.37)$$

куч билан таъсир кўрсатади.

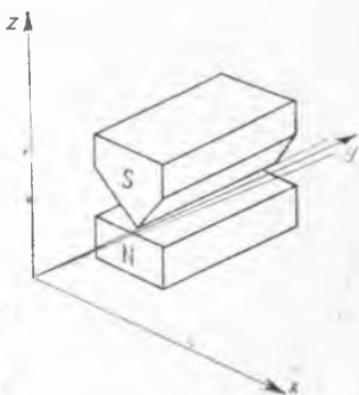
Ҳар доимгидек, z ўқини ташқи магнит майдон йўналишида танлаймиз. У ҳолда магнит момент $\vec{\mu}_L$ нинг μ_{L_x} ва μ_{L_y} ташкил этувчилари, юқорида кўрилган прецессия натижасида,

умумий ҳолда синусоида шаклида ўзгаради. Заррага кўрсатилаётган таъсир кучи (6.37) нинг прецессия даврига нисбатан катта вақт бўйича ўрта қийматини ҳисобласак, синусоида бўйича ўзгарувчи биринчи икки ҳад нолга айланади ва натижада фақат қуйидаги

$$\langle \vec{F} \rangle_{\text{ўрта}} = \mu_{L_z} \frac{\partial \vec{B}}{\partial z} \quad (6.38)$$

ифола қолади. Демак, атом $\frac{\partial \vec{B}}{\partial z}$ йўналишида тезланиш олар экан.

Агар магнит майдон ҳосил қилувчи электромагнитнинг қутб-



52- расм. Штерн-Герлахнинг атомлар дастаси билан бир жинсли бўлмаган магнит майдонда ўтказган тажрибаси.

лари 52- расмдаги каби шаклда бўлса, юқоридаги «тиғсимон» қутбга яқин соҳада \vec{B} энг катта қийматга ва $\frac{\partial B}{\partial z}$ билан мос келувчи йўналишга эга бўлади. Массаси m га тенг ва тиғсимон қутбга параллел ҳаракат қилаётган атом мазкур соҳада

$$\frac{dv_z}{dt} = \langle \vec{F} \rangle_{\text{орта}} / m = \mu_{L_z} \frac{\partial B}{\partial z}, \quad \frac{1}{m} \quad (6.39)$$

га тенг тезланиш олади. Тезланишнинг йўналиши (6.39) га кўра атомнинг дастлабки йўналишига перпендикуляр-дир. Агар атом мазкур соҳани t вақт ичида ўтса, у ўзининг дастлабки йўлидан

$$z = \frac{dv_z}{dt} \cdot \frac{t^2}{2} \quad (6.40)$$

масофага четланади. t вақт магнит қутблари узунлиги d нинг атом тезлигига нисбатига тенг, яъни $t = d/v$. У ҳолда, четланишнинг қиймати

$$z = \frac{1}{2m} \mu_{L_z} \left| \frac{\partial B}{\partial z} \right| \frac{d^2}{v^2} \quad (6.41)$$

га тенг бўлади.

Классик нуқтани назардан электромагнит соҳадан ҳар хил магнит момент йўналишларига эга атомлар дастасининг ўтишида вужудга келадиган (6.41) четланиш

$$z = \text{const} \cdot \mu_{L_z} = \text{const} \mu_L \cdot \cos(\vec{\mu}_L \cdot \vec{B}) \quad (6.42)$$

косинус $\cos(\vec{\mu}_L \cdot \vec{B})$ нинг -1 дан $+1$ гача интервалида мумкин бўлган узлуксиз қийматлари билан характерланади. Натижада, мазкур бир жинслимас магнит майдон орқали ўтгандан сўнг атомлар дастаси z ўқи йўналишида (6.42) миқдорга ёйилган бўлади, холос. Экранда эса (6.42) ифода характерловчи кенгликдаги полоса ҳосил бўлади.

Агар атомлар дастасининг кесими бўйича уларнинг тақсимланиши нотекис бўлса, масалан, даста чеккаларида тақсимланиш максимумга эришса, классик ҳолдаги натижа ҳам квант кўринишида бўлиб қолиши мумкин, яъни экранда интенсивликнинг максимум-минимумидан иборат

манзара вужудга келиши мумкин. Агар магнит майдон соҳасигача атомларнинг магнит моментлари ҳар хил йўналишлар бўйича бир текис тақсимланган бўлса, бу ҳол юз бермаслигини кўрсатиш осон.

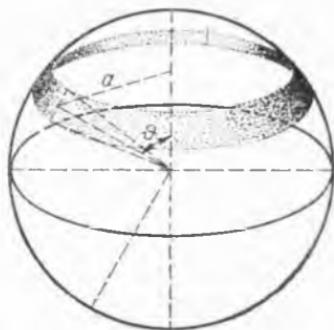
Экранда интенсивлик тақсимоти четланиш z нинг берилган қийматида бирлик интервалдаги атомлар сони билан характерланади, албатта. Демак, оғиш бурчагининг ϑ га тенг қиймати атрофидан $d\vartheta$ интервалда оққан атомлар сонининг шу $d\vartheta$ га тўғри келган четланиш dz нинг қийматига нисбатини аниқлаш талаб қилинади. Агар z ва ϑ ўзаро (6.42) орқали боғланган бўлса, четланиш элементи учун

$$dz = \text{const} \cdot \mu_L \cdot \sin \vartheta \, d\vartheta \quad (6.43)$$

ифодага келамиз.

Иккинчи томондан, атомлар магнит моментлари $\vec{\mu}_L$ учун ҳамма йўналишларнинг тенг ҳуқуқлилигидан μ_L векторларнинг учларини радиуси μ_L га тенг сфера сиртида бир текис тақсимланиши келиб чиқади. z ўқиға нисбатан ϑ бурчак атрофида $d\vartheta$ интервалида йўналган μ_L векторларнинг учи сфера сиртида кенглиги $\mu_L d\vartheta$ га тенг полоса соҳа ҳосил қилади (53- расм). Полосанинг юзи айлана узунлиги $2\pi a$ нинг полоса кенглиги $\mu_L d\vartheta$ га кўпайтмасига тенг. a эса ўз навбатида сфера радиуси μ_L ни $\sin \vartheta$ га кўпайтмасига тенг. У ҳолда полоса юзи $2\pi \mu_L^2 \sin \vartheta \, d\vartheta$ га тенг.

Демак, μ_L магнит моменти \vec{B} билан оғиш бурчагининг ϑ га тенг қиймати атрофидаги $d\vartheta$ интервалда бўлган атомлар сони $\sin \vartheta d\vartheta$ га пропорционал экан. Агар бу атомлар сонини (6.43) орқали аниқланган четланиш элементи dz га бўлсак, интенсивлик тақсимоти учун ҳосил бўлган ифодада ϑ бурчакка боғлиқлик йўқолади. Шундай қилиб, классик нуқтаи назарга кўра экрандаги z га тенг четланиш соҳада интенсивликнинг бир жинсли тақсимоти рўй беради.



53- расм. Сферадаги кенглик-ка мос ϑ бурчак

Фазовий квантланиш. Квант нуқтаи назардан атомлар магнит моментлари ташқи магнит майдонда (6.35), (6.36) га кўра $(2L + 1)$ та йўналишга эга. Демак, моментларнинг учи 53-расмдаги сфера юзидида $2L + 1$ та ҳалқа ҳосил қилади. Ҳар бир ҳалқани характерловчи оғиш бурчак элементига экранда битта четланиш элементи dz мос келади. Экрандаги четланишлар сони оғиш бурчаги $d\theta$ элементлари сонига тенг. Демак, экранда ҳосил бўладиган четланишлар элементининг умумий сони ҳам $(2L + 1)$ га тенг. Шундай қилиб, квант механикасига асосан атомлар дастасининг бир жинсли бўлмаган магнит майдон орқали ўтишида даста $(2L + 1)$ та дасталарга ажралади. Демак, атомлар дастасини бир жинсли бўлмаган магнит майдон орқали ўтказиб квант назариясида вужудга келган фазовий квантланиш ҳақидаги фикрни экспериментда текшириш мумкин.

Штерн ва Герлах тажрибаси. 1921 йилда О. Штерн ва В. Герлах томонидан қўйилган экспериментда фазовий квантланиш биринчи бор яққол кузатилди, қиздириш усули билан буғлантирилган нейтрал кумуш атомлари дастаси 52-расмда тасвирланган бир жинсли бўлмаган магнит майдон орқали ўтказилган. Нормал ҳолатдаги кумуш атомининг магнит momenti бутунлай сони характерга эга, чунки асосий ҳолатида кумуш атоми учун тўла орбитал ҳаракат миқдори momenti нолга тенг ва биттасидан ташқари ҳамма электронларнинг сони моментлари ҳам ўзаро бир-бирини нолга айлантиради. Шундай қилиб, кумуш атомининг магнит momenti битта электронининг спин momenti билан характерланади. Агар электроннинг спни бўлмаганда эди кумуш атомининг асосий ҳолати (S -ҳолати) $L = 0$ ва атомлар дастаси бир жинсли бўлмаган магнит майдонда дасталарга ажралмаган бўлар эди. Агар дастада уйғотилган ҳолатдаги, масалан, $L = 1$ атомлар ҳам мавжуд бўлса, даста m_L нинг $m_L = 0, \pm 1$ қийматлар сонига мос равишда учта дастага ажралар эди.

Штерн ва Герлах тажрибаси кўрсатдики, асосий ҳолатдаги («совуқ») кумуш атомларининг дастаси битта дастага ҳам, учта дастага ҳам ажралмасдан, фақат иккита дастага ажралар экан. Икки дастага ажралишнинг ўзаро оғиш масофасини билган ҳолда четланиш (6.41) га қараб кумуш атомининг магнит momentини аниқлаш мумкин. Тажриба натижаси назария билан жуда тўғри келади.

Тажриба натижасига кўра аниқланган спин магнит моментининг майдон йўналишидаги проекцияси μ_{S_z} . Бор магнетонига тенг бўлиб чиқди. Бу кутилмаган натижа эди. Ҳақиқатан ҳам, агар спин механик моменти билан спин магнит моменти ўртасида орбитал механик ва магнит моментлари ўртасидаги боғланиш (6.25)

$$\mu_{e_z} = -\gamma l_z = -\gamma \hbar m_l = -\mu_B m_l \quad (6.28)$$

га ўхшаш

$$\mu_{S_z} = -\gamma S_z = -\gamma \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \mu_B$$

боғланиш ўринли бўлганда эди, спин магнит моментининг майдон йўналишидаги проекцияси Бор магнетонининг ярмига тенг бўлар эди. Тажрибадан эса μ_{S_z} нинг қийматини бутун Бор магнетонига тенглиги келиб чиқди. Демак, механик ва магнит моментлари ўртасидаги (6.28) каби боғланиш спин учун ўринли эмас. Тажрибадан

$$\mu_{S_z} = -2\gamma S_z = -2\gamma \hbar m_s = \pm 1\mu_B \quad (6.33)$$

натижа келиб чиқади. Спин магнит моменти векторининг, қиймати эса

$$|\vec{\mu}_S| = 2\gamma |\vec{S}| = 2\gamma \hbar \sqrt{S(S+1)} = 1\ 3\mu_B. \quad (6.44)$$

Штерн ва Герлах тажрибасидан сўнг фазовий квантланишни кузатиш устида кўн тажрибалар ўтказилди. Уларнинг ҳаммасида ҳам спин момент учун ҳам, орбитал момент учун ҳам фазовий квантланишнинг ўринли эканлиги тасдиқланди.

38- §. Электроннинг тўла механик ва магнит моменти

Тўла ҳаракат миқдори моменти. Атомда ҳар бир электрон аниқ орбитал ҳаракат миқдори моменти l га ва аниқ спин ҳаракат миқдори моменти s га эга. Бундан буён электроннинг спинини кичик s ҳарфи билан белгилаймиз. Атом магнетизми эса электронларнинг орбитал ва спин моментларига пропорционал бўлган орбитал ва спин магнит моментлари $\vec{\mu}_l$, $\vec{\mu}_s$ билан характерланади (ядро магнит моменти нисбатан жуда кичикдир). Ҳар бир электрон-

нинг тўла ҳаракат миқдори моментини \vec{j} орқали белгиласак, у ҳолда \vec{j} орбитал \vec{l} ва спин \vec{s} моментининг вектор йиғиндисига тенг бўлади:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}. \quad (6.45)$$

Ҳар қандай ҳаракат миқдори momenti сингари электроннинг тўла механик momenti \vec{j} ҳам (6.12) ва (6.13) каби квантланган ва қуйидаги ифодалар орқали аниқланган бўлади:

$$|\vec{j}| = \hbar \sqrt{j(j+1)}, \quad j_z = \hbar m_j. \quad (6.46)$$

Бу ерда j — тўла момент квант сони, Зоммерфельднинг белгилашича, ички квант сони деб аталади. m_j — тўла моментнинг магнит квант сони.

Юқорида (35-§) кўрилган моментларнинг қўшиш қоидаси ҳар қандай моментларни қўшиш учун жумладан, орбитал ва спин моментларини қўшиш учун ҳам ўринлидир. Шунинг учун электроннинг тўла ҳаракат миқдори моментини характерловчи ички квант сони

$$j = |l \pm s| = \left| l \pm \frac{1}{2} \right|, \quad j_1 = l + \frac{1}{2}, \quad j_2 = l - \frac{1}{2} \quad (6.47)$$

га тенг. Орбитал ва спин квант сонлари мос равишда (6.12) ва (6.30) орқали аниқланади. Шундай қилиб, $l \neq 0$ да j иккитагина қиймат; $l = 0$ да эса биттагина қиймат $j = \frac{1}{2}$ қабул қилади. Тўла моментнинг магнит квант сонини аниқлаш учун (6.45) ни z ўқига проекциялаймиз, яъни $j_z = l_z + s_z$. У ҳолда бу ифодага ҳар бир проекция учун, мос равишда, (6.13) тенгликни татбиқ қилсак,

$$m_j \hbar = m_l \hbar + m_s \hbar$$

ҳосил бўлади ёки

$$m_j = m_l + m_s \quad (6.48)$$

га келамиз. Маълумки, m_l нинг мумкин бўлган қийматлари $+l$ дан $-l$ гача ноль ҳам кирган интервалда ётади. m_s нинг мумкин бўлган қийматлари эса $\pm s$ га тенг. l квант сони ҳар доим бутун сондир, спин квант сони s

эса яримга тенг, яъни $s = \frac{1}{2}$. Демак, m_j ҳар доим ярим бутун сон қийматлар қабул қилади. m_j нинг мумкин бўлган қийматлари

$$m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$$

бўлади. Бу ерда j сони орбитал сонининг берилган l қийматида (6.47) да ифодаланган иккита қийматни қабул қилади.

Тўла, орбитал ва спин моментлари \vec{j} , \vec{l} , \vec{s} бир вақтда квантланганлиги сабабли улар ўзаро фақат бирор аниқ йўналишга эга бўлади. Биз кўраётган бир электронли атом ҳолида моментларнинг фақат иккита нисбий жойлашишлари ўринли бўлади. Улардан бири $j = l + s$ ($|\vec{j}| > |\vec{l}|$) га, иккинчиси $j = l - s$ ($|\vec{j}| < |\vec{l}|$) га тўғри келади. 54-расмда $l = 1$ ва $s = \frac{1}{2}$ учун бу икки ҳол тасвирланган.

Орбитал ва спин моментлари ўртасидаги бурчак. Орбитал ва спин моментлари ўртасидаги бурчакни аниқлаш учун (6.45) ни квадратга кўтарамиз:

$$\vec{j}^2 = \vec{l}^2 + \vec{s}^2 + 2|\vec{l}||\vec{s}|\cos(\vec{l} \cdot \vec{s}). \quad (6.49)$$

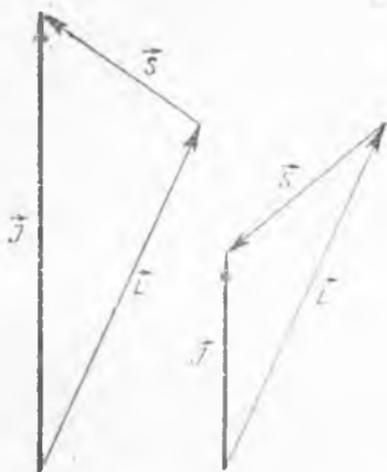
У ҳолда

$$\cos(\vec{l} \cdot \vec{s}) = \frac{j^2 - l^2 - s^2}{2|\vec{l}||\vec{s}|}$$

бўлади. Бу ифодага \vec{j} , \vec{l} , \vec{s} ларнинг (6.46), (6.12), (6.30) ифодаларини қўйиб,

$$\cos(\vec{l}, \vec{s}) = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1)} \cdot \sqrt{s(s+1)}}$$

га келамиз. Ички квант сони j нинг (6.47) даги иккита мумкин қийматларини эсга олсак, орбитал ва спин моменти ўртасидаги бурчакнинг иккита мумкин бўлган қийматини ҳосил қиламиз. Агар биз фазода \vec{l} ва \vec{s} векторларнинг аниқ йўналиши ҳақида ҳеч нарса айта олмасак, у ҳолда улар ўртасидаги бурчакни қандай тушуниш ке-

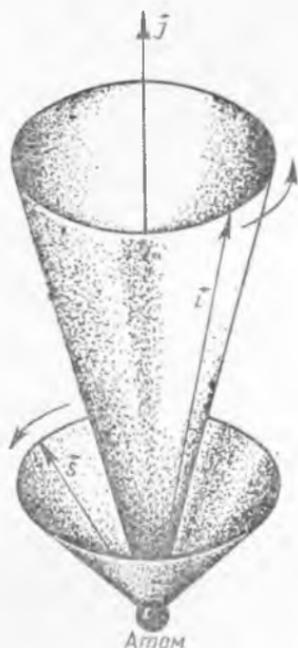


54-расм. Тўла I , орбитал L ва спин S моментлари вектори.

рак, деган савол туғилиши мумкин, албатта. Бу бурчак қуйидаги маънога эга. Ташқи таъсир бўлмаганда (яъни система ёпиқ) тўла ҳаракат миқдори моментининг йўналиши ва миқдори сақланади. Хусусий айлантирувчи моментлар эса l ва s векторларни уларнинг тенг таъсир этувчиси j атрофида прецессия каби ҳаракат қилишга олиб келади. l ва s ларнинг j йўналишига проекцияси аниқ қийматга эга бўлади, яъни l ва s векторларнинг ҳар бирини j билан

ҳосил қилган бурчагини аниқлаш мумкин. У ҳолда, албатта, орбитал ва спин моментлари ўртасидаги бурчак ҳам ҳақиқий маънога эга бўлади ва сон қийматини аниқлаш мумкин. Бу ҳол 55-расмда тасвирланган.

Тўла магнит momenti. Электроннинг орбитал ва спин моментларининг қўшилиши тегишли магнит моментларининг ҳам қўшилишига олиб келади. Биз бу масалани вектор моделида кўрамиз. 56-расмда орбитал ва спин ҳаракат миқдори моментлари l ва s ҳамда уларнинг тенг таъсир этувчиси j Планк доимийси \hbar бирлигида тасвирланган. Тегишли магнит моментлари эса қарама-қарши йўналишда бўлади. Орбитал ва спин магнит моментлари μ_l , μ_s эса расмда Бор магнетони бирлигида тасвирланган. Бирликларнинг бу хил системасида (6.25) га кўра μ_l векторнинг узунлиги l векторнинг узунлигига аниқ тенг, μ_s вектор эса (6.32) га кўра s дан икки марта узун бўлади. Шунинг учун, μ_l ва μ_s ларнинг тенг таъсир этув-



55- расм. Орбитал ва спин моментли векторларнинг тенг таъсир этувчиси атропофидаги прецессияси.



56- расм. Орбитал ва спин моментларнинг вектор қўшилиши схемаси.

чиси \vec{j} га антипараллел эмас. Ташқи майдон бўлмаган ёки марказий куч майдони ҳоли учун \vec{j} нинг сақланиши юқорида айтилган эди. \vec{l} ва \vec{s} векторлар эса \vec{j} атропофида прецесссион ҳаракат қилади. Демак, $\vec{\mu}_l$, $\vec{\mu}_s$ ва уларнинг йиғиндиси $\vec{\mu}_{\text{инт}}$ ҳам \vec{j} атропофида прецесссион ҳаракат қилади. $\vec{\mu}_l$, $\vec{\mu}_s$, $\vec{\mu}_{\text{инт}}$ векторларнинг \vec{j} йўналишидаги проекцияси сақланади, албатта. $\vec{\mu}_{\text{инт}}$ нинг \vec{j} йўналишга проекциясини $\vec{\mu}_j$ орқали белгилаймиз. $\vec{\mu}_{\text{инт}}$ нинг \vec{j} га перпендикуляр ташкил этувчисининг ташқи магнит майдони билан ўртача

ўзаро таъсири нолга тенг. Шунинг учун ташқи майдонда электрон ўзининг «эффektiv» магнит momenti $\vec{\mu}_j$ билан характерланади. Тўла момент \vec{j} билан $\vec{\mu}_j$ ўзаро антипараллелдир, яъни

$$\vec{\mu}_j = -g\mu_B \vec{j}, \quad (6.50)$$

бу ерда g — пропорционаллик коэффициенти бўлиб, Ланде фактори деб аталади.

Тўла момент (6.45) га мос қўйилувчи йигинди магнит momenti

$$\vec{\mu}_{\text{инт.}} = -\mu_B \vec{l} - 2\mu_B \vec{s} \quad (6.51)$$

га тенг. Бу вектор муносабатни \vec{j} йўналишга проекциялаймиз. Бунинг учун аввал (6.51) нинг икки томонини \vec{j} га скаляр кўпайтириб, \vec{j} нинг узунлигига бўламиз. У ҳолда $\vec{\mu}_j$ нинг

$$\mu_j = \frac{\vec{\mu}_{\text{инт.}} \cdot \vec{j}}{j} = -\mu_B \frac{\vec{l} \cdot \vec{j} + 2\vec{s} \cdot \vec{j}}{j}$$

га тенг қийматини аниқлаймиз. $\vec{\mu}_j$ векторнинг ўзи эса $\vec{\mu} = -\mu_B \frac{\vec{j}}{j} = -\mu_B \frac{\vec{l} \cdot \vec{j} + 2\vec{s} \cdot \vec{j}}{j^2} \cdot \vec{j} = -2g\mu_B \vec{j}$ га тенг. Охириги тенгликдан Ланде факторининг қуйидаги ифодаси

$$g = \frac{1}{j^2} (\vec{l} \cdot \vec{j} + 2\vec{s} \cdot \vec{j}) = \frac{1}{j^2} [l(l+s) + 2s(l+s)] = \frac{l^2 + 2s^2 + 3\vec{l} \cdot \vec{s}}{j^2}$$

ни ҳосил қиламиз. $(\vec{l} \cdot \vec{s})$ ни (6.49) дан аниқлаб, \vec{l}^2 , \vec{s}^2 , \vec{j}^2 лар учун квантлаш шартларидан фойдаланамиз. У ҳолда

$$2\vec{l} \cdot \vec{s} = \vec{j}^2 - \vec{l}^2 - \vec{s}^2 = \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)].$$

$(\vec{l} \cdot \vec{s})$ нинг бу ифодасини g учун ёзилган формулага қўйиб \vec{l}^2 , \vec{s}^2 , \vec{j}^2 ларнинг квантлаш шартларига кўра

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (6.52)$$

га келамиз. (6.50) га кўра Ланде фактори Бор магнетони бирлигида тўла магнит ва механик момент учун гиромангнит нисбат вазифасини бажаради. Агар бирор атом учун $S = 0$ бўлса, $J = L$ ва (6.52) дан $g = 1$ келиб чиқади. Тўла орбитал ҳаракат миқдори моменти нолга тенг атом учун эса, яъни $L = 0$ ва $J = S$ га $g = 2$ га, тенг бўлади. Ҳақиқатан ҳам, (6.32) га мос спин учун гиромангнит нисбат орбитал момент учун гиромангнит нисбатга қараганда икки марта каттадир.

40- §. Орбитал ва спин моментларининг ўзаро таъсири. LS- ва jj- боғланишлар

Спин-орбитал ўзаро таъсир. Атом спектрини экспериментал ўрганиш натижасида спектр чизиқларининг дублет характерга эга эканлиги аниқланди. Айни вақтда бу ҳодиса атом электронининг спин ва орбитал ҳаракат миқдори моментлари ўртасидаги магнит ўзаро таъсир асосида тушунтирилади. Мисол тариқасида водород атомини кўрамиз, яъни атомдаги биттагина электрон протондан иборат ядро Кулон майдонида ҳаракатланаётган бўлсин. Спин-орбитал ўзаро таъсирнинг мавжудлигини икки хил йўл билан кўрсатиш мумкин. Биринчидан, ҳаракатланаётган электроннинг орбитал магнит моменти $\vec{\mu}_l$ ҳар қандай магнит моменти сингари қуйидаги электр диполь моментига эга

$$\vec{d} = \frac{1}{c^2} [\vec{v}, \vec{\mu}_l].$$

Бу диполь моментини ядронинг кучланганлиги $\vec{\mathcal{E}}$ га тенг Кулон майдони билан ўзаро таъсир энергияси

$$E_{ls} = -(\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}}) = -\frac{1}{c^2} ([\vec{v}, \vec{\mu}_l] \cdot \vec{\mathcal{E}}) \quad (6.53)$$

га тенг. Бу ерда $\vec{\mathcal{E}}$ — электрон жойлашган нуқтада ядро Кулон майдони кучланганлиги. Демак, ядронинг Кулон майдони билан электрон орбитал магнит моменти $\vec{\mu}_l$ нинг ўзаро таъсир энергияси $l \neq 0$ ҳолларда нолдан фарқли бўлиши мумкин.

Спин-орбитал ўзаро таъсирнинг мавжудлигини қуйидаги содда классик модели ёрдамида ҳам тушунтириш мум-

кин. Ядро атрофида ҳаракатланаётган электрон билан боғлиқ саноқ системасига ўтайлик. У ҳолда электрон билан боғлиқ системада ядро электрон атрофида ҳаракатланади. У ўз ҳаракати натижасида электрон жойлашган нуқтада эффектив магнит майдон ҳосил қилади. Электроннинг спин магнит momenti μ_s ҳар қандай магнит момент сингари бу «ташқи» эффектив магнит майдон билан ўзаро таъсирлашади. Ушбу ўзаро таъсир энергияси

$$E_{LS} = -(\mu_s B_{\text{эфф.}})$$

га тенг бўлади. Ташқи эффектив магнит майдонга нисбатан электроннинг спин магнит momenti, маълумки, фақат икки хил йўналишга эга бўлади. Шунинг учун ўзаро таъсир энергияси

$$E_{LS} = \pm \frac{e\hbar}{2m_e c} B_{\text{эфф.}} = \pm \mu_B B_{\text{эфф.}} \quad (6.54)$$

га тенг икки хил қиймат қабул қилади. Шундай қилиб, атомда муайян квант ҳолатда жойлашган электрон энергияси спин-орбитал ўзаро таъсир йўқ ҳолидаги энергиясидан спиннинг йўналишига қараб $\mu_B B_{\text{эфф.}}$ га ортиқ ёки кам бўлади. Бунинг натижасида ҳар бир квант ($l = 0, S$ - ҳолатдан ташқари) ҳолатни иккита алоҳида ҳолатга, яъни спектр чизиғини иккитага ажралиш ҳодисаси юз беради. S -ҳолат ажралмайди, фақат силжийди холос.

LS- боғланиш. Атомнинг тўла ҳаракат миқдори momenti \vec{J} га бир неча электроннинг орбитал ва спин ҳаракат миқдори моментлари ҳисса қўшса, \vec{J} шу моментларнинг вектор йиғиндиси бўлиб қолаверади. Электронларнинг ўзаро таъсирда бўлишлиги сабабли, уларнинг орбитал ва спин моментларини қўшиш атом системасидаги мавжуд ўзаро таъсирлар характери билан аниқланувчи қоидаларга бўйсунди. Агар электронлар системасининг орбитал ва спин моментлари ўзаро таъсири ҳар бир электроннинг орбитал ва спин моментлари ўзаро таъсиридан кучли бўлса, электронлар системасида LS -боғланиш амалга ошади.

LS -боғланиш кўпинча Рассел-Саундерс ёки нормал боғланиш деб ҳам аталади. Эксперимент натижаларидан табиатда кўпчилик ҳолларда LS -боғланиш амалга оширилиши аниқланган. Шунинг учун ҳам атом тузилиши назариясида LS -боғланиш муҳим роль ўйнайди.

Энг оғир атомлардан ташқари ҳамма ҳолларда ўринли бўлган LS -боғланиш атомнинг ўзаро таъсирлашувдаги ҳар хил электронлар орбитал ҳаракат миқдори моментларини бир-бирлари билан қўшилиб атомнинг тўла орбитал ҳаракат миқдори моменти \vec{L} га, ҳар бир электроннинг спинлари эса атомнинг тўла спин моменти \vec{S} га бирлашиши йўли билан амалга оширилади. \vec{L} ва \vec{S} моментлар эса нисбатан кучсизроқ спин-орбитал ўзаро таъсир натижасида атомнинг тўла ҳаракат миқдори \vec{J} га бирлашади. LS -боғланишнинг схемасини қуйидагича тасвирлаш мумкин:

$$\left. \begin{aligned} \vec{L} &= \sum \vec{l}_i, \\ \vec{S} &= \sum \vec{s}_i, \\ \vec{J} &= \vec{L} + \vec{S}. \end{aligned} \right\} \quad (6.55)$$

$|\vec{L}|$, $|\vec{S}|$, $|\vec{J}|$, L_z , S_z , J_z лар одатдагидек квантланади ва уларга L , S , J , M_L , M_S ва M_J квант сонлари мос келади, яъни

$$\left. \begin{aligned} |\vec{L}| &= \hbar \sqrt{L(L+1)}, \quad L_z = \hbar M_L, \\ M_L &= -L, -L+1, \dots, L, \end{aligned} \right\} \quad (6.56a)$$

$$\left. \begin{aligned} |\vec{S}| &= \hbar \sqrt{S(S+1)}, \quad S_z = \hbar M_S, \\ M_S &= -S, -S+1, \dots, S, \end{aligned} \right\} \quad (6.56b)$$

$$\left. \begin{aligned} |\vec{J}| &= \hbar \sqrt{J(J+1)}, \quad J_z = \hbar M_J, \\ M_J &= -J, -J+1, \dots, J. \end{aligned} \right\} \quad (6.56b)$$

Бу ерда L ва M_L — ҳар доим бутун ёки нолга тенг, қолган квант сонлари эса ҳар доим ярим бутун (агар электронлар сони тоқ бўлса) ёки ҳар доим бутун ё нолга тенг (агар электронлар сони жуфт бўлса). LS -боғланишнинг вужудга келиши айрим орбитал ҳаракат миқдори моментларини битта умумий \vec{L} моментга ва шунинг сингари айрим спин ҳаракат миқдори моментларини битта умумий спин \vec{S} моментга бирлашишга олиб келувчи электростатик кучларнинг нисбатан кучли таъсири остида юз беради. Орбитал ҳаракат миқдори моментлари ўртасидаги ўзаро таъсири

қуйидагича тасаввур қилиш мумкин. Биз юқорида водород атоми мисолида ядро атрофида электрон зичлиги эҳтимоллиги $|\Psi|^2$ нинг водород атомининг ҳар хил ҳолатларида қандай ўзгаришини кўрган эдик (45-расмга қ.) Албатта, электрон зичлигининг мазкур тақсимоти бошқа атомларда янада мураккаб бўлади. Умуман, $|\Psi|^2$ тақсимот, $l = 0$ S -ҳолатдан ташқари ҳолларда сферик-симметрияга эга бўлмайди.

Зарядлар (электронлар) зичлигининг ассиметрик тақсимланиши сабабли атом электронлари орасидаги ўзаро электростатик таъсир электронлар ҳаракат миқдори моменти векторларининг нисбий йўналишига боғлиқ. Системанинг турғун ҳолатлари фақат баъзи қатъий нисбий йўналишлардагина мумкин бўлади. Электронларнинг бу турғун конфигурациялари (6.56а) га мувофиқ квантланувчи тўла орбитал ҳаракат миқдори моменти билан характерланади. Энг кичик энергияли конфигурация учун L нинг қиймати энг катта бўлади. Масалан, ядро атрофида битта Бор орбитасида иккита электрон ҳаракатланаётган бўлсин. Ўзаро электростатик итарилиш сабабли электронлар ядро атрофида бир йўналиш бўйича ҳаракатланишга интилади. У ҳолда электронларнинг тўла орбитал ҳаракат миқдори моменти $|\vec{L}|$ ортади. Аксинча, агар электронлар қарама-қарши йўналишда ҳаракатланганида, $|\vec{L}|$ камайган ва ўз ҳаракатида уларнинг тез-тез бир-бирига яқинлашишидан системанинг энергияси ортган бўлар эди.

Электрон спин моментларининг ўзаро таъсирини тасаввур қилиш мураккаброқ. Биз баъзи тушунчаларни баён этганимиздан сўнг кейинроқ бу масалага қайтамиз.

jj -боғланиш. Оғир атомларда ядро заряди шунчалик каттаки, \vec{l}_i ва \vec{s}_i лар ўртасида у вужудга келтирадиган спин-орбитал ўзаро таъсир электронлар ўртасидаги электростатик ўзаро таъсир билан тенглашади. Натижада LS -боғланиш бузилади (бу хил бузилиш кучли ташқи магнит майдонида ҳам юз беради). LS -боғланишнинг тўла бузилишида айрим электронларнинг тўла ҳаракат миқдори моментлари \vec{j}_i тўғридан-тўғри қўшилади. Шу йўл билан атомнинг ҳаракат миқдори моменти ҳосил бўлади. Электрон ҳаракат миқдори моментларининг бу хил қўши-

лишига, яъни электронларнинг атомдаги ушбу боғланишга (jj)- боғланиш деб аталади. (jj)- боғланишни қуйидаги схема орқали тасвирлаш мумкин:

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i, \quad i = 1 \dots, N, \quad (6.57a)$$

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^N \vec{j}_i. \quad (6.57b)$$

Боғланишларга мисол тариқасида $l = 0, 1$ ҳолатдаги иккита электроннинг ҳосил қилган конфигурациясини кўрамиз $l_1 = 0, l_2 = 1, s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ бўлсин. Рассел — Саундерс боғланишига кўра

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{L(L+1)}, \quad L = l_1 + l_2, \dots, |l_1 - l_2|; \quad L = 1$$

$$|\vec{S}| = \hbar \sqrt{S(S+1)}, \quad S = s_1 + s_2, \dots, |s_1 - s_2|; \quad S = 1, 0$$

$$|\vec{J}| = \hbar \sqrt{J(J+1)}, \quad J = L + S, \dots, |L - S|;$$

$$J = 1 \text{ ва } J = 2, 1, 0,$$

яъни тўртта сатҳга эга бўламиз. Бу тўртта сатҳ $J_1 = 1$ ва $J_2 = 2, 1, 0$ сатҳлардан иборат иккита бош термини ташкил этади. Иккинчи J_2 терм учта бир-бирига жуда яқин сатҳлардан иборат. (jj)- боғланишга кўра эса, аввал

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$$

$$|\vec{J}_1| = \hbar \sqrt{j_1(j_1+1)}; \quad j_1 = l_1 + s_1 \dots |l_1 - s_1|; \quad j_1 = \frac{1}{2},$$

$$|\vec{J}_2| = \hbar \sqrt{j_2(j_2+1)}; \quad j_2 = l_2 + s_2 \dots |l_2 - s_2|;$$

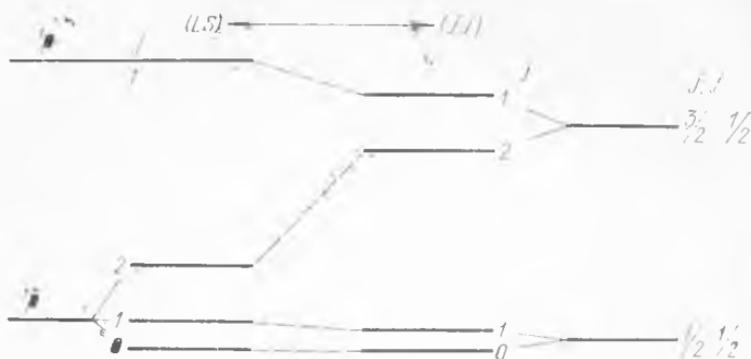
$$j_2 = 3/2 \text{ ва } 1/2.$$

\vec{l} ва \vec{s} ўртасидаги кучли ўзаро таъсир натижасида $j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ ҳолатлар бир-биридан катта фарқ қиладиган энергияга эга бўлади. \vec{j}_1 ва \vec{j}_2 ўртасидаги кучсиз боғланиш натижасида $\vec{J} = \sum \vec{j}_i$, яъни

$$|\vec{J}| = \hbar \sqrt{J(J+1)}; \quad J = j_1 + j_2, \dots, |j_1 - j_2|;$$

$$J = 2, 1 \text{ ва } 1, 0,$$

демак, яна тўрттагина сатҳ ҳосил бўлади. 57- расмда ушбу икки тип боғланишлар берадиган энергия сатҳлари тасвир-



57-расм. (LS) - ва (jj) -боғланишларнинг нисбий тасвири.

ланган. Шундай қилиб, бу икки тип боғланишда сатҳлар сони тенг экан. Ундан ташқари, системанинг тула ҳаракат миқдори моменти \vec{J} нинг қийматлари ҳам бир хил. Икки тип боғланишда ҳосил бўлган \vec{J} нинг қийматлари ўртасидаги мослик 57-расмда пунктир чизиқ билан тасвирланган.

Атомларда одатда Рассел—Саундерс боғланиш тез-тез учрайди. (jj) - боғланиш эса жуда кам учрайди. Қўпинча икки ҳолдан иборат оралиқ боғланиш учрайди. Рассел—Саундерс боғланишдан (jj) -боғланишга ўтиш атом номери ортиши билан юз беради.

41-§. Водород ва водородсимон атомлар сатҳларининг нозик структураси

Атом спектр чизиқларининг нозик структураси спин-орбитал ўзаро таъсир натижасида вужудга келади. Нозик структурани ўрганиш учун спин-орбитал ўзаро таъсирни ҳисобга олган ҳолда энергетик сатҳлар характерини аниқлаймиз. Бу масалани, осонлик учун, водород атоми мисолида қараб чиқамиз. Сифат жиҳатдан, олиб бориладиган фикр-мулоҳазалар водороддан бошқа ҳар қандай атомлар учун ҳам ўринли бўлади.

Водород ва водородсимон атомлар энергетик сатҳларининг ёки термларининг (5.39) формуласи электрон спинини ҳисобга олмайдиган норелятивистик, яъни Шредингер тенг-

ламасини ечишда келтириб чиқарилган эди. Терм қийматлари асосан бош квант сони n га боғлиқ.

Агар атом тўлқин тенгламасида электроннинг релятивистик массасини ва спинини ҳисобга олсак, атомнинг олдинги термларига тузатма ΔE_{nj} киритиш керак бўлади, чунки электрон спини туфайли қўшимча квант сони вужудга келди; $j = l \pm \frac{1}{2}$. Релятивистик ва спин эффектларини ҳисобга оладиган тўлқин тенглама 1928 йилда Дирак томонидан таклиф қилинган. Водород ва водородсимон атомлар учун бу тенгламанинг ечими термларнинг қуйидаги формуласига олиб келади:

$$E_{nj} = E_n - \frac{Rh\alpha^2 Z^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) = E + \Delta E_{nj}, \quad (6.58)$$

бу ерда α — нозик структура доимийси бўлиб,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \quad (6.59)$$

Z — атом ядросининг заряд сони; E_n — атомнинг (5.39) орқали аниқланувчи энергетик сатҳи; ΔE_{nj} — сатҳларнинг нозик ажралишига сабабчи бўлган тузатма. (6.58) нинг иккинчи (тузатма) ҳадига нозик структура доимийсининг квадрати киради ва у сатҳларнинг спин-орбитал ўзаро таъсир сабабидан вужудга келадиган ажралишининг нозиклигини ифодалайди.

Биз юқорида кўрдикки, $l \neq 0$ да электрон маълум магнит моментга эга ва шунинг учун маълум магнит майдон $\vec{B}_{\text{эфф}}$ вужудга келтиради. Бу майдон йўналишида электроннинг спини иккита қиймат қабул қилиши мумкин, чунки $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Шундай қилиб, $l \neq 0$ электрон учун $j_1 = l + \frac{1}{2}$; $j_2 = l - \frac{1}{2}$ характерловчи иккита ҳолат мумкин. j нинг берилган қийматида тўла m_j магнит квант сони j дан $-j$ гача ўзгариб $(2j + 1)$ та қиймат қабул қилади. Демак, берилган n, l, j учун айниш даражаси

$$g_j = 2j + 1 \quad (6.60)$$

га тенг. Ёки j ни l билан боғланишини ҳисобга олсак, берилган n ва l учун мумкин бўлган ҳолатлар сони, яъни айниш даражаси

$$\begin{aligned}
 g_l &= \sum_{l=l-\frac{1}{2}}^{l+\frac{1}{2}} (2j+1) = \\
 &= \frac{\left[2\left(l-\frac{1}{2}\right)+1\right] + \left[2\left(l+\frac{1}{2}\right)+1\right]}{2} (2s+1) = \\
 &= 2(2l+1) \quad (6.61)
 \end{aligned}$$

бўлади.

31-§ да сатҳларнинг айнаш даражасини ҳисоблаганимизда спин-орбитал ўзаро таъсирни ва у билан боғлиқ ажралишни ҳисобга олмаган эдик ва шунинг учун, айнаш даражаси (5.41) га биноан n^2 га тенг. Агар (5.41) да ҳар бир m_l учун иккита $m_s = \pm \frac{1}{2}$ ни ҳиссасини ҳисобга олсак,

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2$$

айниш даражасига эга бўламиз.

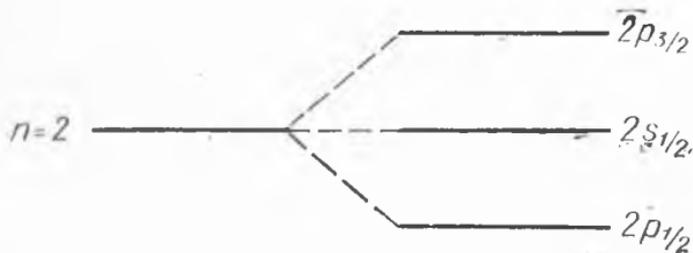
Спин-орбитал ўзаро таъсирда илгари мумкин бўлган $2n^2$ айнаш қисман йўқолади. Чунки энди ташқи майдон бўлмаганда ҳам спин-орбитал ўзаро таъсир сабабли тўла ҳаракат миқдори momenti j нинг сақланиши ўринли бўлади. Бунда сатҳларнинг фақат тўла ҳаракат миқдори momenti проекцияси бўйича айнашигина сақланади.

Мисол тариқасида водород атомининг муайян n билан характерланувчи сатҳларини кўрайлик. Агар $l = 0$ бўлса, $j = \frac{1}{2}$, яъни биргина қиймат қабул қилади. $l \geq 1$ да эса $j = l \pm \frac{1}{2}$, яъни берилган n ва l учун (6.58) га биноан энергияси ҳар хил иккита ҳолат мумкин. Ҳар бир $l \neq 0$ учун энергетик сатҳларни дублет ажралишига сабаб спин-орбитал ўзаро таъсирдир. 58-расмда водород атоми $n = 2$ сатҳининг спин-орбитал ажралиши тасвирланган. Берилган n учун $l = 0, \dots, n-1 = 0, 1$ га тенг. $l = 0$ сатҳ ажралмайди. $m_s = \pm \frac{1}{2}$ билан характерланувчи иккита

S- ҳолатлар бир хил энергияга эга, чунки $l = 0$ учун спин-орбитал ўзаро таъсир нолга тенг. Демак, бу сатҳ

учун айниш сақланади. $l = 1$ бўлган сатҳ $j = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ ва $j = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ билан фарқланувчи икки сатҳга ажралади. Бу ҳолатлар расмда қуйидагича тасвирланган (орбитал ҳаракат миқдори моменти l бир хил, лекин энергияси ҳар хил сатҳларни j квант сонининг қийматини ҳисобга олиш билан бир-биридан фарқ қилиш мумкин). Расмда l сонининг 0, 1, 2, 3, . . . қийматлари, мос равишда, кичик латин ҳарфлари s, p, d, f орқали белгиланган. n сонининг қиймати эса ушбу ҳарфлар олдига ёзилган. j нинг қиймати шу ҳарфларнинг ўнг томонида индексга ёзилган. Қўрамизки, ҳар қандай берилган n учун дастлаб битта бўлган сатҳнинг l бўйича айниши йўқолар ва ҳар бир $l \neq 0$ сатҳ яна 2 га ажралар экан. Берилган n учун l квант сони 0 дан $n - 1$ гача ўзгариши, яъни n та қиймат қабул қилини бизга маълум. l нинг n та қийматларидан $n - 1$ таси яна иккитадан сатҳ ҳосил қилади. У ҳолда, берилган n да битта сатҳдан ажралган сатҳларнинг умумий сони $1 + 2(n - 1) = 2n - 1$ га тенг бўлади. Бошқача айтганда, дастлаб мавжуд $2n^2$ айнишдан спин-орбитал ўзаро таъсир сабабли $2n - 1$ таси йўқолади.

Аммо релятивистик ва спин-орбитал эффектларни ҳисобга олувчи (6.58) даги қўшимча тузатма энергия l дан фақат j орқали боғланган, яъни j квант сони бир хил, лекин l квант сони ҳар хил сатҳлар устма-уст тушади, масалан, расмдаги $2s_{1/2}$ ва $2p_{1/2}$. Бу шуни билдирадики, водородсимон атом учун энергияси берилган n да (6.58) га тенг ҳар бир сатҳ $j = l + s$ нинг $l = 0$ даги $1/2$ дан $l = n - 1$



58 - расм. Водород атоми сатҳининг спин-орбитал ажрალიши.

n	l	j	Симболи Сатҳ	H	H_e^+
3	7/2	4 ² F _{7/2}	[]	0,0075 см ⁻¹	0,12 см ⁻¹
		4 ² F _{5/2}			
		4 ² F _{3/2}			
4	5/2	4 ² D _{5/2}	[]	0,015 см ⁻¹	0,24 см ⁻¹
		4 ² D _{3/2}			
		4 ² D _{1/2}			
1	1/2	4 ² P _{3/2}	[]	0,046 см ⁻¹	0,73 см ⁻¹
		4 ² P _{1/2}			
		4 ² S _{1/2}			
2	3/2	3 ² D _{3/2}	[]	0,036 см ⁻¹	0,57 см ⁻¹
		3 ² D _{1/2}			
		3 ² P _{3/2}			
3	1/2	3 ² P _{3/2}	[]	0,108 см ⁻¹	1,72 см ⁻¹
		3 ² P _{1/2}			
		3 ² S _{1/2}			
1	1/2	2 ² P _{3/2}	[]	0,366 см ⁻¹	5,86 см ⁻¹
		2 ² P _{1/2}			
		2 ² S _{1/2}			
1	0	1/2	1 ² S _{1/2}	—	—

59-расм. Ҳолатларни j ёки l бўйича группалаш.

лари билан характерланувчи энергетик сатҳларнинг устма-уст тушиши энергия қийматига спин-орбитал ўзаро таъсир тузатмаси билан электрон массаси тезликка релятивистик боғлиқлигининг тузатмаси ўзаро қисқариши сабабли юз беради. Бу икки эффектнинг энергия қиймати E_n га киритган

$$\Delta E_{nj} = - \frac{R h Z^4 \alpha^2}{n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (6.62)$$

га тенг тузатмаси ажралишнинг абсолют қийматини характерлайди. Нисбий ажралиш эса

$$\frac{|\Delta E_{nj}|}{|E_n|} = \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \quad (6.63)$$

га тенг.

Водород ва водородсимон атом спектрларини экспериментда кузатиш бу муносабатларнинг тўғрилигини кўрсатди, яъни n квант сонининг ортишида ажралишнинг абсолют қиймати $\frac{1}{n^3}$ га пропорционал равишда камаяди,

даги $n - 1/2$ гача ўзгарувчи қийматлари сонига тенг n та сатҳга ажралади. Бу ҳолни 59-расмдан яққол кўрсак бўлади. Расмда сатҳлар умум қабул қилинган белгилашларда берилган. Латин ҳарфларининг чап томонида юқорига $2s + 1$ қиймат ёзилган. Бизнинг ҳолда $2s + 1 = 2$.

Энергетик сатҳлар ажралишининг кутилмаган бу ҳолни фақат водород ва водородсимон атомларда мавжуд. Тула ҳаракат миқдори моменти j нинг ва бош квант сони n нинг бир хил, орбитал ҳаракат миқдори l нинг эса ҳар хил қийматлари

атом ядроси заряд сони Z нинг ортиши билан эса Z^4 га пропорционал ортади. Нисбий ажралиш n нинг ортиши билан $1/n$ га пропорционал камаяди, Z нинг ортиши билан эса Z^2 га пропорционал ортади.

42- §. Магнитомеханик эффектлар

Механик ва магнит моментларга бағишланган бу бобни якунлашдан аввал магнитомеханик ҳодисаларнинг баъзилари билан танишамиз. Атомнинг механик ва магнит моментлари ўзаро (6.50) муносабат билан боғланган. (6.50) муносабатга кўра, агар атом магнит моментининг фазодаги йўналиши ўзгарса, унинг механик моментининг ҳам ўзгариши юз беради. Агар атом магнит моментининг қиймати, бирор сабабга кўра ўзгарса, бу ҳол, мос равишда, механик momenti қийматининг ҳам ўзгаришига олиб келади. Шунингдек, механик моментнинг ўзгариши билан магнит моментнинг ўзгариши юз беради. Атом магнит ва механик моментларининг бу хил боғлиқлиги асосида юз берадиган ҳодисалар *магнитомеханик эффектлар* деб ном олган.

Магнитланувчи қаттиқ жисм берилган бўлсин. Агар биз жисмни магнитласак, у ҳолда жисм атомларининг магнит моментлари асосан магнитлантириш йўналиши бўйича жойлашади. Шу сабабли жисм атомлари ўз механик momenti йўналишини магнитлантириш йўналиши бўйича ўзгартиради. (6.50) муносабатни иккала томонини жисмнинг ҳамма атомлари бўйича йиғсак, жисм магнит momenti

$$\vec{p} = \sum_k \vec{\mu}_{jk} \quad (6.64)$$

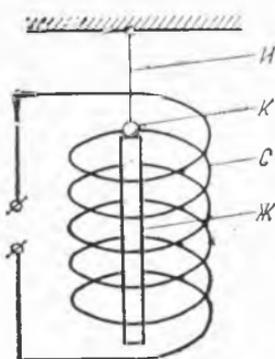
ва атомларнинг натижавий механик momenti

$$\vec{Q} = \sum_k \vec{J}_k \quad (6.65)$$

дан иборат макроскопик катталиклар ўртасидаги муносабат

$$\vec{p} = -q\vec{Q} \quad (6.66)$$

га келамиз. Жисмнинг магнитланиши ўзгартирилса, атомларнинг натижавий механик momenti ўзгаради. Агар жисмни яхлит ҳолда ёпиқ система деб қарасак, унинг ме-



60- расм. Эйнштейн — де Гааз тажрибасининг схемаси.

ханик momenti атомлар натижавий механик momenti билан жисмнинг яхлит тарздаги механик momentининг йиғиндисидан иборат бўлади. Ёпиқ системанинг тўла механик momentининг сақланиш қонунига асосан атомлар натижавий механик momenti ўзгариши жисмнинг яхлит тарздаги механик momentининг ҳам тескари қийматга ўзгаришини вужудга келтиради. Демак, жисмнинг магнитланиши ўзгарса, жисм яхлит ҳолда маълум ҳаракат миқдори momenti $Q_{ж}$ га эга бўлади.

Эйнштейн ва де-Гааз тажрибаси.

Магнит ва механик momentлар ўртасидаги юқорида айtilган боғланиш биринчи марта Эйнштейн ва де-Гааз тажрибасида кузатилган. 60- расмда тажрибанинг принципиал схемаси берилган. Токли соленоид C ичида ингичка кварц I ипга цилиндр шаклидаги магнитланувчи қаттиқ жисм $Ж$ осилган. Жисмга K кўзгу бириктирилган. Соленоид ғалтаги орқали ток ўтказилса, жисм магнитланади ва бурилади. Ғалтадаги ток йўналишини ўзгартирсак, жисм тескари томонга бурилади. Жисмнинг бурилишлари кўзгудан қайтган ёруғлик шуъласи ёрдамида кузатилиши мумкин.

Жисмга ташқи куч қўйилмаганлиги сабабли унинг тўла ҳаракат миқдори momenti сақланиши керак, яъни

$$\vec{Q} + \vec{Q}_{ж} = \text{const}$$

(бошланғич ҳолатда жисм ҳаракатсиз деб олинса, const нолга тенг бўлади). У ҳолда (6.66) муносабатдан жисм атомлари натижавий магнит momentининг кичик ўзгариши $\delta \vec{p}$ билан боғлиқ (яхлит ҳолдаги) жисм ҳаракат миқдори momentининг кичик ўзгариши учун қуйидаги ифодани ёзишимиз мумкин:

$$\delta \vec{Q}_{ж} = -\frac{1}{q} \delta \vec{p}.$$

Жисмнинг δp магнитланиши натижасида у δQ ҳаракат миқдори momentига эга бўлади ва ўз ўқи атрофида бури-

лади. Бу эса кварц ипни буралишига олиб келади. Кварц ипнинг механик эластиклик параметрларини ва жисмнинг бурилиш бурчагини билган ҳолда q коэффициентни аниқлаш мумкин. У эса гиромагнит нисбатни беради.

Эйнштейн ва де-Гааз тажрибаларида магнитланувчи жисм сифатида парамагнит ва ферромагнит моддалар ишлатилган. Кузатилувчи эффект парамагнитлар учун жуда кичик бўлиб чиқди ва шунинг учун резонанс ҳодисаси қўлланилди: галтакдаги токнинг ўзгариш частотасини жисмнинг ўз ўқи атрофида айланиш частотасига тенг қилиб танланди. Натижада жисмнинг бурилиш амплитудаси сезиларли даражада ошди. Ферромагнит моддадан тайёрланган жисмнинг бурилиши бусиз ҳам етарли даражада катта бўлади.

Эйнштейн ва де-Гааз тажрибалари магнитомеханик эффектнинг мавжудлигини тасдиқлади. Тажрибада аниқланган гиромагнит нисбатнинг қиймати кутилгандан кўра икки марта катта бўлиб чиқди. Ўз вақтида бу натижа тушунарсиз эди, чунки электроннинг орбита бўйлаб ҳаракати тасаввурга биноан гиромагнит нисбат (6.26) даги қийматга тенг бўлиши керак эди. Тажрибада эса магнит ва механик моментларининг (6.32) бўйича аниқланган нисбатига тенг қиймат олинди, яъни спин гиромагнит нисбат қиймати келиб чиқди. Кейинчалик электроннинг спини кашф қилингандан сўнг, тажрибада аниқланган гиромагнит нисбатининг қийматига биноан, ферромагнит моддаларнинг магнит хоссаси электроннинг спини билан боғлиқ деб тушултириш мумкин бўлди.

Барнет эффекти. Эйнштейн ва де-Гааз эффектига тескари магнитомеханик эффектга *Барнет эффекти* деб аталади. Фараз қилайлик, расмда кўрсатилган жисм ташқи таъсир остида бурила бошласин. Атомдаги электронларнинг айланма ҳаракати туфайли жисмнинг ҳар бир атоми кичик гироскоп сифатида қараш мумкин. Бу кичик гироскоплар ўз айланиш ўқини, яъни ҳаракат миқдори моментини ва у билан боғлиқ магнит моментини сақлашга интилади. Жисмнинг яхлит ҳолда айланишида моментларнинг йўналиши сақланиши учун атомнинг (ёки электрон орбитасининг) прецессион ҳаракати ҳосил бўлади. Атомларнинг бу ҳаракати (51- расмга қ.) жисмнинг магнитланиши билан эквивалентдир. Демак, жисмнинг айланишида у маг-

нитланиши мумкин. Магнитланиш йўналиши айланиш ўқи билан мос бўлади. Магнитланиш қиймати эса айланишнинг бурчак тезлигига пропорционал бўлади. Атомлар прецессион ҳаракатининг бурчак тезлиги атомлар прецессиясининг Лармор частотасига тенг, яъни

$$\omega_L = \frac{eB}{2m_e c} = \gamma B. \quad (6.67)$$

У ҳолда жисмнинг ω бурчак тезлик билан айланиши уни B магнит майдонга жойлашиши билан эквивалентдир:

$$B = \omega/\gamma.$$

Эксперимент натижалари Барнет эффектани ҳам миқдор, ҳам сифат жиҳатдан тасдиқлади. Ферромагнит моддалардан ясалган жисмда ўтказилган тажрибадан аниқланган гиромагнит нисбат магнит ва механик моментларнинг (6.32) дан аниқланган нисбатига тенг бўлиб чиқди. Бу эса модда ферромагнитизми табиатини спин характерга эга эканлигини яна бир марта тасдиқлайди.

VII БОБ

МУРАҚҚАБ АТОМЛАР

43-§. Атом спектр чизиқларининг табиати

Шу пайтгача бир спектр чизиқларининг вужудга келиш табиатини квант нуқтаи назардан тушунтирмадик. Н. Бор водород атоми назариясини яратишда атом ҳолатининг бир энергетик сатҳ E_m дан нисбатан паст иккинчи энергетик сатҳ E_n га ўтишидаги чиқарадиган нурланиш частотасини $\nu = (E_m - E_n)/h$ га тенг деб фараз қилишга мажбур бўлган эди. Ҳозир биз квант механикасида бу муносабатни табиий равишда ҳосил бўлишини кўрсатамиз.

Асосий ҳолатдаги атомда электронлар энг паст энергетик сатҳларни эгаллаган бўлади. Атомнинг уйғотилган ҳолатида эса битта ёки бир неча электрон нисбатан юқори энергетик сатҳларда бўлади ва шунинг учун паст сатҳлар шунча электронларга тўлдирилмаган бўлади. Электронларнинг паст сатҳларига қайтиб ўтиши нурланиш чиқариш билан юз беради. Демак, электроннинг ядрогача бўлган «ўртача масофаси» ўзгармаса, атом энергия кванти нурламайди. Энергия квантининг чиқарилиши учун атом ядроси атрофидаги электрон маълум осцилляцион ҳаракат қилиши, яъни юқори энергетик сатҳдан пастки сатҳга ўтиши керак. Электроннинг ядрогача бўлган ўртача масофаси ўзгаришининг бир ўлчовли квант масаласини кўрайлик. Осцилляцион ҳаракатни x ўқи бўйича юз беради деб фараз қиламиз.

Ҳолати n квант сони билан характерланувчи E_n энергетик сатҳдаги электроннинг вақтга боғлиқ тўлқин функцияси (4.18) га биноан, вақтга боғлиқ бўлмаган $\psi(x)$ функциясининг вақт бўйича $\nu_n = E_n/h$ частота билан ўзгарувчи $\varphi(t)$ функцияга кўпайтмаси тарзида ифодаланади, яъни

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}.$$

Мазкур электроннинг ядрогача бўлган ўртача масофаси учун (4.37) га биноан

$$\begin{aligned} \bar{x}_n &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* x \Psi_n dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx \cdot e^{+\frac{i}{\hbar} E_n t - \frac{i}{\hbar} E_n t} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* x \psi_n dx \end{aligned} \quad (7.1)$$

ифода ҳосил бўлади.

Демак, стационар ҳолатдаги атомда электроннинг ядрогача бўлган ўртача масофаси вақт бўйича ўзгармас экан. Стационар ҳолатдаги бу электрон нурланиш чиқаришда қатнашмайди. Шундай қилиб, квант механикасига биноан маълум стационар квант ҳолатдаги атом нурланиш чиқармайди.

Энди атомда электроннинг бир энергетик сатҳдан иккинчи энергетик сатҳга ўтиш масаласини кўрайлик. Албатта, бу жараёни қуйидагича тасаввур қилишимиз керак. Дастлаб, бошланғич вақтда, асосий ҳолатдаги атомга бирор ташқи таъсир кўрсатилади, яъни атомни уйғотилган ҳолатга ўтказамиз, сўнгра эса у E_m энергияга эга уйғотилган ҳолатдан асосий n ҳолатга нурланиш чиқариш йўли билан ўтади. Умуман, атом уйғотилган m ҳолатида бирор вақт давомида мавжуд бўлиши (яшаши) мумкин. Фараз қилайлик, электрон фақат шу иккита ҳолатдагина мавжуд бўла олсин. У ҳолда электроннинг бу икки ҳолатда бўлишини тасвирлайдиган тўлқин функцияси n ва m ҳолатларнинг

$$\Psi = a_n \psi_n + a_m \psi_m \quad (7.2)$$

кўринишдаги суперпозициясидан иборат бўлади. Бу ерда $|a_n|^2$, $|a_m|^2$ — мос равишда электроннинг n ва m ҳолатда мавжуд бўлиш эҳтимолини ифодалайди. Электроннинг атомда умуман мавжудлигининг эҳтимоли бирга тенг, албатта, яъни $\int |\Psi|^2 dx = 1$. Бошланғич вақтда электрон фақат n ҳолатда бўлиши учун (7.2) да $a_n = 1$ ва $a_m = 0$; $\int |\Psi|^2 dx = |a_n|^2 \int |\psi_n|^2 dx = 1$ дан эса $\int |\psi_n|^2 dx = 1$ келиб чиқади. Атом уйғотилган ҳолатда мавжуд бўлган вақтда

эса (7.2) да $a_n = 0$ ва $a_m = 1$; $\int |\Psi|^2 dx = |a_m|^2 \int |\psi_m|^2 dx = 1$ дан $\int |\psi_m|^2 dx = 1$ келиб чиқади. Вақтнинг шу икки моментлари орасида эса $\int |\psi|^2 dx = 1$ дан

$$|a_n|^2 + |a_m|^2 = 1 \quad (7.3)$$

ифодага келамиз.

Электрон шу икки энергетик сатҳларнинг бирида мавжуд бўлганида нурланиш юз бермайди, лекин электроннинг юқори энергетик сатҳдан пастки сатҳга ўтишида нурланиш рўй беради. Нурланиш жараёнида электроннинг ядрогача бўлган ўртача масофасини ҳисоблаймиз:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} (a_n^* \psi_n^* + a_m^* \psi_m^*) x (a_n \psi_n + a_m \psi_m) dx = \\ &= \bar{x}_n |a_n|^2 + \bar{x}_m |a_m|^2 + \bar{x}_{mn}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Бу ерда биз n ва m ҳолатларнинг ўртача масофасини (7.1) га мос равишда, \bar{x}_n ва \bar{x}_m орқали белгиладик. \bar{x}_{mn} орқали эса электроннинг ўтиш жараёни учун ўртача масофани белгиладик:

$$\begin{aligned} \bar{x}_{mn} &= a_n^* a_m \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi_m^* \psi_n e^{+\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n)t} dx + \\ &+ a_m^* a_n \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi_n^* \psi_m e^{+\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m)t} dx \end{aligned} \quad (7.5)$$

Боғланган чекли системанинг икки ҳолати (сатҳ) га оид квант механикаси масаласидан

$$\psi_n^* \psi_m = \psi_m^* \psi_n \text{ ва } a_n^* a_m = a_m^* a_n$$

муносабатларни ҳосил қилиш мумкин. Шунинг учун (7.5) ифодада вақтга боғлиқ экспонента функцияларни бирлаштириш мумкин, яъни

$$\bar{x}_{mn} = a_n^* a_m \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi_n^* \psi_m [e^{+\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n)t} + e^{-\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n)t}] dx.$$

Ўрта қавс ичидаги экспоненталарни синус ва косинуслар орқали

$$e^{\pm iy} = \cos y \pm i \sin y$$

ифодаси билан алмаштириб ва интеграл ташқарисига ёз-
сак, \bar{x}_{mn} учун қуйидаги содда ифодага келамиз:

$$\bar{x}_{mn} = 2a_n^* a_m \cos [(E_m - E_n) t / \hbar] \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_m dx. \quad (7.6)$$

Шундай қилиб, \bar{x}_{mn} учун вақтга қуйидагича боғлиқ

$$\cos [(E_m - E_n) t / \hbar] = \cos [2\pi (E_m - E_n) t / \hbar] = \cos (2\pi \nu t)$$

ифодани ҳосил қиламиз. \bar{x}_{mn} нинг бу каби вақтга боғлиқ-
лигидан электроннинг нурланиш жараёнидаги ядрогача
бўлган ўртача масофасининг

$$\nu = (E_m - E_n) / \hbar \quad (7.7)$$

га тенг частота билан характерланувчи

$$\cos (2\pi \nu t)$$

осцилляция қонун билан ўзгариши келиб чиқади. Элек-
троннинг ядрогача бўлган ўртача масофасини унинг тула
ифодаси (7.4) ва (7.6) дан қуйидагича аниқлаймиз:

$$\begin{aligned} \bar{x} = & |a_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_n dx + |a_m|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_m^* \psi_m dx + \\ & + 2a_n^* a_m \cos 2\pi \nu t \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_m dx. \end{aligned}$$

Электрон n ёки m стационар ҳолатда бўлганида охириги
ҳад ва $|a_m|^2$ ёки $|a_n|^2$ (ҳолатга мос равишда) катталиқ нол-
га тенг бўлади. Атомнинг нурланиш жараёнида эса элек-
трон бу икки ҳолат билан ифодаланувчи осцилляция
ҳаракат қилади, натижада унинг ядрогача бўлган ўртача
масофаси (7.7) частота билан ўзгаради. Бу частота тажри-
бада аниқланади ва нурланиш частотаси деб аталади. Шун-
дай қилиб, нурланиш частотаси (7.7) квант механикасида
табiiй равишда келиб чиқади.

44-§. Дипол нурланиш

Классик электродинамикага асосан x ўқи бўйича ос-
цилляция ҳаракатининг

$$P = \pm ex = \pm P_0 \cos \omega t \quad (7.8a)$$

га тенг диполь моментини вужудга келтирувчи $\pm e$ заряд A амплитудали чизикли гармоник

$$x = A \cos \omega t$$

тебранишда бўлса фазонинг ҳамма томонларига чиқарилаётган нурланиш (чунки заряднинг ҳар қандай тезланишли ҳаракатида у нурланиш йўли билан энергия йўқотди) энергиясининг қуввати $P_0^2 = (eA)^2$ га пропорционал бўлади:

$$W = \frac{16\pi^4}{3c^2} v^4 |P_0|^2 \quad (7.8)$$

Бу ерда $v = \omega/2\pi$. Шу нарсани эслатиш зарурки, диполь деганда ўзаро маълум масофада жойлашган икки қарама-қарши зарядларнинг, яъни яхлит ҳолда нейтрал система (масалан, атом) нинг осцилляция ҳолати тушунилади.

Нурланиш энергиясининг (7.8) қувватига тўғри келадиган фотонлар сонни фотонларнинг квант тушунчасига асосан

$$\frac{W}{h\nu} = \frac{16\pi^4}{3hc^3} v^3 |P_0|^2 \quad (7.9)$$

га тенг.

Ядро ва электрондан иборат квант системани диполь сифатида қарасак, системанинг (7.6) осцилляция ҳаракати атомнинг энг муҳим диполь нурланишига олиб келади. (7.6) ни қуйидаги кўринишда ёзайлик:

$$\bar{x}_{mn} = 2a_n^* a_m \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_m dx \cdot \cos 2\pi \nu t = A \cos \omega t \quad (7.10)$$

Бу ерда A — шартли равишда осцилляция ҳаракат амплитудасини билдиради ва

$$A = 2a_n^* a_m \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_m dx = 2a_n^* a_m P'_{nm} \quad (7.11)$$

каби аниқланади. (7.8) га назар ташласак,

$$P_0^2 = e^2 A^2 = 4e^2 (a_n^* a_m)^* (a_n^* a_m) |P'_{nm}|^2 = 4 |P_{nm}|^2, \quad (7.12)$$

чунки $|a_n|^2 = |a_m|^2 = 1$. У ҳолда квант механикасига асосан (7.9) ифода қуйидаги кўринишда ёзилади:

$$\frac{W_{nm}}{h\nu_{nm}} = \frac{64\pi^4}{3c^3h} \nu_{nm}^3 |P_{nm}|^2, \quad (7.13)$$

бу ерда W_{nm} — атом системасидан (тўғрироғи водороддан) бирлик вақт ичида нурланаётган энергия.

$$P_{nm} = e \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx \quad (7.14)$$

системанинг E_m энергетик сатҳдан E_n энергетик сатҳга диполь ўтиш моменти.

Маълумки, бирлик вақтда ёпиқ системадан нурланаётган ν_{nm} частотали фотонларнинг тўла сони система-нинг E_m энергетик сатҳдан E_n га ўтиш эҳтимоли N_{nm} билан аниқланади, яъни

$$N_{nm} = \frac{W_{nm}}{h\nu_{nm}} = \frac{64\pi^4}{3hc^3} \nu_{nm}^3 |P_{nm}|^2. \quad (7.15)$$

Ҳосил бўлган формула системанинг оддий энергетик сатҳлари орасидаги ўтишлар учун ўринли. Худди шу йўл билан системанинг айниган сатҳлари орасидаги ўтишларни ҳам тасвирлаш мумкин.

45-§. Танлаш қондаси

Юқорида кўрдикки, системанинг икки ҳолати ўртасидаги ўтишлар $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x \psi_m dx$ — интеграл қиймати билан ха-

рактерланар экан. Бу интегралнинг чекли қийматларига мос келувчи квант ўтишларни тақиқланмаган ўтишлар деб атаймиз. Ҳолат функциялари ψ_i нинг чеклилик хоссасига кўра интеграл чекли ёки нолга тенг бўлиши керак. Интеграл нолга айланувчи ўтишларни *тақиқланган ўтишлар* деб атаймиз.

Спин характеристикаларни ҳисобга олмасак, система-нинг бошланғич ва охири ҳолатлари учта квант сони: n, l, m_l билан аниқланади. Электромагнит нурланиш вужудга келиши учун атом ҳолатининг нурланишгача n', l', m'_l ва нурланишдан кейинги n, l, m_l квант характеристикалари *танлаш қондалари* деб аталувчи қондаларга бўйсунушлари керак. Квант механикасида танлаш қондалари табиий равишда вужудга келади. Танлаш қондаси система учун квант ўтишларининг тақиқланиш ёки тақиқ-

ланмаслигини ифодалайди. Мисол тариқасида водород атоми масаласини кўрамиз. Водород атоми учун тўлқин функция бизга маълум. У ҳолда атомнинг диполь ўтишини характерловчи (7.14) каби интеграл

$$\int \psi_{n l m_l}^* u \psi_{n' l' m_l'} dV \neq 0 \quad (7.16)$$

ни $u = x$, $u = y$, $u = z$ бўлган ҳолларда квант сонларининг камида биттаси фарқ қиладиган ҳар хил жуфт ҳолатлар учун ҳисоблаш мумкин. Агар биз (7.16) интеграллашни бажарсак, у нолдан фарқли бўлиши учун

$$\left. \begin{aligned} \Delta l &= 0, \pm 1 \quad (l_{\text{бошл.}} \neq 0 \text{ ва } l_{\text{охир.}} \neq 0, \\ \Delta l &= \pm 1 \quad (l_{\text{бошл.}} = 0 \text{ ва } l_{\text{охир.}} = 0), \\ \Delta m_l &= 0, \pm 1 \end{aligned} \right\} \quad (7.17)$$

шартларга келамиз. Бош квант сонининг ўзгариши ихтиёрий кўринишда бўлиши мумкин. (7.17) шартлар тақиқланмаган квант ўтишлар учун танлаш қондалари деб аталади.

Магнит квант сони m_l учун (7.17) шарт осон келтириб чиқарилиши мумкин. Бунинг учун (7.16) ни водород атоми учун бажариш керак. Ҳажм элементи dV ни сферик координаталарда аниқлаймиз. x , y , z ўзгарувчиларнинг сферик координаталар орқали ёзилган ифодаси

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

дан ҳажм элементи учун

$$dV = dx dy dz = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi$$

га келамиз. У ҳолда $u = x$ учун (7.16) дан

$$\begin{aligned} \bar{u}_x &= \int x \psi_{n l m_l}^* \psi_{n' l' m_l'} dV = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi r \sin \vartheta \cos \varphi, \\ &\quad \psi_{n l m_l}^* \psi_{n' l' m_l'} r^2 \cdot \sin \vartheta. \end{aligned}$$

Водород атоми тўлқин функциясини (4.111), (4.112), (4.113) каби нормаланган учта функция кўпайтмаси (4.104) кўринишида ифодаласак бўлади:

$$\psi_{n, l, m_l}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) \theta_{lm_l}(\vartheta) \Phi_{m_l}(\varphi).$$

У ҳолда юқоридаги интеграл

$$\bar{u}_x = \int_0^{\infty} r^3 R_{n,l}^*(r) R_{n',l'}(r) dr \int_0^{\pi} \sin^2 \vartheta \Theta_{lm_l}^*(\vartheta) \Theta_{l'm_l'}(\vartheta) d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m_l'}^3 \cos \varphi d\varphi$$

кўринишга келади. Φ функциянинг (4.124) ифодасини учинчи интегралга қўямиз:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m_l'} \cos \varphi d\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(m_l - m_l')\varphi} \cos \varphi d\varphi = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \left\{ e^{-i(m_l - m_l' - 1)\varphi} + e^{-i(m_l - m_l' + 1)\varphi} \right\} d\varphi. \end{aligned}$$

Бу ерда m_l, m_l' квант сонлари, мос равишда, $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ ва $0, \pm 1, \dots, \pm l'$ га тенг бўлганлиги сабабли $(m_l - m_l' - 1)$ ва $(m_l - m_l' + 1)$ сонлар ноль ёки $\pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$ қийматларга тенг бўлади.

Охирги интеграл остидаги экспоненталар кўрсаткичи нолдан фарқли бутун сонларга каррали бўлса, интеграл натижаси нолга тенг бўлади. (7.16) шартга кўра нурланиш юз бериши учун экспоненталар кўрсаткичи

$$m_l - m_l' + 1 = 0 \text{ ёки } m_l - m_l' - 1 = 0$$

шартни қаноатлантириши керак. Бу тенгламаларни қуйидагича умумлаштириш мумкин:

$$\Delta m_l = m_l - m_l' = \pm 1. \quad (7.18)$$

Келтириб чиқарилган танлаш қондаси $u = y$ да ҳам ўринли. Буни исботлаш учун юқорида ўтказилган ҳисоблашларни $u = y$ ҳолида қайтариш лозим, холос. $u = z$ ҳоли учун эса

$$u_z = \int_{-\infty}^{\infty} z \Psi_{n,l,m_l}^* \Psi_{n',l',m_l'} dV = \int_0^{\infty} r^3 R_{n,l}^* R_{n',l'} dr \times$$

$$\times \int_0^{\pi} \sin \vartheta \cos \vartheta \theta_{l m_l}^* \theta_{l' m'_l} d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi.$$

Охирги интеграл

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(m_l - m'_l)\varphi} d\varphi$$

га тенг. Унинг қиймати $\Delta m_l = m_l - m'_l = 0$ дан бошқа ҳолларда нолга тенг. Шу сабабли водород атоми нурланишининг магнит квант сони учун танлаш қондаси умумий ҳолда

$$\Delta m_l = 0, \pm 1 \quad (7.19)$$

шартдан иборат бўлади.

Шу йўсинда орбитал квант сони учун ҳам танлаш қондаси келтириб чиқарилади. (7.17) танлаш қондалари водородсимон атомлар учун ҳам ўринли.

Атом системаси учун нурланиш жараёнининг юз беришини тасвирловчи танлаш қондаси аслида атомнинг спин характеристикаларини ҳам ҳисобга олган бўлиши керак эди.

Танлаш қондаларида системанинг спин характеристикаларини ҳам ҳисобга олиш масаласини норелятивистик квант механикасида ечиб бўлмайди. Чунки атом системаси ва ундан нурланаётган фотонни биргаликда қараш керак. Бу масала анча мураккаб бўлганлиги учун қуйидаги умумий мулоҳазалар билан чегараланамиз.

Оптика курсидан маълумки, ёруғлик тўлқинларини қутбланган ҳолатга келтириш мумкин. Ёруғлик тўлқини фақат икки хил кўндаланг қутбланиши мумкин. Ўзаро икки перпендикуляр йўналишда чизиқли қутбланиш асосий қутбланиш хили ҳисобланади. Ёруғликнинг ҳар қандай бошқача қутбланишларини чизиқли қутбланишлардан ташкил қилиш мумкин. Масалан, ёруғликнинг доиравий қутбланишини бир-бирдан $\pi/2$ фазага силжитилган тенг амплитудали тебранишлар ташкил қилади. Биз учун қутбланиш текислигининг айланувчи ҳоли қизиқарли. Бу хил қутбланган ёруғлик тўлқинининг электр майдон кучланганлиги вектори \vec{E} (шунингдек, магнит майдон кучланганлиги вектори \vec{H}) тўлқин ҳаракат йўналишига кўндаланг

доира бўйлаб айланади. Натижада электромагнит нурланишнинг ҳаракат миқдори моменти вектори тўлқиннинг ҳаракати бўйича йўналади. Квант механикаси тили билан айтганда фотон проекцияси ҳаракат йўналишига икки хил қиймат қабул қилувчи спинга эга. Кузатишларга кўра фотоннинг спини бирга тенг ва ҳаракат йўналишига проекцияси ± 1 га тенг иккита қиймат қабул қилади. Бунинг сабаби ёруғлик тўлқинининг кўндаланглигидир.

Энди фотон чиқарган атомнинг тўла ҳаракат миқдори моментининг қанчага ўзгаришини кўрайлик. Бу жараёнда атом моментининг ўзгариши фотон олиб кетаётган момент миқдорига, яъни бирга тенг. Фотоннинг орбитал ҳаракат миқдори моментини тахминан нолга тенг деб ҳисоблаш мумкин. Бошланғич ҳолатда атомнинг ҳаракат миқдори моменти нолга тенг бўлса, ҳаракат миқдори моментининг сақланиш қонунига асосан атомнинг охириги ҳолатдаги моменти бирга тенг бўлади.

Нурланиш жараёнининг охириги ҳолатида тўла ҳаракат миқдори моменти $J_{\text{охир}} = 0$ га тенг бўлиши бошланғич ҳолатида моменти бирга тенг атом учун мумкин. Шундай қилиб, бошланғич ёки охириги ҳолат ҳаракат миқдори моментининг нолга тенг ҳолларида квант ўтишнинг вужудга келиши учун тўла ҳаракат миқдори моменти нурланиш жараёнида бир бирликка ўзгариши керак, яъни

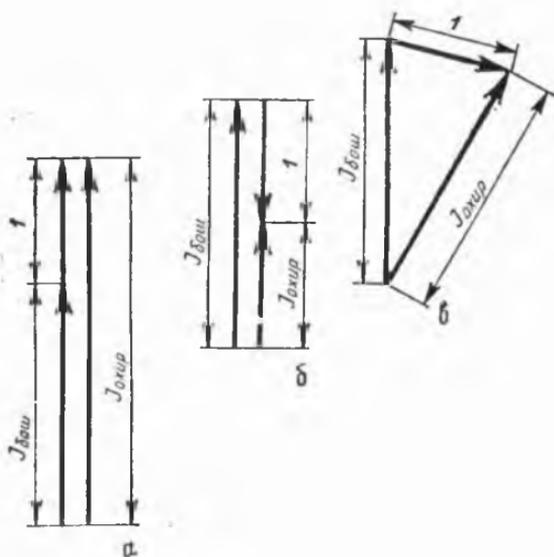
$$\Delta J = \pm 1 \text{ (агар } J_{\text{бош.}} = 0 \text{ ёки } J_{\text{охир.}} = 0 \text{ бўлса)} \quad (7.20)$$

Ушбу танлаш қоидасига кўра $J_{\text{бош}} = 0$ ҳолатдан $J'_{\text{охир}} = 0$ ҳолатга $0 = 0$ ўтиш тақиқланади. Умумий ҳолда, агар бошланғич ва охириги ҳолатлар моменти нолдан фарқли бўлса, \vec{J} векторга бирлик векторни — фотоннинг спинини вектор қўшиш қоидаси тасвирланган 61-расмга кўра қуйидаги танлаш қоидаси ҳосил бўлади:

$$\Delta J = 0, \pm 1 \text{ (агар } J_{\text{бош.}} \neq 0 \text{ ва } J_{\text{охир.}} \neq 0 \text{)}. \quad (7.21)$$

Агар тўла ҳаракат миқдори моменти бўйсунадиган охириги (7.20) ва (7.21) танлаш қоидасини орбитал ҳаракат миқдори моменти бўйсунадиган (7.17) танлаш қоидаси билан солиштирсак, фотон чиқарилиш жараёнида (нурланишда) спин векторининг ўзгармаслигини, яъни

$$\Delta S = 0$$



61- расм. Ҳолат моментнинг нурланиш фотони спинига ўзгариши.

ни ҳосил қиламиз. Ҳақиқатан ҳам, атом электронининг бир энергетик сатҳдан нисбатан паст энергетик сатҳга ўтишида системанинг атом спини ўзгармайди.

Юқорида келтириб чиқарилган танлаш қондалари фотон хусусиятлари билан боғлиқ ва электромагнит, тўғрироғи, диполь ўтишлари учун характерлидир.

46-§. Термнинг мультиплетлиги

Оптикавий электроннинг спин магнит моменти билан унинг орбитал ҳаракати вужудга келтирган магнит майдоннинг ўзаро таъсири атом термларининг дублет тузилишини вужудга келтиради. Дублет тузилиш электрон спинининг орбитал моментига нисбатан мумкин бўлган йўналишлари сонини иккига тенглигидан келиб чиқади. Умумий ҳолда, атом оптик (валент) электронлари сони бирдан ортиқ бўлиши мумкин. Моментларнинг нормал боғланиши ҳолида электронларнинг спини қўшилиб атомнинг тўла спинини (\vec{S}), орбитал моментлари эса тўла ор-

битал моментни (\vec{L}) ҳосил қилади. Шундай қилиб, атомнинг тўла спин магнит momenti билан тўла орбитал ҳаракатнинг ўзаро таъсири вужудга келади. Терми ажратувчи ушбу спин-орбитал ўзаро таъсир спин ва орбитал моментнинг ўзаро йўналишлари сони — *мультиплетликка* боғлиқ.

Нормал боғланиш ҳолида иккита электрон моментлари қуйидагича ёзилади:

$$\vec{l}_1 + \vec{l}_2 = \vec{L}, \quad \vec{s}_1 + \vec{s}_2 = \vec{S}, \quad \vec{S} + \vec{L} = \vec{J}.$$

Спин қиймати $1/2$ га тенг бўлганлиги сабабли $S = 0, 1$ га тенг. $S = 0$ ўзаро қарама-қарши йўналган антипараллел спинларнинг қўшилишидан, $S = 1$ эса параллел спинларнинг қўшилишидан ҳосил бўлади.

Атом орбитал momenti вектори \vec{L} га нисбатан спин вектори \vec{S} нинг мумкин бўлган йўналишлари сони

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|$$

га тенг бўлган

$$2S + 1$$

катталиқ *термининг мультиплетлиги* деб аталади. Шунини таъкидлаймизки, J ҳар хил қийматларга эга: $L \geq S$ да $2S + 1$ га, $L \leq S$ да $2L + 1$ га тенг. Термининг мультиплетлиги эса фақат $2S + 1$ қиймат билан характерланади. Албатта, $L \leq S$ да терм ажралишининг компонентлари ($2S + 1$) дан кам бўлади.

Шундай қилиб, икки валент электронли атом учун термларнинг икки тўплами:

$$\text{синглет: } S = 0, J = L,$$

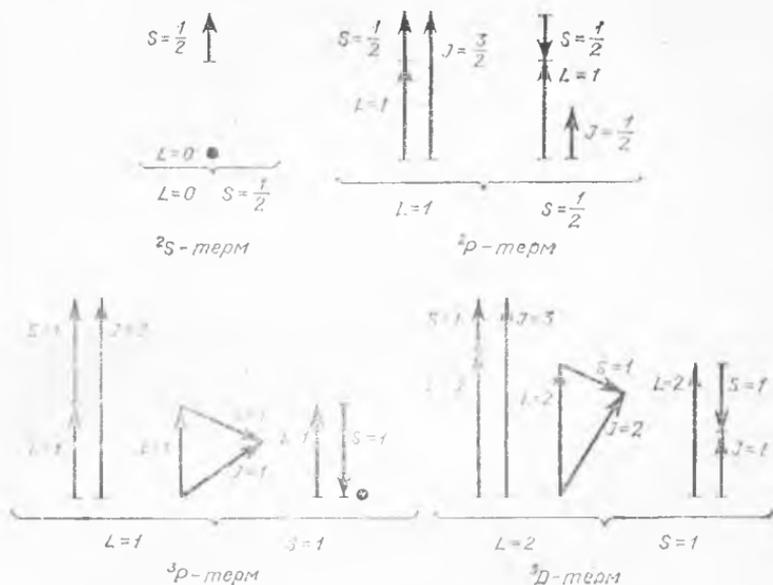
$$\text{триплет: } S = 1, J = L + 1, L, L - 1$$

га эга бўламиз. Тўла орбитал моментнинг ҳар хил қийматлари билан характерланувчи ҳолатлар терми латин алфавитининг бош ҳарфлари орқали қуйидагича тартибда белгиланади.

$$L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

$$S, P, D, F, G, H, \dots$$

Терм белгиларининг ўнг томонида пастда ички квант сони J кўрсатилади. Масалан, 3S_1 , ${}^2P_{1/2}$, ${}^4D_{7/2}$ термларнинг тўла орбитал momenti, мос равишда, $L = 0, 1, 2$ га, тўла



62- расм. Спин вектори \vec{S} нинг орбитал момент вектори \vec{L} га нисбатан мумкин бўлган йўналишларининг сони ушбу терм мультиплетлигига тенг.

спини $S = 1, 1/2, 3/2$ га, J эса $J = 1, 1/2, 7/2$ га тенглигини кўрсатади. 62-расмда термлар мультиплетлигини ҳосил бўлиши тасвирланган.

47- §. Паули принципи

Кўп электронли атомнинг асосий ҳолатида электронларнинг орбиталар бўйича жойланиши билан боғлиқ атом тузилиши масаласини тўла қараб чиқиш учун атом физикасининг фундаментал тушунчаларидан бири Паули принципи билан танишамиз. Маълумки, атомда электронлар n, l, j, m_j квант сонлари тўплами билан характерланувчи ҳар хил ҳолатларда бўлиши мумкин. Биз юқорида танишган оддий квант тасаввуримиз нуқтани назаридан электронлар атомнинг асосий ҳолатида мумкин қадар энг

кам энергияга эга, яъни энг чуқур сатҳда жойлашган бўлиши керак. Аммо, тажрибанинг кўрсатишича, атом ядро заряди осони Z нинг ошиши билан электронлар атомда кетма-кет юқори энергетик сатҳларни тўлдиради. Атомлар сатҳининг электронлар билан кетма-кет тўлдирилишини Паулининг муҳим қонуни тасвирлайди. 1925 йилда Вольфганг Паули кашф қилган принципга биноан, атомнинг ҳар қандай стационар квант ҳолатида фақат биттагина электрон жойлашиши мумкин. Демак, уйғотилмаган атомда электронлар энг паст сатҳдан бошлаб, ҳар бир квант ҳолатда биттадан бўлган ҳолда атом сатҳларини тўлдиради. Ҳар томонлама текширишлар Паули принципининг тўғрилигини кўрсатди. Паули принципи умумий қоида бўлиб фақат битта атом электронлари учунгина эмас, бутун олам электронлари учун ҳам ўринлидир. Умуман Паули принципи ярим бутун спинли айнан бир хил зарралардан иборат ҳар қандай система учун ўринлидир. Шуни ёдда тутиш керакки, системани ташкил қилган бир хил зарралар (масалан, олам электронлари) энергияси ва фазода жойлашган ўрни билан ҳам фарқ қилиши мумкин.

Паули принципининг математик маъносини кўрайлик. Соддалик учун бирор майдонда ҳаракатланаётган 2 та бир хил зарралардан (масалан, электрондан) ташкил топган система берилган деяйлик. Биринчи зарранинг координаталарини 1 индекси билан, иккинчисининг координаталарини 2 индекси билан белгилаймиз. Биринчи зарра a ҳолатда, иккинчи b ҳолатда жойлашган бўлсин. Улар ўртасидаги ўзаро таъсир кучини ҳисобга олмасак, биринчи зарранинг квант ҳолати $\psi_a(\vec{r}_1)$ тўлқин функция билан, иккинчи зарранинг ҳолати эса $\psi_b(\vec{r}_2)$ тўлқин функция билан тавсифланади. Таърифга кўра $|\psi_a(\vec{r}_1)|^2$ электронни (x_1, y_1, z_1) нуқта атрофида қайд қилиш эҳтимоллиги $|\psi_b(\vec{r}_2)|^2$ эса (x_2, y_2, z_2) нуқта атрофида қайд қилиш эҳтимоллига пропорционал бўлади.

Мазкур системада зарралар тақсимооти масаласини кўрайлик. Агар бу икки зарра Паули принципига бўйсунмаганларида эди, уларнинг ўзаро таъсири нолга тенг ҳолдаги ҳаракати ўзаро боғлиқмас (эркин) бўлар эди. Эҳтимоллик назариясига биноан ўзаро эркин икки тайин ҳодисанинг юз бериш эҳтимоллиги ҳар бир ҳодисанинг юз бериш

эҳтимолликларининг кўпайтмасига тенг. Шунинг учун, агар бу икки зарра Паули принципига бўйсунмаса, системанинг тўлқин функциясини

$$\Psi^{(1,2)} = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_a(\vec{r}_1) \cdot \psi_b(\vec{r}_2) \quad (7.22)$$

кўринишда ёзиш мумкин. (7.22) квант механика тасаввурларига зиддир. Зарраларнинг ўзаро айнанлиги туфайли уларни бир-биридан ажратиб бўлмайди. (7.22) га кўра қайси зарра биринчи, қайси зарра иккинчи эканлиги аниқ белгиланган. Агар зарралар айнан бўлса, система учун эҳтимоллик зичлиги зарралар ўрни алмашилиши билан ўзгармаслиги керак, яъни

$$|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2. \quad (7.23)$$

Демак, зарраларнинг айнанлигини ҳисобга оладиган $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ тўлқин функция (7.23) ни қаноатлантирувчи қуйидаги

$$|\Psi_S(2, 1)|^2 = + |\Psi_S(1, 2)|. \quad (7.24)$$

$$\Psi_A(2, 1) = - \Psi_A(1, 2), \quad (7.25)$$

хоссага эга бўлиши керак. Маълумки, тўлқин функция тажрибада ўлчанувчи катталиқ эмас. Шунинг учун зарралар ўрни алмашганда ишорасини ўзгартириши мумкин. Зарралар ўрни алмашилиши таъсир этмайдиган тўлқин функцияни симметрик, ўрин алмаштиришда ишорасини ўзгартирадиган функцияни антисимметрик тўлқин функциялар деб атаймиз. Иккинчи томондан, зарраларнинг айнанлиги туфайли вақтнинг исталган моментида системанинг ҳолатини $\Psi(1, 2)$ ва $\Psi(2, 1)$ функциялардан қайси бири тавсифлаши номаълум. Вақтнинг бирор моментида системанинг $\Psi(1, 2) = \psi_a(\vec{r}_1) \cdot \psi_b(\vec{r}_2)$ орқали тавсифланиш эҳтимоллиги вақтнинг шу моментида $\Psi(2, 1) = \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1)$ орқали тавсифланиш эҳтимоллиги билан тенг. Бошқача айтганда, системанинг ҳолат тўлқин функцияси $\Psi(1, 2)$ ва $\Psi(2, 1)$ функцияларнинг чизиқли комбинацияси (ҳолатлар суперпозицияси) дан иборат. Иккинчи томондан биламизки, бир системанинг ҳамма ҳолатлари вақтнинг ҳар қандай моментида муайян бир симметрияга эга бўлган тўлқин функция билан тавсифланиши керак. Демак, системанинг ҳолатларини тавсифловчи $\Psi(1, 2)$ ва $\Psi(2, 1)$ нинг

чизикли комбинациясидан тузилган тўлқин функция (7.24) ёки (7.25) хусусиятга эга бўлиши керак, яъни

$$\Psi_S = [\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) + \Psi_a(\vec{r}_2)\Psi_b(\vec{r}_1)]/V\sqrt{2} \quad (7.26)$$

$$\Psi_A = [\Psi_a(\vec{r}_1)\Psi_b(\vec{r}_2) - \Psi_a(\vec{r}_2)\Psi_b(\vec{r}_1)]/V\sqrt{2} \quad (7.27)$$

Бу ерда $1/\sqrt{2}-\Psi_S$ ва Ψ_A функцияларни нормалаш коэффициенти. (7.26) ва (7.27) ифодаларнинг ҳар бири икки ҳаддан иборат бўлиб, биринчи ҳад a ҳолатда, биринчи зарранинг b ҳолатда иккинчи зарранинг мавжудлик ҳолини, иккинчи ҳад эса, аксинча, a ҳолатда иккитаси зарранинг b ҳолатда биринчи зарранинг мавжудлик ҳолини тавсифлайди. a ва b ҳолатларнинг аралашиб кетганлиги сабабли энди қайси ҳолатда қайси электроннинг мавжудлигини аниқлаб бўлмайди.

Ψ_S ва Ψ_A функцияларнинг (7.24) ва (7.25) хусусиятига эътибор берайлик. Агар системани ташкил этган зарраларнинг айнанлигини эсласак ва улар эгаллаши мумкин бўлган a ва b ҳолатларни айнан тенг деб фараз қилсак, Ψ_A айнан нолга айланади. Ψ_S учун эса айтарли ўзгариш юз бермайди. Демак, ҳолатлари антисимметрик тўлқин функция Ψ_A билан тавсифланувчи системанинг ташкил этган бир хил зарралари (масалан, электронлар) айнан бир хил ҳолатларда бўла олмас экан. Аксинча, симметрик функция тавсифловчи зарралар эса айнан бир хил ҳолатларда бўлиши мумкин.

Тажриба кўрсатадики, электрон ва бошқа ҳамма ярим бутун спинли зарралар ҳолати антисимметрик тўлқин функция билан тавсифланади. Шунинг учун улар системанинг ҳар бир ҳолатида биттадан жойлаша олади. Улар Паули принципига бўйсунди ва фермионлар деб аталади. Бутун спинга эга ҳамма зарралар (масалан, фотон) симметрик тўлқин функция билан тавсифланади. Бутун спинли зарралар бозонлар деб аталади.

Паули ўз принципига атом спектрини ўрганиш билан келган эди. Атом спектрига қараб атом ҳолатларини ва ҳолатларнинг квант сонларини аниқлаш мумкин. Водород атоми спектридан ташқари ҳамма атомлар спектрида тушиб қолган чизиклар бор. Бу чизикларга албатта маълум квант сонлари тўплами тўғри келади. Масалан, гелий атоми спектрида асосий ҳолатга электронларнинг натижавий

спини бирга тенг ҳоллардан ўтиш чизиқлари йўқ. Айни вақтда асосий ҳолатга икки электрон спиннинг қарама-қарши йўналишига тўғри келадиган натижавий спиннинг ноль қиймати характерловчи ҳолатлардан ўтиш мавжуд. Бу ҳолни қуйидагича тушунтириш мумкин.

Квант механикасида зарралар системасининг тўлқин функциясини спинни ҳисобга олган ҳолда қуйидаги

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_1, s_2) = \chi(s_1, s_2) \cdot \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (7.28)$$

кўринишда ёзиш мумкин. Бу ерда χ — фақат зарранинг спинига боғлиқ бўлган спин тўлқин функциясидир. Энди гелий атоми учун икки электроннинг ўрнини алмаштиришга нисбатан антисимметрик тўлқин функциясини (7.27) ифода сингари (7.28) дан ҳосил қилайлик. Унда координата тўлқин функциясининг симметрик ҳоли учун спин тўлқин функциясининг антисимметрик, яъни иккала электроннинг спинлари антипараллел бўлиб қўшилган ҳоли ва аксинча координата тўлқин функциясининг антисимметрик ҳоли учун эса спин тўлқин функциясининг симметрик, яъни спинларнинг параллел бўлиб қўшилганида тўла спин бирга тенг ҳоли тўғри келади. Демак, икки электроннинг тўла спини бирга тенг бўлган ҳолат учун Шредингер тенгламасининг ечими, яъни координата тўлқин функцияси антисимметрик экан. Бу ҳолат учун квант сонлари тўплами $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = 1/2$ га тенг. Шредингер тенгламасининг симметрик ечими тавсифловчи ҳолат учун квант сонлари тўплами $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = 0$ ва битта электрон учун эса $m_s = 1/2$, иккинчиси учун эса $m_s = -1/2$ га тенг.

Шредингер тенгламасининг симметрик ечимига мос келадиган энергетик сатҳ E_s ни характерловчи квант сонлари $n = 1, j = l + s = 0$ га тенг, антисимметрик ечимига мос энергетик сатҳ E_A ни эса $n = 1, j = l + s = 1$ характерлайди, ва шунинг учун ҳам, гелий атоми электронлари энергиясининг мумкин бўлган қийматлари E_s ва E_A тўла спинга боғлиқ ҳолда бир-биридан фарқ қилади. Бу ҳолга олиб келадиган ўзаро таъсир *алмашинувчи ўзаро таъсир* деб аталади.

48- §. Ишқорий металллар атомининг энергетик сатҳлари ва спектри

Энергетик сатҳлар. Биз юқорида атомлар ичида энг соддаси бўлган водород атомига оид квант механикаси масаласини деярли ҳамма томондан қараб чиқдик ва водород атоми масаласининг нисбатан содда эканлигига ишонч ҳосил қилдик. Менделеев даврий системасининг бошқа атомлари учун айна масала мураккаб ва уни ечиш учун тақрибий ҳисоблаш методлари кенг қўлланилади. Бироқ ишқорий металл атомлари учун кўпгина муҳим натижаларга етарлича осон эришиш мумкин.

Менделеев даврий системасида ишқорий металллар инерт газлардан: литий гелийдан, натрий неондан, калий аргондан ва ҳоказо сўнг туради ва уларнинг ташқи электрон қобиғида фақат битта электрон бор. Ишқорий металл атомининг электронлари сони инерт газлар атомига қараганда худди шу ташқи электронга кўп. Маълумки, инерт газлар атоми барқарорлиги билан характерланади, уларни ионлаштириш учун нисбатан юқори энергия керак. Аксинча, ишқорий металллар атоми енгил ионлаштирилади.

Агар ишқорий металл атоми ҳаммаси бўлиб Z электронга эга десак, улардан $Z - 1$ таси барқарор инерт газлар атоми тузилишини ҳосил қилади ва охириги электрон $Z - 1$ та электрон ва атом ядроси билан жуда кучсиз боғланган бўлади. Шундай қилиб, ишқорий металл атоми электронларининг биринчи $Z - 1$ таси билан атом ядроси биргаликда $+e$ зарядга эга атом қолдиғи ҳосил бўлади ва охириги электрон шу қолдиқ вужудга келтирган эффектив Кулон майдонида ҳаракат қилади. Демак, шу тасвирда ишқорий металл атомларини водородсимон деб ҳисоблаш мумкин. Аммо мазкур ҳолда, қолдиқ заряднинг Кулон майдони марказий кучни вужудга келтирмайди. Шунинг учун ташқи электрон ҳаракатланаётган эффектив майдонни

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} + \frac{C_1}{r^2} + \frac{C_2}{r^3} + \dots \right) \quad (7.29)$$

кўринишда ифодалаш мумкин. Бу ерда қавс ичидаги C_1/r^2 , C_2/r^3 ва ҳоказо ҳадлар ишқорий металл атоми майдонининг водород ва водородсимон атомлар майдонидан фарқини кўрсатади. Одатда, ҳисоблашларда $\frac{C_1 e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$ ҳад би-

лан чегараланилади. У ҳолда ишқорий металл атоми учун ҳисоблашлар водород атоми ҳолига ўхшаш бўлади. Ишқорий металл атоми учун Шредингер тенгламаси

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{e^2 C_1}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] R = 0$$

кўринишда ёзилади. Ўрта қавс ичидаги охириги икки ҳадни

$$l(l+1) - C_1 \frac{2m_e e^2}{\hbar^2 4\pi\epsilon_0} = l'(l'+1) \quad (7.30)$$

кўринишда белгиласак, марказий майдондаги ҳаракатни характерловчи l га боғлиқ ҳамма катталикларда l ни l' билан алмаштириш кифоя.

$$l' = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(2l+1)^2 - C_1 \frac{2m_e e^2}{\pi\epsilon_0 \hbar^2}} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(2l+1) \times \\ \times \sqrt{1 - C_1 \frac{2m_e e^2}{(2l+1)^2 \pi\epsilon_0 \hbar^2}}$$

Ҳақиқатан ҳам, агар $C_1 = 0$ бўлса, $l' = l$ келиб чиқади. C_1 қатнашган ҳад марказий майдоннинг ўзгаришидаги тузатмани ҳисобга олади. Агар бу ҳадни кичик деб фараз қилсак,

$$\sqrt{1 - C_1 \frac{2m_e e^2}{(2l+1)^2 \pi\epsilon_0 \hbar^2}} \approx 1 - C_1 \frac{m_e e^2}{(2l+1)^2 \pi\epsilon_0 \hbar^2} \quad (7.31)$$

га тақрибан тенг. У ҳолда l' учун

$$l' = l - C_1 \frac{m_e e^2}{\left(l + \frac{1}{2}\right) 4\pi\epsilon_0 \hbar^2} = l - \frac{C_1}{(l + 1/2) a_1}$$

ифодага келамиз. Бу ерда a_1 — биринчи Бор орбитасининг радиуси. Водород атоми учун бош квант сони $n = n_r + l + 1$ эканлигини эсласак, ишқорий металл атоми энергетик сатҳини характерловчи бош квант сони

$$n_n = l' + n_r + 1 = n_r + l + 1 - \frac{C_1}{(l + 1/2) a_1} = n + j(l) \quad (7.33)$$

га тенг бўлади; энергия сатҳи учун эса

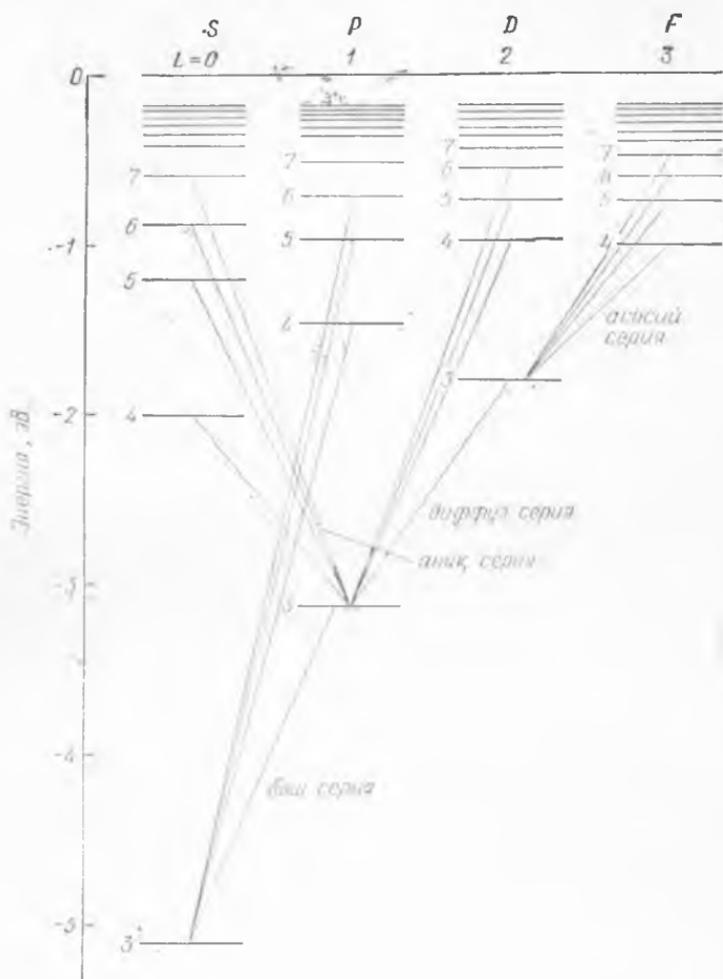
$$E_{n,l} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n_n^2} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{[n + j(l)]^2} \quad (7.34)$$

формулага келамиз. (7.34) дан ишқорий металл атомининг энергияси орбитал квант сонига боғлиқ эканлиги кўри-
ниб турибди. Энергиянинг орбитал квант сонига боғлиқ-
лиги ишқорий металл атоми энергетик сатҳларининг водо-
род атоми энергетик сатҳларидан тубдан фарқ қилишини
кўрсатади. Энди берилган бош квант сони учун ҳар хил
орбитал квант сонларига тўғри келадиган энергетик сатҳ-
лар устма-уст тушмайди. Мисол тариқасида натрий атоми
энергетик сатҳлари схемасини кўрайлик (63-расм). Энергия-
нинг энг паст сатҳи $3S$ ($n = 3, l = 0$) ҳолатга тўғри ке-
лади, чунки $n = 1$ ва $n = 2$ ҳолатлар водородсимон атом
негизини ҳосил қилган ўнта электрон билан тўлдирилган.
Энергия жиҳатдан $3S$ га энг яқин ҳолат $n = 3, l = 1$,
яъни $3P$ ҳолат эканлиги расмдан ҳам кўриниб турибди.
Расмдан яна шу нарса кўриниб турибдики, агар ишқорий
атом энергетик сатҳлари схемаси $l = 0$ ҳолида водород
атоми сатҳларига энг яқин бўлса, орбитал квант сони l
нинг катталашини билан сатҳлар схемаси кескин ўз-
гаради.

Ишқорий металл атомлари спектри. Ишқорий металл
атоми спектрларининг тузилиши водород атоми спектри-
нинг тузилишига ўхшашдир, чунки биринчи $Z - 1$ элек-
тронлар ва ядродан иборат ишқорий металл атом қолдиғи
учун тўла ҳаракат миқдори моменти полга тенг ва ишқо-
рий металл атомининг ҳаракат миқдори моменти ташқи
валент электронининг тўла моменти билан характерла-
нади. Атом уйғотилганда ва нурланиш чиқарганида атом
қолдиғи электронлари ўз энергетик ҳолатларини ўзгар-
тирмайди. Атом оптикавий (валент) электронининг бир
энергетик сатҳдан иккинчисига ўтганидагина нурланиш
рўй беради. 63-расмда бу ўтишлар схемаси ҳам тасвир-
ланган. Расмда ҳар қандай сатҳлардан ҳам ўтишлар юз
беравермаслиги кўриниб турибди. Фақат ушбу ҳол учун
ўринли бўлган танлаш қоидасига бўйсунувчи ўтишларгина
мумкин,

$$\Delta n = 0, 1, 2, \dots; \Delta l = \pm 1, \quad (7.35)$$

яъни бош квант сони ихтиёрий қийматга ўзгариши
мумкин, лекин орбитал квант сони эса фақат бир бир-
ликка ўзгариши лозим. Бошқача айтганда, l бўйича
қўшни сатҳлардан ўтишларгина мумкин, масалан, S - ва



63- расм. Натрий атоми сатҳларининг схемаси ва чиқариш спектрларининг сериялари. Натрий атомининг асосий ҳолати.

P - ҳолатлар, P - ва D - ва ҳоказо ҳолатлар ўртасидагина ўтишлар тақиқланмаган.

Резонанс чизиқлар. Ишқорий металл атомларининг берилган ансамблида Больцман тақсимотига кўра сон жиҳатдан энг кўп атомлар энг паст энергетик ҳолатда

бўлади. Масалан, натрий атоми учун $3S$ ҳолатдаги битта оптикавий электрон энг паст энергетик ҳолатдадир. Энг яқин уйғотилган ҳолат $3P$ ҳолатдир. Больцман тақсимотига биноан худди шу ҳолатда энг кўп уйғотилган атомлар бўлади. Шунинг учун $3P$ ҳолатдан $3s$ ҳолатга ўтиш ҳисобига ҳосил бўладиган нурланиш чизиқлари энг юқори интенсивликка эга. Бу чизиқни одатда *резонанс чизиқ* деб атайдилар. Умуман, асосий ҳолат билан биринчи уйғотилган ҳолат ўртасидаги ўтишлар ҳисобига ҳосил бўладиган нурланиш чизиқлари интенсив бўлади ва резонанс чизиқлар деб аталади.

Бош серия. Ишқорий металл атомида юз берадиган ўтишларда бош квант сонининг ҳар қандай қийматга ўзгариши туфайли, масалан, натрий атомида $3S$ - ҳолатга ҳар қандай P ҳолатлардан (P ҳолатдан, чунки $\Delta l = \pm 1$) ўтишлар мумкин. Бу ўтишлар натижасида ҳосил бўладиган нурланиш чизиқлари сериясига *бош серия* деб аталади. Бу серия частотасини шартли равишда ҳар қандай ишқорий атом учун ўринли ҳолда қуйидагича

$$\begin{aligned} \text{бош серия } \nu &= ns - mp \quad (n = 2, 3, \dots; \\ m &= n, n + 1, \dots) \end{aligned} \quad (7.36)$$

ифодалаш мумкин. Бош серия чизиқларига резонанс чизиқ ҳам киради, яъни $n = m$ ҳол чизиғи. Ишқорий атом спектрида бош сериядан ташқари бошқа сериялар ҳам мавжуд. Шулардан муҳимлари қуйидаги сериялардир:

$$\begin{aligned} \text{аниқ серия } \nu &= np - ms \quad (n = 2, 3, \dots; m = n + 1, \dots, \\ \text{диффуз серия } \nu &= np - md \quad (n = 2, 3, \dots; \\ m &= n, n + 1, \dots) \end{aligned} \quad (7.37)$$

$$\begin{aligned} \text{Бергман серияси } \nu &= nd - mf \quad (n = 2, 3, \dots; \\ m &= n + 1, \dots). \end{aligned}$$

Бош серия чизиқлари уй температураси шароитида ёруғлик чиқарилишида ҳам, ютилишида ҳам кузатилади. Бошқа сериялар чизиқлари фақат ёруғлик чиқарилишида кузатилади.

Сатҳларнинг нозик структураси. Водород атоми ҳолидаги сингари ишқорий металл атомларида ҳам электрон-

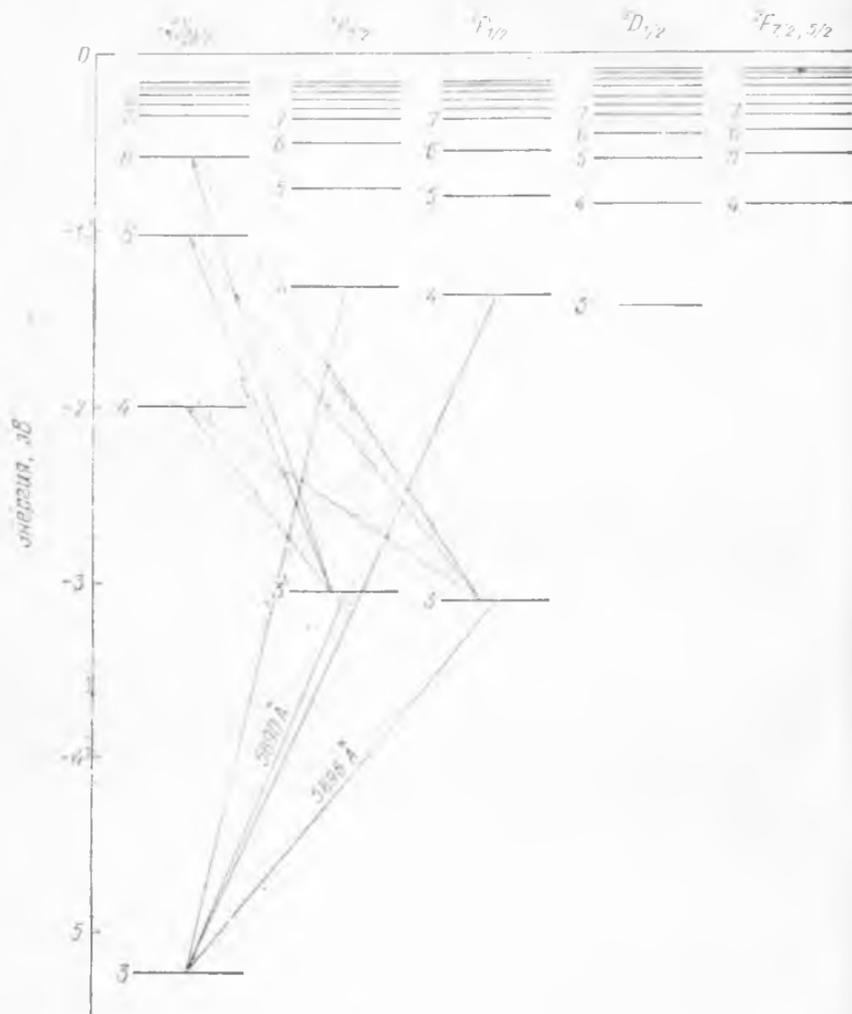
нинг спини мавжудлиги сабабли, энергия сатҳларининг ва спектр чизиқларининг нозик структурасига эга бўламиз.

Равшанки, орбитал момент \vec{l} билан спин \vec{s} қўшилиб, тўла момент $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ ни ҳосил қилади. Демак, ишқорий металл атомлари учун ҳам водород атоми сингари, ички квант сони, яъни тўла моментнинг квант сони $j = l \pm \frac{1}{2}$ га тенг қийматлар қабул қилади. Шу сабабдан, атомнинг $l > 0$ ҳолатига тўғри келадиган ҳар бир энергетик сатҳлар иккитадан сатҳларга ажралади, яъни дублет ажрალიшлар ва дублет термлар вужудга келади. Ишқорий металлларда айниқса спиннинг таъсири сезиларли бўлади, чунки берилган n учун ҳар хил l лар тўғри келадиган сатҳлар бир-бирдан узоқ жойлашганлиги сабабли ҳар бир сатҳнинг ажрალიши яққол тасвирга эга бўлади. Шундай қилиб, масалан, 63-расмда тасвирланган натрий атоми учун, P қаторнинг ($l = 1$) ҳар бир терми $j = \frac{1}{2}$ ва $j = \frac{3}{2}$ га, D қаторнинг сатҳлари эса $j = 3/2$ ва $j = 5/2$ га мос келадиган ва ҳоказо сатҳларга ажралади. Бошқача айтганда, 63-расмда тасвирланган $l = 0$ га тўғри келадиган s сатҳдан бошқа ҳамма сатҳларнинг ажрალიши юз беради. 64-расмда* натрий атомининг 63-расмда тасвирланган сатҳларининг ажрალიши кўрсатилган.

Танлаш қоидаси (7.35) ва (7.21) га асосан ${}^2S_{1/2}$ сатҳ ${}^2P_{1/2}$ ва ${}^2P_{3/2}$ лар билан биргаликда дублет чизиқларни беради. Бу ҳол, 64-расмда келтирилган $4S_{1/2} - 3P_{1/2}$, $4S_{1/2} - 3P_{3/2}$ ва $5S_{1/2} - 3P_{1/2}$, $5S_{1/2} - 3P_{3/2}$ каби дублет ўтишлар орқали тасвирланган. Дублет сатҳлар эса биргаликда уч хил ўтишга мос учта чизиқни беради. Масалан, 65-расмда Цезий атомининг P ва D дублет сатҳлардаги ўтишлари:

$5D_{3/2} - 6P_{1/2}$, $5D_{3/2} - 6P_{3/2}$ ва $5D_{5/2} - 6P_{3/2}$ берадиган учта чизиқ тасвирланган. Расмдаги пунктир билан тасвирланган ўтиш танлаш қоидаси билан тақиқланган. Демак, дублет термларда учта чизиқ кузатилади.

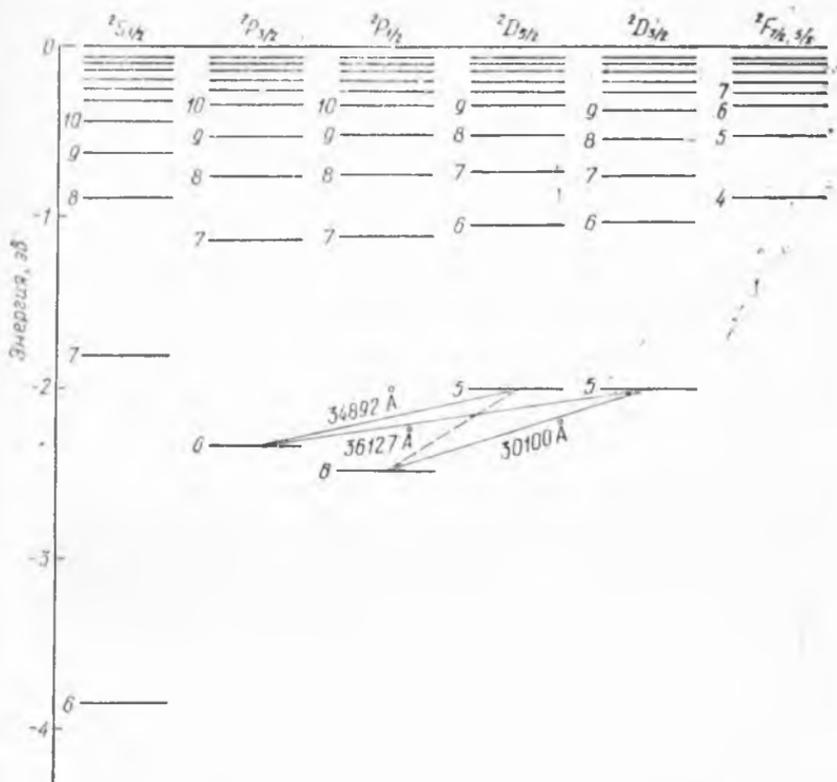
* Расмдаги термлар белгисининг чапдан юқорисида термларнинг магнит майдонида ажралувчи дублетлиги кўрсатилади. Унг томонидаги пастки индекс орқали эса j нинг қийматлари белгиланади. n нинг қийматлари терм белгисининг олдида кўпайтма тарзда бериледи.



64- расм. Натрий атоми сатҳларининг назик структураси. Бош серия ва аниқ серия дублет чизиқларидан иборат.

Шундай қилиб, «дублет спектрлар» деган ном термларнинг дублетлигига асосан берилган, спектр чизиқлари эса кўпинча жуда мураккаб тўпламлардан иборат бўлади.

Спин-орбитал ўзаро таъсир билан аниқланувчи дублет ажралишнинг қиймати ҳақидаги масала энг муҳим ҳисобланади. Бу ажралишнинг қиймати электроннинг орбитал



65-расм. Цезий атомининг дублет P- ва D- сатҳларидаги ўтишлар диффуз сериясининг триплет чизиқлари.

ҳаракати вужудга келтирган B_l магнит майдонда спин магнит momenti векторнинг ўзаро таъсир энергияси билан аниқланади:

$$\Delta E = -(\vec{\mu}_S \vec{B}_l) = -\mu_S B_l \cos(\vec{\mu}_S \vec{B}_l). \quad (7.38)$$

Айлана бўйлаб ҳаракат ҳоли учун магнит майдон электронинг айланишидаги ҳалқасимон ток майдонидир, яъни

$$B_l = \frac{2\pi i}{c \cdot r} = \frac{2\pi}{c \cdot r} Z e \frac{v}{2\pi r} = \frac{Z Z e v r}{r^3 2c} = \frac{2Z}{r^3} |\vec{r}| \vec{v}.$$

У ҳолда (7.38) ни қуйидагича ёзишимиз мумкин:

$$\Delta E = \frac{2Z}{r^3} \cdot (\vec{\mu}_l \vec{\mu}_s) = \frac{2Z}{r^3} 2\mu_B^2 (\vec{l} \vec{S}).$$

Бу ифодадаги $1/r^3$ ни унинг ўрта қиймати

$$\overline{\frac{1}{r^3}} = \int \Psi_{nl}^* \frac{1}{r^3} \Psi_{nl} dv = \frac{Z^3}{a_1^3 n^3 l \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)}$$

билан алмаштирамиз. Бу ерда ўрта қиймат учун водородсимон атомлар тўлқин функцияси татбиқ этилган, $a_1 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2$. Натижада

$$\Delta E = - \frac{R\alpha^2 Z^4}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{2}$$

формула ҳосил бўлади; бунда R — Ридберг доимийси, α — нозик структура доимийси. Ички квант сони j нинг иккита қиймати $j = l \pm \frac{1}{2}$ га мос келувчи термларнинг спин-орбитал ўзаро таъсир туфайли ўзгариши учун

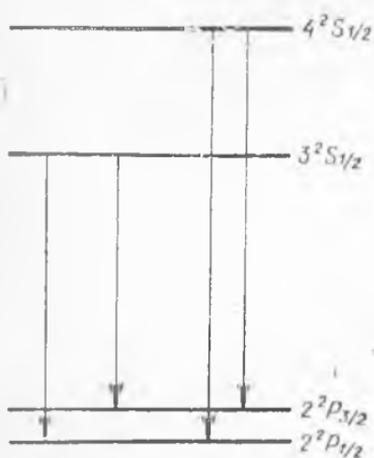
$$\Delta T_{(l,s)}^+ = - \frac{R\alpha^2 Z^4}{2n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)}, \quad j = l + \frac{1}{2},$$

$$\Delta T_{(l,s)}^- = \frac{R\alpha^2 Z^4}{2n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)l}, \quad j = l - \frac{1}{2}$$

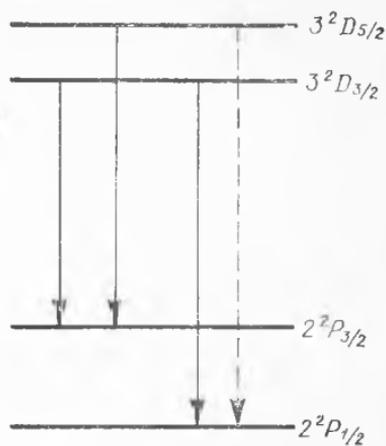
келиб чиқади. Шундай қилиб, спин-орбитал ўзаро таъсир натижасида термларнинг ажрალიши

$$\Delta T = |\Delta T^+ - \Delta T^-| = \frac{R\alpha^2 Z^4}{n^3 l(l+1)} \quad (7.39)$$

га тенг. (7.39) Ланде формуласи деб аталади. Бу ерда Z ядро қолдигининг «эффектив» зарядини билдиради. (7.39) ифодага кўра дублет ажрალიшнинг қиймати ΔT бош ва орбитал квант сонининг ўсиши билан тез камаяди ва Z нинг ўсиши билан эса Z^4 га пропорционал ортади. Мисол тариқасида nS термлардан $2P$ термларга ўтишда кузатила-



66-расм. Бош ва аниқ серияларнинг позик структура бўйича дублетлиги.



67-расм. Диффуз сериянинг ас-лида триплет чизиқлари дублетлиги.

диган аниқ серияларни кўрайлик. Бу хил ўтишларнинг схемаси 66-расмда позик структурани ҳисобга олган ҳолда тасвирланган. Равшанки, бу серия чизиқларининг ажралиши қиймат жиҳатдан бирдай бўлади, чунки ҳамма чизиқларнинг мазкур ҳолдаги ажралишига битта терм- $2P$ ажралиши сабабчидир.

nD термдан $2P$ термга ўтишларда кузатиладиган диффуз сериянинг схемаси позик структурани ҳисобга олган ҳолда 67-расмда тасвирланган. (7.39) га биноан nD сатҳнинг ажралиши $2P$ сатҳ ажралишига қараганда кўп марта кичик бўлади. Танлаш қондасига биноан пунктир чизиқ билан белгиланган ўтиш тақиқланганлиги сабабли $3D$ — $2P$ ўтишларда учта чизиқ кузатилишини юқорида айтган эдик. Ажралган D термлардан уларга яқин жойлашган P термга ўтишларда кузатиладиган иккита чизиқ шунчалик бир-бирга яқинки, оддий спектрал асбобларда кузатиб бўлмайди. Улар битта ёйилган чизиқ тарзидаги тасвирни беради. Бу қўш чизиқ билан якка чизиқ ўртасида ажралиш нисбатан катта. Шунинг учун, мазкур учта чизиқ тўнлами дублетга ўхшаш тасвир қолдиради. Шу сабабдан бу серия диффуз серия деб аталган.

49- §. Мураккаб атомларнинг электрон қобиғи

Бирдан ортиқ электронларга эга атомларнинг электрон тузилиши иккита асосий ҳолада бўйсунди: 1) электронларнинг берилган умумий сонда атомда энергиянинг минимум ҳолати амалга ошади; 2) ҳар бир квант ҳолатда фақат биттагина электрон бўлиши мумкин.

Мураккаб атомда ҳар хил электронлар бир-бири билан ўзаро таъсирда бўлишига қарамасдан, соддалик учун, ҳар бир электрон ўзгармас ўртача куч майдонида ҳаракат қилади деб ҳисоблаш мумкин. Айрим электрон учун бу майдон ядронинг Ze га тенг заряди вужудга келтирилган майдоннинг ядрога мазкур электрондан яқин жойлашган ҳамма электронлар билан тўсилишидаги қисман кучсизланган эффектив майдонга тенг. Эффектив майдонни марказий симметрик майдон деб қараш мумкин. Умуман айтганда, атомнинг ҳар хил электронлари учун бу хил майдонлар ҳар хил бўлади. Бу майдонлар бир вақтда аниқланиши лозим, чунки ҳар бир майдон қолган электронларнинг ҳолатига боғлиқ. Шунинг учун, бундай майдон ўз-ўзидан мосланган майдон деб аталади. Ушбу марказий-симметрик майдонда электроннинг ҳар бир ҳолати учун орбитал ҳаракат миқдори моменти l тайин қийматга эга бўлган сақланувчи катталиқдир.

Бир хил квант сонлар (n, l) билан характерланувчи электронларни ядродан бир хил масофада деб ҳисоблаш мумкин. У ҳолда бу электронлар ядро билан бир хил ўзаро таъсирида бўлади ва шунинг учун уларнинг энергияси тақрибан тенг. Бу хил электронлар атомнинг битта қобиғида жойлашган деб аталади. Электрон қобиқлар катта ҳарфлар билан қуйидагича белгиланади:

$$n \quad 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

$$\text{қобиқ } K, L, M, N, O, \dots$$

Битта электроннинг марказий Кулон майдонидаги ҳаракатида n нинг катта қийматларига энергиянинг юқори қийматлари мос келади. Энергиянинг минимал қийматига K -қобиқдаги электронлар, ундан юқориқоқ энергияга эса L -қобиқдаги электронлар ва ҳоказо эга бўлади.

Муайян электрон қобиғида жойлашган ҳар бир электрон энергияси n га нисбатан кучсиз боғлиқ бўлса-да, орбитал квант сонига ҳам боғлиқдир. Бу ҳолни ишқорий атомларда

(7.34) кўрдик. Орбитал квант сони l нинг катта қийматларига система энергиясининг катта қийматлари (боғланиш энергиясининг кичик қийматлари) ва аксинча, l нинг кичик қийматларига энергиянинг кичик қийматлари тўғри келади.

Ҳар бир электрон қобиғидаги берилган l билан характерланувчи электронлар қобиқчаларни ташкил қилади. Бу қобиқчалар (ёки электронлар) бош квант сони (n)нинг қийматини кўрсатувчи рақам ва ундан кейин ёзилувчи орбитал квант сонининг кичик ҳарфи белгиси орқали белгиланади. Масалан, $4d$ белги $n = 4$ ва $l = 2$ бўлган ҳолатни характерлайди. Одатда l нинг символик белгисининг ўнг томонида юқорида ёзилган рақам шу сатҳчадаги электронлар сонини билдиради. Масалан, $4d^2$ белги $n = 4$ ва $l = 2$ ҳолатда иккита электрон борлигини кўрсатади. Атомдаги электронларнинг ҳар хил n ва l ҳолатлар бўйича жойлашиши электрон конфигурацияси деб аталади. Масалан, $1s^2$, $2s^2$, $2p^6$, $3s^1$ белги $1s^2$ ($n = 1, l = 0$) ва $2s^2$ ($n = 2, l = 0$) сатҳчаларда иккитадан тўртта электрон $2p^6$ ($n = 2, l = 1$) сатҳчада олтита электрон ва $3s^1$ ($n = 3, l = 0$) сатҳчада эса битта электрон борлигини билдиради.

n ва l нинг берилган қиймати билан характерланувчи сатҳ учун орбитал моменти ва спин моменти проекциялари m_l , m_s бўйича айниш мавжуд. Биз юқорида кўрган эдикки, бу айниш даражаси берилган l да m_l нинг қабул қиладиган қийматлар сони $(2l + 1)$ ни m_s нинг қийматлари сонини 2 га ($m_s = \pm \frac{1}{2}$) кўпайтириш билан аниқланади, яъни $2(2l + 1)$. Бошқача айтганда n ва l бир хил бўлган $2(2l + 1)$ та ҳолат мавжуд. Бу ҳолатларни эквивалент ҳолатлар деб аталади. Шундай қилиб, атомда бир вақтнинг ичида фақат $2(2l + 1)$ тагача электронлар бир хил n ва l га эга бўла олади. Берилган n ва l билан характерланувчи ҳамма $2(2l + 1)$ ҳолатлардаги электронларнинг ҳаммаси ёпиқ қобиқ ҳосил қилади.

Юқорида айтилганларни яқунлаб шуни таъкидлаймизки, атомда электронлар аввал энг паст қобиқни, сўнгра юқорироқ қобиқларни тўлдиради. Ҳар бир муайян қобиқ соҳасида электронлар $l_{\min} = 0$ дан $l_{\max} = n - 1$ гача бўлган s , p , d , f ҳолатларда жойлашади. Берилган қобиқ $2n^2$ та электрон билан тўла тўлдирилади. Қобиқларни тўла тўлдирилиши инерт газлар атомидагина тугалланади.

50-§. Менделеевнинг даврий системаси

Электронлараро таъсирни ҳисобга олиш ва Паули принципи элементларнинг даврий системасини тўла тушунтиради. Ҳар хил ҳолатларни тўлдирилиши юқорида баён қилинган иккита асосий қонда, яъни система энергиясининг минимумлик шартини ва Паули принципига бўйсунди. Лекин электронлараро ўзаро таъсирни ҳисобга олган ҳолда атом системасининг энергиясини аниқлаш мураккаб масала.

Электронлараро ўзаро таъсирнинг мавжудлигига қарамадан ҳар бир электроннинг ҳолати илгаригидек тўртта асосий квант сонлари билан характерланади. Биз юқорида кўрганимиздек, квант сонлари қуйидаги қийматларни қабул қилади:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n-1 \\ m_l &= 0, \pm 1, \pm 2; \dots, \pm l \\ m_s &= \pm \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Бинобарин, бош квант сон n нинг берилган қийматида шу тўртта квант сонининг камида биттаси билан фарқланувчи ҳолатларнинг мумкин бўлган тўла сони (яъни электронлар сони) $2n^2$ га тенг. Шу ҳолатлардаги $2n^2$ та электрон n та қобиқ бўйича гақсимланади. Ҳар бир қобиқ $2(2l + 1)$ та электрон билан тўлдирилган. Шундай қилиб, масалан, $n = 1$ да $l = 0$, шунинг учун бу K -қобиқда фақат иккита электронгина жойлашиши мумкин ва шунинг учун иккита электрон жойлашган K -қобиқ ёпиқ электрон қобиқ ҳисобланади. Биринчи ёпиқ қобиқ, яъни K -қобиқ гелий атомида учрайди ва Менделеев жадвалининг бутун соҳаси бўйича ўзгармайди. $n = 2$ қобиқни L -қобиқ деб атаймиз. L -қобиқ иккита: $l = 1$ ва $l = 0$ га тўғри келувчи қобиқчалардан ташкил топган. $l = 0$ ҳолатда, яъни S -ҳолатда иккита, $l = 1$ P -ҳолатда эса олти электрон жойлашиши мумкин.

Мураккаб атомларда электрон қобиқлар, юқорида кўрастилгандек, энергиянинг ўсиш тартиби бўйича тўлдирилади. Ҳар қандай атомнинг асосий ҳолатдаги электрон конфигурацияси энергияси мумкин бўлган даражада паст

қийматларга эга электрон ҳолатларининг тўлдирилишига мос келади. n нинг кетма-кет қийматлари бўйича қобикларининг тўлдирилиши элементлар даврий системасининг умумий қонуниятини тасвирлайди.

Боян квант сони n нинг берилган қийматида $2n^2$ электрон билан тўлдирилган ёпиқ қобикнинг $2n^2$ электронларининг тўла momenti нолга тенг. Агар берилган қобикда орбитал квант сонининг l қиймати характерловчи қобикча $2(2l + 1)$ та эквивалент электрон билан тўлдирилган бўлса, бу ёпиқ l қобикчанинг ҳам тўла momenti нолга тенг, чунки тўлдирилган қобикчанинг тўла орбитал ва спин магнит квант сонлари m_L ва m_S қобикчадаги $2(2l + 1)$ та эквивалент электронлар ҳолатларини характерловчи орбитал ва спин магнит квант сонлари m_l ва m_s учун мумкин бўлган ҳамма мусбат ва манфий қийматларнинг йиғиндисига тенг, яъни

$$m_L = \sum m_l = 0 + (\pm 1) + (\pm 2) + \dots = 0;$$

$$m_S = \sum_{-1/2}^{+1/2} m_s = \left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2} = 0.$$

Демак,

$$m_J = m_L + m_S = \sum (m_l + m_s) = 0.$$

У ҳолда таърифга кўра

$$J_Z = \hbar m_J = L_Z + S_Z = \hbar (m_L + m_S) = 0,$$

$$m_{J \max} = \pm J = 0; \quad m_{L \max} = \pm L = 0, \quad m_{S \max} = \pm S = 0.$$

Шунинг учун тўлдирилган ёпиқ орбитал қобикча учун $J = 0$, $L = 0$, $S = 0$ каби қоидага эга бўламиз. Шундай қилиб, тўлдирилган қобикчада орбитал ва спин моментларининг ўзаро нолга айланишига келамиз. Ёпиқ қобикнинг ҳолати 1S_0 бўлиб, унга энергиянинг битта айнинаган сатҳи тўғри келади. Электрон қобиғи тўла (яъни ички қобикчалари ҳам) тўлдирилган элементлар алоҳида турғунлик хусусиятига эга. Бу элементлар атомларида кучсиз боғланган ташқи электрон йўқ. Охирги қобиғи ҳам тўлган электрон конфигурацияли инерт газлар атомлари шулар

жумласига киради. Қўйида инерт газлар атомининг охириги қобиқчалари кўрсатилган:

He	Ne	Ar	Kr	Xe	Rn
$1s^2$	$2p^6$	$3p^6$	$4p^6$	$5p^6$	$6p^6$
$1S_0$	$1S_0$	$1S_0$	$1S_0$	$1S_0$	$1S_0$

Умуман формал равишда n ва l бир хил бўлган эквивалент электронларнинг муайян қобиқ бўйича жойлашиши қўйидаги тартибда квант ҳолатларни бирин-кетин тўлдирилишига мос бўлади:

$$\begin{array}{l}
 n = 1 \quad 1 s^2 \\
 n = 2 \quad 2 s^2 2p^6 \\
 n = 3 \quad 3 s^2 3p^6 3d^{10} \\
 n = 4 \quad 4 s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} \\
 n = 5 \quad 5 s^2 5p^6 5d^{10} 5f^{14} 5g^{18}
 \end{array}
 \left. \begin{array}{l}
 2 n^2 = 2 \\
 2 n^2 = 8 \\
 2 n^2 = 18 \\
 2 n^2 = 32 \\
 2 n^2 = 50
 \end{array} \right\} (7.40)$$

ва ҳоказо. Ҳақиқатда эса ҳолатларни бу тартибда тўлдирилиши бажарилмайди. Спектроскопик кузатишлар натижаси Менделеев даврий системаси учун III жадвални беради.

Даврий системанинг бош қисмида электрон қобиқлар тўла тўлдирилган ва шунинг учун даврдаги элементлар сони охириги элемент электронларининг тўла сонига тенг. Масалан, биринчи даврда иккита элемент: H ва He мавжуд. $n = 1$ қобиқда электронлар сони иккига тенг. He элементи худди шунча электронга эга. Жадвалдан кўрамизки, учинчи даврдан бошлаб, бу тартиб бузилади. Кейинги даврларда қобиқларнинг тўлдирилиши янада мураккаблашади. Юқорида ишқорий металл атомлари мисолида кўрганимиздек, мураккаб атом электронининг энергиясининг бош квант сони n билан бир қаторда орбитал квант сони l га боғлиқлиги янада ошади. Шунинг учун элементлар электрон тузилиши қонуниятини тасвирлашда n бўйича қобиқларнинг тўлдирилиш тартибинигина эмас, балки l бўйича қобиқчаларнинг тўлдирилиш тартибини ҳам ҳисобга олиш зарур.

Муайян n да l қанча кичик бўлса, электроннинг энергияси шунча кичикдир (боғланиш энергияси катта). Чунки l нинг камайиши билан муайян n да ядронинг эффектив заряди шунча катта бўлади. s -электронлари, масалан,

Элемент	K	L	M	N			O			Ассий терм	Элемент	K	L	M	N		O		P	Ассий терм
				4s 4p	4d	4f	5s	5p	5d						4s 4p 4d	4f	5s 5p	5d	6s	
³⁷ Rb	2	8	18	8	—	—	1	—	—	² S _{1/2}	⁵⁵ Cs	2	8	18	18	—	8	—	1	² S _{1/2}
³⁸ Sr	2	8	18	8	—	—	2	—	—	¹ S ₀	⁵⁶ Ba	2	8	18	18	—	8	—	2	¹ S ₀
³⁹ Y	2	8	18	8	1	—	2	—	—	² D _{3/2}	⁵⁷ La	2	8	18	18	—	8	1	2	² D _{3/2}
⁴⁰ Zr	2	8	18	8	2	—	2	—	—	³ P ₂	⁵⁸ Ce	2	8	18	18	2	8	—	2	³ H ₄
⁴¹ Nb	2	8	18	8	4	—	1	—	—	⁶ D _{1/2}	⁵⁹ Pr	2	8	18	18	3	8	—	2	⁴ I _{7/2}
⁴² Mo	2	8	18	8	5	—	1	—	—	⁷ S ₃	⁶⁰ Nd	2	8	18	18	4	8	—	2	⁵ I ₄
⁴³ Tc	2	8	18	8	6	—	2	—	—	⁶ S _{1/2}	⁶¹ Pm	2	8	18	18	5	8	—	2	⁶ H _{5/2}
⁴⁴ Ru	2	8	18	8	7	—	1	—	—	⁵ F ₅	⁶² Sm	2	8	18	18	6	8	—	2	⁷ F ₀
⁴⁵ Rh	2	8	18	8	8	—	1	—	—	⁴ F _{7/2}	⁶³ Eu	2	8	18	18	7	8	—	2	⁸ S _{7/2}
⁴⁶ Pd	2	8	18	8	10	—	—	—	—	¹ S ₀	⁶⁴ Gd	2	8	18	18	7	8	1	2	⁹ D ₂
⁴⁷ Ag	2	8	18	18	—	—	1	—	—	² S _{1/2}	⁶⁵ Tb	2	8	18	18	8	8	1	2	⁸ H _{11/2}
⁴⁸ Cd	2	8	18	18	—	—	2	—	—	¹ S ₀	⁶⁶ Dy	2	8	18	18	10	8	—	2	⁵ I ₈
⁴⁹ In	2	8	18	18	—	—	2	1	—	² P _{1/2}	⁶⁷ Ho	2	8	18	18	11	8	—	2	⁴ I _{13/2}
⁵⁰ Sn	2	8	18	18	—	—	2	2	—	³ P ₀	⁶⁸ Er	2	8	18	18	12	8	—	2	³ H ₆
⁵¹ Sb	2	8	18	18	—	—	2	3	—	⁴ S _{1/2}	⁶⁹ Tm	2	8	18	18	13	8	—	2	² F _{7/2}
⁵² Te	2	8	18	18	—	—	2	4	—	³ P ₂	⁷⁰ Yb	2	8	18	18	14	8	—	2	¹ S ₀
⁵³ J	2	8	18	18	—	—	2	5	—	² P _{3/2}	⁷¹ Lu	2	8	18	18	14	8	1	2	² D _{3/2}
⁵⁴ Xe	2	8	18	18	—	—	2	6	—	¹ S ₀	⁷² Hf	2	8	18	18	14	8	2	2	³ F ₂
											⁷³ Ta	2	8	18	18	14	8	3	2	⁴ F _{3/2}
											⁷⁴ W	2	8	18	18	14	8	4	2	⁵ D ₀

Элемент	K	L	M	N	O		P		Ассий терм	Элемент	K	L	M	N	O		D		Q	Ассий терм
					5s 5p	5d	6s	6p							5s 5p 5d	5f	6s 6p	6d	7s	
⁷⁵ Re	2	8	18	32	8	5	2	—	⁶ S _{1/2}	⁸⁷ Fr	2	8	18	32	18	—	8	—	1	² S _{1/2}
⁷⁶ Os	2	8	18	32	8	7	1	—	⁵ D ₄	⁸⁸ Ra	2	8	18	32	18	—	8	—	2	¹ S ₀
⁷⁷ Ir	2	8	18	32	8	7	2	—	⁴ F _{7/2}	⁸⁹ Ac	2	8	18	32	18	—	8	1	2	² D _{3/2}
⁷⁸ Pt	2	8	18	32	8	9	1	—	³ D ₃	⁹⁰ Th	2	8	18	32	18	—	8	2	2	³ F ₂
⁷⁹ Au	2	8	18	32	8	10	1	—	² S _{1/2}	⁹¹ Pa	2	8	18	32	18	2	8	1	2	⁴ K _{11/2}
⁸⁰ Hg	2	8	18	32	18	—	2	—	¹ S ₀	⁹² U	2	8	18	32	18	3	8	1	2	⁵ L ₆
⁸¹ Tl	2	8	18	32	18	—	2	1	² P _{1/2}	⁹³ Np	2	8	18	32	18	4	8	1	2	⁶ L _{11/2}
⁸² Pb	2	8	18	32	18	—	2	2	³ P ₀	⁹⁴ Pu	2	8	18	32	18	6	8	—	2	⁷ F ₀
⁸³ Bi	2	8	18	32	18	—	2	3	⁴ S _{1/2}	⁹⁵ Am	2	8	18	32	18	7	8	—	2	⁸ S _{1/2}
⁸⁴ Po	2	8	18	32	18	—	2	4	³ P ₂	⁹⁶ Cm	2	8	18	32	18	7	8	1	2	⁹ D ₇
⁸⁵ At	2	8	18	32	18	—	2	5	² P _{3/2}	⁹⁷ Bk	2	8	18	32	18	8	8	1	2	⁸ H _{17/2}
⁸⁶ Rn	2	8	18	32	18	—	2	6	¹ S ₀	⁹⁸ Cf	2	8	18	32	18	10	8	—	2	⁵ I ₆
										⁹⁹ Es	2	8	18	32	18	11	8	—	2	⁴ I _{13/2}
										¹⁰⁰ Fm	2	8	18	32	18	12	8	—	2	³ H ₆
										¹⁰¹ Md	2	8	18	32	18	13	8	—	2	² F _{7/2}
										¹⁰² No	2	8	18	32	18	14	8	—	2	¹ S ₀
										¹⁰³ Lw	2	8	18	32	18	14	8	1	2	² D _{3/2}
										¹⁰⁴ Ku	2	8	18	32	18	14	8	2	2	³ F ₂



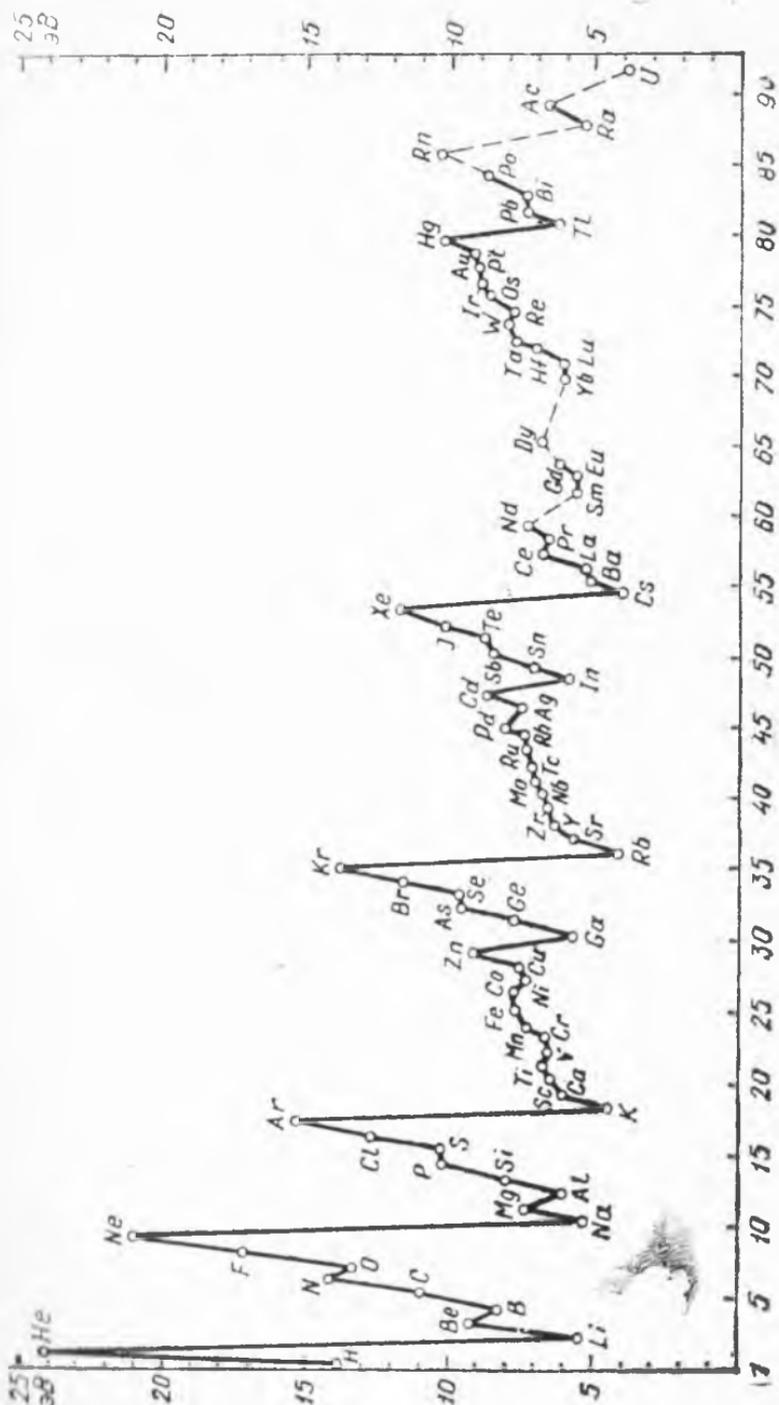
68-расм. Атом электрон қобіқ-ларининг тўлдирилиш тартиби.

p -электронларига қараганда ядродан камроқ тўсилган бўлади (албатта, $n = 1$ да s -электрони ядродан тўсилмаган). Демак, аввал ns , np , nd ва ҳоказо қобіқчалар тўлдирилади. Электрон энергиясининг l га боғлиқлиги туфайли $n \geq 4$ дан бошлаб, баъзи ҳолларда, бош квант сони n катта ва орбитал квант сони l кичик бўлган электронлар n сони кичик ва l катта электронларга қараганда кучлироқ боғланган бўлар экан, яъни

$$n > n' \text{ ва } l < l' \text{ да } E_{nl} > E_{n'l'}$$

Масалан, $4s$ -электронлар (улар иккита, албатта) $3d$ - (ўнта) электронларга қараганда кучлироқ боғланган. $5s$ -электронлар $4d$ - ва $4f$ -электронлардан, $6s$ электронлар эса $5d$ -, $5f$ -, $5g$ - ва ҳатто $4f$ -электронлардан ҳам кучлироқ боғланган.

Элементларнинг электрон тузилиши тасвирланган жадвалдан кўрамизки, оралиқ группа элементлари учун юқори қобіқнинг s ҳолатлари пастки қобіқнинг d - ва f -ҳолатларидан аввал тўлдирилади бошлайди. Бу эффект кузатилади биринчи элемент калий атомидир. Калий атомининг ташқи электрони — $3d$ - ҳолатда эмас, балки $4s$ - ҳолатда жойлашган. Жадвалдан ва 68-расмдан атомларда электрон қобіқчалар тўлдирилишининг $1s$, $2s$, $2p$, $3s$, $3p$, $4s$, $3d$, $4p$, $5s$, $4d$, $5p$, $6s$, $4f$, $5d$, $6p$, $7s$ тартибда бажарилишини кўрамиз. Бу тартибга асосан лантаноид ва актиноидларнинг химиявий хоссаларини жуда ўхшашлигини тушунтириш мумкин. Ҳамма лантаноидлар бир хил ташқи тузилишга $5s^2 5p^6 6s^2$ ва тўлдирилмаган $4f$ -қобіқчага эга. $4f$ -электронлар лантаноидларнинг химиявий хоссаларига таъсир кўрсатмайди. Лантаноидларнинг химиявий хоссалари асосан ташқи электронлар билан аниқланади. Худди шунингдек ҳамма актиноидлар $6s^2 6p^6 7s^2$ тартибдаги ташқи тузилишга



69- расм. Элементлар биринчи ионизация потенциалнинг атом номерига боғлиқлиги.

эга. Улар ўзаро химиявий хоссаларига таъсир кўрсатмайдиган, $5f$ - ва $6d$ - электронлари билан фарқ қилади, холос.

Атом электронлар боғланиш энергиясининг мунтазамлигини бу каби бузилишига оғир инерт газлари атомларининг ташқи қобиги тўлдирилишининг тугалланмаганлиги яъни (7.40) ни бажарилмаслиги сабабчидир. Масалан, гелий атомидаги иккита электрон биринчи қобикда $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$, $m_s = \pm \frac{1}{2}$ мумкин бўлган ҳамма ҳолатларни тўлдиради ва шу билан биринчи ёпиқ қобик (давр) га эга бўламиз. Айни ҳолда, неон атоми ($Z = 10$) учун ҳам K - ва L -қобиклар тўлдирилган бўлади. Неон атоми билан иккинчи давр тугалланади ва иккинчи ёпиқ қобикқа келамиз. Аргон атомида ($Z = 18$) эса M -қобикда 8 тагина электрон бор. 10 та электрон жойланиши мумкин бўлган $3d$ -қобикча мутлақо бўш ва у $4s$ -қобикча тўлдирилгандан сўнг тўлдирила бошлайди ва ҳоказо.

Менделеев даврий системасини квант механика нуқтаи назаридан тушунтиришга бағишланган бу параграфни тугаллашдан аввал атом номерининг функцияси сифатида 69-расмда тасвирланган элементларнинг биринчи ионлаш потенциалига изоҳ берамиз. Расмда келтирилган маълумотлар спектроскопик кузатишлар асосида аниқланган. Ҳар бир элемент учун ионлаш потенциали шу элементдан кейинги элементга ўтишида қўшиладиган электроннинг боғланиш энергиясини билдиради.

51. §. Хунд қондаси

Кўпчилик ҳолларда ташқи электронлар атомда жуфтланмаган бўлади, яъни бир йўналишдаги параллел спинларга эга бўлади. Электронларнинг мавжуд ҳолдаги конфигурацияси Хунд қондасига бўйсунди. Хунд қондаси, умуман, жуда кўп эксперимент натижаларига кўра, эквивалент электронларнинг LS — боғланиши ҳолида, атом термларининг тутган ўрнини аниқлайди. Одатда, Хунд қондасини қуйидаги икки қисмга ажратилади.

1. Электронларнинг берилган конфигурацияси учун S , яъни мультиплетлик қанча катта бўлса, терм энергияси шунча паст бўлади.

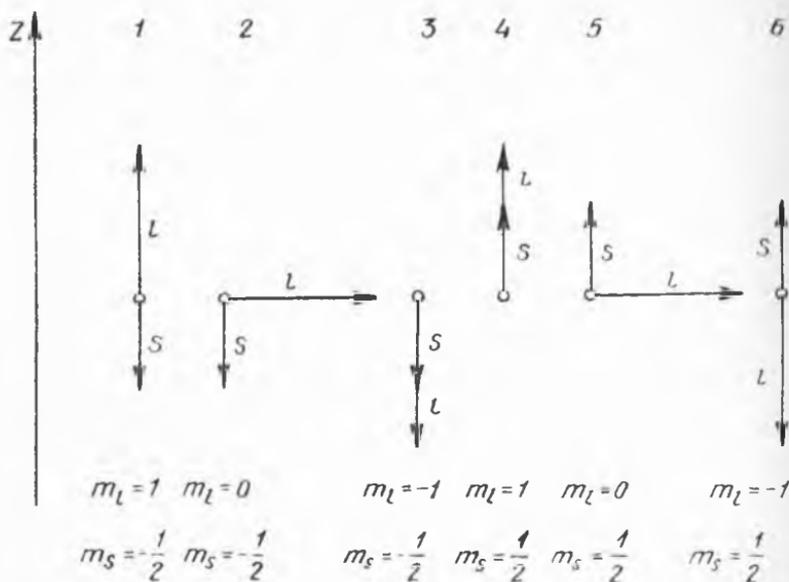
Жумладан, агар мультиплетлик мумкин қадар максимал ва шу мультиплетликда L нинг қиймати ҳам мумкин қадар катта бўлса, терм энг паст ҳолатда бўлади.

2. $L \geq S$ да мультиплет термининг максимал сони $2S + 1$ мультиплетлик билан аниқланади. Агар $L < S$ бўлса, сатҳлар сони $2L + 1$ га тенг бўлмаган мультиплет ҳосил бўлади.

Агар l -қобиқчани тўлдираётган электронлар сонининг қиймати $2(2l + 1)$ нинг ярмидан ҳам кам бўлса, термининг энг паст сатҳи учун J нинг қиймати энг кичик, яъни $|L - S|$ бўлади. Акс ҳолда, агар электронлар сони $(2l + 1)$ га тенг ёки кўп бўлса, энг паст сатҳ учун J нинг қиймати энг катта, яъни $L + S$ га тенг бўлади. Биринчи ҳолда, термларни нормал ёки тўғри деб, иккинчи ҳолда — нотўғри деб айтилади.

Шундай қилиб, моментларни қўшиш квант механикаси қондаси йўл қўйган қийматларининг ҳаммасидан, Хунд қондасига кўра, берилган L ва S да, фақат $|L - S|$ ва $L + S$ чегаравий қийматларда амалга оширилади.

Хунд қондасини углерод атоми учун қўллашлик. Углерод атомида олтита $2p$ ҳолатдан фақат иккитасигина электронлар билан эгалланган. Икки электрон учун натижавий спиннинг энг катта қиймати иккаласининг ҳам спинларини параллел йўналганида ҳосил бўлади. Паули принципи эса $2p$ ҳолатда параллел спинли иккита электроннинг бўлишини тақиқламайди, чунки $l \neq 0$ сабабли, икки электроннинг ҳолати \vec{l} нинг йўналиши билан фарқ қилиши мумкин. 70-расмда p -қобиқчанинг мумкин бўлган олтита ҳолати схематик тасвирланган. Биринчи учта ҳолат иккинчи учта ҳолатдан спинининг йўналиши билан фарқ қилади. Z ўқининг йўналиши ихтиёрий. Шунинг учун, фараз қиламизки, p -ҳолатга жойлашган иккита электроннинг ҳам спини пастга қараган бўлсин. U ҳолда иккала электронни ҳам, биринчи учта ҳолатлардан иккитасига жойлаштиришимиз мумкин. Икки электроннинг тўла орбитал momenti учун $L = l_1 + l_2$, $l_1 + l_2 - 1, \dots, l_1 - l_2 = 2, 1, 0$ ҳосил бўлади. Электронларнинг спинини ҳар хил йўналганлигидан. Паули принципи бўйича $L = 2$ ҳолат тақиқланади. Шунинг учун L нинг мумкин бўлган энг катта қиймати 1 га тенг бўлади. U ҳолда Хунднинг иккинчи қондасига кўра, яъни мумкин бўлган ҳолатларнинг ярмидан кам тўлдирилганлиги сабабли тўла момент $J = |L - S| = 0$ бўлади. Демак, углерод атомининг асосий ҳолати

70-расм. P -қобикдаги ҳолатлар.

$L = 1$, $S = 1$, $J = 0$ билан характерланувчи 3P_0 ҳолатдир. Худди шу йўсунда азот атоми учун $L = 0$, $S = \frac{3}{2}$, $J = \frac{3}{2}$ билан характерланувчи асосий ҳолат ${}^4S_{3/2}$ ни аниқлаймиз.

Неон атомининг L -қобигидаги саккизта ҳолат ($2s$ - ва $2p$ -ҳолатлар) нинг ҳаммаси электронлар билан тўлдирилган. 70-расмдан кўрамизки, тўла тўлдирилган $2p$ - ($2s$ - да ҳам) қобикчада ҳамма ҳаракат миқдори ўзаро нолга тенг. Шунинг учун неоннинг асосий ҳолати учун $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$ (юқорнда исботлаганимиздек) бўлади. Демак, неоннинг асосий ҳолати 1S_0 .

Қобиклари сал кам тўлган атомларнинг (масалан, фтор) асосий ҳолатини тўлган қобик ҳолатидан аниқласа бўлади. Фторнинг ($Z = 9$) асосий ҳолатини аниқлаш учун $2p$ -қобикча тўлишига битта электрон етмаслигини эслаш кифоя. Тўлдирилган қобикча квант сонлари $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$, бўлгани сабабли фтор атоми асосий ҳолатининг квант сонлари L ва S худди шу етишмаётган электрон квант

сонлари l ва s га тенг. U ҳолда охириги Хунд қоидасига кўра, J квант сони аниқланган S ва L дан ҳисоблаб топилади. $J = L + S = l + s = 3/2$. Демак, фтор атомининг асосий ҳолати ${}^2P_{3/2}$ ҳолат бўлади. Хулди шундай, бор ва фтор, углерод ва кислородлар учун S ва L квант сонлари бир хил. J нинг қиймати мос равишда бор ва углерод учун $J = |L - S|$ ва кислород ва фтор учун $J = L + S$ га тенг.

Хунд қонунияти элементларнинг ўзгача физикавий хусусиятларини юзага келишини тушунтиради. Масалан, темир, кобальт ва никель моддаларининг ферромагнит хоссаларига жавобгар. Мазкур элементларнинг $3d$ -қобиқчаси қисман тўлдирилган ва бу электронлар жуфтланмаган, масалан, темирда олтита $3d$ -электронлардан 5 таси бир йўналишдаги (паралел) спинга эга.

Хунд қоидасининг биринчи қисмига асосан атом энергияси кичик бўлиши учун натижавий орбитал момент мумкин қадар катта бўлиши керак. Айни вақтда S нинг ҳам мумкин қадар катта бўлиши кўзда тутилади. Бунинг учун спинларнинг параллел бўлиши кифоя. Паули принципига биноан орбитал моментлар параллел бўла олмайди. Лекин, натижавий орбитал момент қийматини мумкин қадар катта бўлиши учун электронлар бир-биридан узоқда ҳаракатланиши керак.

52. §. Мураккаб атомлар спектри

Икки валентли атомлар. Термлар тузилиши икки валент электронли атомлар, масалан, гелий, ишқорий-ер элементлари ҳамда, рух, кадмий, симоб ва ҳоказолар учун янада мураккаблашади. Ишқорий металл атомларининг дублет термидан фарқли равишда икки валент электронли атомлар учун синглет (ёлғиз) термлар ва триплет термлар системаси мавжуд. Синглет термлар учун $S = 0$, $J = L$, триплет термлар учун эса $S = 1$, $J = L + 1$, L , $L - 1$ ўринли.

Мазкур термлар системасининг ҳар бири учун термларaro ўтишлар (7.17) ва (7.21) формулалар билан аниқланувчи таълаш қондасига бўйсунди. Натижада, синглет термларнинг ўзаро бир-бирига синглет-синглет ўтишларида ишқорий металл атомларидаги ўтишлар каби ёлғиз чиқиқ-

лардан иборат сериялар ҳосил бўлади. Шунинг учун бу ерда ҳам сериялар бош, аниқ, диффуз ва асосий ёки Бергман сериялари деб аталади. Триплет термлар ҳам биргаликда триплет-триплет ўтишларни вужудга келтиради. Бу ўтишлардаги серияларга ҳам юқоридагидек номлар берилган. Триплет система термларидаги ўтишлар билан боғлиқ чизиқлар бош ва аниқ сериялардаги триплет, диффуз ва Бергман серияларидаги секстетлардан, яъни олтига чизиқлардан ташкил топган.

Ҳар бир терм соҳасида қуйидаги таплаш қоидалари кучга эга.

Синглет ўтишлар	Триплет ўтишлар
${}^1S_0 - {}^1P_1$	${}^3S_1 - {}^3P_{0,1,2}$
${}^1P_1 - {}^1S_0$	${}^3P_{0,1,2} - {}^3S_1$
	(TT)
(CC)	
${}^1P_1 - {}^1D_2$	${}^3P_{0,1,2} - {}^3D_{1,2,3}$
${}^1D_2 - {}^1F_3$	${}^3D_{1,2,3} - {}^3F_{2,3,4}$

Бу ўтишлардан ташқари ушбу икки система термлари ўртасида ўзаро ўтишлар ҳам мавжуд. Улар ядро заряди сонининг ошиши билан интенсивроқ юз бера бошлайди.

Гелий атоми. Гелий атомининг термлари ва оптикавий спектрлари тузилишини кўрайлик. Гелий атомининг асосий 1S_0 ҳолатида атомнинг иккала электрони ҳам 1s сатҳда жойлашган ва Паули принципига биноан уларнинг спини ўзаро қарама-қарши йўналган. Атомнинг уйғотилишида битта электрон ёки иккаласи ҳам юқорироқ сатҳга ўтади. Бу икки ҳолдан биринчиси, яъни бир электрон 1s сатҳда қолиб, иккинчиси уйғотилган юқорироқ ҳолатга ўтиши билан боғлиқ ҳолни кўрайлик. У ҳолда, 1s дан юқори ҳолатга ўтган электроннинг спини 1s даги электрон спинига нисбатан параллел ёки антипараллел йўналишга эга бўлиши мумкин. Спинларнинг ўзаро бу икки хил йўналиши икки хил энергетик сатҳга тўғри келади.

Спинларнинг антипараллел йўналган ҳолини кўрайлик. Айни ҳол учун мавжуд сатҳларнинг мультиплетлиги $2S + 1 = 1$ га тенг, чунки $S = 0$, яъни сатҳлар ёлғиз (синглет) бўлади. Бу сатҳлар 71-а расмда тасвирланган. Сатҳлардан чапда қабс ичида электронларнинг иккала-

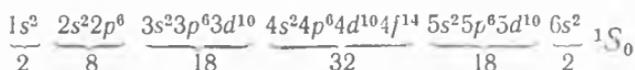
$J = 0$ бўлгани сабабли (7.20) бажарилиши керак. Мазкур ҳолда эса $\Delta L = 0$. Иккинчи томондан ҳар қандай бир электрон ўтишларида $\Delta L \neq 1$ ҳол тақиқланади. Шундай қилиб, бу ўтиш бирданига икки танлаш қондаси билан тақиқланган. Шунинг учун ҳам 2^1S_0 ҳолатни *узоқ яшовчи ёки метастабил* ҳолат дейилади. Атомнинг бу ҳолатини уйғотиш 20,55 эВ энергияни талаб қилади. Атом бу метастабил ҳолатдан асосий ҳолатга фақат иккита фотон чиқариш орқали ўта олади.

Гелий атоми учун энг паст триплет терм, 71-б расмда тасвирланганидек, 2^3S_1 сатҳдир. Бу ва бошқа ҳамма *ортогелий* деб аталувчи триплет ҳолатлар электронлар спинининг параллел йўналган ҳолида ҳосил бўлади. Асосий 1^1S_0 ҳолатдан бу триплет ҳолатларга фотон ютиш билан ўтиш мумкин эмас, чунки ҳар доим $\Delta S = 0$ бажарилиши шарт. Гелий атоми триплет ҳолатларга электронларни атом билан тўқнашувида электронлардан бирининг спини ўгирилиб қолиши орқали ўтиши мумкин. 71-б расм да гелий атоми электронлари спинининг параллел ҳолати термлари тасвирланган. Мумкин бўлган энг паст 1^3S_1 ҳолат Паули принципига биноан тақиқланган 2^3S_1 терм ҳам ҳамма S лар каби биттагина сатҳдан иборат, чунки $L = 0, J = S = 1$.

Гелий атомининг 2^3S дан кейинги триплет ҳолати, яъни бир электроини $1s$ — да, иккинчисини $2p$ — сатҳда бўлган ҳолати, $S = 1$ ва $L = 1$ сабабли, $J = 0, 1, 2$ га тенг учта қийматларга мос терм триплетдир. Триплет терм 2^3P нинг сатҳлари $2^3P_0, 2^3P_1, 2^3P_2$ дан иборат. Бу учта сатҳнинг ҳар қайсисидан энг паст триплет 2^3S_1 ҳолатга ўтишлар мавжуд. Расмдан кўрамизки, ҳамма $n > 1$ қобиклардаги P, D, \dots термлар триплет мультиплетликка эга, чунки ҳар доим $S = 1$, демак, $2S + 1 = 3$.

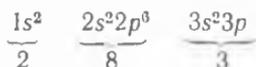
Синглет ва триплет термларнинг ўзаро бир-бирига ўтишлари $\Delta S = 0$ танлаш қондасига биноан ман қилинади. Худди шунингдек, 2^3S_1 дан асосий ҳолат 1^1S_0 га оптикавий ўтиш тақиқланган ва шунинг учун 2^3S_1 ҳолат метастабилдир. Ортогелийнинг бу метастабил ҳолатидан гелийнинг 1^1S_0 ҳолатига ўтиш атомлар тўқнашувида бир атомдан (ортогелийдан) иккинчи атомга энергияни бевосита узатилиши жараёнида рўй бериши мумкин, холос. Расмда 2^3S_1 ҳолатни уйғотиш учун 19,77 эВ зарурлиги кўрсатилган.

Симоб атоми. Лаборатория тадқиқотлари нуқтаи назардан муҳим аҳамият касб этувчи симобли лампаларнинг сруғлик спектрини кўрайлик. Симоб атоми ядро ва 78 та электрондан иборат атом қолдигидан ташқаридаги орбитада икки валент электронига эга. Шунинг учун симоб атоми спектри ҳам, гелий атоми спектри каби характерга эга. Симоб атомининг электрон конфигурацияси қуйидагича:

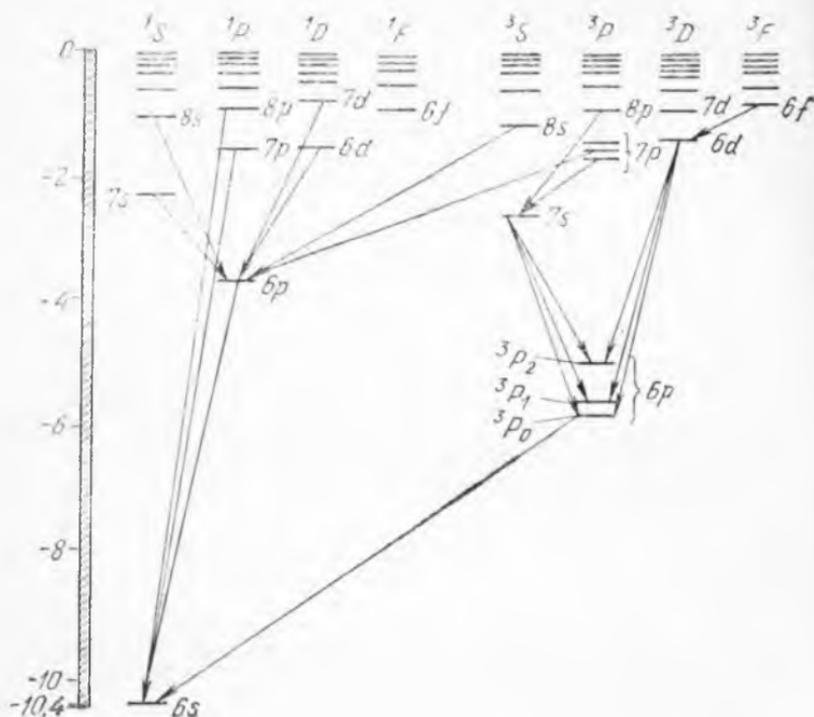


72-расмда симоб атомининг битта ташқи электронининг юқори ҳолатига мос термлари тасвирланган. Симоб атомида ҳам синглет ва триплет термларга эга бўламиз. Атом оғирлиги катта бўлгани учун, мазкур ҳолда, ҳаракат миқдори моментларининг LS -боғланиши сезиларли даражада айнайди ва, натижада, $\Delta S = 0$ танлаш қондасининг бузилиши билан юз берадиган синглет ва триплет термлараро ўтиш вужудга келади. Мисол учун $6^3P_1 - 6^1S_0$ ўтиш ультраби-нафша соҳанинг $\lambda = 2537 \text{ \AA}$ чизиғи вужудга келиши билан юз беради. Бу симоб спектридаги жуда интенсив чизиқлардандир. 6^3P_1 сатҳнинг уйғотилиши ҳам деярли осон юз беради. Бунинг сабаби 6^3P_1 сатҳ 6^1S_0 ҳолатдан бевосита ҳосил бўлишидан ташқари юқори термлардан ўтиш натижасида ҳам вужудга келиши мумкин. 6^3P_1 терм триплетдир. Триплет термнинг бошқа сатҳларидан асосий ҳолатга ўтишлар, яъни $6^3P_0 - 6^1S_0$ ва $6^3P_2 - 6^1S_0$ бошлангич $J = 0$ дан охириги $J = 0$ ҳолатга ўтишлар (7.20) га кўра таққиқланади.

Уч валентли атом. Алюминий атоми спектри. Алюминий атомининг асосий (уйғонмаган) ҳолати электрон конфигурацияси



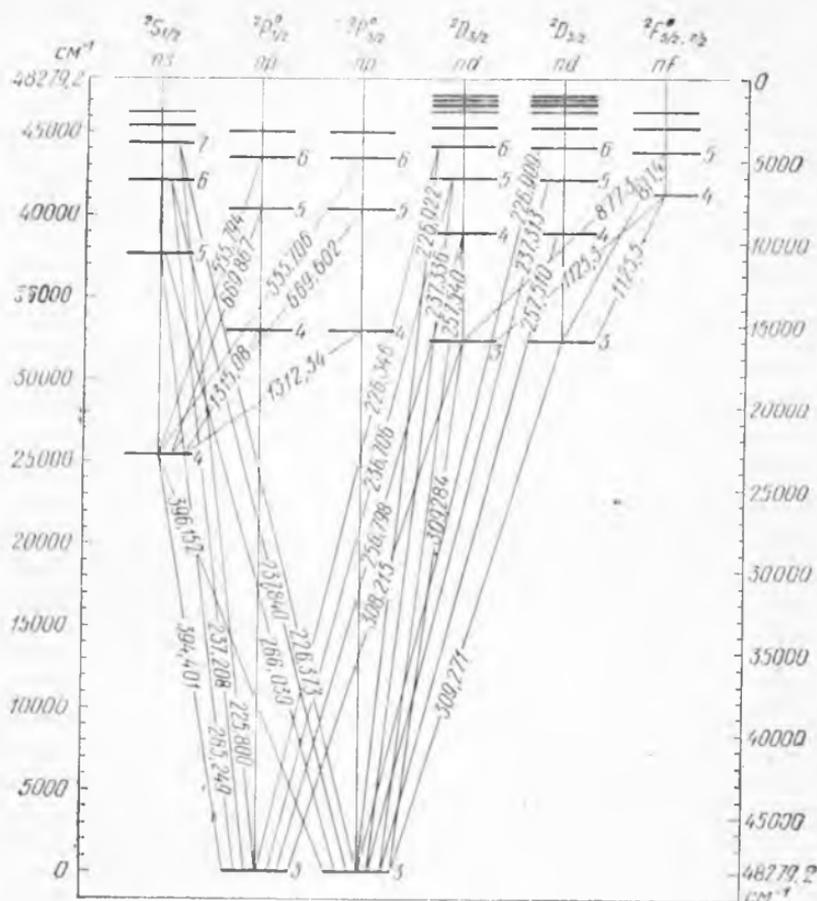
каби кўринишга эга. Ташқи электрон қобиқда учта электрон жойлашган. Лекин алюминийнинг кўпчилик уйғотилган сатҳлари энг кучсиз боғланган электроннинг ўтишлари билан боғлиқ. Ташқи қобиқнинг $3s^2$ иккита электрони ички қобиқ электронлари билан бирга атом қолдигини сил қилади. Ишқорий металл атомлари каби алюминий



72-расм. С₃С₃ атомининг синглет (6s, 6p) ва триплет (3p) термлари ва спектр чизиқлари.

атоми қолдиги ҳам тўлдирилган электрон 1—2-қобикларидан ва тўлдирилган $3s^2$ қобикчадан иборат бўлганлиги сабабли, унинг тўла орбитал моменти L ва тўла спини S юқорида таъкидлаганимиздек, нолга тенг, яъни $L = 0$, $S = 0$, $J = 0$. Демак, алюминий атоми масаласи ҳам, ишқорий металл атомидаги сингари, атом қолдиғининг сферик симметрияга яқин майдонида жойлашган битта оптикавий электрон ҳаракатларини ўрганишдир. Шунинг учун ҳам, алюминий атоми термлари схемаси ишқорий металл атомларининг терм схемасига ўхшаш дублет термлар сериясидан иборатдир. Алюминий атоми энергетик сатҳлари схемаси 73-расмда келтирилган.

Алюминий атоми термлари схемасининг ишқорий металл атоми термлари схемасидан асосий фарқи алюминий



73- расм. Алюминий атомининг энергетик сатҳлари ва спектр чизиқлари.

атомининг паст сатҳи $2P$ эканлигидир. Юқорида кўрган эдикки, ишқорий металл атомининг паст сатҳи $2S$ эди.

Алюминий атомининг оптикавий электрони ўтишларида қуйидаги асосий серия спектр чизиқлари кузатилади: бош серия $\nu = ns - mp$ ($n = 4, 5, 6, \dots$; $m = n, n+1, \dots$), аниқ серия $\nu = ns - mp$ ($n = 3, 4, 5, \dots$; $m = n+1, \dots$) диффуз серия $\nu = ns - md$ ($n = 3, 4, 5, \dots$; $m = n, n+1, \dots$), Бергман серияси $\nu = nd - mf$ ($n = 3, 4, 5, \dots$; $m = n+1, \dots$).

Алюминий атомининг энг паст терми $3p$ бўлганлиги туфайли унинг спектр чизиқлари сериялари ишқорий металл спектридан бирмунча фарқ қилади. Спектр чизиқлари серияларига диққат билан назар ташласак, мазкур ҳолда бош серия билан аниқ ва диффуз серия ўрин алмашган. Алюминий атомининг бош серияси вазифасини аниқ серия ва диффуз серия бажаради. Бу сериялардаги ўтишлар атомининг $3p$ асосий ҳолатига ўтишларда ҳосил бўлади.

Алюминий атомининг асосий ҳолат терми чуқур жойлашган бўлади. Энг яқин термлардан ўтишлар: $3p - 4s$ ва $3p - 3d$ чизиқларнинг тўлқин узунлиги ультрабинафша соҳасида ётади.

Шундай қилиб, ишқорий металл атомлари спектрини ўрганишда қўлланилган (атом қолдиғи майдонида оптикавий электрон ҳаракати ҳақидаги) модель анча мураккаб алюминий атоми ҳоли учун ҳам ўз кучини сақлар экан. Худди шу усулда бошқа мураккаб атомлар спектрини ҳам ўрганиш мумкин.

53- §. Рентген нури

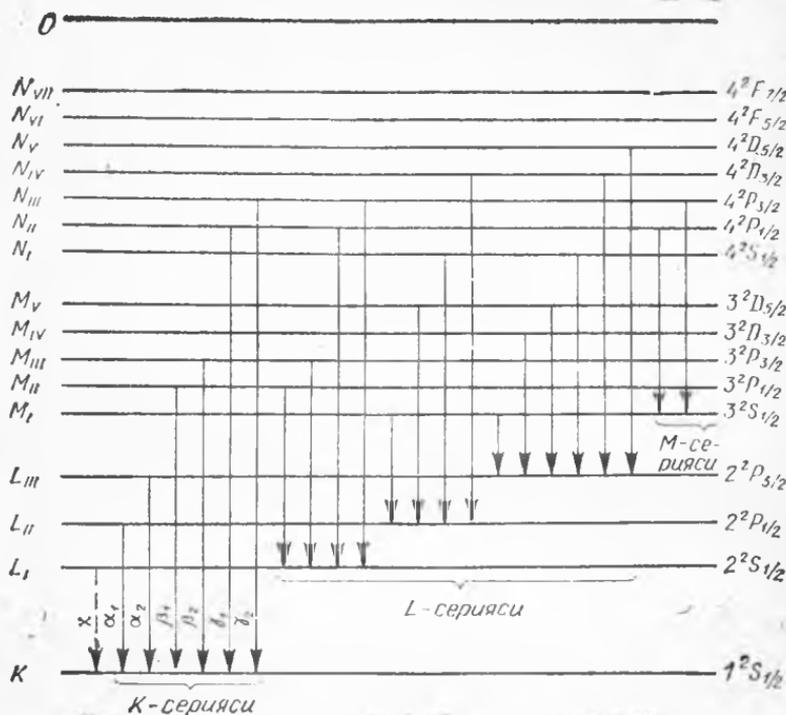
Биз юқорида атомнинг ташқи электрон қобиғидаги валент электронининг бир энергетик сатҳдан иккинчисига ўтишини ўргандик. Атом системаси ташқи электронларининг ўтишидаги энергия ўзгариши бир неча электронвольтгагина тенг бўлади. Ҳатто ташқи электронни атомдан ажратиш учун энг кўпи билан гелий атоми ҳолига тўғри келадиган, 24,6 эВ энергиягина керак бўлади. Шунинг учун бу хил ўтишлар электромагнит нурланишнинг ёруғлик тўлқини узунлиги соҳасида бўлган фотонлар чиқарилиши билан юз беради. Валент электрон уйғотилган ҳолатларга ўтиши учун ҳам оз энергия керак. Атом ички қобиқ электронларини уйғотиш эса мутлақо бошқача юз беради.

Юқори энергияли фотонлар ёки электронлар билан атом тўқнашганда мураккаб атомнинг ички электронлари юқоридаги бўш энергия сатҳларига ўтиши мумкин. Ички қобиқда бўш қолган жойга қўшни энергия сатҳидан электронлар ўтиши вужудга келади, чунки атомнинг ички электрон қобиғи бўш бўлган ҳолат энергия жиҳатдан беқарор. Атом барқарор ҳолатга ўтиши учун электрон структураси қайтадан тузилади. Атом ички қобиқларида электрон ўтиши катта энергия чиқарилиши билан юз беради.

Чунончи, ички қобиқларнинг бирдан иккинчисига электрон ўтишида чиқариладиган фотонлар энергияси оптиквий фотонларникига қараганда юз, минг, ҳатто оғир атомларда, ўн минг мартагача катта бўлади. Тўлқин узунликларнинг бир ангстрем соҳасидаги бу нурланишга *характеристик Рентген нурланиши* дейилади. Рентген нурланиш спектри атомнинг сатҳлар тузилишига боғлиқ бўлади. Шунинг учун ҳар бир элемент фақат ўзига хос характеристик нурланиш спектрига эга бўлади. Оптиквий нурланиш спектридан фарқли рентген спектри атомнинг атом оғирлиги ва электрон қобиқларининг даврий тўлдирилиши билан содда ва қонуний боғланган. Биз қуйида кўрамизки, рентген спектрларининг бундай характерга эга эканлиги элементлар атом оғирлигининг ортиб бориши билан тўлдирилган ички электрон қобиқларининг ўзгармаслигини билдиради.

Рентген нурланиш спектрини характерловчи мураккаб атом рентген термларини кўрамиз. Ҳар бир рентген терм электрон қобиқларининг қайси бирида электрон йўқотилганлигини кўрсатади. Агар электрон K -қобиқдан ($n = 1$) уриб чиқарилган бўлса, бу бўш жойга қўшни қобиқлардан электрон ўтишида K -серияли рентген нурланиши чиқади. Электронларнинг L -қобиқдаги бўш ҳолатга ўтишида эса L -серияли рентген нурланиши ҳосил бўлади ва ҳоказо. Шундай қилиб, рентген термлари «ковак» характерга эга, яъни қайси қобиқдан электрон йўқотилганлиги билан характерланади. Ҳар бир тўлдирилган қобиқ ва қобиқчалар учун L , S ва J квант сонлари нолга тенг. Шунинг учун, бирор электрон йўқотган қобиқнинг квант сонлари L , S , J шу электроннинг l , s ва j квант сонларига тенг бўлади. Демак, рентген термлари схемаси водородсимон атом термлари схемасига ўхшаш бўлар экан.

Масалан, ташқи магнит майдон йўқ ҳолида, биринчи қобиқдаги иккала $1s$ электрон учун ҳам квант сонлари $s = 1/2$, $l = 0$, $j = 1/2$ га тенг. Уларнинг қайси бири ўрнидан уриб чиқарилган бўлмасин $n = 1$ қобиқда қолган битта электрон ҳолати ${}^2S_{1/2}$, $s = 1/2$, $L = 0$, $J = 1/2$ квант сонлари билан характерланади. Агар электрон $n = 2$ бўлган L -қобиқдан йўқотилган бўлса, уч хил ҳолат: $2s^2$ -электронларнинг биттасини йўқотилишида ${}^2S_{1/2}$ ва $2p^0$ -электронларнинг биттасини йўқотилишида эса



74- расм. Рентген чизикларининг ҳосил бўлиш схемаси.

$${}^2P_{1/2} (S = 1/2, L = 1, J = L - S = 1/2) \text{ ҳамда}$$

$${}^2P_{3/2} (S = 1/2, L = 1, J = L + S = 3/2)$$

дан иборат иккита ковак ҳолат ҳосил бўлади. Шундай қилиб, K -терм ёлғиз сатҳдан иборат ва у айни вақтда оптиканий терм ${}^2S_{1/2}$ ҳамдир. L -терм учта сатҳдан ($n = 2$ да $l = 0, 1$ учун $l = 0$ да $j = S = 1/2$ ва $l = 1$ да $j = 1 \pm \pm 1/2$) иборат ва ҳоказо. Бу сатҳлар 74- расмда чап томонда $K, L_1, L_2, L_3, M_1, \dots$ орқали белгиланган.

Умуман, L -термдан бошлаб ҳар бир L, M, N, \dots ва ҳоказо термларда $L = l = 0$ дан бошқа $L = l = 1, 2, \dots, n - 1$ сатҳлар спин-орбитал ўзаро таъсир натижасида $2L$ та сатҳга ажралган бўлади. Демак, $L = 0$ ни ҳам ҳисобга олган ҳолда, ҳар бир n -қобиқ $2L + 1$ та сатҳдан иборат бўлади.

Электроннинг юқори сатҳдан пастки бўш сатҳга рентген нури чиқариш билан ўтишида ҳам юқорида биз кўрган танлаш қоидалари бажарилади. Масалан, танлаш қоида-сига кўра $2^2S_{1/2}$ сатҳдан $1^2S_{1/2}$ сатҳга электрон ўтиши $\Delta L = \pm 1$ томонидан тақиқланган. Бу тақиқланган ўтиш расмнинг энг чап қисмида кўрсатилган. Расмда бошқа ҳамма тақиқланган ўтишлар кўрсатилмаган. Электроннинг K -қобиққа ўтишида ҳосил бўладиган ҳар қандай чизиқ K -серияга бирлаштирилади. L -серия чизиқлари эса L дан юқори қобиқлардаги ҳар қандай электроннинг L -қобиқдаги бўш ҳолатга ўтишидан иборат бўлади ва ҳоказо. Сериянинг ҳар бир чизигига алоҳида-алоҳида ном берилган. Муайян қобиққа ундан юқори қўшни қобиқдаги ҳар қандай электроннинг ўтишида вужудга келадиган чизиқ α индекс, иккинчи, юқори қобиқдан ўтишга мос чизиқ β индекс, учинчи юқори қобиқдан ўтиш — γ индекс ва ҳоказо ёрдамида фарқланади. Расмда K -серия учун бу белгилашлар кўрсатилган. Ҳар бир қобиқ бир неча қобиқчалардан иборат бўлгани учун α , β , γ . . индекслар муайян қобиқдан танлаш қоидаси тақиқламаган ўтишлар тартиби билан номерланган. Масалан, K_{α_1} чизиқ L -қобиқнинг танлаш қоидаси билан электрон ўтиши тақиқланмаган энг паст қобиқчасидан K -қобиққа ўтишда ҳосил бўлади. K -сериянинг α группа чизиқлари иккита K_{α_1} ва K_{α_2} дан иборат.

Мозли қонуни. Водород атоми учун нурланиш частотаси

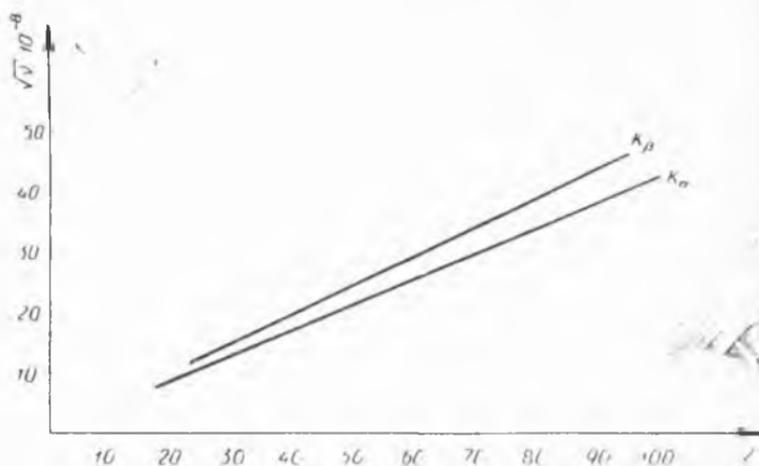
$$\nu = \frac{BZ^2}{n^2}$$

га тенг эди. Ишқорий металллар учун эса бош квант сони ўрнига эффектив квант сонини киритиб мазкур частота учун

$$\nu = \frac{RZ^2}{n_u^2}$$

формулани ёзишимиз мумкин. Агар бош квант сонини ўзгартиришсиз қолдириб ядро зарядини ўзгартирсак, яъни ички электронлар томонидан ядро зарядининг тўсилишини (экранланишини) ҳисобга олувчи эффектив заряд

$$Z_{\text{эфф}} = (Z - \sigma) e$$



75-расм. K_α ва K_β рентген чизиқларининг Мозли графиги.

киритсак, исқоридаги частота учун

$$\nu = \frac{R}{n^2} (Z - \sigma)^2 e$$

ни ёзиш мумкин. Бу ерда: σ — экранланиш доимийси, n — бош квант сони.

Умуман, берилган n -қобик учун атомлар ички электрон тузилиши бир хил бўлганлиги сабабли ҳар қандай атом учун σ бир хилдир, яъни σ ядро заряди сонига боғлиқ эмас. Аммо у n , l квант сонларига боғлиқ. K -қобикдаги иккита электрон учун ҳар бир электронга фақат иккинчиси экранлаш таъсирини кўрсатади. Бу ҳол учун $\sigma \approx 1$. L -қобик электронлари учун $\sigma \approx 8$. σ_{nl} нинг аниқ қиймати экспериментдан аниқланади.

Энг охириги формуладан

$$\sqrt{\frac{\nu}{R}} = \frac{Z - \sigma}{n} \quad (7.41)$$

умумлашган Мозли қонунининг ифодасини ҳосил қиламиз. Мозли қонунига биноан рентген терми (ν) нинг квадрат илдизи элементларнинг заряд сони Z билан чизиқли боғлиқ.

75-расмда K_α ва K_β чизиқлари учун Мозли графиги келтирилган. Шундай қилиб, рентген спектрларининг

экспериментда кузатилувчи серияли тузилиши ва Мозли қонуни биз юқорида кўрган элементлар даврий система-сининг талқин этилишининг тўғри эканлигини кўрсатади. 75-расмдан кўрамизки, Z нинг ўсиши билан график харак-тери ўзгармайди. Элементларнинг даврий тузилиши тушун-часига кўра ҳақиқатан ҳам шундай бўлиши керак, чун-ки Z нинг ўсиши билан атом ички электрон қобиклари де-ярли ўзгармайди (фақат сиқилган бўлиши мумкин).

Оже эффекти. Ички қобиғидан электрон йўқотган атом рентген фотони чиқармасдан ҳам ўзининг электрон тузили-шини ўзгартириши, яъни уйғониш (ортиқча) энергиясини нурланишдан бошқа йўл билан ҳам чиқариши мумкин. Бу ҳодиса *Оже эффекти* дейилади. Оже эффектида ташқи қо-биқдан ички электрон қобиқдаги буш ўринга электрон ўтишида атомнинг энг ташқи электронларидан бири атом-дан бутунлай чиқиб кетиши мумкин. Худди шу электрон ички қобиқдаги буш ҳолатнинг тўлдирилишида ажралиб чиққан энергияни олиб кетади. Маълум маънода Оже эффекти ички фотоэлектрик эффектдир. Кўпчилик атомлар-да Оже эффекти рентген нурланиши билан рақобатда бў-либ унга тўсқинлик қилиши мумкин. Оже эффекти, айниқ-са, электромагнит нурланиш тақиқланган ҳолларида, ма-салан, $0 - 0$ ўтишларда кучли юз беради. Оже эффектида атом бир каррали ионланиш ўрнига икки каррали ионлан-ган бўлади.

АТОМ ТАШҚИ ЭЛЕКТР ВА МАГНИТ МАЙДОНДА

Агар нурланаётган ёки нурланиш ютаётган атомни (жисмни) ташқи электр ёки магнит майдонга «жойлаштирсак», муҳим оптикавий ҳодисалар вужудга келади: нурланиш ва ютиш спектрини, ёруғликнинг қутбланиш характеристикаларини, тарқалиш тезлигини ва ҳоказо ўзгариши юз беради. Ташқи майдон таъсирида атом спектр чизиқлари ажралиши ва спектр чизиқларининг кенгайиши кузатилади. Атом спектр чизиқларининг ташқи электр майдонда ажралиши Штарк эффекти дейилса, магнит майдон таъсирида ажралишга Зеeman эффекти деб аталади.

Спектр чизиқларининг магнит майдон таъсирида ажралиши 1896 йилда голландиялик физик Зеeman томонидан натрий буғларининг шуълаланишини кузатишда каниф қилинган ва бу ҳодиса Зеeman номни билан аталади. Ҳар бир спектр чизигининг учтагача чизиқларга ажралиши билан боғлиқ бўлган ҳодиса нормал Зеeman эффекти ва спектр чизиқларининг учтадан кўп чизиқларга ажралиши билан боғлиқ ҳодиса аномал Зеeman эффекти дейилади. Нормал ва аномал деб ном берилишининг сабаби чизиқларнинг учтагача компонентларга ажралиши классик методлар асосида тушунтириш мумкинлигидан ва Зеemanнинг аномал эффектини эса классик физикага асосан тушунтириб бўлмаслигидан келиб чиққан.

Магнит майдонга жойлаштирилган атом энергетик сатҳларини ҳисоблаш мазкур масалага онд Шредингер тенгламасининг ечилишини талаб қилади. Бу масалада тенгламага кирувчи энергия оператори

$$\hat{E} = \hat{T} + \hat{U}_{\text{Кул.}} + \hat{U}_{\vec{S}\vec{L}} + \hat{U}_{\vec{S}\vec{H}} + \hat{U}_{\vec{L}\vec{H}}$$

кўринишда бўлади. Бу ерда \hat{T} — электронларнинг кинетик энергиясининг йиғиндисига тенг атом кинетик энергияси-

$$\hat{T} = \frac{1}{2m_e} \sum_i \hat{p}_i^2$$

ни билдиради; $\hat{U}_{\text{Кул.}}$ - электронларнинг эффектив Кулон майдонидаги потенциал энергияларининг йиғиндиси бўлиб, электронларнинг ўзаро бир-бири билан Кулон итариши ва ядро билан Кулон тортишиш энергияларидан иборат; $\hat{U}_{\vec{L}\vec{S}}$ — сатҳларнинг нозик структурасига сабабчи спин-орбитал ўзаро таъсирга боғлиқ энергия. Энергия операторининг биринчи бу учта ҳади ташқи майдонга боғлиқ эмас. Охирги икки ҳад атом орбитал ва спин магнит моментларининг ташқи магнит майдон \vec{H} билан ўзаро таъсирини характерлайди. Тўла магнит моментнинг

$$\vec{\mu} = -g_J \mu_B \vec{J}$$

ифодасидан электрон моментининг ташқи магнит майдон йўналиши z ўқига проекцияси

$$\mu_z = g_J \mu \cdot \cos(\vec{\mu} \vec{H}) = -g_J \mu_B m_J$$

га тенглигини аниқлаймиз. Бу ерда m_J — тўла механик момент учун магнит квант сони, g_J — Ланде фактори. z ҳолда, атомнинг ташқи магнит майдони таъсирида вужудга келган қўшимча энергияси

$$\begin{aligned} \Delta E &= -(\vec{\mu} \vec{H}) = -\mu H \cos(\vec{\mu} \vec{H}) = \\ &= -\mu_z H = +g_J \mu_B H m_J \end{aligned} \quad (8.1)$$

га тенг.

Энергия операторининг юқоридаги ифодасида ташқи майдон H бўйича квадратик бўлган атомнинг магнит қабул қилувчанлигини аниқловчи ҳадлар ташлаб юборилган. Лекин бундай соддалаштиришга қарамасдан, энергия операторининг юқоридаги умумий кўринишида Шредингер тенгламасини ечиш қийин. Шунинг учун қўйида биз янада соддалаштирилган тенгламалар билан иш кўрамиз.

Квадратик кичик катталикларни ҳисобга олмасак, электр майдондаги атом учун энергия оператори юқори-

даги операторнинг охирги икки ҳадини атом электр диполи моментининг ташқи электр майдон билан ўзаро таъсирини характерловчи диполь потенциал энергиясига алмаштиришдан келиб чиқади.

54- §. Зеemannнинг нормал эффекти

Зеemannнинг нормал эффекти спектр чизиқларининг ташқи магнит майдон таъсирида учтага ажрალიш ҳодисасидир. Масалан, $S = 0$, $J = L$ сатҳлар ўртасидаги ўтишларда Зеemannнинг нормал эффекти кузатилади. Магнит майдонда ҳар бир $S = 0$, $J = L$ синглет сатҳ $2J + 1 = 2L + 1$ та сатҳга ажралади. Янги ҳосил бўлган сатҳлар орасидаги масофалар бир хил, чунки $S = 0$ да Ланде фактори g_L га боғлиқ эмас ва $g = 1$ га тенг.

Квант назариясига кўра атом электронининг магнит майдонидаги тўла энергияси (8.1) га биноан

$$E(n, L, m_L) = E_0(n, L) + \mu_B H m_L \quad (8.2)$$

га тенг. Бу ерда $E_0(n, L)$ магнит майдонининг ва спиннинг нолга тенг ҳоли учун электроннинг тўла энергияси; n, L, m — мос равишда, бош, орбитал ва магнит квант сонлари. Шундай қилиб, электрон энергиясининг магнит майдон таъсирида ўзгариши

$$\Delta E = E - E_0 = + \mu_B H m_L \quad (8.3)$$

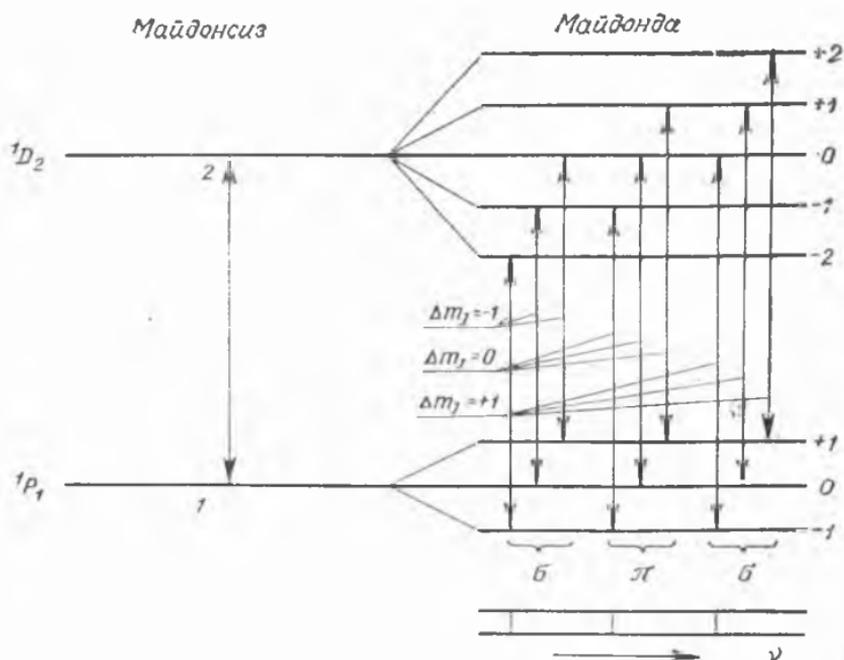
га тенг. Орбитал магнит m_L квант сони — J дан $+J$ гача бир бирликка ўзгарувчи қийматлар қабул қилади, чунки $J = L$. Демак, юқорида айтылганидек, ажралган сатҳлар орасидаги энергия бирлигидаги масофа ҳар доим $H \mu_B$ га тенг. $\mu_B H$ қиймат магнит майдондаги атом сатҳлари ажрალიшининг ўлчашдаги табий бирликни ифодалайди ва *нормал силжиш* дейилади.

(8.2) формулани спектр чизиқлари частотаси учун ҳам

$$\nu = \nu_0 + \mu_B H (m_{L_2} - m_{L_1})/L \quad (8.4)$$

каби ёзиш мумкин. Диполь учун танлаш қондасига кўра магнит квант сонининг

$$\Delta m_J = \Delta m_L = m_{L_2} - m_{L_1} = 0, \pm 1$$



76- расм. Спектрал чизиқнинг Зеeman ажрлиши. Майдонга параллел қутбланган нурланиш чизиқлари π -компонента, айлана бўйича қутбланган нурланиш чизиқлари эса σ -компонента дейилади.

га тенг ўзгариши ўринли бўлган ўтишларгина тақиқланмаган. Шунинг учун, нурланиш ёки ютилиш спектр чизиқлари ташқи магнит майдонда учта чизиққа: $\Delta m_L = 0$ га тўғри келувчи силжимаган (ν_0) ва $\Delta m_L = \pm 1$ га тўғри келувчи симметрик силжиган иккита чизиқларга ажралади. Силжиш катталиги частоталарда

$$\Delta\nu = \mu_B H/h \quad (8.5)$$

га тенг. 76-расмда магнит майдонда ажралган $S_1 = 0$, $J_1 = L_1 = 1$ сатҳлар билан $S_2 = 0$, $J_2 = L_2 = 2$ сатҳлар ўртасидаги мумкин бўлган ҳамма ўтишлар тасвирланган. Умуман олганда, танлаш қондасига кўра тўққизта ўтишлар мумкин; лекин 2 ва 8 ўтишлар энергияси (частотаси) 5-асосий ўтиш энергияси (частотаси) билан юс келади, худди шунингдек 1, 3, 6 ва 4, 7, 9 ўтишлар энер-

гияси (частотаси) ҳам тенгдир. Бунга ишонч ҳосил қилиш учун (8.4) га асосан ўтиш чизиқлари частотасини ҳисоблаш кифоя. Шундай қилиб, магнит майдонда $S = 0$ сатҳлар ўртасидаги ўтиш чизиқлари триплет тарзида кузатилиши керак.

Агар ташқи магнит майдон кучли бўлса, ҳеч қандай чек қўйилмаган ҳар қандай ихтиёрий (синглет эмас) мумкин бўлган ўтишларда ҳам Зеemannнинг нормал эффектини кузатиш мумкин. Кучли магнит майдонда $\vec{L} \vec{S}$ -боғланиш «узилади», яъни $\vec{L} \vec{S}$ ўзаро таъсир спин ва орбитал магнит моментларининг ташқи майдон билан ўзаро таъсирига нисбатан ташлаб юбориладиган даражада кичикдир. Бошқача айтганда, кучли магнит майдонда электроннинг энергияси \vec{L} ва \vec{S} нинг ўзаро йўналиши (яъни $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ тўла момент вектори) га боғлиқ эмас. Энергия фақат \vec{L} нинг \vec{H} га \vec{S} нинг \vec{H} га алоҳида-алоҳида проекцияларига боғлиқ, яъни

$$E = E_0 + g_L \mu_B m_L H + g_S \mu_B m_S H.$$

Ланде факторлари учун $L = 0$ деб, $g_S = 2$, $S = 0$ деб $g_L = 1$ қийматларни аниқлаймиз. У ҳолда, кучли майдондаги атом энергияси учун

$$E = E_0 + \mu_B H \cdot (m_L + 2m_S) \quad (8.6)$$

формулага келамиз. Маълумки, орбитал ва спин магнит квант сонлари учун танлаш қондаси $\Delta m_L = 0, \pm 1$ ва $\Delta m_S = 0$. У ҳолда, ажралган спектр чизиқлари (частотаси) яна (8.5.) га силжиган. Ҳақиқатан ҳам. (8.6) га биноан, кучли магнит майдонда ҳар доим учта компонентага ажралиш юз бериши керак:

$$h\nu = (E_{02} - E_{01}) + \mu_B H (m_{L_2} - m_{L_1}) = h\nu_0 + \mu_B H \cdot \Delta m_L \quad (8.7)$$

чунки $\Delta m_S = 0$. m_L учун танлаш қондаси $\Delta m_L = 0, \pm 1$. Шунинг учун, кучли магнит майдонда силжимаган ($\Delta m_L = 0$) чизиқдан ташқари, қизил ва бинафша соҳага частота бирлигида бир хил масофа $\mu_B H$ га силжиган иккита чизиқ кузатилади, яъни

$$\Delta\nu_H = \mu_B H / h. \quad (8.5)$$

Яна (8.5) қийматга келдик. Агар (8.5) да Бор магнетони μ_B ни ошкор кўринишда ёзсак,

$$\Delta\nu = \frac{e}{4\pi mc} H \quad (8.6)$$

бўлади. Яъни ажралган чизиқлар орасидаги частота бўйича масофа Планк доимийсига ҳамда квант сонларига боғлиқ эмас. Шунинг учун ҳам (8.5) формулани классик физика тушунчалари асосида ҳосил қилиш мумкин. Ҳақиқатан ҳам. Лоренц электрон назариясига асосан Зеeman эффектини тушунтиришга муваффақ бўлган. 1903 йил Зеemanга ва Лоренцга янги эффектни очганлиги ва классик электрон назарияси нуқтаи назардан тушунтиргани учун Нобель мукофоти берилган.

Умуман, квант назариясига биноан, Зеemannинг нормал эффекти қуйидаги уч ҳолларда кузатилади.

1. Нурланиш ёки ютилиш синглет чизиқлари вужудга келадиган ёлғиз сатҳлар ўртасидаги ўтишларда. Бу ҳолда тўла спин $S = 0$. Шунинг учун, электронларнинг тўла механик моменти фақат орбитал моментдан иборат $J = L$ бўлади. Ланде фактори ёлғиз чизиқлар учун ҳар доим бирга тенг. Зеemannинг нормал силжиган $\Delta\nu = \mu_B H$ триплети ҳосил бўлади.

2. Электрон қобиғи учун тўла орбитал моменти нолга тенг атом сатҳлари ўртасидаги ўтишларда. Бу ҳолда, $L = 0$ бўлгани сабабли, тўла момент $J = S$, Ланде фактори эса ҳар доим 2 га тенг. Мазкур ҳолда нормал силжишдан икки марта катта бўлган Зеemannинг $\Delta\nu = 2\mu_B H$ триплет ажралниши ҳосил бўлади.

3. $J = 0$ ва $J = 1$ сатҳлар ўртасидаги ўтишларда. Биринчи ($J = 0$) сатҳ ажралмайди, чунки $m_J = 0$. Иккинчи сатҳ эса учтага ажралади, чунки $m_J = 0, \pm 1$. Спектрал чизиқ учта компонентага ажралади. Силжиш катталиги $\Delta\nu = g\mu_B H$ га тенг. Зеeman триплети ҳосил бўлади. Бу ерда g $J = 1$ сатҳ учун Ланде фактори.

55- §. Зеemannинг аномал эффекти

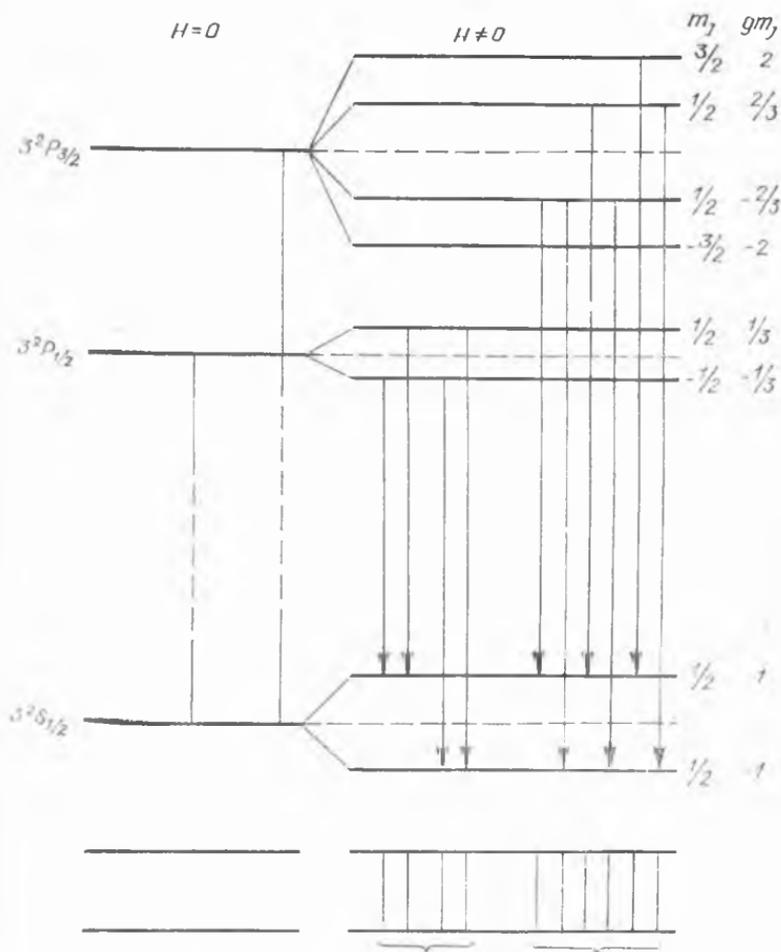
Зеemannинг аномал ёки мураккаб эффекти кучсиз магнит майдондаги оптикавий ўтишларда кузатилади. Бошқача айтганда, магнит майдондаги атом энергияси-

нинг операторида $\overline{L S}$ -боғланиш билан боғлиқ спин-орбитал ўзаро таъсирга нисбатан спин ва орбитал магнит моментларининг ташқи магнит майдон билан ўзаро таъсири жуда кичикдир. Бу ҳолда, сатҳларнинг майдон бўлмагандаги тасвири деярли сақланади, фақат сатҳларнинг озгина ажралиши вужудга келади. Ташқи майдон шу даражада кучсизки, унинг таъсирида вужудга келувчи қўшимча ажралиш спин-орбитал ўзаро таъсирда ҳосил бўладиган нозик структура чизиқлари орасидаги масофага нисбатан ниҳоят кичик.

Маълумки, ташқи (магнит) майдон бўлмаган ҳолида атомнинг ҳар бир электрон сатҳи L, S, J квант сонлари билан характерланади. Атомнинг магнит моменти ҳам шу учта квант сонлари билан аниқланади. Магнит моментига эга ҳар қандай атомнинг ташқи магнит майдонида оладиган қўшимча энергияси — (8.1) атом моментиинг ташқи майдонга нисбатан йўналишига, яъни проекциясига μ_z боғлиқ. Атомнинг қўшимча энергияси магнит моменти проекцияси орқали магнит квант сонига боғлиқ. Маълумки, магнит квант сони m_J квантлаш қондасига биноан, $\pm J, \pm(J-1), \pm(J-2), \dots$ каби $(2J+1)$ та қийматлардан ихтиёрий биттасини қабул қилиши мумкин. Демак, ҳаракат миқдори моменти проекциясининг ҳар бир қийматига магнит моменти проекциясининг маълум қиймати ва ўз навбатида магнит майдондаги атомнинг қўшимча энергияси мос келади, яъни

$$\Delta E = \mu_z H = g_J \mu_B H m_J.$$

Шундай қилиб, магнит майдонда атом энергия сатҳларининг магнит квант сони бўйича айнаши йўқолади. 77-расмда $3^2S_{1/2}$ ($n=3, L=0, S=1/2, J=1/2$), $3^2P_{1/2}$ ($n=3, L=1, S=1/2, J=1/2$)—ва $3^2P_{3/2}$ ($n=3, L=1, S=1/2, J=3/2$) сатҳларнинг магнит майдонда ажралиши тасвирланган. Расмдан кўрамизки, m_J қанча қиймат қабул қилиши мумкин бўлса, берилган сатҳ шунча сатҳга ажралади. m_J нинг ҳар қандай қўшни қийматлари ўзаро бир бирликка фарқ қилишини эсласак, магнит майдонга жойлаштирилган атомнинг ҳар қандай сатҳи бир-бирдан тенг масофага силжиган $2J+1$ донга тенг оралиқ-



77- расм. Атом сатҳларининг кучсиз магнит майдонда Зеeman аномал ажралиши.

ли сатҳларга ажралади. Демак, Зеemannинг мураккаб эффектига кура берилган ташқи магнит майдон кучланганлигида, атом сатҳларининг магнит ажралиш катталиги $g_L \mu_B$ купайтманиннг сон қиймати билан аниқланади. Биланмизки, g_L фақат L, S, J квант сонларига боғлиқ, бош квант сони n га эса боғлиқ эмас. Шундай қилиб, ҳосил бўл-

ган сатҳлар мультиплетни учун компоненталар орасидаги масофа, берилган ташқи майдонда

$$\Delta E_H = g_J \mu_B H \quad (8.9)$$

га тенг. Бу катталик муайян мультиплет учун ўзгармас, ҳар хил мультиплетлар учун, албатта, ҳар хилдир.

Берилган спектр чизигининг Зеeman ажралиши эса шу оптикавий ўтиш юз бераётган икки сатҳнинг ажралиши ва магнит квант сони учун ўринли бўлган танлаш қондаси билан аниқланади. Спектр чизигининг ажралишлар сони шу чизиқни вужудга келтираётган ўтишнинг юқори ва пастки сатҳларининг квант характеристикаларига боғлиқ.

Дипол нурланиш учун магнит квант сони бўйсунадиган танлаш қондаси

$$\Delta m_J = m_{J_2} - m_{J_1} = 0, \pm 1. \quad (8.10)$$

Бу ерда m_{J_1} , m_{J_2} — дипол ўтиш юз бераётган сатҳларнинг магнит квант сонлари.

Умумий ҳолда ўтиш энергиясини аниқлаб,

$$\begin{aligned} h\nu &= \Delta E m_{J_2} m_{J_1} = E_2 - E_1 = (E_{02} + g_2 \mu_B H m_{J_2}) - \\ &- (E_{01} + g_1 \mu_B H m_{J_1}) = (E_{02} - E_{01}) + (g_2 m_{J_2} - g_1 m_{J_1}) \mu_B H = \\ &= h\nu_0 + h \cdot \Delta\nu, \end{aligned} \quad (8.11)$$

спектр чизиқларининг частота бўйича ажралишининг катталигини аниқлаймиз:

$$\Delta\nu = (g_2 m_{J_2} - g_1 m_{J_1}) \mu_B H / h. \quad (8.12)$$

Агар (8.12) ни (8.8) билан солиштирсак, кўрамизки, мураккаб Зеeman эффектида спектр чизиқларининг частота бўйича ажралиш катталиги оптикавий ўтиш юз бераётган сатҳларнинг квант характеристикалари — квант сонлари ва Ланде факторларига боғлиқ.

Агар (8.10) ни эътиборга олсак, (8.11) формулани икки сатҳ мультиплетлари ўртасидаги ўтишларнинг қуйидаги типлари орқали ёзиш мумкин:

$$\left. \begin{aligned} \Delta m_J = m_{J_2} - m_{J_1} &= 0; & \Delta E_{MM} &= (g_2 - g_1) m_J \mu_B H; \\ \Delta m_J = m_{J_2} - m_{J_1} &= +1; & \Delta E_{M+1,M} &= [(g_2 - g_1) m_J + \\ & & + g_1] \mu_B H; \\ \Delta m_J = m_{J_2} - m_{J_1} &= -1; & \Delta E_{M-1,M} &= [(g_2 - g_1) m_J - \\ & & - g_1] \mu_B H. \end{aligned} \right\} \quad (8.13)$$

(8.13) ифодалардан кўрамизки, агар оптикавий ўтишлар юз бераётган сатҳларнинг g — факторлари g_1 ва g_2 ўзаро тенг бўлса, (8.13) дан Зеemannинг нормал эффекти ҳосил бўлади. (8.13) га кўра $\Delta m_J = 0$ билан юз берувчи ўтишларда ҳосил бўладиган чизиқлар дастлабки ажралмаган чизиқ ўрнига нисбатан симметрик жойлашади, чунки m_J нинг қийматлари $\pm J, \pm(J - 1), \dots$ ва ҳоказо. Чизиқларнинг бу группасига π -ташқил этувчилар дейилади. $\Delta m_J = \pm 1$ ўтиш чизиқлари группасининг симметрия маркази эса мос равишда $\pm g_J \mu_B H$ га силжиган бўлади. Бу чизиқлар группасини δ -ташқил этувчилар дейилади.

Муайян бир группа чизиқлари орасидаги масофа (8.13) га кўра ўзгармас ва $\mu_B H(g_2 - g_1)$ га тенг, яъни $(g_2 - g_1)$ қанча кичик бўлса, группа чизиқлари шунча бир-бирига яқин бўлади.

Агар (8.12) формуладаги қавсни рационал каср тарзида (чунки квант сонлари бутун, ярим бутун қийматлар қабул қилади) ифодаласак, яъни

$$\frac{q}{r} = m_{J_2} g_2 - m_{J_1} g_1 \quad (8.14)$$

деб белгиласак, чизиқлар частотаси силжишининг

$$\Delta\nu = \frac{eH}{4\pi m_e c} (m_{J_2} g_2 - m_{J_1} g_1) = \frac{eH}{4\pi m_e c} \frac{q}{r} = \Delta\nu_H \frac{q}{r} \quad (8.15)$$

Ҳиссага қоидасига келамиз. Бу ерда $\Delta\nu_H$ частотанинг нормал силжиши.

Юқорида баён қилинган мулоҳазаларга мисол тариқасида магнит майдонда натрийнинг D - чизиғи (дублет) ни кўрамиз. 77- расмда натрийнинг $3^2S_{1/2}$, $3^2P_{1/2}$ ва $3^2P_{3/2}$ сатҳларининг магнит майдонда ажралоши ва янги ҳосил бўлган сатҳларнинг мультиплетлари орасидаги ўтишлар тасвирланган. Расмдан кўрамизки, $3^2P_{1/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ ва $3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ ўтишлар магнит майдонда дублет чизиқларни ташқил қилар экан, чунки $3^2S_{1/2}$ сатҳ магнит майдондан $2J + 1 = 2$ мультиплетликка эга иккита сатҳларга ажралади. Расмда танлаш қоидаси билан тақиқланмаган ўтишлар кўрсатилган. Ўтиш юз бераётган ҳолатлар (сатҳлар)нинг Ланде факторини ҳисоблайлик.

$$3^2S_{1/2} (n = 3, L = 0, S = 1/2, J = 1/2);$$

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} = 2$$

$$3^2P_{1/2} (n = 3, L = 1, S = 1/2, J = 1/2); \quad g = 2/3$$

$$3^2P_{3/2} (n = 3, L = 1, S = 1/2, J = 3/2); \quad g = 4/3$$

Натрийнинг асосий ҳолати — $3^2S_{1/2}$ терм магнит майдон таъсирида дублет термларга ажралади. Дублет терм компоненталарининг силжиши, Зеemannнинг нормал эффектидаги каби, (8.1) дан

$$\Delta E_S = 2\mu_B H m_J = \pm \mu_B H;$$

яъни нормал силжишга тенг.

Биринчи уйғотилган терм $3^2P_{1/2}$ эса магнит майдонда $2J + 1 = 2$ тага ажралади. Бу икки сатҳ $3^2P_{1/2}$ сатҳнинг магнит майдон бўлмагандаги ўрнига нисбатан симметрик равишда

$$\Delta E_{P_{1/2}} = \pm \frac{1}{3} \mu_B H$$

га тенг масофага силжиган, чунки $3^2P_{1/2}$ учун $g_J = \frac{2}{3}$ ва $g_J m_J = \frac{2}{3} \left(\pm \frac{1}{2} \right) = \pm \frac{1}{3}$; Ушбу сатҳлар орасидаги масофа (8,9) га мос равишда $2/3 \mu_B H$ га тенг.

Худди шундай, $3^2P_{3/2}$ терм $2J + 1 = 4$ тага ажралади. Бу мультиплет компоненталари орасидаги масофа (8.9) га биноан $(4/3) \mu_B H$ га тенг. Бу компоненталар термнинг магнит майдон бўлмагандаги ўрнига нисбатан (расмда пунктир чизиқ билан кўрсатилган) симметрик жойлашган. Энг яқин компоненталар пунктир чизиққа нисбатан $\left(\pm \frac{2}{3} \mu_B H \right)$ га, қолган иккита компонента $\left(\pm \frac{6}{3} \mu_B H \right)$ га силжиган.

Магнит квант сони қаноатлантирувчи (8.10) танлаш қондасига биноан, магнит майдон таъсирида, $3^2P_{1/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ ўтиш (8.14) нинг тўртта қиймати

$$\frac{q}{r} = (m_{J_2}g_2 - m_{J_1}g_1) = \begin{cases} \frac{2}{3}, & \text{агар } m_{J_2} = -\frac{1}{2}; \quad m_{J_1} = -\frac{1}{2}; \\ \frac{4}{3}, & \text{—»— } m_{J_2} = +\frac{1}{2}; \quad m_{J_1} = -\frac{1}{2}; \\ -\frac{4}{3}, & \text{—»— } m_{J_2} = -\frac{1}{2}; \quad m_{J_1} = +\frac{1}{2}; \\ -\frac{2}{3}, & \text{—»— } m_{J_2} = +\frac{1}{2}; \quad m_{J_1} = +\frac{1}{2} \end{cases}$$

га мос равишда тўртта ўтишга ажралади. $3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ ўтиш эса олтига ўтишга ажралади. Бу ўтиш чизиқларининг частоталарини эса (8.15) дан аниқлаш мумкин. Одатда чизиқларнинг магнит ажралиш частотаси учун нормал силжиш $\Delta\nu_H = \mu_B H/h$ орқали ифодаланади. Ҳар бир чизиқ частотасини

$$\nu = \nu_0 + (m_{J_2}g_2 - m_{J_1}g_1) \Delta\nu_H = \nu_0 + \frac{q}{r} \Delta\nu_H$$

орқали аниқлаймиз. Натижада, магнит майдонда жойлашган натрий атомининг дублет ўтишлари учун қуйидаги частоталар тўпламини ҳосил қиламиз:

Майдон бўлмаганда

Майдон бўлганда

$$\begin{array}{l} \nu_0^{(1)} = {}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2S_{1/2} \\ \nu_0^{(2)} = {}^2P_{3/2} \rightarrow {}^2S_{1/2} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \nu = \nu_0^{(1)} \pm \frac{2}{3} \Delta\nu_H \\ \nu = \nu_0^{(1)} \pm \frac{4}{3} \Delta\nu_H \\ \nu = \nu_0^{(2)} \pm \frac{1}{3} \Delta\nu_H \\ \nu = \nu_0^{(2)} \pm \Delta\nu_H \\ \nu = \nu_0^{(2)} \pm \frac{5}{3} \Delta\nu_H \end{array} \right.$$

π- ташкил этувчилар
σ- ташкил этувчилар
π- компонента-лар
σ- компонента-лар

Биз юқорида кўрдикки, кучли магнит майдонда $\vec{L} \vec{S} =$ боғланиш узилади ва g фактор аниқ қийматларга эга бўлган $g_L = 1$ ва $g_S = 2$ факторларга айланади ва (8.14)

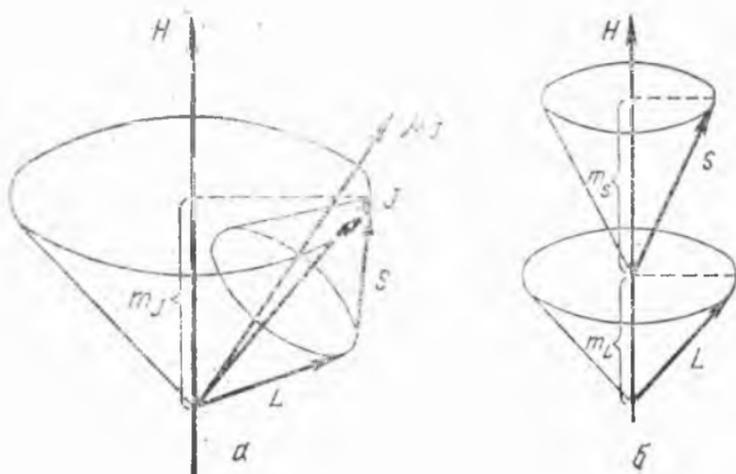
$$\frac{q}{r} = (m_{L_2} + 2m_{S_2}) - (m_{L_1} + 2m_{S_1}) = m_{L_2} - m_{L_1} = 0, \pm 1$$

га айланади. Натижада Зеemannнинг нормал триплет ажралиши ҳосил бўлади. Бу ҳодиса Пашен—Бак эффекти дейилади ва у 1912 йилда Пашен ва Баклар томонидан кашф қилинган.

56- §. Пашен—Бак эффекти

Кучли майдон. Ташқи магнит майдоннинг кучланганлиги ошиши билан Зеemannнинг аномал эффекти бўйича ажралган сатҳлар орасидаги масофа майдонга пропорционал равишда ошади. Агар майдон таъсирида юз берган термларнинг ажралиш масофаси берилган спектрал мультиплет компоненталари орасидаги масофа билан таққосланадиган даражада бўлса, яъни сунъий (майдон таъсирида) ажралиш катталиги мультиплетнинг табиий ажралиш катталигига тахминан тенг бўлса, ташқи магнит майдонни кучли деймиз. Демак, кучли ёки кучсиз майдон тушунчаси нисбийдир, чунки айнан бир майдон бир мультиплет учун кучсиз (агар мультиплет компоненталари — термлар бир-бирдан етарлича узоқ жойлашган) бўлса, иккинчи мультиплет учун кучли бўлиши мумкин.

Термларнинг магнит ажралишини мультиплетнинг табиий ажралиши билан тенглашишида ташқи кучли майдон таъсири \vec{L} ва \vec{S} моментларнинг ўзаро квантланиши (боғлиқ йўналганлиги) га сабабчи $\vec{L} \vec{S}$ ўзаро таъсирдан катта бўлади. Бошқача айтганда, ташқи майдоннинг \vec{L} ва \vec{S} моментларнинг ҳар бирига кўрсатган таъсири шу моментларнинг ўзаро таъсирдан катта. Натижада, \vec{L} ва \vec{S} моментларнинг \vec{J} атрофидаги прецессия энергияси \vec{J} нинг ташқи майдон \vec{H} атрофидаги прецессия энергиясидан кичиклашади. Бундай вазиятда, яъни \vec{L} ва \vec{S} моментларнинг, натижавий момент \vec{J} га мос ҳолда, ташқи майдон атрофидаги



78- расм. Магнит моментларининг ташқи майдон таъсиридаги прецессияси.

прецессияси ички ўқ (\vec{J}) атрофидаги прецессиясига нисбатан катта бўлганлиги сабабли \vec{J} айланиш ўқи сифатида ўз маъносини йўқотади, \vec{L} \vec{S} -боғланиш «узилади». Шундай қилиб, кучли магнит майдонида, атом ҳолати \vec{L} ва \vec{S} моментларининг ташқи майдондаги алоҳида-алоҳида ҳолати билан аниқланади. 78- расмда ташқи майдон кучсиз (а) ва кучли (б) бўлган ҳолида моментларнинг квантланиши тасвирланган. Ташқи майдон кучли ҳолида \vec{L} ва \vec{S} моментлар ташқи майдон йўналиши атрофида ўзаро мустақил равишда айланадилар ва шу ташқи майдон йўналишига алоҳида-алоҳида ҳолда квант проекциялари m_L ва m_S ни беради. Демак, кучли майдон таъсирида тўла момент ўз маъносини йўқотиши сабабли атомнинг ҳолати L ва m_L , S ва m_S квант сонлари билан характерланади.

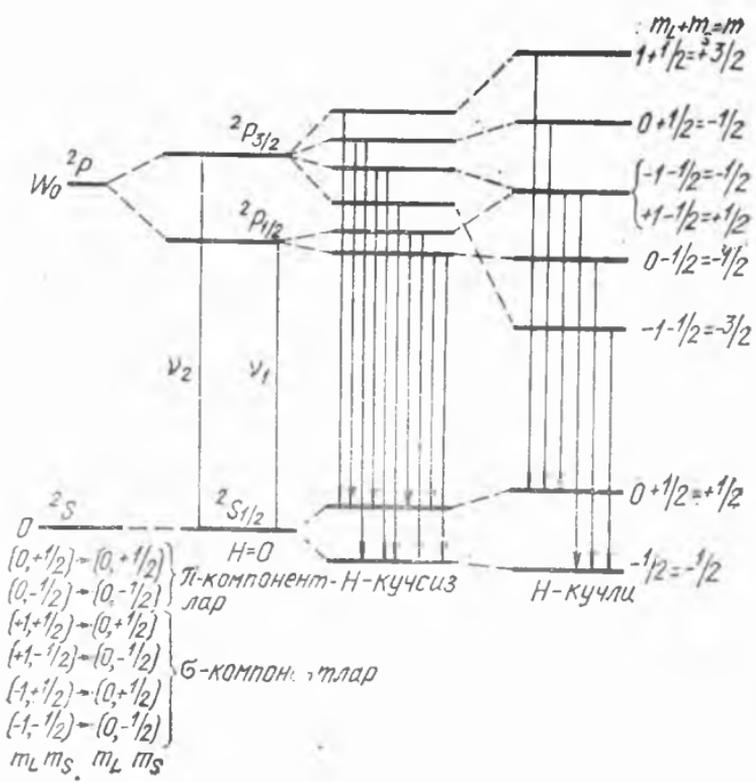
Сатҳларнинг ажралиши. Атомнинг орбитал ва спин магнит моментлари ўзаро мустақил равишда ташқи майдон билан таъсирлашиши туфайли атомнинг ташқи кучли магнит майдон билан ўзаро таъсирлашув энергияси орбитал ва спин магнит моментларининг майдон билан ўзаро таъсир энергияларининг йиғиндисидан иборат, яъни (8.6) га тенг бўлади:

$$\Delta E = (m_L + 2m_S) \mu_B H = N \mu_B H. \quad (8.16)$$

Бу ерда N — бутун сон, чунки m_L ва $2m_S$ ҳар доим бутун қийматларга тенг. Демак, кучли магнит майдонда атом термлари бир-биридан нормал силжиш $\mu_B \cdot H$ га қаррали оралиқларга силжиган термларга ажралади.

Кучли магнит майдонда термларнинг ажрალიшига мисол тариқасида натрий атомининг юқорида кўрилган S ва P сатҳларининг ажрალიшини кўраимиз. Бу сатҳларнинг кучсиз майдондаги схемасини 77- расмда кўрган эдик. Ажралган термлар компоненталарининг квант характеристикалари $m_J = \pm 1/2$ ($3^2S_{1/2}$ ва $3^2P_{1/2}$ учун) ва $m_J = \left(\pm \frac{3}{2}\right), (\pm 1/2)$ ($3^2P_{3/2}$ учун) га тенг эди. Бу олти сатҳ кучли магнит майдонда олти янги сатҳларга ўтади. Улар бир-бирига магнит майдон кучланганлигининг аста-секин ўзгариши билан ўтади. Шунинг учун, янги ҳосил бўлган олти сатҳларнинг ҳар бири аномал ажрალიш сатҳларининг қайси бирдан келиб чиқиши ҳақидаги савол туғилиши мумкин. 79- расмда шу нарса тасвирланган. Албатта, орбитал ва спин моментлари магнит майдон йўналишига параллел ёки антипараллел ҳолатлар тўғридан-тўғри ўтади. Масалан, $2P_{3/2}$ ($m_J = \pm \frac{3}{2}$) № 1 ва № 6 термлар. Орбитал momenti ташқи майдонга параллел, спин momenti антипараллел $2P_{1/2}$ ($m_J = +\frac{1}{2}$) ҳолат ҳам тўғридан-тўғри № 4 га ўтади. Янги термларни даставвалги термлардан узлуксиз ҳосил бўлишини эътиборга олсак, 79- расмдаги тасвирга келамиз. Термларнинг қайта тузилишининг 79- расмдаги тасвири тўла момент ҳақидаги маълумот йўқолиши билан эквивалентдир.

Ҳақиқатан ҳам, агар орбитал ва спин моментлари ўзаро эркин катталиклар бўлса, $2P_{3/2}$ ва $2P_{1/2}$ сатҳларни бир-биридан ажратиш мумкин эмас, чунки энди уларнинг иккаласи ҳам $L = 1$ ва унга нисбатан ихтиёрий йўналган спинга эга бўлган сатҳлар каби бир хил характерланади. Бу сатҳлар ташқи майдон йўналишига нисбатан L нинг учта проекцияси ($m_L = 1, 0, -1$) билан характерланувчи

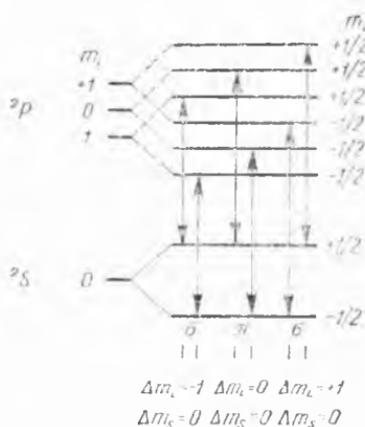


79- расм. Аномал ажралиш сатҳларнинг нормал ажралиш сатҳларига ўтиши.

сатҳларни спиннинг икки йўналишига мос яна иккига ажралишидан ҳосил бўлади (80- расм).

Спектр чизиқларининг ажралиши. Дипол нурланиш учун уришли танлаш қоидалари $\Delta m_L = 0, \pm 1, \Delta m_S = 0$ тақиқланмаган ўтишларни кўрамиз. Бу ўтишлар 79—80- расмларда кўрсатилган. Ҳаммаси бўлиб олти та чизиқ ҳосил бўлади. Ташқи майдонга nisbatan спин йўналишининг ҳисобига ҳар қандай L учун сатҳлар ажралиши, яъни P ва S сатҳларнинг ажралиши бирдай ва шунинг учун бу олти та чизиқ иккита-иккитадан учта триплетга бирикади. Улар узро, частота бўйича (8.5) билан аниқланувчи силжиган бўлади:

$$\nu = \nu_0 + \mu_B \frac{H}{h} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$



80-расм. Зееманнинг нормал триплет чизиқларини $\pm \frac{1}{2}$ спин-га мос дублет таркиби.

Шундай қилиб, кучли магнит майдонда спектр чизиқлари учтага ажралади. Улар бир-биридан нормал силжишга тенг масофага ажралган бўлади.

Биз юқорида спин-орбитал ўзаро таъсирни бутунлай ҳисобга олмадик, аслида эса маълумки, спин-орбитал ўзаро таъсир ҳар доим нолдан фарқли бўлиб қолади. Агар кичик спин-орбитал ўзаро таъсирни ҳам ҳисобга олганимизда эди қўшимча мультиплет ажралишига келар эдик ва у ўз навбатида Пашен — Бак эффектда спектр чизиқларининг нозик структурасини вужудга келтирар эди.

57- §. Штарк эффекти

Магнит майдон сингари ташқи электр майдон ҳам атом спектр чизиқларига таъсир кўрсатади. Электр майдон таъсири остида атом зарядлари маълум даражада силжиши мумкин. Зарядларнинг силжиш оқибатида атомнинг ҳар хил квант ҳолатлари энергияси ҳар хил ўзгаради ва натижада атомнинг энергия сатҳлари бузилиб спектрининг ўзгариши кузатилади. Ҳақиқатан ҳам, 1913 йилда Штарк водород атоми Бальмер чизиқларининг электр майдон таъсирида ажралишини кузатди. Шунинг учун электр майдонда атом спектр чизиқларининг ажралиш ҳодисасига *Штарк эффекти* дейилади.

Аксиал симметрияли ташқи бир жинсли электр майдонда ҳам, магнит майдонидаги сингари, атом ҳаракат миқдори моментининг проекцияси майдон йўналишида сақланувчи қийматлар қабул қилади. Момент проекцияси майдон йўналишида квантланган бўлади ва $+J, J-1, \dots, -J$ қийматларга тенг.

Электр майдон атомнинг ҳаракат миқдори моменти \vec{J} билан боғлиқ магнит моментига тўғридан-тўғри таъсир эта олмайди.

Юқорида айтилганидек, электр майдоннинг атомга таъсири атом зарядларининг силжиши оқибатида атомнинг электр қутбланган бўлиб қолишидан юз беради. Қутбланиш ташқи майдонга пропорционал бўлади, албатта. Агар атомнинг қутбланувчанлигини σ орқали белгиласак, ташқи электр майдонда атомнинг электр қутбланишидан вужудга келган электр дипол моменти электр майдон кучланганлиги $\vec{\mathcal{E}}$ га пропорционал бўлади:

$$\vec{P}_{эл} = \sigma \cdot \vec{\mathcal{E}}. \quad (8.17)$$

Атом электр дипол моментининг қиймати майдонга нисбатан атом ҳаракат миқдори моменти \vec{J} нинг йўналишига, яъни орбита ориентациясига боғлиқ. Маълумки, атом ҳар доим мумкин бўлган минимум энергияли ҳолатда бўлади. Ташқи электр майдон таъсирида минимал энергияли ҳолатга атом системасининг интилиши майдон йўналиши $\vec{\mathcal{E}}$ атрофида ҳаракат миқдори моменти \vec{J} нинг прецессиясини вужудга келтиради. \vec{J} нинг прецессияси давомида m_J сақланади. Атом электр дипол моментининг ташқи электр майдон билан ўзаро таъсирлашуви натижасида атомнинг энергияси

$$\Delta E = -(\vec{P}_{эл} \cdot \vec{\mathcal{E}}) = - \int_0^{\mathcal{E}} \sigma \mathcal{E} \cdot d\mathcal{E} = -\frac{\sigma \mathcal{E}^2}{2} \quad (8.18)$$

га тенг қўшимча энергияга ўзгаради. Атом электр дипол моментининг электр майдонга чизиқли пропорционалликдан атомнинг электр майдонда олган қўшимча энергиясини майдон кучланганлигининг квадратига пропорционаллик келиб чиқади. Бошқача айтганда, қўшимча энергиянинг қиймати майдон йўналишига боғлиқ эмас экан. Бу ҳол, умуман, мураккаб атомларда кузатилади.

Электр майдондаги атом сатҳларининг ажралишини атомнинг вектор моделига асосан тушунтириш мумкин.

Маълумки, мураккаб атомларда \vec{J} вектор \vec{L} ва \vec{S} ларнинг вектор йиғиндисидан иборат. Агар ташқи майдон таъсирида $\vec{L}\vec{S}$ -боғланиш узилмаса, \vec{J} векторининг ташқи электр майдони йўналишидаги проекцияси $m_J = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$ га тенг қийматлар қабул қилади. Электр майдоннинг таъсири атом ҳаракат миқдори моментининг \vec{J} майдонга нисбатан йўналишига боғлиқ бўлиши сабабли, ташқи электр майдон атом сатҳларининг ажрალიшига олиб келади. Лекин, сатҳларнинг магнит майдон таъсиридаги ажрალიшидан фарқли равишда, термларнинг электр ажрალიш компоненталари сони $2J + 1$ га тенг эмас, чунки (қўшимча энергиянинг электр майдон йўналишига боғлиқ бўлмаганидек) магнит моментларининг қарама-қарши йўналганлиги билан фарқланувчи икки ҳолатда атомнинг қўшимча электр энергияси тенг. Бошқача айтганда, фақат m_J ва $-m_J$ билан фарқланувчи ҳолатлар энергия сатҳлари устма-уст тушган битта сатҳдан иборат бўлади, яъни ташқи электр майдон атом сатҳларининг айниганлигини тўла йўқотмайди. Шу сабабдан, энергия сатҳлари тўла моментнинг бутун сон қийматли ҳолида $J + 1$ та, ярим бутун сон қийматида эса $J + 1/2$ та компоненталарга ажралади. Бу компоненталарнинг ҳар бири кучсиз магнит майдонда (яъни ташқи электр майдон устига магнит майдон ҳам қўйилса) яна иккитаданга ажралади, чунки магнит майдонда m_J ва $-m_J$ ҳолатлари эквивалент эмас.

Водород атомида Штарк эффекти. Водород атоми ҳолида ташқи электр майдондаги атом учун Шредингер тенгламасини аниқ ечиш мумкин. Агар ташқи электр майдонни z ўқига мос йўналишда олсак, электроннинг атомдаги ички потенциал энергияси $V = -e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ га қўшимча ташқи электр майдондаги потенциал энергияси $e\mathcal{E}_z$ га тенг бўлади. Одатда, атомнинг ички электр майдони ташқи майдонга нисбатан жуда катта бўлади. Масалан, водород атомида биринчи Бор орбитаси (a_1) учун Кулон майдонининг кучланганлиги

$$\mathcal{E}_0 = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_1^2} \approx 5 \cdot 10^{11} \text{ В/м.}$$

Шунинг учун атомнинг ташқи электр майдонда олган қўшимча потенциал энергияси

$$W = e\mathcal{E}_z$$

ни унинг майдон бўлмагандаги тўла энергияси

$$E_0 = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

га узатма тарзида қараш мумкин. Квант механикасида бу хил масалалар ғалаёнланиш назариясига асосланган метод билан ечилади. Ғалаёнланиш назарияси квант механикасига оид махсус дарсликларда бериледи.

Ташқи электр майдондаги водород атомининг Шредингер тенгламасини ғалаёнланиш назарияси бўйича ечиш ғалаёнланмаган ҳолатнинг тўла энергиясига иккинчи тартибли яқинлашиш учун иккинчи яқинлашишдаги тузатманинг ҳам ўз ичига олган қуйидаги ифодани беради:

$$E = E_0 + E^{(1)} + E^{(2)} = -\frac{R\hbar}{n^2} + 3e\mathcal{E}a_1(n_1 - n_2)\frac{n}{2} - a_1^3\mathcal{E}^3 [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m_l^2 + 19] \left(\frac{n}{2}\right)^4. \quad (8.19)$$

Бу ерда n — бош квант сони; $n = 1 + |m_l| + n_1 + n_2$, n_1 ва n_2 бутун мусбат сонлар, m_l — орбитал магнит квант сони. E_0 — атомнинг $\mathcal{E} = 0$ ҳолдаги тўла энергияси, $E^{(1)}$ ва $E^{(2)}$ — ғалаёнланмаган ҳолатнинг тўла энергияси E_0 га биринчи ва иккинчи тартибли яқинлашиш тузатмаси. Биринчи яқинлашиш электр майдон кучланганлигига \mathcal{E} нисбатан биринчи тартибли Штарк эффектига олиб келади: $E = E_0 - E^{(1)}$, иккинчи яқинлашиш эса \mathcal{E}^2 нисбатан иккинчи тартибли Штарк эффектини беради. \mathcal{E} ва \mathcal{E}^2 олдидаги доимий коэффициентларни ҳисоблаб,

$$\begin{aligned} \frac{3}{2}ea_1 &= \frac{3\hbar^2}{8\pi^2 m_e e} = 1,28 \cdot 10^{-28} \frac{\text{Эрг}}{(\text{В/см})} = 6,42 \cdot 10^{-5} \frac{\text{см}^{-1}}{(\text{В/см})}; \\ \frac{a_1^3}{16} &= \frac{-\hbar^3}{16(2\pi e)^6 m_e^3} = -1,04 \cdot 10^{-31} \frac{\text{Эрг}}{(\text{В/см})} \\ &= -5,22 \cdot 10^{-16} \frac{\text{см}^{-1}}{(\text{В/см})}. \end{aligned}$$

Бунда биринчиси иккинчисидан тахминан 10^{11} марта катта эканлигини аниқлаймиз. Демак, унча кучли бўлмаган электр майдонларда чизиқли Штарк эффекти кузатилади.

Водород атоми термларининг ташқи электр майдон таъсирида ажралишини қараб чиқайлик. Бош квант сони ва n_1, n_2 мусбат бутун сонлар ўртасидаги юқоридаги муносабатдан $0 \leq n_1 \leq n-1$, $0 \leq n_2 \leq n-1$ ва $|m_l| \leq n-1$ келиб чиқади. У ҳолда, чизиқли Штарк эффектита, водород атомининг биринчи тўрт термининг қуйидаги IV жадвалда келтирилган ажралиш тасвирига келамиз. Жадвалда

IV жадвал

Электр майдонда водород атоми термларининг ажралиши

n	m_l	n_1	n_2	$C(n_1-n_2)n$	n	$ m_l $	n_1	n_2	$C(n_1-n_2)n$
1	0	0	0	0	4	3	0	0	0
2	1	0	0	0	4	2	1	0	4C
2	0	1	0	2C	4	2	0	1	-4C
2	0	0	1	-2C	4	1	2	0	8C
3	2	0	0	0	4	1	0	2	-8C
3	1	1	0	3C	4	1	1	1	0
3	1	0	1	-3C	4	0	3	0	12C
3	0	2	0	6C	4	0	0	3	-12C
3	0	0	2	-6C	4	0	2	1	4C
3	0	1	1	0	4	0	1	2	-4C

$$c = 3 h \mathcal{E} / (8\pi^2 m_e e) = E^{(1)} / [h(n_1 - n_2)n]$$

га тенг.

Шундай қилиб, қуйидаги натижаларга келамиз.

1) бош квант сонининг ошиши билан ажралган компонентлар сони жуда тез ўсади. $n = 1$ терм бутунлай ажралмайди; $n = 2$ терм учтага; $n = 3$ — олтигага; $n = 4$ эса ўнтага ажралади. Аммо охириги икки ҳолда баъзи компоненталар энергияси тенг ва тегишли сатҳлар ажралмаган. $n = 3$ да биринчи ва охириги компоненталар энергияси нолга тенг ва уларнинг сатҳлари $\mathcal{E} = 0$ даги ўрнидан силжимаган. $n = 4$ да эса биринчи ва бешинчи, иккинчи ва тўққизинчи, учинчи ва ўнинчи компоненталар энергияси ўзаро тенг. Шундай қилиб, берилган n да термларнинг ажралиш компоненталари сони $(2n - 1)$ та бўлади;

2) n термининг $2n - 1$ та компонентаси билан n' термининг $2n' - 1$ та компонентаси ўртасидаги ўтишларнинг максимал сони $(2n - 2) \cdot (2n' - 1)$ тага тенг чизиқни бериши керак. $(2n - 1)(2n' - 1)$ ўтишларнинг баъзилари $\Delta |m| = 0, \pm 1$ танлаш қоидаси билан тақиқланган бўлиши мумкин,

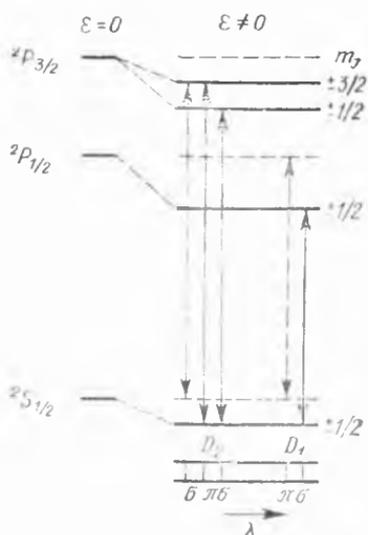
3) чизиқли Штарк эффекти учун келтириб чиқарилган ифодадан кўрамизки, компоненталарнинг ўзаро силжиш катталиги магнит квант сони m_l га бевосита боғлиқ бўлмасдан $(n_1 - n_2)$ айирмага боғлиқдир. Силжиш катталигининг қиймати $3 \cdot ea_1 \mathcal{E} (n_1 - n_2) n/2 = 3 ea_1 \mathcal{E} (n - 1)n/2 n^2$ пропорционал, чунки $(n_1 - n_2)$ катталик $(n - 1)$ дан $(n + 1)$ гача ўзгарадиган қийматлар қабул қилади. Демак, водород атомида, чизиқли Штарк эффектининг юқори термлардаги сатҳларнинг бир-бирларини қоплаши кузатилиши керак.

Ташқи электр майдон кучланганлигининг 10^6 В/см қийматларидан бошлаб майдон кучланганлигига квадратик Штарк эффектив сезиларли бўлади. Чизиқли ҳаддан фарқли равишда, $E^{(2)}$ квадратик ҳад термларнинг асимметрик ажралишига олиб келади. Компоненталарнинг ўзаро силжиши эса n^6 га пропорционал. Шу сабабдан, ҳар бир чизиқнинг юқори терми пасткисига қараганда кўпроқ силжийди. Натижада спектр чизиқлари частотасининг ортиши ва спектрининг эса қизил томонга силжиши кузатилади.

Мураккаб атомларда Штарк эффекти. Кучсиз ташқи электр майдонда фақат водород атоми учун характерли бўлган чизиқли Штарк эффекти орбитал квант сонига (l) нисбатан айнишга эга бўлмаган сатҳларда (водородсимон ва мураккаб атомларда) йўқолади. Шунинг учун водородсимон ва бошқа мураккаб атомларда термларни кучсиз ташқи электр майдон таъсирида майдон кучланганлигининг квадратига (\mathcal{E}^2) пропорционал ажралиши кузатилади. Бу ҳол юқоридаги мулоҳазаларга асосан (8.18) да ифодаланган.

Кучсиз электр майдонлардан кучли майдонларга ўтишда майдон кучланганлигига квадратик Штарк эффекти аста-секин чизиқли эффектга ўтади.

Мисол тариқасида ишқорий металлларнинг D - чизиғи учун Штарк эффектини кўрамиз. D - чизиқ термлари ${}^2P_{3/2}$, ${}^2P_{1/2}$ ва ${}^2S_{1/2}$ ташқи кучсиз электр майдонда, тўла момент-



81-расм. Ишқорий металллар D чизиги учун Штарк эффекти

нинг ярим бутун сон қийматига мос $J + \frac{1}{2}$ та компоненталарга ажралади, яъни ${}^2P_{3/2}$ терм $J + 1/2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} = 2$ тага ажралади, ${}^2P_{1/2}$ ва ${}^2S_{1/2}$ эса $J + 1/2 = 1$ ажралмайди. Бундан ташқари (8.18) га мос ҳолда термларнинг ҳаммаси қар хил қийматга, энергияси кам томонга силжийди. Бу ҳол, 81-расмда тасвирланган. Шундай қилиб, 2P термлар учта термга ажралади (${}^2P_{3/2}$ — иккитага ва ${}^2P_{1/2}$ нинг ўзи). 2P нинг бу учта компоненталаридан ${}^2S_{1/2}$ термга ўтишлар учта чизиқни беради:

$${}^2P_{3/2} \rightarrow {}^2S_{1/2}$$

$$|m_J| = \frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2}; \quad {}^2P_{3/2} \rightarrow {}^2S_{1/2};$$

$$|m_J| = 1/2 \rightarrow 1/2; \quad {}^2P_{1/2} \rightarrow S_{1/2}; \quad m_J = 1/2 \rightarrow 1/2.$$

Кучли электр майдонга ўтишда, термларнинг электр ажралоши шу термнинг $\vec{L} \cdot \vec{S}$ ўзаро таъсир остида ажралоши билан тенглашади ва ташқи майдон кучланганлигини ошишида \vec{L} ва \vec{S} векторнинг ўзаро таъсирини кичик деб атом энергиясига тузатма сифатида қараш мумкин. Натижада, $\vec{L} \cdot \vec{S} =$ боғланиш узилади ва шу сабабдан, \vec{L} векторни кучли ташқи электр майдонда мустақил квантланиши юз беради. Берилган \vec{L} билан характерланувчи терм $2L + 1$ компоненталарга ажралади, лекин $l + 1$ та компонентагина қар хил энергияга эга бўлади.

IX БОБ

МОЛЕКУЛАЛАР ТУЗИЛИШИ

Ўтган бобларда атом тузилишини қараб чиқдик. Биз кўрдикки, атом спектрал қонуниятлари атом электрон қобиғи тузилиши хусусиятларини ва оптикавий электрон хоссаларини тўла акс эттиради. Энди химиявий қонуниятларни худди шу электрон қобиғи ва айрим электрон хоссалари билан қандай боғланганлигини ўрганамиз. Маълумки, элементларнинг химиявий хоссалари ташқи қобиқ электронлари билан боғлиқ. Шунинг учун оптикавий спектрлар асосида ётган қонуниятлар элементларнинг даврий қайтариловчи химиявий хоссалари назариясининг яратилишига ҳам асос бўлиши керак. (Ички қобиқ электронлари, атомнинг оптикавий хоссалари сингари, химиявий хоссаларига ҳам таъсир этмайди.)

Лекин якка атомнинг химиявий хоссаларини ўрганиш маъносиздир, албатта. Атомнинг химиявий хоссалари фақат шу атом билан ўзаро химиявий таъсирлашувчи бир ёки бир неча бошқа атомнинг ҳозир бўлишидагина намоён бўлади. Бошқача айтганда, атомнинг химиявий хоссаларининг намоён бўлиши ва демак, шу хоссаларнинг ўзи ҳам, биргина атомнинг функцияси бўлмасдан, балки у ёки бу молекулани ҳосил қилувчи бир неча атомлар тўплами функциясидир. Шунинг учун атомларнинг химиявий хоссаларини ва уларни молекулага бириктирувчи химиявий кучларни ўрганиш уларнинг спектрал қонуниятларидан фарқли равишда атом структурасига эмас, балки молекула тузилишига ва унинг физикавий ва химиявий хоссаларини ўрганишга асосланади. Биз молекула тузилишини ўрганишни атомларнинг шу молекулага бириктирувчи кучлар билан танишишдан бошлаймиз.

58-§. Химиявий боғланиш кучлари

Молекула деганимизда турғун тузилишга эга атомлар тўпламини тушунамиз. Молекулада ҳар бир атом турғун ўринга эга бўлади. Молекуладаги ҳар қандай атомнинг ўз ўрнидан ҳар қандай силжиши молекуланинг потенциал энергиясининг ортишига олиб келади. Молекуланинг турғун тузилишга эга бўлиши атомлараро вужудга келадиган химиявий боғланиш кучлари таъсири остида амалга оширилади. Умуман, атомларнинг боғланган системага бириктириши қуйидаги кучлар таъсири остида юз беради.

1. Ван-дер-Ваальс кучлари. Ван-дер-Ваальс кучлари бир-биридан узоқ масофада жойлашган молекулалар атомлари ўртасида уларнинг электрон структураларини ўзаро қопланиши асосида вужудга келади. Бу кучлар атомларни молекулага бириктира олмайди ва шунинг учун улар соф ҳолда молекула тузилишида қатнашмайди. Ван-дер-Ваальс кучлари асосан суюқлик молекулаларини бир-бири билан боғлаб туришда муҳим роль ўйнайди. Бу кучлар қаттиқ жисм тузилишида ҳам актив иштирок этади. Ван-дер-Ваальс кучлари билан батафсил танишишни келаси бобга қолдирамиз.

2. Ионли (ёки гетерополяр) боғланиш кучлари. Менделеев даврий системасида инерт газларга энг яқин турган атомларнинг шу инерт газ атомлари электрон қобиғининг тузилишига ўхшаш электрон конфигурацияга эга бўлишга мойиллиги уларнинг ион боғланишини вужудга келтиради. Масалан, ишқорий металл атомларида битта электрон тўлдирилган қобиқдан ташқарида ҳаракатланади ва у ядро билан кучсиз боғланган бўлади. Аксинча, галогенларда эса электрон қобиқни инерт газ атомининг турғун электрон қобиғигача тўлиши учун битта электрон етишмайди. Бу хил атомлар ўртасида химиявий боғланиш бир атомнинг битта ёки бир неча кучсиз боғланган электронларини иккинчисига ўтишида биринчи атомнинг мусбат, иккинчисини манфий зарядланиши натижасида улар ўртасида ўзаро электростатик тортишиш кучининг вужудга келиши билан амалга оширилади. Масалан, NaCl молекуласида атомларнинг боғланиши Na^+ иони билан Cl^- иони ўртасида электростатик тортишиш кучи асосида вужудга келади.

Ион кучлари ҳам атомларни яқка ҳолдаги молекулага

бириктира олмайди. Умуман, қатъий айтганда, молекула деб атомларнинг тажриба вақтида якка ҳолдаги зарра сифатида намоён бўлувчи электр нейтрал тўпламини кўзда тутамиз. Масалан, водород газининг зарралари иккита водороддан ташкил қилган водород молекуласидан иборатдир. Иккинчи томондан, ош тузи кристалли (Na Cl) натрий ва хлор ионларининг тўплами бўлиб, бу ионлар туз структурасидан ташқарида битта Na^+ ва битта Cl^- дан ташкил этган дискрет молекулага бирлашмайди. Лекин молекуланинг химиявий маъноси расмий ўз кучини сақлайди, чунки ош тузи кристаллининг битта Cl^- иондан ва битта Na^+ иондан тузилган қисми ҳам бутун кристалл билан бир хил хоссага эга. Бундан буён Na Cl молекуласини шу маънода тушунамиз ва ион боғланиш кучларига ҳам келаси бобда қайтамиз.

3. Ковалент (ёки гомеополяр) боғланиш кучлари. Молекулага бириккан икки атом учун бир ёки бир неча электронларнинг умумлашиши орқали шу икки атомнинг ковалент боғланиши вужудга келади. Умумлашган электронлар шу икки атом ўртасида оралиқ соҳада ҳаракат қилади. Оралиқ соҳадан ташқарида эса кам вақт бўлади. Водород атомининг молекуласи соф ковалент боғланишга мисол бўла олади.

Ковалент боғланишни классик нуқтаи назардан тушунтириб бўлмайди. Айниқса, атомларнинг аниқ сони билан молекулага бирикиши, яъни атомлараро боғланиш кучининг тўйиниш характериға эга бўлиши классик физика қонунларига хос ўзаро таъсир табиатиға мутлақо зиддир. Масалан, нима сабабдан иккита водород атомигина ягона молекулага бирикади-ю, учтаси эса бирикмайди. Водород молекуласини вужудга келтирувчи кучнинг тўйиниши нима сабабдан юз беради? Бу саволға фақат квант механикаси жавоб бера олади. Чунки, ковалент боғланишни соф квант характерға эга алмашинув кучлари вужудга келтиради. Жумладан, ковалент боғланиш табиатини тушунтириш квант механикасининг ажойиб ютуқларига киради.

Бу параграфни яқунлашдан аввал шуни айтиш керакки, атомлардан молекула, молекулалардан жисм ҳосил бўлишда, умуман, сифат ўзгариши юз беради. Биз молекуладаги атом деганимизда атом образини тушунамиз холос. Масалан, водород атоми битта протондан иборат

ядродан ва $1s$ қобикдаги битта электрондан иборат. Иккита водород атомининг бир-бирига маълум масофага яқинлашишида эса электронларнинг иккаласи ҳам икки протоннинг умумий таъсирига тушади, яъни иккала протон ўзаро электрон эл машина бошлайди. Молекулада электронларнинг ҳаракат соҳаси шу сабабдан атом ҳолидагига қараганда, мутлақо ўзгариб кетади. Водород молекуласида электронларнинг янгидан ҳосил бўлган умумий электрон қобиғи вужудга келади. Шундай қилиб, молекулада иккита водород атоми эмас, балки иккита атомнинг ташкилий қисмигина (икки протон ва икки электрон) қатнашади. Худди шундай, $NaCl$ молекуласида ҳам $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ электрон конфигурацияга эга натрий атоми ва $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ электрон конфигурацияга эга хлор атоми мавжуд бўлмасдан, балки электрон конфигурациялари мос равишда $1s^2 2s^2 2p^6$ ва $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ бўлган Na^+ ва Cl^- ионлари қатнашган. Шундай қилиб, молекулада эркин элементларга хос атом хусусиятлари сақланмайди.

59-§. Электронларнинг умумлаштирилиши

Электрони умумлаштирилган энг содда молекуляр системага водород молекуласининг H_2^+ иони мисол бўлади. Умумий тарзда, мазкур системани 82-расмдагидек тасаввур қилиш мумкин. Протон атрофидаги электр майдон электрон учун потенциал ўра вазифасини ўтайди. Бир-бирига R масофагача яқинлаштирилган иккита протон эса потенциал девор билан бир-бирдан ажратилган иккита потенциал ўрани вужудга келтиради. Квант механикасининг туннель эффектига биноан энди электрон потенциал девор орқали потенциал ўраларнинг (протонларнинг) бирдан-иккинчисига ўтиши мумкин. Албатта, электроннинг баланд потенциал девор орқали протонларнинг бирдан-иккинчисига ўтиш эҳтимоли, яъни умумлаштирилиши протонлар ўртасидаги масофа R га боғлиқ. Умуман, электроннинг бу каби умумлаштирилиши фақат тўлқин функцияларининг соҳаси бир-бирини етарлича қоплаган атомлар учун мумкин.

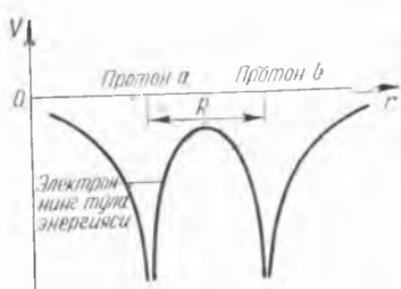
Икки протонга баравар қарашли электроннинг ҳаракати (ёки ҳаракат соҳаси) энди бир протонга қарашли ҳолидагига қараганда кам чекланган ва шунинг учун ноа-

ниқликлар муносабатига кўра унинг импульси ва демак, кинетик энергияси камайган бўлади. Натижада, электроннинг H_2^+ молекуляр ионда эга бўлган тўла энергияси унинг $H + H^+$ системадаги тўла энергиясидан кичик бўлади. Протон-протоннинг H_2^+ даги электростатик итарилиши ҳам кичик бўлганлиги сабабли H_2^+ барқарор бўлиши мумкин.

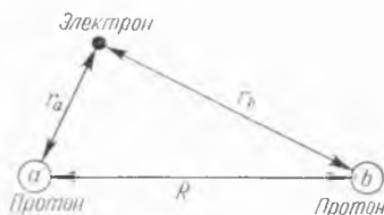
Атом орбиталарининг чиқиқли комбинацияси (АОЧК) методи. Одатда химияда асосий квант сонлари n , l , m_l билан характерланувчи тўлқин функция Ψ_{n, l, m_l} га атом орбитали (АО) дейилади. АОЧК методига биноан молекула тўлқин функцияси, қониқарли равишда, соф атом функцияларининг чиқиқли комбинацияси орқали тақрибан тасвирлаш мумкин.

H_2^+ системанинг геометрик тасвири 83-расмдаги кўринишга эга деяйлик. Протонлар орасидаги R масофа водород атомининг биринчи Бор орбитаси a_1 дан анча катта бўлсин. Айни ҳолда агар $r_b \gg r_a$ га бўлса, яъни электрон a протонга яқин соҳада ҳаракатланса, тўлқин функцияси ψ_a орқали белгиланувчи ва $1s$ ҳолатдаги водород атоми ҳосил бўлади. Худди шунингдек, агар $r_a \gg r_b$, яъни электрон b протонга қарашли ҳолида ψ_b тўлқин функция тавсифловчи водород атомга келади.

Агар $R = 0$ бўлса, яъни a ва b протонлар қўшилиб гелий атомининг ядросини ҳосил қилса, улар атрофида биргина электрон мавжудлигидан система гелий атомнинг He^+ бир каррали ионига айланади.



82-расм. Бир-биридан R масофада жойлашган иккита протон электр майдонидаги электроннинг потенциал энергияси. Чап томондаги потенциал ўрада водород атомининг асосий ҳолати учун электроннинг тўла энергияси сатҳи кўрсатилган.



83-расм. Иккита протондан ва электрондан иборат система.

Гелий атомининг He^+ иони учун тўлқин функция эса системанинг $1s$ асосий ҳолатида ψ_a ва ψ_b функцияларнинг

$$\Psi_S = N_S (\psi_a + \psi_b) \quad (9.1)$$

каби симметрик комбинацияси ва $2p$ уйғотилган ҳолатда эса

$$\Psi_A = N_A (\psi_a - \psi_b) \quad (9.2)$$

каби антисимметрик комбинацияси тарзида ифодаланиши мумкин. ψ_a ва ψ_b a ва b нуқталарда жойлашган водород атомининг $1s$ ҳолат функцияси бўлиб, алоҳида-алоҳида нормаланган.

Айни ҳолда (9.1) ва (9.2) функциялар водороднинг молекуляр иони учун ўзаро боғлиқ бўлмаган икки хил чизиқли комбинацияга мос орбитали ҳамдир. Бу формулаларидаги N_S ва N_A коэффициентлар нормаловчи доимийлардир, яъни

$$\int |\Psi_S|^2 dV = 1, \quad (9.3 S) \quad \int |\Psi_A|^2 dV = 1. \quad (9.3 A)$$

Агар ψ_a ва ψ_b функцияларнинг нормаланганлигини эсласак, N_S ва N_A нормалаш доимийси учун

$$N_S^2 = \frac{1}{2(1+D)}, \quad (9.4 S), \quad N_A^2 = \frac{1}{2(1-D)} \quad (9.4 A)$$

ифодалар ҳосил бўлади. Бу ерда D — қоплаш интегрални дейилади ва

$$D = \int \psi_a \psi_b dV \quad (9.5)$$

га тенг. ψ_a ва ψ_b ҳар хил атомларга тааллуқли. Агар улар бир атомга қарашли бўлганида эди, ортонормалланган функциялар системасига қарашли бўлиб (9.5) нолга тенг бўлади. ψ_a ва ψ_b функцияларнинг фазонинг атом жойлашган a ва b нуқталари атрофида нолдан фарқли эканлигини ва аниқ интегралнинг таърифини эсласак, (9.5) интегралнинг фақат ψ_a ва ψ_b функцияларнинг умумий нолдан фарқли соҳаси билан аниқланишини кўрамиз. Қисқаси, (9.5) интеграл ψ_a ва ψ_b тўлқин функциялар бир-бирининг соҳаларини қоплашининг ўлчови бўлиб хизмат қилади.

Водород молекуласининг H_2^+ иони учун тақрибий молекуляр орбиталлар: ψ_S ва ψ_A ни аниқлаганимиздан сўнг шу ҳолатларга тўғри келадиган электрон энергияси E_S ва E_A ни ҳисоблаш осон. Электроннинг протонлар билан ўзаро таъсир потенциал энергияси 83-расмга биноан

$$V_e = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \quad (9.6)$$

га тенг. У ҳолда, агар протонларнинг бир-бири билан ўзаро таъсирини ҳисобга олмасак, H_2^+ ионидаги электрон қуйидаги Шредингер тенгламасини ёзиш мумкин:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Psi_{S,A} + [E_{S,A} - V_e] \Psi_{S,A} = 0.$$

Тенгламанинг ечими, яъни тўлқин функцияни маълум деб ҳисобласак, тенгламадан электрон энергиясини ҳисоблаш осонлашади. Бунинг учун охириги тенгламани қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$E_{S,A} \Psi_{S,A} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Psi_{S,A} + V_e \Psi_{S,A}.$$

Ҳосил бўлган тенгликнинг икки томонини чап тарафдан Ψ^* қўшма функцияга кўпайтириб бутун фазо бўйича интеграллаймиз. Тўлқин функциянинг ((9.1) ёки (9.2)) нормаланганлиги сабабли $\int |\Psi_{S,A}|^2 dV = 1$ ва демак,

$$E_{S,A} = -\int \Psi_{S,A}^* \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \Psi_{S,A} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right) \Psi_{S,A} \right] dV. \quad (9.7)$$

(9.7) ифодани симметрик тўлқин функция (9.1) учун ҳисоблайлик. У ҳолда энергия

$$\begin{aligned} E_S &= -N_S^2 \int (\psi_a^* + \psi_b^*) \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} (\nabla^2 \psi_a + \nabla^2 \psi_b + \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_a} \psi_a + \frac{1}{r_b} \psi_b + \frac{1}{r_a} \psi_b + \frac{1}{r_b} \psi_a \right) \right] dV = \\ &= -N_S^2 \int (\psi_a^* + \psi_b^*) \left[-E_0^H \psi_a - E_0^H \psi_b + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_a} \psi_b + \frac{1}{r_b} \psi_a \right) \right] dV \quad (9.8) \end{aligned}$$

бўлади. Биз бу ҳисоблашларни бажаришда ψ_a ва ψ_b тўлқин функцияларнинг ҳар қайсисини водород атоми асосий ҳолатининг тўлқин функцияси эканлигини ҳисобга олдик. E_0^n орқали худди шу водород атоми асосий ҳолатининг энергиясини белгиладик, яъни

$$E_0^n \psi_{a, b} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi_{a, b} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{a, b}} \psi_{a, b}$$

(9.8) тенгламани қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$E_S = +N_S^2 E_0^n \int |\psi_a + \psi_b|^2 dV - N_S^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\int \frac{1}{r_b} |\psi_a|^2 dV + \int \frac{1}{r_a} |\psi_b|^2 dV + \int \frac{1}{r_B} \psi_a \psi_b^* dV + \int \frac{1}{r_a} \psi_a^* \psi_b dV \right]. \quad (9.9)$$

(9.1) ва (9.3 S) тенгламалардан (9.9) нинг биринчи ҳади яққаланган водород атомининг асосий ҳолати энергиясига тенглигини аниқлаймиз. (9.9) нинг ўрта қавс ичидаги биринчи икки ҳади Кулон интеграллари дейилади. Биринчи Кулон интеграллари a протонни ўраган электрон булутининг b протон майдонидаги потенциал энергиясини, иккинчиси эса b протонни ўраган электрон булутининг a протон майдонидаги потенциал энергиясини ифодалайди. Биз электрон булутини леганимизда $|\psi|^2$ ни кўзда тутдик, албатта.

(9.9) нинг охириги икки ҳади алмашинув интеграллари деб юритилади. Интеграл остида эҳтимоллик зичликлари $|\psi_a|^2$, $|\psi_b|^2$ ўрнига тўлқин функциялар ψ_a ва ψ_b нинг аралаш кўпайтмалари ўрин олган. Алмашинув интеграллари ифодаловчи энергияни классик тушунчалар асосида изоҳлаш мумкин эмас. Чунки алмашинув энергиясининг вужудга келиши соф квантомеханик ҳодисадир.

Мазкур масалада юқорида келтирилган интегралларнинг ҳаммасини ҳам осон ҳисоблаш мумкин. Бунинг учун, водород атомининг асосий ҳолатида ($n = 1, l = 0, m_l = 0$)

$$E_0^n = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} = -\hbar R_H = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2a_1},$$

$$\psi_{nlm_l} = \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a_1}} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_1^3}} \cdot e^{-\frac{r}{\Lambda}}$$

эканлигини ҳисобга олиб интеграллаш учун эллиптик координаталар ξ , η , φ ни ($\xi = (r_a + r_b)/R$, $\eta = (r_a - r_b)/R$)

қўллаш кифоя. У ҳолда

$$D = \left[1 + \frac{R}{a_1} + \left(\frac{R}{a_1} \right)^2 \cdot \frac{1}{3} \right] e^{-\frac{R}{a_1}},$$

$$\begin{aligned} N_S^2 C &= -N_S^2 \int \frac{2a_1}{r_b} |\psi_a|^2 dV = -N_S^2 \int \frac{2a_1}{r_a} |\psi_b|^2 dV = \\ &= -N_S^2 \left[-\frac{a_1}{R} + \left(\frac{a_1}{R} + 1 \right) \cdot e^{-\frac{2R}{a_1}} \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_S^2 A &= -N_S^2 \int \frac{2a_1}{r_b} \psi_a \psi_b^* dV = -N_S^2 \int \frac{2a_1}{r_a} \psi_a^* \psi_b dV = \\ &= -N_S^2 \left(1 + \frac{R}{a_1} \right) e^{-\frac{R}{a_1}}. \end{aligned}$$

Бу ерда a_1 — биринчи Бор радиуси C орқали эса Кулон интегралларини белгиладик. Кулон интеграллари ўзаро тенг, чунки a ва b протонлар ўрнини алмаштиришда ҳар бири ўзгаришсиз қолади. Худди шунингдек, алмашинув интеграллари ҳам ўзаро тенг. Демак, H_2^+ ионнинг электрон энергияси симметрик орбитал ҳоли учун

$$E_S = E_0^n [1 + N_S^2 (2C + 2A)] = E_0^n \left[1 + \frac{C + A}{1 + D} \right], \quad (9.10)$$

протонлар ўртасидаги масофа R нинг ҳар хил қийматларида $E_S R$ нинг функцияси сифатида ўзгаради. Масалан, $R \rightarrow \infty$ да $C \rightarrow 0$, $A \rightarrow 0$, $D \rightarrow 0$ электроннинг энергияси, E_S эса $E_S \rightarrow E_0^n$, яъни яккаланган водород атоми энергиясига интилар экан. Лекин АОЧК методи $R \rightarrow 0$ да нотўғри натижага олиб келади. (9.10) ни водород молекуласи H_2^+ ионининг электрони энергиясининг аниқ қиймати билан солиштирсак, $R = 2a_1$ ҳосил бўлади. Протонлар ўртасидаги масофанинг $R = 2a_1$ га тенг қийматида H_2^+ система мувозанат ҳолатда бўлади.

Юқориди ўтказилган ҳисоблашларни Ψ_A функция учун ҳам такрорласак, антисимметрик молекуляр орбитали ҳоли учун электрон энергиясининг

$$E_A = E_0^n \left(1 + \frac{C^2 - A}{1 - D} \right) \quad (9.11)$$

га тенг ифодасига келамиз. Водород молекуласи H_2^+ ионининг тўла энергиясини аниқлаш учун электроннинг иккита протон билан ўзаро таъсир потенциал энергиясига протонларнинг ўзаро таъсир потенциал энергиясини қўшимиз керак:

$$V_p = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (9.12)$$

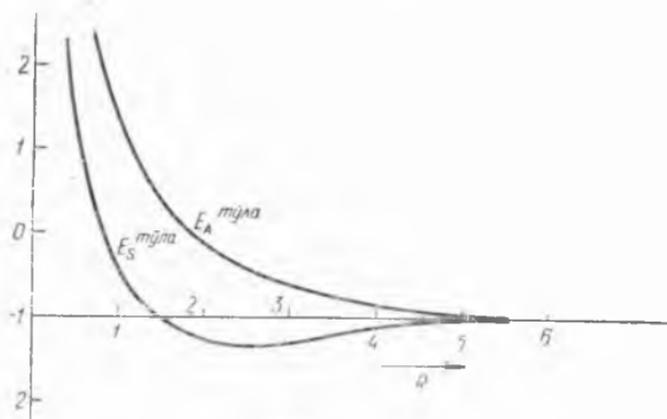
У ҳолда водород молекуласи H_2^+ ионининг тўла энергияси

$$E_{S, A}^{t\ddot{u}la} = E_0^n \left[1 + \frac{2a_1}{R} + \frac{C \pm A}{1 \pm D} \right] \quad (9.13)$$

бўлади. Бу ерда E_s га (9.13) даги охириги нисбатнинг қўш ишорадан мусбат ишораси, E_A га эса манфий ишораси мос келади. Тўла энергиянинг протонлар ўртасидаги масофанинг функцияси сифатидаги тасвири 84-расмда келтирилган. Расмдан кўринадики, тўла энергия симметрик ҳолат учун минимумга эга, айти вақтда антисимметрик ҳолат учун ҳеч қандай, минимум кузатилаётгани йўқ. Шундай қилиб, АОЧК методи ўзининг мавжуд камчиликларига қарамадан электроннинг умумлашиши билан боглиқ богланишнинг характерини аниқлашни сифат жиҳатдан таъминлаб бера олди.

60-§. Водород молекуласи. Алмашинув ўзаро таъсир

Водород молекуласи иккита электронга эга, яъни унинг H_2^+ ионининг ягона электронига яна битта электрон қўшилган бўлади. Шунинг учун энди электроннинг потенциал энергияси (9.6) формуладагидек икки ҳаддан иборат бўлмасдан қуйидаги беш ҳаддан: ҳар бир электроннинг «ўз»про-



84- расм. Водород иони H_2^+ нинг симметрик ва антисимметрик ҳолатлари учун тўла энергиянинг ядролар ўртасидаги масофа R га боғлиқлиги. Абсцисса ўқи бўйича биринчи Бор орбитаси бирлигида R қўйилган. Ордината ўқи бўйича водород атоми асосий ҳолатининг энергияси бирлигида $E_{S, A}^{\text{H}}$ энергия қўйилган.

тони билан, «бегона» протон билан ва электронларнинг ўзаро таъсиридан иборат, яъни

$$V_e = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r_{1a}} + \frac{1}{r_{2b}} + \frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{12}} \right]. \quad (9.14)$$

Водород молекуласининг тўла потенциал энергияси электронларнинг (9.14) потенциал энергияси ва протонларнинг ўзаро Кулон итарилиш (9.12) потенциал энергиясидан иборат бўлади.

Электронларнинг «ўз» протони билан боғланиши албатта уларнинг «бегона» протон билан боғланишидан кўра кучлироқ, шунинг учун (9.14) ифоданинг биринчи икки ҳади иккинчи икки ҳадга қараганда катта. (9.14) даги охирги ҳад характерловчи ва (9.12) потенциал энергиялар тартиб жиҳатдан электронларнинг «бегона» протонга тортишиш энергиясига тенг ва уларнинг ишоралари қарама-қарши бўлганлиги туфайли, бир-бирларини қисман қисқартирадилар. Шундай қилиб, икки водород атомининг бир-бирларига яқинлашишида ҳам электронларнинг ўз протонлари билан ўзаро таъсирлашуви асосий роль ўй-

найди. Шунинг учун қолган потенциал энергияларнинг ҳаммасини бу икки асосий потенциал энергияга тузатма сифатида қараш мумкин. Ушбу айтилганларни кўзда тутган ҳолда водород молекуласи учун тўла энергия операторини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\hat{E} = \hat{E}_1 + \hat{E}_2 + V. \quad (9.15)$$

Бу ерда биринчи ҳад биринчи атомнинг тўла энергиясини ифодалайди, яъни

$$\hat{E}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{1a}}, \quad (9.16a)$$

иккинчи ҳад эса иккинчи атомнинг тўла энергиясини ифодалайди, яъни

$$\hat{E}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{2b}}, \quad (9.16b)$$

учинчи ҳад эса ғалаёнланмаган ҳолат энергияси $\hat{E}_1 + \hat{E}_2$ га тузатма — ғалаёнланишни ифодалайди, яъни

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{R} \right]. \quad (9.16b)$$

Молекуланинг ғалаёнланмаган ҳолатининг тўлқин функцияси сифатида биринчи ва иккинчи водород атомининг асосий ҳолатининг тўлқин функциясини, яъни \hat{E}_1 ва \hat{E}_2 операторларнинг хусусий функциялари

$$\begin{aligned} \psi_a(1) &= \psi_{a100}(\vec{r}_1) \chi_1, \\ \psi_b(2) &= \psi_{b100}(\vec{r}_2) \chi_2 \end{aligned}$$

ни танлаш ўринли бўлади. Бу ерда χ -функция электроннинг спин ҳолатини тавсифлайди. У ҳолда эркин иккита водород атомидан иборат системанинг тўлқин функцияси $\psi_a(1)$ ва $\psi_b(2)$ нинг кўпайтмасига тенг. Демак, $\psi_a(1) \cdot \psi_b(2)$ кўпайтма ўтган параграфда биз кўрган атом орбиталларини ифодалайди. Водород молекуласининг тақрибий функциясини эса АОЧҚ га асосан ёзамиз. Паули принципига биноан эса икки айнан (мазкур ҳолда электрон) заррадан иборат системанинг тўлқин функцияси зарраларнинг ўрнини алмаштиришга нисбатан антисимметрик бўлиши керак, яъни

$$\Psi = N [\psi_a(1) \psi_b(2) - \psi_a(2) \psi_b(1)]. \quad (9.17)$$

Бу ерда $\psi_a(1)$ — a атомдаги биринчи электроннинг, $\psi_b(2)$ b атомдаги иккинчи электроннинг тўлқин функцияси, $\psi_a(2)$ ва $\psi_b(1)$ функциялар эса электрон алмашган a ва b атомларни тасвирлайди. N — нормалаш доимийси.

Умуман, электронларнинг ўрнини алмаштиришда, масалан, биринчи электронни иккинчининг ўрнига қўйишда, иккинчининг алмаштиришгача эгаллаган фазовий ва спин ҳолатига қўйишимиз керак. Аксинча, иккинчини биринчига алмаштиришда иккинчини биринчининг фазовий ва спин ҳолатига қўямиз. Электронларнинг спини эса ўзаро параллел ёки антипараллел бўлиши мумкин. Агар электронларнинг спини параллел бўлса, уларнинг ўрнини алмаштириш билан спин ҳолатлари ўзгармайди. Демак, спинларнинг параллел ҳолида электронларни алмаштириш билан уларнинг тўлқин функциясининг спин қисми χ ўзгармайди ва (9.17) формуланинг иккала ҳадида ҳам спин функцияси бир хил бўлади. Спин функциясини қавсдан ташқарига чиқариб нормаловчи кўпайтувчи билан бирлаштирсак, тўлқин функциянинг фазовий қисми учун (9.17) га ўхшаш ифодани ҳосил қиламиз, яъни:

$$\Psi_{\uparrow\uparrow} = \Psi_A = N_A [\psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) - \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1)]. \quad (9.17A)$$

Агар электронларнинг спини антипараллел бўлса, электронларнинг ўрнини алмаштирилишида тўлқин функциянинг спин қисми ишорасини ўзгартиради. У ҳолда (9.17) да биринчи ва иккинчи ҳаднинг спин функциялари қарама-қарши ишораси билан фарқ қилади. Икки электроннинг бу спин функциясининг абсолют қийматини қавсдан ташқарига чиқариб доимий кўпайтувчига қўшиб юборсак, тўлқин функциянинг фазовий қисми учун

$$|\Psi_{\uparrow\downarrow}| = \Psi_S = N_S [\psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) + \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1)] \quad (9.17S)$$

ифодага келамиз, (9.17S) формула икки водород атомидан иборат системанинг электронлар спини антипараллел, яъни тўла спин нолга тенг ҳоли учун фазовий симметрик функцияни ифодалайди.

Водород молекуласи учун биз аниқлаган (9.17A) ва (9.17S) тақрибий функциялар ёрдамида (9.7) да қўллаганимиздек энергияни ҳисоблайлик:

$$E_{S,A} = N_{S,A}^2 \int [\psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \pm \psi_a^*(\vec{r}_2) \psi_b^*(\vec{r}_1)] (\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + V) \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left[\psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1) \right] dV_1 dV_2 = \\ & = N_{S,A}^2 (I_1 + I_2 \pm I_3 \pm I_4). \end{aligned} \quad (9.18)$$

Бу ерда

$$I_1 = \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) (\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + V) \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) dV_1 dV_2,$$

$$I_2 = \int \psi_a^*(\vec{r}_2) \psi_b^*(\vec{r}_1) (\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + V) \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1) dV_1 dV_2,$$

$$I_3 = \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) (\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + V) \psi_b(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2) dV_1 dV_2,$$

$$I_4 = \int \psi_a^*(\vec{r}_2) \psi_b^*(\vec{r}_1) (\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + V) \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) dV_1 dV_2.$$

Мазкур интегралларни ҳисоблаш учун $\psi_a(\vec{r}_1)$ ва $\psi_b(\vec{r}_2)$ функцияларни \hat{E}_1 ва \hat{E}_2 операторларнинг хусусий функцияси эканлигидан, яъни

$$\hat{E}_1 \psi_a(\vec{r}_1) = E_1 \psi_a(\vec{r}_1), \quad \hat{E}_2 \psi_b(\vec{r}_2) = E_2 \psi_b(\vec{r}_2)$$

тенгламаларни қаноатлантиришидан ва шунинг учун $\psi_a(\vec{r}_1)$ ва $\psi_b(\vec{r}_2)$ нинг нормалланганидан фойдаланамиз. У ҳолда

$$\begin{aligned} I_1 &= (E_1 + E_2) \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_1) dV_1 \int \psi_b^*(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_2) dV_2 + \\ &+ \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) V \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 = E_1 + E_2 + C. \end{aligned}$$

С орқали охириги интегрални белгиладик. Ўтган параграфда айтилганидек, C катталиқ Кулон интеграллари дейлади ва у протонни иккинчи протон билан, электрон булутини иккинчи электрон булутини билан ва ҳар бир электрон булутининг «бегона» атом ядроси билан ўзаро таъсир энергияларининг йиғиндисига тенг, яъни:

$$C = \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) V \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) dV_1 dV_2, \quad (9.19)$$

бу ерда V — (9.16 в) орқали ифодаланган.

Иккинчи интегрални ҳисоблаш учун интеграллаш ўзгарувчисини алмаштирамиз. Агар иккинчи интегралда интеграллаш ўзгарувчилари x_1, y_1, z_1 ларни x_2, y_2, z_2 ларга ва аксинча алмаштирсак, юқорида ҳисобланган биринчи I_1 интегралга келамиз. Шунинг учун, у

$$I_2 = I_1 = E_1 + E_2 + C \quad (9.20)$$

га тенг. Учинчи D интегрални ҳисоблайлик:

$$I_3 = (E_1 + E_2) \int \psi_a^*(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1) dV_1 \int \psi_b^*(\vec{r}_2) \psi_a(\vec{r}_2) dV_2 + \\ + \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) V \psi_b(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 = (E_1 + E_2) D + A.$$

Бу ерда D орқали қоплаш интегралнинг

$$D = \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_1) dV \cdot \int \psi_b^*(\vec{r}_2) \psi_a(\vec{r}_2) dV_2, \quad (9.21)$$

A орқали эса алмашув интегралларининг

$$A = \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) V \psi_b(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 \quad (9.22)$$

ифодасини белгиладик.

Агар тўртинчи I_4 интегралда ҳам интеграллаш ўзгарувчиларини алмаштирсак, I_3 ни ҳосил қилиш мумкин. Шунинг учун, у

$$I_4 = I_3 = (E_1 + E_2) D + A \quad (9.23)$$

га тенг. (9.17 S) ва (9.17A) лардаги нормаловчи доимийларни аниқлаш учун симметрик ва антисимметрик фазовий тўлқин функцияларнинг нормаланганлигидан, яъни

$$\int \Psi_{S,A}^* \Psi_{S,A} dV_1 dV_2 = 1$$

ифодадан фойдаланамиз:

$$\int \Psi_{S,A}^* \Psi_{S,A} dV_1 dV_2 = N_{S,A}^2 \left\{ \int |\psi_a(\vec{r}_1)|^2 dV_1 \int |\psi_a(\vec{r}_2)|^2 dV_2 + \right. \\ \left. + \int |\psi_a(\vec{r}_2)|^2 dV_2 \int |\psi_b(\vec{r}_1)|^2 dV_1 \pm \int \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_1) dV_1 \times \right. \\ \left. \times \int \psi_b(\vec{r}_2) \psi_a(\vec{r}_2) dV_2 \pm \int \psi_a^*(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_2) dV_2 \int \psi_b(\vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_1) dV_1 \right\} = \\ = N_{S,A}^2 \{1 + 1 \pm D \pm D\} = 2N_{S,A}^2 \{1 \pm D\} = 1.$$

Демак, нормаловчи доимий илгаригидек

$$N_S^2 = \frac{1}{2(1+D)}, \quad N_A^2 = \frac{1}{2(1-D)} \quad (9.24)$$

га тенг.

Юқорида ҳисобланган интегралларнинг (9.20), (9.23) қийматларини ва нормаловчи доимийнинг (9.24) ифодасини (9.18) га келтириб қўйсак, водород молекуласининг фазовий тўлқин функцияси симметрик ва антисимметрик бўлган ҳоли учун тўла энергиясини аниқлаймиз:

$$E_{S,A} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1 \mp D} [2(E_1 + E_2 + C) \pm 2(E_1 + E_2) D \pm 2A] = \\ = E_1 + E_2 + \frac{C \pm A}{1 \mp D} = E_1 + E_2 + \Delta E_{S,A} \quad (9.25)$$

Агар (9.13) формуладаги C ва A катталиклар ўлчамсиз қиймат бўлса, (9.25) даги C ва A эса энергия ўлчамига эга. Бундан ташқари, (9.25) ифодада Кулон интегрални C га протонларнинг ўзаро таъсир потенциал энергиясини ҳам қўшиб юбордик, (9.13) да эса бу энергия соф ҳолда ажратилиб ёзилган эди. (9.25) да ҳам, (9.13) да ҳам қоплаш интегрални D ўлчамсиз қийматга тенг, чунки тўлқин функциянинг квадрати ҳажм (dV) ўлчамига тескари ўлчамга эга. Тўлқин функциянинг бундай ўлчамга эга бўлиши унинг нормаланиш шартига бўйсунилишнинг табиий натижасидир.

Ядролар орасининг ўртача масофаларида, яъни электроннинг Бор радиуси тартибдаги масофаларда атом тўлқин функцияларининг ўзаро қоплаган соҳаси катта ва шунинг учун электрон булутининг алмашинув зичлиги ҳам катта бўлади. Бундан ташқари, электрон булутини алмашинув соҳасининг баъзи қисмлари ядроларга жуда яқин келган ва натижада уларнинг ядролар билан ўзаро тортишуви алмашинув A интегралига катта манфий ҳисса қўшади. Айни вақтда, ядролар орасидаги масофа ҳам алмашинув зичликнинг айрим соҳаларни ўртасидаги масофага нисбатан катта. Шундай қилиб, ядролар орасининг ўртача ($R \sim a_1$) масофаларида A интеграл манфийдир. Иккинчи томондан, берилган R да биринчи электрон булутининг b ядрогача бўлган ўртача масофаси (r_{1b}) ҳам, иккинчи электрон булутининг a ядрогача масофаси (r_{2a}) ҳам алмашинув зичликнинг ядроларгача ўртача масофасидан катта. Ундан ташқари, электрон булутлари ўртасидаги ($r_{1,2}$) масофа ҳам нисбатан каттадир. Хуллас, Кулон интегрални C сон жиҳатдан A дан жуда кичик. Агар энди $D < 1$ эканлигини ҳам эътиборга оласак, $\Delta E_{S,A}$ ни деярлик A га боғлиқлигини, A эса манфий қийматга тенг эканлигини аниқлаймиз.

Шундай қилиб, $\Delta E_{S,A}$ да қатнашган интегралларни баҳолаш шуни кўрсатадики, электронлар спинининг параллел ҳолида $\Delta E_A > 0$, антипараллел ҳолида эса $\Delta E_S < 0$. Шунинг учун, электронларининг спини ўзаро параллел иккита водород атоми бир-бири билан итаришишади, антипараллел ҳолида эса тортишади.

Бу ҳодисани Паули принципига асосан осон тушунса бўлади. Водород молекуласида иккала электронни умумий

орбита ($n, l, m_l = 1, 0, 0$) да ҳаракат қилиши учун уларнинг спини антипараллел йўналган бўлиши керак. Электронлар спинининг фақат антипараллел йўналишидагина водород молекуласи-параводород ҳосил бўлиши мумкинлиги сабабли H_2 молекуласининг тўла спини нолга тенг ва шунинг учун водород молекуласининг магнит моменти ҳам нолга тенг. Демак, водород молекуласи диамагнетикларга киради. Бу назарий хулосалар ҳақиқатан ҳам экспериментда тасдиқланади.

85-расмда ядролар орасидаги масофанинг (R) функцияси сифатида водород молекуласининг энергияси тасвирланган. Расмда тасвирланган ΔE_1 ва ΔE_2 функциялар $\Delta E_{S,A}$ билан қуйидагича боғланган

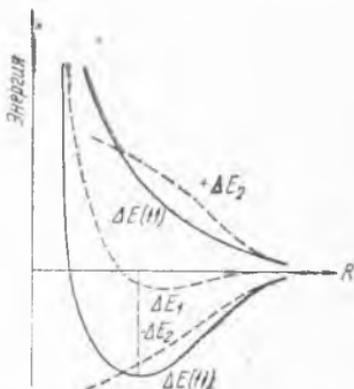
$$\begin{aligned} \Delta E &= \Delta E_{S,A} = \frac{1 \mp D}{1 \mp D} \cdot \frac{C \pm A}{1 \pm D} = \frac{(1 \mp D)C \pm A(1 \mp D)}{1 - D^2} = \\ &= \frac{C - AD}{1 - D^2} \mp \frac{CD - A}{1 - D^2} = \Delta E_1 \mp \Delta E_2. \end{aligned}$$

Бу ерда ΔE_1 ва ΔE_2 мусбат катталиқлар.

Расмдан ΔE ни R га боғлиқлик чизиғи, атом спинларининг ўзаро параллел ёки антипараллел ҳолида бир-биридан фарқ қилишини яққол кўрамиз. ΔE_1 чизиғи ўзгармайди.

Лекин спин йўналишларига қараб ΔE_2 кескин ўзгаради ва ΔE га муҳим ҳисса қўшади. Атомлар орасидаги масофанинг мувозанатли ҳолатга тўғри келган қийматини назарий баҳолаш мумкин. Ҳисоблаш йўли билан олинган қиймат ($\sim 1.6 \text{ \AA}$) экспериментал қиймат (1.4 \AA) билан мос келади.

Энди алмашинув ўзаро таъсирининг тўйинишини кўрайлик. Фараз қилайликки, водород молекуласига учинчи водород атоми яқинлаштирилсин. Маълумки, водород молекуласида



85- расм. Иккита водород атомидан иборат система энергияси янинг атомлар ўртасидаги масофага боғлиқлиги.

спини антипараллел иккита электрон бор. Демак, учинчи водород атоми электронининг спини молекуладаги электроннинг бирини спинига параллел, иккинчисиникига антипараллел бўлади. Молекула билан атомнинг яқинлашишида ўзаро алмашинув таъсир вужудга келиши учун улар ўзаро электрон алмашишлари керак. Лекин водород молекуласи ва водород атоми ўзаро антипараллел спинли электронлар билан алмашиша олмайди, чунки бу жараён натижасида водород молекуласида ўзаро параллел йўналган спинга эга иккита электрон вужудга келади. Биламизки, бундай ҳолат катта энергияга эга бўлади ва унга мос келувчи алмашинув энергия итарилиш ўзаро таъсирни туғдиради. Водород молекуласи ва водород атомининг спинлари ўзаро параллел электронлар билан алмашиши ҳам тақиқланади, чунки водород молекуласининг юқоридаги мисолида кўрдикки, бу хил алмашиш ўзаро итарилиш кучини вужудга келтиради. Шундай қилиб, водород молекуласи билан водород атоми ўртасида улар ўзаро яқинлашишганда итарилиш кучи вужудга келади ва шунинг учун, укта водород атомидан ташкил топган водород молекуласининг вужудга келиши мумкин эмас. Хуллас, ковалент боғланишда спини ўзаро қарама-қарши йўналган иккита электрон қатнашади.

61-§. Валентлик

Водород молекуласи мисолида кўрдикки, атомларни молекулага бириктириш бир атомнинг электронини (ёки умумий ҳолда электронларидан бирини) бошқа атомнинг антипараллел спинли элекрони билан алмашинишида юз берар экан. Бу хил ковалент боғланишда антипараллел спинли электронлар жуфти иштирок этади. Агар, атомнинг ҳамма электронлари антипараллел спинли жуфтларга бирлашган бўлса, ҳеч бир электрон бошқа атом элекрони билан алмашинишда қатнаша олмайди ва демак, бошқа атом билан бирикиб молекула ҳосил қила олмайди. Бунга инерт газлар мисол бўлади. Инерт газлар атомида электронлар антипараллел спинли жуфтларга бирлашган ва атомнинг тўла спини шунинг учун нолга тенг.

Атомларнинг тўлдирилган қобикларининг электронлари ҳам атомнинг молекулага бирикишида, худди шу юқори-

даги сабабга кўра, иштирок этмайди. Умуман, атомларнинг тўлдирилган электрон қобиқлари бир-бирининг ичига кира олмайди. Агар, қисман бўлса ҳам, бир-бирини ичига кириш мумкин бўлса эди, бу икки электрон қобиқнинг ҳар бирида электронлар сони шу қобиқда Паули принципи йўл қўйган мумкин бўлган ҳолатлар сонидан анча кўп бўлар эди. Паули принципига кўра ҳар бир ҳолатда фақат биттагина электрон жойлашиши сабабли бир-бирига кирган қобиқлардаги электронларнинг ортиқ қисми юқори ҳолатларга «сиқиб» чиқарилади. Бу эса система энергиясининг ортиб кетишига ва демак, атомларнинг ўзаро итарилишига олиб келади. Шундай қилиб, атомларнинг молекулага бирикиши тўлдирилмаган ташқи электрон қобиғи билан боғлиқ. Ташқи электрон қобиқдаги электронлар сони атомнинг водород атомига нисбатан валентлигини билдиради. Масалан, метан молекуласида (CH_4) тўрт валентли углерод атомининг тўртта валент боғланиши тўртта водород атомининг валент боғланиши билан тўйинган. Мазкур ҳолда, углерод атоми тўртта водород атоми билан тўртта ковалент боғланиш тузади. Ёки, иккита азот атоми уч каррали ковалент боғланиш билан $\text{N} \equiv \text{N}$ азот молекуласига бирикиши мумкин.

Юқорида биз қисман танишган гетерополяр боғланишда атомларнинг молекулага бирикиши валент электронларини бир атомдан иккинчисига ўтиши билан кузатилади. Ушбу ҳолда молекулага бириккан атомлар зарядланиб қолади, заряд сони уларнинг валентлигига тенг бўлади.

62- §. Молекуланинг энергетик сатҳлари

Молекулага бириккан атомларнинг ва уларнинг электронларининг, ядроларининг ҳаракатини молекула масса марказига нисбатан қараймиз. Ушбу саноқ системасида ядролар ўз массасининг электрон массасига нисбатан чексиз катталиги туфайли жуда секин ҳаракатланади. Шу сабабдан, ядро ҳаракати билан боғлиқ энергия электроннинг ядро атрофида айланиш энергиясидан кўп марта кичик, бироқ ядронинг молекула бўйлаб айланиш даври электронникига нисбатан жуда катта. Демак, электронлар ҳаракатини ҳисоблашда ядрони қўзғалмас деб қараш мумкин. Шундай қилиб, ядронинг ўрни билан электронларнинг ҳаракати мосланган.

Ядро ҳаракатини илгарилама, айланма ва мувозанат ҳолат атрофида тебранма ҳаракатларга ажратиш мумкин. Илгарилама ҳаракат квант эффектларга олиб келмайди, яъни спектр чизиқларини вужудга келтирмайди.

Шундай қилиб, молекуланинг энергетик сатҳини уч турга ажратиш мумкин: электронлар энергетик сатҳларига, тебраниш ва айланиш энергетик сатҳларига. Бу энергетик сатҳларнинг нисбий катталикларини аниқлаш қийин эмас. Фараз қилайлик, молекуланинг чизиқли ўлчами a га тенг бўлсин. Маълумки, атомларни молекулага бириктирувчи валент электронлар молекуляр орбита бўйлаб ҳаракат қилиб, ўз ҳаракатида тўлдирилган электрон қобиклар соҳасидан ташқари молекуланинг бутун соҳасини ўтади. Шунинг учун валент электроннинг ҳаракат энергияси тартиби жиҳатдан m_e массали электроннинг a радиусли айланма орбита бўйлаб ҳаракат энергиясига тенг, яъни

$$E^e \approx \frac{\hbar^2}{m_e a^2}, \quad (9.26)$$

бунда a — бир неча ангстремга тенг. Ушбу ҳолда (9.26) энергия миқдорига мос келувчи частота спектрнинг кўринувчи ва ультрабинафша соҳаси частотасига тўғри келади.

Тебраниш энергиясини ҳисоблаш учун молекулада атомлар эластик боғланган ва ўзларининг мувозанат вазияти атрофида тебранади деб фараз қиламиз. Маълумки, ҳар қандай тебранишни гармоник тебранишлар йиғиндиси орқали тасвирлаш мумкин. Биринчи яқинлашишда эса атомлар тебранишини M массанинг K_0 эластиклик коэффицентли гармоник тебраниш сифатида қараш мумкин. M масса тахминан ядро массасига тенг. Атом тебраниши эса ядро тебраниши билан характерланади, чунки электронларнинг ядро атрофидаги ҳаракати шунчалик тезки, улар ядронинг силжишида ҳар доим улгуради ва ўзини ядро билан маҳкам боғлангандек тутати. Демак, атом тебранишида электронлар булути ўзгармайди. Атом тебранишининг эластиклик коэффиценти эса химиявий боғланишнинг таранглигини характерлайди. K_0 ни қуйидаги йўл билан аниқлаш мумкин. Агар тебраниш бўйича a масофага (молекула ўлчами) силжиш юз берса, молекула энергияси албатта E^e га ўзгаради, чунки бундай катта масофага

силжиш молекуляр орбитадаги электрон ҳаракатининг бузилишига олиб келади, яъни

$$E^e \approx -Fa \approx K_0 a^2,$$

бу ерда $F = -K_0 r$ — ҳар доим атомнинг мувозанат вазиятига йўналган ва силжиши r га пропорционал куч. Шундай қилиб, эластиклик коэффициенти тақрибан

$$K_0 \approx E^e / a^2 \quad (9.27)$$

га тенг. У ҳолда молекуланинг кичик уйғонган ҳолатига мос келувчи мувозанат вазият атрофида атомнинг кичик гармоник тебраниши билан боғлиқ энергияси, агар гармоник тебраниш частотаси билан эластиклик коэффициенти орасидаги

$$\omega^2 = \frac{K_0}{M}$$

муносабатни эсга олсак,

$$\begin{aligned} E^r &\approx \hbar \omega = \hbar \left(\frac{K_0}{M} \right)^{1/2} = \frac{\hbar}{a} \left(\frac{E^e}{M} \right)^{1/2} = \\ &= \frac{\hbar^2}{a^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{M m_e}} = \sqrt{\frac{m_e}{M}} E^e \end{aligned} \quad (9.28)$$

бўлади, бу ерда M — тахминан протонлар массаси (умуман, атомлар массаси) ва $m_e/M \approx 10^{-4}$ тартибга эга. Демак, E^r энергия E^e га қараганда тахминан икки тартибга кичик ва у спектр чизиғининг инфрақизил соҳаси частотасига мос келади.

Молекуланинг айланма ҳаракат энергиясини ҳисоблаш учун унинг инерция моментидан фойдаланиш мумкин. Классик назарияга биноан молекуланинг инерция моменти

$$I \sim M a^2$$

га пропорционал. Квант назариясига кўра ротацион ҳолатлар энергияси

$$E^r = J(J+1) \frac{\hbar^2}{2I} = B_0 J(J+1) \quad (9.29)$$

га тенг. Бу ерда J — ротацион квант сони дейилади ва у 0, 1, 2 каби бутун мусбат сон қийматлар қабул қилади.

У ҳолда, молекуланинг айланма ҳаракат энергияси тартиб жиҳатдан

$$E_r \simeq \frac{\hbar^2}{Ma^2} = \frac{m_e}{M} E^e, \quad (9.30)$$

яъни E^e дан тахминан тўрт тартибга кичик. Айланиш энергия частотаси спектр чизигининг микротўлқинлар соҳаси частотасига тўғри келади.

Шундай қилиб, (9.26), (9.28), (9.30) ифодаларга асосан, электронлар энергетик сатҳларини, тебраниш ва айланиш энергетик сатҳларини кичик параметр $(m_e/M)^{1/2}$ бўйича кетма-кет ёйилган ҳадлар қатори сифатида қараш мумкин. Ушбу маънода, молекула энергияси қаторининг нолинчи ҳад ёйилмаси электрон энергетик сатҳлари билан, биринчи ҳад ёйилмаси тебраниш энергетик сатҳлари билан, иккинчи ҳад ёйилмаси эса айланиш энергетик сатҳлари билан характерланади.

Энергетик сатҳларни, бундай, бир-биридан кескин фарқ қилувчи группаларга ажралиши молекулаларнинг нурланиш спектрини атомлар нурланиш спектридан кескин фарқ қилишига олиб келади. Атомлар спектри алоҳида-алоҳида аниқ чизиқлардан иборат, яъни чизиқли бўлади. Молекулалар спектри эса бир томонидан аниқ чегарага эга бўлмаган йўл-йўл тасвирга эга бўлади. Молекулалар спектрини атом спектридан фарқ қилиши тушунарли ҳол, албатта. Маълумки, атомларнинг оптикавий спектрлари ташқи қобикдаги электронлар ҳаракатининг ўзгариши билан боғлиқ. Молекулада эса худди шу электронлар химиявий боғланишда иштирок этади. Шунинг учун молекуладаги атом ташқи қобик электронларининг ҳаракати тубдан ўзгарган бўлади ва бу спектри бутунлай ўзгартириб юборади. Молекула спектрини атом спектридан фарқ қилишининг бошқа сабаби молекулани атомга нисбатан қўшимча эркинлик даражасига (тебранма ва айланма) эга бўлишидир, чунки ушбу қўшимча ҳаракатлар ҳам нурланиш спектрига ҳисса қўша олади.

Атомларнинг молекулага бирикишида фақат электронларни иштирок қилишининг қўшимча экспериментал тасдиғи молекула рентген спектрини атом рентген спектрига айнан мос келишидир. Бу ҳол шуни кўрсатдики, молеку-

ладаги атомларнинг ички электрон қобиқларининг тузилиши атомларнинг эркин ҳолидаги тузилишдан фарқ қилмайди.

63- §. Ротацион спектрлар

Молекуланинг ротацион ҳолати ўзгаришида, яъни айланиш энергиясининг бир сатҳидан иккинчисига электрон ўтишларда вужудга келувчи спектрига айланма ёки ротацион спектрлар дейилади. Албатта, ушбу спектр молекуланинг ташқи қобиғида заряд (электрон) тақсимотиغا боғлиқ. Айланиш энергетик сатҳи ҳар доим (9.29) га тенг бўлишидан қатъи назар, ротацион спектр носимметрик, яъни дипол моменти нолдан фарқли молекулалардагина кузатилади. Симметрик молекулалар, масалан, H_2 , CO_2 , C_2H_2 , CH_4 ва ҳоказо дипол моментиغا эга бўлмаганлиги туфайли айланма спектрага эга эмас. Бундан ташқари, ўзгармас дипол моментиغا эга молекулаларнинг айланиш энергетик сатҳларидаги ўтишларнинг ҳаммасида ҳам нурланиш юз беравермайди. Атом спектрлари ҳолидаги каби, айланиш сатҳларида радиацион ўтишлар ротацион квант сони ва унинг проекцияси бўйсунувчи қуйидаги танлаш қондаси билан аниқланади:

$$\Delta J = \pm 1; \quad \Delta m_J = 0 \quad (9.31)$$

(квант сонлари $J=0, 1, 2, \dots$; $m_J=0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots \pm J$ га тенг қийматлар қабул қилади).

Амалда молекулаларнинг ротацион спектри ҳар доим нурланишнинг ютилиши билан боғлиқ тажрибаларда кузатилади. Ҳар бир кузатилган ўтиш квант сони J билан характерланувчи бирор бошланғич ҳолатни $J + 1$ квант сони билан характерланувчи келгуси юқори ҳолатга ўзгаришига мос келади. Носимметрик молекулаларнинг ротацион спектри биринчи яқинлашишда, яъни бикир (қаттиқ) молекула ҳолида ютилаётган фотонлар частотаси билан аниқланади:

$$\nu_{J \rightarrow J+1} = \Delta E_r/h = (E_{J+1} - E_J)/h = \frac{(J+1)\hbar}{2\pi I} \quad (9.32)$$

Шундай қилиб, бикир молекула спектри бир-биридан тенг масофада жойлашган чизиқлардан иборат бўлар экан

(86-расмга қаранг). Чизиқлар орасидаги частота бўйича фарқ $\Delta\nu$ ни тажрибадан аниқлаб, (9.32) га кўра

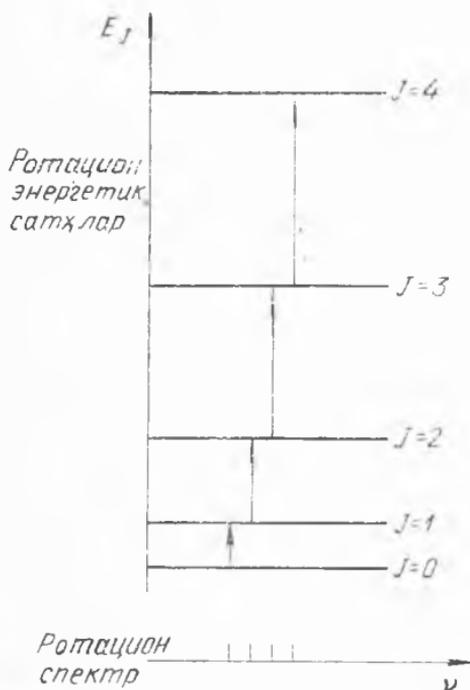
$$\Delta\nu_{\substack{J+1 \rightarrow J+2 \\ J-J+1}} = \frac{\hbar}{2\pi I} [(J+2) - (J+1)] = \frac{\hbar}{2\pi I} \quad (9.33)$$

боғланишдан молекулаларнинг инерция моментини осон аниқлаш мумкин. Инерция моментининг қиймати аниқлангандан сўнг химиявий боғланиш узунлигини (R) ҳисоблаш мумкин. Масалан, икки атомли молекула учун химиявий боғланиш узунлиги молекула ўлчамига тенг:

$$R \approx a = \sqrt{I \frac{M_1 + M_2}{M_1 \cdot M_2}}$$

Агар молекулада атомлар ўзаро бикир боғланмаган бўлса, спектр чизиқлари орасидаги масофа J нинг ортиши билан қисқаради, чунки бикирмас молекула сатҳлари

кичик энергиялар соҳасига силжиган бўлади.



86-расм. Молекуланинг ротацион (айланма ҳаракат) энергия сатҳлари ва спектр чизиқлари.

Инерция моменти атом массасининг функцияси бўлганлиги сабабли, молекуладаги атомни унинг изотопи билан алмаштириш ротацион энергиясини (9.29) га биноан ўзгаришига ва шунинг учун тегишли спектр частотасининг ҳам ўзгаришига олиб келади, яъни изотопик эффект ёки силжиш юз беради. Лекин, молекулада атомни изотоп билан алмаштириш бирор сезиларли даражада на электрон қобиқ тузилишини ва на химиявий боғланиш турини ўзгартиради. Шунинг учун ушбу алмаштиришда атомлар орасидаги

масофа—боғланиш узунлиги ҳам ўзгармайди. У ҳолда бирор атомни унинг изотопи билан алмаштириб ротацион спектр чизиқларининг силжишини кузатиш йўли билан изотопнинг атом массасини аниқлаш мумкин, ёки молекулада қатнашган атомларнинг ва алмаштирилувчи изотопнинг массаси маълум бўлса, мураккаб молекула геометриясини аниқлаш ҳам мумкин. Мисол тариқасида OCS молекулада C—O ва C—S боғланишлар узунлиги R_{CO} , R_{CS} ни аниқлайлик (87- расм.)

Фараз қилайлик, $O^{16} C^{12} S^{32}$ ва $O^{16} C^{12} S^{34}$ молекулаларнинг спектри чизиғи аниқланган дейлик. Бу икки молекула учун ҳам R_{CO} ва R_{CS} бир хил деб ҳисоблаймиз. У ҳолда, агар молекуланинг координата бошига жойлаштирилган масса марказидан O, C ва S атомларгача масофани мос равишда r_O , r_C ва r_S орқали белгиласак, инерция моменти, масалан, OCS^{32} учун

$$I = M_O r_O^2 + M_C r_C^2 + M_S r_S^2$$

бўлади. Ушбу масофаларни боғланиш узунликлари орқали ифодалаб, яъни

$$r_O = R_{CO} + r_C$$

$$r_S = R_{CS} - r_C$$

ва $M_O r_O + M_C r_C = M_S r_S$ дан фойдаланиб, инерция моменти учун қуйидаги ифодани ҳосил қиламиз:

$$I(OCS^{32}) = M_O R_{CO}^2 + M_S R_{CS}^2 - (M_O R_{CO} - M_S R_{CS})^2 / (M_O + M_C + M_S).$$



87- расм. Оксисульфид углерод молекуласининг геометрик тасвири.

Худди шундай ифодани иккинчи молекула — OCS^{34} учун ҳам ёзишимиз мумкин:

$$I (\text{OCS}^{34}) = M_{\text{O}} R_{\text{CO}}^2 + M'_{\text{S}} R_{\text{CS}}^2 - (M'_{\text{S}} R_{\text{CS}} - M'_{\text{S}} R_{\text{CS}})^2 / (M_{\text{O}} + M_{\text{C}} + M'_{\text{S}}).$$

Ротацион спектр чизиқлари орасидаги масофанинг (частоталардаги фарқ) экспериментда эниқланган қиймати OCS^{32} учун $\Delta\nu = 1,216 \cdot 10^{10}$ Гц, CCS^{34} учун эса $\Delta\nu' = 1,187 \cdot 10^{10}$ Гц. У ҳолда инерция моменти учун

$$I = \frac{\hbar}{2\pi\Delta\nu} = 1,38 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2 \text{ ва } I' = \frac{\hbar}{2\pi\Delta\nu'} = 1,414 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2.$$

Юқорида молекулалар инерция моментининг тегишли ифодаларига ушбу қийматларни қўйсақ R_{CO} ва R_{CS} га нисбатан икки номаълумли икки тенгламадан иборат системага келамиз. Унинг ечими

$$R_{\text{CO}} = 1,161 \text{ \AA} \text{ ва } R_{\text{CS}} = 1,559 \text{ \AA}$$

га тенг.

Изотопик ўрин алмаштириш ёрдамида янада мураккаброқ кўп атомли молекулаларни ҳам ўрганиш мумкин. Мураккаб молекулаларда изотоплар нисбий миқдорини аниқлаш ёки боғланишлар узунлиги ва улар орасидаги бурчак ҳақида жуда аниқ маълумотлар олиш мумкин.

64-§ Тебранма-айланма ҳаракат спектрлари

Тебранма ҳаракат сатҳлари ва спектрлари. Молекула атомларининг мувозанат вазият атрофида гармоник тебранишининг потенциал энергияси, масалан, икки атомли молекула учун

$$V = - \int F dr = K_0 r^2 / 2 = \frac{M \omega^2}{2} r^2$$

билан осциллятор учун Шредингер тенгламасини ечиш

$$E^T = \hbar \omega^T \left(v^T + \frac{1}{2} \right) = \hbar v^T \left(v^T + \frac{1}{2} \right) \quad (9.34)$$

га тенг энергия сатҳларини беради. Бу ерда $v^T = 0, 1, 2, \dots$ — тебранма квант сони дейилади.

Мураккаб молекулаларнинг ҳар бир ички эркинлик даражасига тебранма ҳаракатнинг аниқ бир тури тўғри келади. Чизиқли бўлмаган молекуланинг ички эркинлик даражаси $3N - 6$ га тенг (N — атомлар сони) чунки ҳаммаси бўлиб $3N$ эркинлик даражадан сақланиш қонунларига кўра масса марказининг илгарилама ҳаракатига тўғри келадиган учта эркинлик даражасини ва молекуланинг яхлит ҳолда, уч ўқ бўйича айланма ҳаракатига тўғри келадиган учта эркинлик даражасини, яъни олтита эркинлик даражасини айириб ташлаш керак.

Чизиқли молекула ҳолида молекуляр чизиқ — симметрия ўқи бўйлаб айланиш ҳисобга олинмайди, шунинг учун $3N - 5$ тагина тебранма ҳаракат мумкин. Масалан, икки атомли молекула $N = 2$ да $3N - 5 = 1$, яъни битта, ички эркинлик даражасига ва унга мос якка тебранма ҳаракатга эгадир. Ёки чизиқли бўлмаган H_2O молекуланинг ички эркинлик даражаси $3N - 6 = 3$ га тенг ва у уч хил тебранма ҳаракатда бўлиши мумкин.

Ички эркинлик даражасига мос келувчи ҳар бир тебранишни гармоник деб ҳисоблаймиз. Масалан, молекуланинг i -тебраниш частотаси

$$\omega_i^T = \frac{1}{2\pi} \sqrt{K_0^i \frac{M_1^i + M_2^i}{M_1^i \cdot M_2^i}}$$

га тенг. Бу ерда K_0^i — i -боғланишнинг эластиклик доимийси, M_1^i ва M_2^i — шу i -боғланишда қатнашган иккита атомнинг массаси.

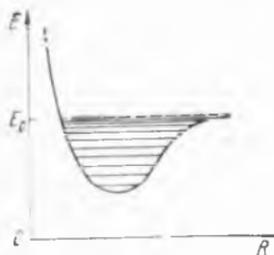
Ҳақиқатдан тебранма спектрлар соф ҳолда ҳеч қачон кузатилмайди. Молекула ҳар доим тобранма энергия билан бир қаторда унга нисбатан икки тартибга кичик айланма энергияга ҳам эга бўлади. Молекуланинг айланиш энергиясининг тебраниш энергиясидан икки тартибга, тахминан 100—1000 марта кичиклиги туфайли айланма ҳаракат тебранма ҳаракатни буза олмайди, яъни бошқача айтганда, молекуланинг айланиши унинг спектрининг тебранма структурасини айната олмайди. Кичик айланма квантларнинг тебранма квантлар устига қўшилиши туфайли, тебранма спектр чизиқлари бир-бирига қўшилиб, айланма чизиқлар тўпламларига тўғри келадиган, йўл-йўл (полоса) кўринишга эга бўлади. Шундай қилиб, айланма тебранма спектр чизиқли йўл-йўл тузилишга эга.

Тебранма спектрнинг ҳар бир йўлини молекуланинг икки тебранма термлари фарқи билан аниқланувчи маълум тебранма частота ν^T характерлайди.

$$\nu^T = (E_{\text{бош.}}^T - E_{\text{охир.}}^T)/h. \quad (9.35)$$

Молекуланинг тебранма ҳолатлари ўртасидаги ўтишлар, гармоник осциллятор яқинлашишида, $\Delta v = \pm 1$ танлаш қоидасига бўйсунган ҳолда юз беради. ν^T частота билан тебранувчи диполь худди шу частотали нурланишни чиқариши ёки ютиши мумкин. ν^T частотали квантларнинг ҳаммасининг ҳам энергияси $h\nu^T$ га тенг. Демак, тебранаётган диполь энергиясини бирданига $\Delta E = h\nu^T$ га ўзгартириши мумкин, яъни, масалан, квант ютди десак, энергиясини $(v + 1/2)h\nu^T$ дан $(v^T + 1/2 + 1)h\nu^T$ га орттиради, квант чиқарди десак — $(v + 1/2)h\nu^T$ дан $(v^T + 1/2 - 1)h\nu^T$ га камайтиради. $\Delta v^T = \pm 1$ танлаш қоидаси шундай келиб чиқади.

Шуни эслатиш лозимки, молекуладаги тебранишни фақат тебраниш амплитудаси кичик бўлгандагина соф гармоник деб ҳисоблаш мумкин. Ядролар орасидаги масофанинг функцияси бўлган атомлар ўзаро таъсир потенциал энергияси умуман асимметрик шаклга эга бўлади. Шу сабабдан, агар бирор тебранаётган атом ўзининг мувозанат вазиятидан сезиларли силжиса, унинг қўшни атомга яқинлашишида итарувчи таъсир кучи узоқлашишидагига қараганда тезроқ ўзгаради ва тебраниш ангармоник ҳаракатга ўтади. Шунинг учун, тебранма ҳолат энергетик сатҳлари бир-биридан бир хил масофада бўлмасдан, квант сони ортиши билан 88-расмда тасвирланганидек тобора бир-бирига яқинроқ жойлашган бўлади. Молекуланинг ангармоник тебранишлар энергияси ангармоник осциллятор энергиясининг мураккаб ифодаси билан характерланади:



88- расм. Молекуланинг тебранма ҳолат энергия сатҳлари, E_0 — молекуланинг диссоциацияланиш энергияси.

$$E_A^T = h\nu^T \left(v^T + \frac{1}{2} \right) - h\nu^T x \left(v^T + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (9.36)$$

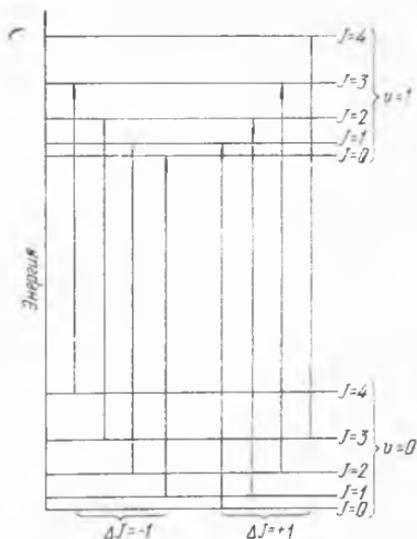
бу ерда κ — ангармоник тебраниш доимийси. κ нинг кичиклиги туфайли тебранма квант сони ν^T нинг кичик қийматларида (9.36) тенглама (9.34) га ўтади. Демак, паст энергетик сатҳларда молекуланинг тебраниши гармоник равишда юз берар экан. Тебраниш энергиясининг (9.36) умумий ифодасидан молекуланинг тебранма энергетик сатҳлари орасидаги масофанинг ўзгариши келиб чиқади.

Биринчи яқинлашишда молекуланинг тебраниши ва айланиши ўзаро бири-бирига боғланмаган ҳолда юз беради деб қараш мумкин. Айни вақтда ангармоникликни ҳам ҳисобга олмаймиз. Ушбу ҳолда икки атомли молекуланинг энергетик сатҳлари қуйидаги формула билан ифодаланади:

$$E^{\nu, J} = \left(\nu^T + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\frac{K_0}{M}} + J(J+1) \frac{\hbar^2}{2I} \quad (9.37)$$

89-расмда икки атомли молекуланинг $\nu^T = 0$ ва $\nu^T = 1$ тебранма ҳолатлари учун $J = 0, 1, 2, 3, 4$ (айланма) сатҳлари ва $\Delta \nu^T = \pm 1$, $\Delta J = \pm 1$ танлаш қоидаларига бўйсунувчи ютиш спектрал чизиқлари тасвирланган. Расмдан кўрамизки, тебранма ҳаракатнинг $\nu^T = 0 \rightarrow \nu^T = 1$ битта ўтиши айланма ҳаракатнинг қўшилишида бир тўплам ўтишларга ажралди. Ушбу тўплам иккига: $\Delta J = -1$ ўтишларга ва $\Delta J = +1$ ўтишларга бўлинган (9.37) формуладан мазкур ўтишларга тўғри келадиган частоталарни осон аниқласа бўлади:

$$\begin{aligned} \nu_{\Delta J = -1} &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K_0}{M}} + [(J-1)J - J(J+1)] \frac{\hbar}{4\pi I} = \\ &= \nu^T - J \frac{\hbar}{2\pi I}, \end{aligned}$$



89-расм. Икки атомли молекула учун $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$ ўтишларининг айланма ҳолат структураси.

$$\begin{aligned} v_{\Delta J=+1} &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K_0}{M}} + [(J+1)(J+2) - J(J+1)] \frac{\hbar}{4\pi I} = \\ &= v^T + (J+1) \frac{\hbar}{2\pi I}. \end{aligned}$$

Расмда кўрсатилганидек, биринчи ҳолда ротацион квант сони $J = 1, 2, 3 \dots$, иккинчи ҳолда $J = 0, 1, 2$ қий-матлар қабул қилади.

65-§. Электрон спектрлари

Молекулада атомлар томонидан умумлаштирилган электронлар ўзларининг молекуляр орбитадаги ҳаракатида, атом ҳолидаги каби, ёруғлик ютиш ва чиқариш йўли билан квант ҳолатини ўзгартиради. Аммо молекула орбитасидаги электронлар бирдан ортиқ атом ядролари майдонида, яъни сферик симметрияга эга бўлмаган майдонда ҳаракатланиши туфайли баъзи ҳолларда атом электронидан фарқ қилинади. Лекин шунга қарамасдан, молекула электронларининг бир квант ҳолатдан иккинчисига ўтишларида кузатиладиган спектр чизиқлари, атомдаги каби, спектрнинг кўринувчи ва ультрабинафша соҳасида ётади. Асосий фарқ қуйидагидан иборат.

Молекула орбитасидаги электронлар энергиясининг ўзгариши билан молекуланинг тебранма ва айланма энергияси ҳам ўзгаради. Шунинг учун нурланиш частотаси ушбу уч энергетик ўзгаришлар комбинацияси орқали аниқланади:

$$\begin{aligned} v &= \frac{(E^e + E^T + E^r)_6 - (E^e + E^T + E^r)_0}{h} = \\ &= v^e + v^T + v^r, \end{aligned} \quad (9.38)$$

бу ерда

$$v^e = \frac{E_6^e - E_0^e}{h}, \quad v^T = \frac{E_6^T - E_0^T}{h}, \quad v^r = \frac{E_6^r - E_0^r}{h}.$$

Молекуланинг ушбу мураккаб спектрини икки атомли молекула ҳолида тушунтириш осон. Фараз қилайлик, молекуланинг тебранма ва айланма ҳаракатидан истисно, фақат электрон ўтишларини кузатиш мумкин бўлсин. У ҳолда биз эркин атом ҳолидаги каби чизиқли спектрни кузатар эдик. Электрон ўтишларига молекуланинг фақат

тебранма ҳаракати билан боғлиқ ўтишларини киритсақ, электрон спектр чизигининг ҳар бирига тебранма спектр қўшилади, чунки ҳар бир электрон термлари тебранма термлар тўпламига ажралади. Шунинг учун, даставвалги электрон чизигининг ҳар бири энди ҳар хил тебранма ўтишларга мос бутун бир тебранма спектр чизиқларидан иборат тузилишга эга бўлади. Айланма ҳаракатни ҳам ҳисобга олиш эса тебранма спектрнинг ҳар бир чизигини ротацион спектр чизиқларидан иборат тузилишига олиб келади.

Шундай қилиб, электрон спектрни тебранма ва ротацион спектрларни инфрақизил ва қисқа тўлқинлар соҳасидан спектрнинг кўринувчи ва ультрабинафша соҳасига силжитилади ва уларни (тебранма ва айланма спектрларни) шунча кўп марта қайтарадики, худди бу спектрларни электрон спектрига қайта-қайта кўпайтирилганидек тасвирни вужудга келтиради.

Спектрнинг электрон-тебранма тузилиши. Спектр тузилишини батафсил қараб чиқишни икки атомли молекула ми-солида электрон спектрининг тебранма тузилишидан бошлаймиз. Ушбу чизиқлар частотаси (9.38) частотанинг айланма частота v^r дан истисно ҳоли билан аниқланади:

$$v^{eT} = v^e + v^T$$

Агар молекуланинг тебранма энергиясини, умумий ҳолда, (9.36) га тенглигини эътиборга олсак, яъни

$$\begin{aligned} v^T &= (E_6^T - E_0^T)/h; \quad E_6^T = h v_6^T \left(v_6 + \frac{1}{2} \right) - h v_6^T \kappa_6 \left(v_6 + \frac{1}{2} \right)^2 \\ E_0^T &= h v_0^T \left(v_0 + \frac{1}{2} \right) - h v_0^T \kappa_0 \left(v_0 + \frac{1}{2} \right)^2 \end{aligned}$$

тебранма тузилишга эга электрон спектр чизиқларининг частотаси учун Деландрнинг эмперик формуласига келамиз:

$$v^{eT} = v_{00} + a_6 v_6 - b_6 v_6^2 - a_0 v_0 + b_0 v_0^2. \quad (9.39)$$

Бу ерда

$$v_{00} = v^e + \frac{1}{2} v_6^T \left(1 - \frac{\kappa_6}{2} \right) - \frac{1}{2} v_0^T \left(1 - \frac{\kappa_0}{2} \right)$$

$$a_{6,0} = v_{6,0}^T \left(1 - \kappa_{6,0} \right), \quad b_{6,0} = v_{6,0}^T \kappa_{6,0}.$$

Берилган электрон ҳолатлар учун тебранма йўлларнинг тўла системаси v_0 ва v_0 нинг ҳар хил ўзгаришлари билан тасвирланади. Шунинг учун, одатда, муайян йўлнинг тўлқин сони v^{eT} тўғри бурчакли матрица тарзида ифодаланади. v^{eT} матрицанинг устунлари ҳар хил v_0 га, сатрлари эса ҳар хил v_0 га мос қўйилади, яъни v^{eT} . v^{eT} нинг ушбу (матрица кўринишидаги) схемасини *Деландр схемаси* деб юритилади. Деландр схемасидан унинг кўндаланг ва бўйлама икки серияси келиб чиқади. Деландрнинг кўндаланг серияси асосий электрон ҳолатининг пастки маълум тебранма сатҳи $v_0 = \text{const}$ билан (юқори) уйғотилган электрон ҳолатининг ҳар хил тебранма сатҳлари ўртасидаги ўтишларда кузатиловчи ютилиш спектрида ҳосил бўлади. Уйғотилган электрон ҳолатининг маълум тебранма сатҳи $v_0 = \text{const}$ билан асосий электрон ҳолатининг ҳар хил тебранма сатҳлари ўртасидаги ўтишларга мос чиқариш спектрида Деландрнинг бўйлама серияси ҳосил бўлади.

Молекулаларнинг дискрет ва туташ спектрларида интенсивликнинг тақсимланиши Франк—Кондон принцинга бўйсунди. Франк—Кондон принципи қуйидагича тушунтирилади. Молекулаларнинг ташқи орбитадаги электрон ўтишлари электрон қобиқларнинг қайта тузилишидан иборат бўлади ва бу ўтишлар ядронинг ҳаракатига нисбатан жуда тез юз беради. Шунинг учун, электрон ўтиши давомида ядролар орасидаги масофа ва ядроларнинг тезликлари ўзгармайди (ўзгаришга улгурмайди). Ядролар тезлигининг ўзгариши нолга тенглигидан улар орасидаги масофанинг сақланишига мос келувчи электрон ўтишлар энг кўп эҳтимолликка эга. Шу сабабли, ушбу ўтишларга мос келувчи чизиқлар қолган чизиқларга нисбатан энг интенсив бўлади.

66-§. Ёруғликнинг комбинацион сочилиши

Комбинацион чизиқлар ва классик назария. Ёруғликни муҳитдан ўтишида у қисман ҳар томонга сочилади. Сочилиш муҳитнинг бир жинсли бўлмаган соҳасида юз бериб, соҳа ўлчамларини тушаётган ёруғлик тўлқин узунлигига яқинлашишида янада кучаяди. Соф жисмда бир жинслилик зичликнинг флукутацияси тарзида бузилиши мумкин.

Ёруғликнинг зичлик флукуациясида сочилиши *молекуляр ёки Релей сочилиши* дейилади. Релей сочилишининг характерли хоссаси ёруғлик частотаси ўзгармасдан юз бериши ва унинг когерент бўлишидир.

Муайян частотали ёруғлик манбадан тушаётган нурнинг мухитда сочилишида манба спектрига хос чизиқлар (яъни, Релей сочилишининг спектр чизиғи) билан бир қаторда унга нисбатан силжиган ва хира чизиқлар ҳам кузатилади. Ушбу ҳодисани комбинацион ёки силжиган сочилик дейилади. У 1928 йилда ҳинд олими Раман томонидан биринчи эълон қилинган ва баъзан Раман эффекти деб аталади. Комбинацион сочилик ҳодисасини Раман билан бир вақтда Москвада Ландсберг ва Мандельштам ҳам кузатган.

Комбинацион сочиликда кузатиладиган силжиган чизиқларни Раман чизиқлари (ν_R) дейилади. Комбинацион сочиликда молекуланинг бошланғич ва охири ҳолатлари ўзаро оралиқ ҳолат воситасида комбинациялашади. Оралиқ ҳолат бошланғич ва охири ҳолатлар билан ҳар хил комбинацияда бўлади. Шунинг учун ҳам, ёруғликнинг комбинацион сочилиши поккогерентдир. (Когерент сочиликда тушаётган нурланиш энергиясининг ютилиш ва иккиламчи нурланишни пайдо бўлиш оралиғида ёруғлик фазасини ўзгартирувчи ҳеч қандай жараён бўлмайди. Нокогерент сочиликда, аксинча, ютилиш ва нурланиш оралиғида фаза ўзгариши юз беради, масалан, комбинацион сочилик, Комптон сочилик, люминесценция ва бошқа ҳодисаларда шундай ҳодиса юз беради.) Сочувчи молекула структурасини комбинацион сочилик спектр чизиғининг ўрни ва сони билан характерланиши комбинацион сочиликнинг муҳим хусусиятларидан биридир. Тушувчи (бирламчи) ёруғлик частотаси билан комбинацион сочилик чизиқлари частотасининг фарқи сочувчи модданинг инфрақизил ютиш соҳаси частоталарига тенг. Ушбу частоталар молекуланинг тебранма ва айланма ҳолатини характерлайди.

Комбинацион сочилик ҳодисаси классик назария нуқтаназаридан қуйидагича тушунтирилади. Ёруғлик тўлқинининг ўзгарувчи электр майдони

$$E = E_0 \sin 2\pi \nu_0 t$$

таъсирида сочувчи молекулада ташқи электр майдон кучланганлигига пропорционал индуктив дипол momenti

$$\vec{P} = \sigma \vec{\mathcal{E}}$$

вужудга келади. Бу ерда \mathcal{E}_0 — ёруғлик тўлқини электр майдон кучланганлигининг амплитудаси, ν_0 — тушаётган ёруғлик частотаси, σ — молекуланинг қутбланувчанлиги, фақат унинг тузилиши ва хоссасига боғлиқ бўлган донмий.

Молекуляр диполнинг мажбурий тебранишлари худди шу оддий Релей сочилишининг сабабидир. Шундай қилиб, ν_0 частотада мажбурий тебранаётган дипол, классик электродинамикага биноан, интенсивлиги

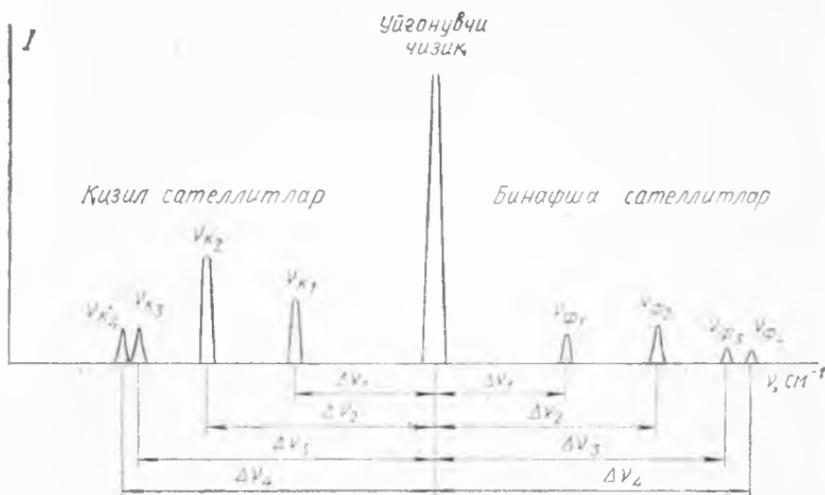
$$I_{\nu_0} = \frac{16 \pi^4 \nu_0^4}{3c^2} \sigma^2 \mathcal{E}_0^2 \quad (9.40)$$

га тенг монохроматик нурланиш чиқаради.

Агар сочувчи муҳит қутбланувчанлиги ўзгарувчи, яъни $\sigma \neq \text{const}$ бўлса, молекуланинг дипол momenti ҳам вақт бўйича ўзгаради. Умуман, молекула қутбланувчанлиги ядролар тебранишини диполь тебранишларида қатнашиши сабабли доимо ўзгариши керак. Масалан, электронларнинг ва ядроларнинг ўзаро боғланганлиги сабабли электронларнинг ν_0 частотада мажбурий тебранишлари ядроларнинг ҳам тебранишини юзага келтиради. Лекин ядролар массасини катталиги сабабли уларнинг тебраниши жуда секин бўлади. Бу эса молекуланинг қутбланишини ўзгаришига олиб келади, яъни сочилган ёруғлик частотаси ўзгаради. Частота ўзгариши ν_0 дан катта ва кичик қийматлар соҳасига симметрик силжшдан иборат бўлади. Частотанинг ушбу ўзгарган қийматларига асосий чизиқдан чап ва ўнгга силжиган қўшимча чизиқлар — сателлитлар тўғри келади (90-расм). Асосий чизиқдан чап томонга силжиган қизил сателлит чизиқларни Стокс чизиқлари ($\nu_R^S < \nu_0$), ўнг томондаги бинафша сателлит чизиқларни эса анти-стокс чизиқлари ($\nu_R^S = \nu_0$) дейилади.

Шундай қилиб, классик назарияга асосан, сочилган ёруғлик спектрида силжимаган чизиқнинг (ν_0) ҳар икки томонида бирор ν масофага симметрик силжиган чизиқлар жойлашган ва уларнинг интенсивлиги

$$I_{\nu_R^S, A} = \frac{4\pi^4}{3c^2} (\nu_R^S, R)^4 \sigma^4 \mathcal{E}_0^2 = \frac{4\pi^4}{3c^2} (\nu_0 \mp \nu)^4 \sigma^4 \mathcal{E}_0^2 \quad (9.41)$$



90- расм. Ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрининг схематик тасвири.

га тенг. Хуллас, классик нуқтан назардан Стокс ва анти-стокс чизикларининг интенсивлиги ўзаро тенг. Лекин эксперимент натижалари ушбу чизиклар интенсивлигининг тенг эмаслигини, жумладан, қизил сателлитлар — Стокс чизикларининг интенсивлигини бинафша сателлитлар интенсивлигидан юқори эканлигини кўрсатади.

Тебранма Раман спектрининг квант назарияси. Квант назариясигина ёруғликнинг комбинацион сочилишини миқдоран тўғри тасвирлай олади. Раман эффектнинг кванто-механик назарияси Крамерс—Гейзенберг дисперсия назариясига асосланади. Ёруғлик сочилиши классик назариясининг электронлар, яъни диполь мажбурий тебранилишига квант назариясида молекуланинг дискрет энергия сатҳларидан электрон ўтишлари тўғри келади. Бинобарин, квант механикаси нуқтан назардан молекулада ёруғлик сочилиши қуйидагича талқин этилади. Молекула ёруғлик таъсирида асосий ҳолат энергетик сатҳидан ҳар қандай юқори сатҳга қисқа вақтга ўтиб, сўнг у бирор пастки энергетик сатҳга қайтади. Агар молекуланинг охириги ҳолат сатҳи дастлабки сатҳга устма-уст тушса, ёруғликнинг

Релей сочилиши, акс ҳолда, яъни сатҳлар устма-уст туш-маса, Раман сочилиши юз беради. Молекуланинг вақтинча бўладиган уйғонган ҳолат сатҳининг энергиясини E_x , дастлабки сатҳ энергиясини E_0 , охириги сатҳ энергиясини эса E орқали белгиласак, ёруғлик сочилишини қуйидаги икки босқичга шартли равишда ажратишимиз мумкин:

$$h\nu_0 = E_x - E_0 \quad \text{ва} \quad h\nu = E_x - E. \quad (9.42)$$

У ҳолда частоталар ўзгариши

$$\nu_R = \nu_0 - \nu = \frac{(E_x - E_0) - (E_x - E)}{h} = \frac{E - E_0}{h}$$

га тенг. Умумий ҳолда охириги сатҳ энергияси — E дастлабки сатҳ энергиясидан катта, кичик ёки унга тенг бўлиши мумкин. Агар $E = E_0$ бўлса, $\nu_R = 0$ — ҳақиқатан ҳам, ёруғликнинг Релей сочилишига келамиз. Агар $E > E_0$ бўлса, $\nu_0 > \nu_R$ қизил сателлитлар чизиги ҳосил бўлади. Агар $E < E_0$ бўлса, молекуланинг дастлабки сатҳи уйғонган ҳолатга тегишли бўлади. Нурланишда (иккинчи босқичда) у кўпроқ энергия чиқаради. Ушбу ҳолда, $\nu \rightarrow -\nu$ сабабли $\nu_R = \nu_0 + \nu$ бўлади, яъни $\nu_0 < \nu_R$ бинафша сателлитлар ҳосил бўлади. Шундай қилиб, Раман чизиқларини вужудга келтирадиган ёруғликнинг комбинацион сочилиш жараёни расман қуйидаги схемада ўтади:

$$h\nu_0 + M \rightarrow h\nu_R^S + M^*,$$

$$h\nu_0 + M^* \rightarrow h\nu_R^A + M,$$

бу ерда M — нолинчи тебранма сатҳдаги ($\nu = 0$), яъни нормал ҳолатдаги молекула. M^* — тебранма квантга эга уйғотилган молекула. Агар тебранма квант сони бўйсунувчи танлаш қондасини

$$\Delta \nu = \pm 1$$

эътиборга олсак, юқоридаги комбинацион сочилиш схема-сига кўра, дастлаб асосий ҳолатдаги молекула ($\nu = 0$) ёруғлик билан ўзаро таъсирлашиб, яъни $h\nu_0$ квант ютиб, битта тебранма квант ($\nu = 1$) энергияга

$$E^T = h\nu^T \left[\left(1 + \frac{1}{2}\right) - \left(0 + \frac{1}{2}\right) \right] = h\nu^T$$

эга уйғонган M^* охирги ҳолатга ўтади ва жараён давомида $h\nu_R^S = h\nu_0 - h\nu^T$ ёруғлик кванти сочилади. Иккинчи ҳолда эса ёруғликни биринчи тебранма уйғотилган молекула M^* билан ўзаро таъсири натижасида молекула нолинчи тебранма ҳолат M га ўтади ва жараён давомида сочилган ёруғлик квантининг энергияси бир тебранма квант энергиясига ортади, яъни $h\nu_R^A = h\nu_0 + h\nu^T$.

Сочилган ёруғликнинг интенсивлиги созувчи модда молекулаларининг сонига соғлиқ. Уй температураси шароитида N та молекуладан иборат созувчи модданинг

$$N^* = N \cdot e^{-E^T/kT}$$

га тенг молекулалари тебранма уйғотилган ҳолатда бўлади ва модданинг N^* молекуласи ўзининг ортиқча энергиясини ёруғлик квантига бериши мумкин. У ҳолда сочилган ёруғлик спектрида антистокс компонентаси интенсивлигининг Стокс компонентаси интенсивлигига нисбати уйғотилган молекулалар сонини нормал ҳолатдаги молекулалар сонига нисбати билан аниқланади:

$$\frac{I_{\nu_0 + \nu^T}}{I_{\nu_0 - \nu^T}} = \left(\frac{\nu_0 + \nu^T}{\nu_0 - \nu^T} \right)^4 e^{-\frac{E^T}{kT}}. \quad (9.43)$$

Одатда эксперимент шароитида молекулаларнинг кўпчилиги энг паст энергетик сатҳда ($\nu = 0$) бўлиб, фақат уларнинг оз қисмигина $\nu = 1$ ҳолатда бўлади ва шунинг учун $e^{-E^T/kT} \ll 1$ бўлади. Шундай қилиб, оддий шароитда, Стокс чизиқларининг интенсивлиги ҳар доим антистокс чизиқлари интенсивлигидан катта бўлади ва ушбу классик назария тушунтира олмаган экспериментал фактни квант назариясида осон тушунтира олик.

Ротацион Раман спектрлағи. Биз юқорида кўрдикки, молекуланинг айланма квантлар энергияси тебранма квантлар энергиясидан камида икки тартибга кичик. Шунинг учун, молекуланинг Раман спектрларида айланма квантга тегишли чизиқларни фақат юқори даражада ажрата олиш кучига эга асбоблардагина кузатиш мумкин. Айни ҳолда, Раман эффекти туфайли молекулаларнинг айланма термлари структурасини ўрганиш кузатилиши қийин бўлган

инфрақизил ва микроўлқинлар соҳасидан спектрнинг қулай оқ соҳасига кўчирилади.

Ротацион Раман спектр тузилиши ротацион квант сонига тегишли танлаш қоидалари $\Delta J = \pm 1$ билан аниқланади. (9.42) схемага кўра ва ушбу танлаш қоидасига биноан оралиқ ҳолат учун $E_0 \rightarrow E_x$, $J_x = J_0 \pm 1$ (J_0 — бошланғич ҳолат квант сони) билан характерланувчи икки хил уйғотилган сатҳ тенг эҳтимолли бўлади. Молекуланинг пастки сатҳга $E_x \rightarrow E$ қайтишда охириги E сатҳни характерловчи ротацион квант сони $J = J_x \pm 1 = (J_0 \pm 1) \pm 1 = J_0 \pm 2$ га тенг қийматлар қабул қилиши мумкин. Шундай қилиб, инфрақизил спектр соҳасидаги ўтишлар бўйсунувчи $\Delta J = \pm 1$ танлаш қоидасидан фарқли равишда ротацион Раман спектри учун танлаш қоидаси $\Delta J = \pm 2$ каби ифодаланади.

(9.29) формулага асосан ротацион Раман чизиқлари учун частотанинг қуйидаги ифодасига келамиз:

$$\begin{aligned} \nu_R &= \nu_0 - (E_{J+\delta}^r - E_J^r) \frac{1}{h} = \\ &= \nu_0 - B_0 \delta (2J + \delta + 1) \frac{1}{h}. \end{aligned} \quad (9.44)$$

Бу ерда $\delta = \pm 2$. Агар (9.44) га $\delta = \pm 2$ ни қўйсак, молекуланинг айланма ҳаракат спектри йўлининг иккита тармоққа ажралишини ифодаловчи формулага келамиз:

$$S \text{ — тармоқ учун } \nu_R^S = \nu_0 - 2B_0 (2J + 3) \frac{1}{h},$$

$$O \text{ — тармоқ учун } \nu_R^A = \nu_0 + 2B_0 (2J - 1) \frac{1}{h}.$$

Мазкур ифодаларга биноан, спектрнинг икки қўшни чизиқлари орасидаги масофа инфрақизил спектрдаги $\Delta \nu = 2B_0/h$ дан фарқли равишда, $\Delta \nu_R = 4B_0/h$ га тенг, яъни икки баробар узоқ жойлашган бўлади.

Раман спектрлари асосида биз молекулаларнинг хусусий тебраниш частоталарини ва уларнинг инерция моментларини аниқлашимиз мумкин. Тебранма ва ротацион спектрга эга бўлмаган бир хил атомлардан тузилган молекулаларнинг хусусий тебраниш частоталарини бевосита аниқлаш мумкинлиги Раман спектрлари методини қанчалик аҳамиятли эканлигини кўрсатади. Молекулалар структурасини ва уларнинг агрегат ҳолатини ўзгаришида

дуч келинадиган структура ўзгаришларини химиявий мувозанатни ўрганишда, мураккаб аралашмаларни анализ қилишда ва у ёки бу бирикмаларни идентификациялашда Раман спектри методининг катта аҳамияти бор.

67- §. Спонтан ва мажбурий нурланиш

Маълумки, атом ёки молекуладан иборат ҳар қандай система энергиянинг дискрет қийматлари билан характерланувчи квант ҳолатларнинг бирдан иккинчисига ўтишида нурланиш чиқариши ёки ютиши мумкин. Ушбу жараённи биз ўтган параграфда электромагнит нурланиш билан модда атоми ёки молекуласининг ўзаро таъсирлашуви сифатида схематик тасвирлаган эдик. Умуман, электромагнит майдон билан атом ёки молекуланинг ўзаро таъсирлашуви масаласини квант электродинамикасидагина тугал ечиш мумкин. Биз мазкур жараённи Эйнштейн томонидан таклиф қилинган термодинамик нуқтани назардан қараб чиқайлик.

Атомлардан иборат система айнимаган n ки энергетик сатҳга $E_i, E_k > E_i$ эга бўлсин. E_i энергия билан характерланувчи ҳолатдаги атомларнинг бирлик ҳажмдаги сонини N_i га ва иккинчи ҳолатдагиларнинг бирлик ҳажмдаги сонини N_k га тенг дейлик. У ҳолда dt вақтда юз берадиган юқори ҳолатдан пастки ҳолатга спонтан ўтишлар сони

$$dN_{kcn} = N_k A_{ki} dt \quad (9.45)$$

га тенг. Бу ерда A_{ki} — спонтан ўтишлар эҳтимоллигининг Эйнштейн коэффициентини. Агар энди ҳолатлари N_i ва N_k нисбатда банд қилинган ушбу системани электромагнит майдонга жойлаштирсак, Эйнштейн кўрсатганидек, спонтан ўтишлар билан бир қаторда системада мажбурий ўтишлар ҳам юз бериши мумкин. Умуман, мазкур системани электромагнит майдон билан мувозанатли ўзаро таъсирлашувида қуйидаги уч хил ўтишлар ўринли бўлади:

1. Системада пастки энергия E_i ҳолатдан юқори энергия E_k ҳолатга ўтиш. Ушбу ўтишда атом $h\nu_{ik} = E_k - E_i$ энергияли фотон ютади, шунинг учун у резонанс ютилиш деб юритилади, яъни частотаси сатҳлар фарқига тенг энергияни характерловчи фотонгина ютилади. Мазкур жараён-

ни символик равишда атомни ёки молекулани A , фотонни $h\nu$ орқали белгиласак,

$$A + h\nu_{i\kappa} = A^*$$

кўринишда ёзиш, 91-а расмдагидек шартли тасвирлаш мумкин ва уни, одатда, мажбурий ўтишларга киритилади. Бу хил мажбурий ўтишлар сони dt вақт ичида

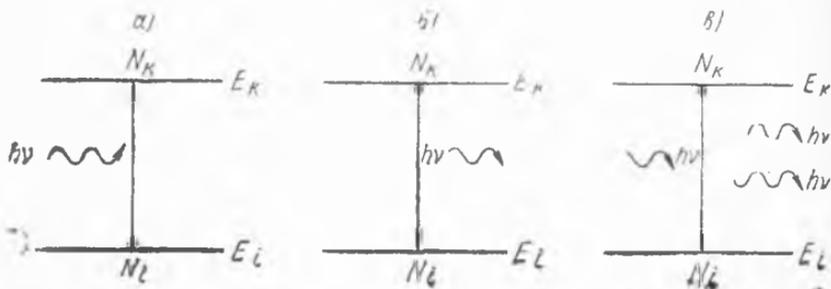
$$dN_{i\text{ мажб.}} = N_i B_{i\kappa} \rho(\nu_{i\kappa}) dt \quad (9.46)$$

га тенг бўлади. Бу ерда $\rho(\nu_{i\kappa})$ — электромагнит майдоннинг ўтиш частотасига тенг энергиясининг бирлик ҳажмдаги спектрал зичлиги; $B_{i\kappa}$ — ёруғлик кванти ютилишини характерловчи ўтиш эҳтимоллигининг Эйнштейн коэффициенти.

2. Системанинг уйғотилган ҳолатидан асосий ҳолатига (E_1) спонтан ўтиши. Символик равишда

$$A^* = A + h\nu_{\kappa i}$$

кўринишда ёзилади ва 91-б расмдагидек тасвирланади. dt вақт ичида юз берган спонтан ўтишлар сони (9.45) орқали ифодаланади. Спонтан ўтишлар ташқи майдон билан боғлиқ эмас. Спонтан ўтишларнинг табиати тугал равишда аниқланмаган. Спонтан ўтишларнинг энг характерли томони ушбу ўтишларда система атомларининг нурланишини бир-бирлари билан боғлиқ бўлмаган ҳолда юз бериши ва айрим спонтан ўтишларнинг эса вақтга боғлиқ эмаслигидир. Шунинг учун бу хил ўтишларда нурланаётган электромагнит тўлқин ихтиёрий равишда қутбланган ва йўналган



91-расм. Квант ўтишлар: а — резонанс ютилиш; б — спонтан нурланиш; в — мажбурий нурланиш.

бўлади, яъни қисқача айтганда, спонтан нурланиш ташқи майдонга нисбатан нокогерентдир. Иккинчи томондан, спонтан ўтишлар эҳтимоллиги ҳам (9.45) га кўра, ташқи майдонга боғлиқ эмас, фақат вақтга боғлиқ, чунки атом уйғонган ҳолатда қанча узоқ вақт бўлса, спонтан ўтиш эҳтимоллиги шунча катта.

3. Атомларнинг уйғотилган ҳолатдан асосий ҳолатга ташқи майдон таъсирида мажбурий ўтиши. Бу ўтишларда атом $h\nu_{ik}$ фотон таъсирида қўшимча $h\nu_{ki}$ фотон чиқаради. Бу хил мажбурий ўтишлар индукцион ўтишлар деб ҳам юритилади ва символик равишда

$$A^* + h\nu_{ki} = A + h\nu_{ki}$$

кўринишда ёзилади ҳамда 91-б расмдагидек тасвирланади. dt вақт ичида юз берадиган мажбурий индукцион ўтишлар сони

$$dN_{\text{мажб.}} = N_{\kappa} B_{\kappa i} \rho(\nu_{ki}) dt \quad (9.47)$$

га тенг.

Индукцион ўтишларнинг энг муҳим хусусияти ушбу жараёнда вужудга келадиган иккиламчи фотонни унинг вужудга келишига сабабчи бирламчи фотон билан йўналиш, қутбланиш, частота жиҳатдан айнанлигидир. Қисқача айтганда, ташқи майдон таъсирида мажбурий вужудга келган фотон шу майдонга нисбатан монохроматик ва когерентдир. Шундай қилиб, мажбурий индукцион нурланиш муҳитда жуда кичик фазовий бурчак бўйича тарқалаётган ёруғлик оқимининг интенсивлигини оширади. Индукцион нурланишнинг худди шу хусусияти оптикавий квант генераторлар — лазерларнинг физикавий асосини ташкил этади.

Жараёнларнинг ўзаро статистик боғланишда бўлмаслигига биноан dt вақт ичида спонтан ва мажбурий индукцион ўтишлар сонининг йиғиндиси шу вақт ичида $\kappa - i$ га ўтишларнинг тўла сонини беради.

$$dN_{\text{сп}} + dN_{\text{мажб.}} = [A_{\kappa i} + B_{\kappa i} \rho(\nu_{ki})] N_{\kappa} dt$$

У ҳолда k (юқори) сатҳнинг тўлдирилганлиги dt вақт ичида

$$dN_{\kappa} = N_i B_{i\kappa} \rho(\nu) dt - [A_{\kappa i} + B_{\kappa i} \rho(\nu_{ki})] N_{\kappa} dt \quad (9.48)$$

га ўзгаради. Шу вақт ичида i -сатҳнинг тўлдирилганлиги эса

$$dN_i = -N_i B_{ik} \rho(\nu)_{ik} dt + [A_{ki} + B_{ki} \rho(\nu_{ki})] N_k dt \quad (4.49)$$

га ўзгаради. (9.48) ва (9.49) тенгламалар кинетик тенгламалар дейилади. Кинетик тенгламаларда ушбу жараённинг квант табиати бевосита акс эттирилмаган. (Квант табиат A_{ki} , B_{ik} , B_{ki} коэффициентлар ифодасида намоён бўлади. Коэффициентларнинг ифодаси эса квант электродинамикасида келтирилиб чиқарилади.)

Эйнштейн коэффициентлари ўртасидаги муносабатни аниқлаш учун атомлар системасини ташқи майдон билан термодинамик мувозанати шартидан фойдаланамиз. Термодинамик мувозанат шароитида сатҳларнинг атомлар билан тўлдирилганлиги, яъни сатҳлар зичлиги вақт бўйича ўзгармаслиги керак, яъни $dN_i/dt = 0$ ва $dN_k/dt = 0$. Бу шарт квант механикасида деталь мувозанат принципи номи билан аталади. Квант механикасининг деталь мувозанат принципига биноан бирор икки ҳолат ўртасида бир томонга ўтиш мавжуд бўлса, иккинчи томонга ҳам ўтиш мавжуд ва бу ўтишларнинг эҳтимоллиги тенг.

Шундай қилиб, (9.48) ёки (9.49) дан

$$A_{ki} N_k + \rho(\nu_{ki}) B_{ki} N_k = \rho(\nu_{ki}) B_{ki} N_i. \quad (9.50)$$

Агар спектрал зичлик учун $k \rightarrow i$ га ва $i \rightarrow k$ га ўтиш частоталарининг тенглигини эътиборга олсак, яъни $\nu_{ik} = \nu_{ki} = \nu$, охириги ифодадан қуйидаги нисбат келиб чиқади:

$$\frac{N_k}{N_i} = \frac{B_{ik} \rho(\nu)}{A_{ki} + B_{ki} \rho(\nu)}$$

Больцман тақсимотига биноан эса термодинамик мувозанат шароитида уйғотилган ҳолатдаги молекулалар ёки атомлар сони

$$N_k = N_i e^{-\frac{\Delta E_{ki}}{\kappa T}}$$

нисбатда бўлади. Охириги икки муносабатдан майдон энергиясининг спектрал зичлиги учун

$$\rho(\nu) = \frac{A_{ki}}{B_{ik} e^{\frac{\Delta E_{ki}}{\kappa T}} - B_{ki}}$$

келиб чиқади. Спектрал зичлигининг ν бу ифодасини (1.19) ни ҳисобга олган ҳолда, Планк формуласи (1.24)

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

билан таққослаб, Эйнштейн коэффициентлари ўртасидаги боғланишни аниқлаймиз:

$$A_{ki} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} B_{ki}, \quad (9.51)$$

$$B_{ik} = B_{ki} = B. \quad (9.52)$$

Охирги муносабат температуранинг чексизга интилишида нурланиш спектрал зичлигининг ҳам чексиз ўсиши шартдан келиб чиқади. Одатда, спонтан ўтиш эҳтимоллиги A_{ki} экспериментал аниқланадиган доимий катталиқ бўлгани учун уни ҳисоблашларда атом доимийси сифатида олинади. Ҳақиқатан ҳам, агар ташқи майдон бўлмаса, спонтан ўтишлар ҳисобидагина юқори сатҳдаги атомлар сони камаяди:

$$dN_k = -A_{ki} \cdot N_k dt$$

Бундан вақтнинг t momentiда юқори сатҳдаги атомлар сони

$$N_k = N_{k_0} e^{-A_{ki} t}$$

га тенг. Бу ерда N_{k_0} — вақтнинг $t = 0$ бошланғич momentiда юқори сатҳнинг атомлар билан тўлдирилганлиги. Энди N_k орқали спонтан ўтиш эҳтимоллиги A_{ki} билан қуйидагича боғланган спонтан нурланиш спектрал чизигининг интенсивлигини, яъни спонтан нурланиш қувватини аниқлаш мумкин:

$$I_c = A_{ki} N_k h \nu_{ki} = I_{c_0} e^{-A_{ki} t} = I_{c_0} e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (9.53)$$

Бу ерда $I_{c_0} = A_{ki} N_k h \nu_{ki}$ — вақтнинг $t = 0$ momentiдаги нурланиш интенсивлиги. $\tau = 1/A_{ki}$ атомнинг уйғонган ҳолатда яшашининг ўртача вақти. τ спонтан нурланишнинг сўниш вақтига тенг. A_{ki} ва τ катталиқлар уйғотилган квант системасини ўзининг асосий мувозанат ҳолатига ўтишида

спонтан нурланиш интенсивлигининг сўниш характериға қараб экспериментал йўл билэн аниқланади.

Шу нарсани таъкидлаш керакки, лазерлар учун муҳит тайёрлашда спонтан нурланишнинг сўниш вақти алоҳида аҳамият касб этади.

68- §. Лазерлар

И н в е р с и о н м у ҳ и т л а р. Муайян ν частотали электромагнит тўлқин тарқалаётган ҳажм квант ўтишлар натижасида шу частотали энергия квантини ютиши ёки чиқариши мумкин бўлган молекулалар ёки атомлар билан тўлдирилган дейлик. У ҳолда ушбу ҳажм бўйича тарқалаётган электромагнит нурланишнинг интенсивлиги спонтан нурланиш, мажбурий ютилиш ва мажбурий индукцион нурланиш ҳисобига ўзгаради. (dt вақт ичида уйғотилган k -сатҳ билан асосий i -сатҳлар орасидаги $(E_k - K_i)/h = \nu$ частотали нурланиш чиқариш ёки ютиш билан юз берадиган ўтишлар сони (9.46), (9.45) ва (9.47) формулалар орқали аниқланади). Электромагнит нурланиш интенсивлигининг нисбий ўзгаришини характерловчи $\kappa(\nu)$ коэффициентни аниқлайлик. Агар муҳитда тарқалаётган стационар ёруғлик оқимини z ўқи бўйлаб йўналган десак, спонтан нурланиш ҳиссасини ҳисобга олмаган ҳолда, ёруғлик дастаси интенсивлигининг спектрал зичлигини z ўқи бўйича ўзгариши учун

$$dI_\nu/dz = \kappa(\nu) I_\nu = P_{\nu}, \quad (9.54)$$

яъни

$$I_\nu = I_{0\nu} \exp[\kappa(\nu) \cdot z]$$

формулани ёзишимиз мумкин. Бу ерда $P_{0\nu}$ — мажбурий ўтишлар ҳисобига бирлик ҳажмда ажралиб чиқаётган тўла нурланиш қувватининг спектрал зичлиги. Интенсивликни кучайтириш коэффициенти

$$\kappa(\nu) = B_{ik}(\nu) (N_k - N_i) \frac{n \nu_{ki}}{c} \quad (9.55)$$

га тенг. Бу ерда $B_{ik}(\nu)$ — спектрал чизиқ шаклига боғлиқ спектрал Эйнштейн коэффициенти.

$$\Delta N = N_k - N_i \quad (9.56)$$

айрма инверсион тўлдирилганлик дейилади.

Атомларнинг сатҳлар бўйича Больцман тақсимооти термодинамик мувозанат ҳолатида сатҳлар тўлдирилганлигини абсолют температура (T) орқали тугал аниқлайди. $N_k = N_0 e^{-E_k/kT}$, $N_i = N_0 e^{-E_i/kT}$, яъни ҳар доим $N_i > N_k$, чунки $E_k > E_i$. У ҳолда (9.55) га кўра $\kappa(\nu)$ манфийдир. Шунинг учун, (9.54) га биноан, термодинамик мувозанат ҳолатидаги система орқали ўтаётган электромагнит нурланиш ютилади, яъни сўнади.

Интенсивликнинг ортиши учун термодинамик мувозанатни шундай бузиш керакки, термодинамик мувозанат ўринли бўлмаган системанинг камида бир жуфт сатҳлари учун инверсион тўлдирилганлик мусбат, яъни пастки сатҳларнинг тўлдирилганлиги юқорисига нисбатан кам бўлсин. У ҳолда бундай муҳитда худди шу сатҳларни характерловчи частотада нурланиш кучаяди. Бу хил муҳитни *инверсион ёки манфий температурали муҳит* дейилади. Чунки

$$\frac{N_k}{N_i} = e^{-\frac{E_k - E_i}{kT}}$$

нисбатда $N_k > N_i$ бўлиши учун $\Delta E = E_k - E_i > 0$ сабабли, $T < 0$ бўлишини талаб қилади. Албатта, $T < 0$ бўлиши мумкин эмас, шунинг учун муҳитни, шартли равишда, манфий температурали деймиз.

Ҳозирги вақтда турли муҳитларда сатҳларнинг инверсион тўлдирилганлигига (зичлигига) эришишнинг ҳар хил йўллари, методлари маълум.

О п т и к а в и й р е з о н а т о р. Лазер ишлашининг асосида мажбурий индукцион нурланиш ҳисобига муҳитда ёруғликни кучайтириш ётади. Ёруғликни кучайтириш ёки генерациясига эришиш учун кучайтирувчи, яъни бошқача айтганда, актив муҳит оптикавий резонаторга жойлаштирилади. Оптикавий резонатор актив муҳитнинг икки томонидан қўйилган текис ёки сферик кўзгудан иборат бўлади. Одатда, бир томонига ярим шаффоф кўзгу ўрнатилади. Оптикавий резонаторда лазер нурланишининг асосий хусусиятларига—юқори даражада йўналтирилганлигига, когерентлигига, монохроматиклигига эришилади. Геометрик оптика нуқтан назаридан кўзгулар ёруғликни кўп марта актив муҳит орқали ўтишини таъминлайди. Инверсион

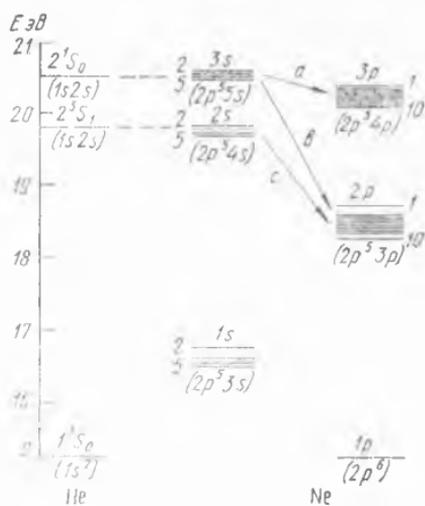
муҳитнинг кучайтириш қобилияти нурланиш тарқаладиган қатлам қалинлигига боғлиқ бўлар экан ва у нурни кўзгулардан кўп марта қайтиб муҳит орқали ўтиши билан эришилади. Иккинчи томондан, актив муҳит трубкасининг диаметрига нисбатан кўзгулар орасидаги масофанинг катталиги сабабли фақат лазер ўқи (z ўқи) билан кичик бурчак ташкил қилиб тарқалаётган нургина актив муҳитдан кўп марта ўтиши ва натижада кучайиши мумкин. Шундай йўсинда, лазер нурунинг юқори даражали йўналтирилганлиги таъминланади. Учинчи томондан, резонаторда унинг узунлиги бўйича фақат бутун сон (n) марта ётадиган электромагнит тебранишларгина мавжуд бўла олади. Ушбу тебранишларга тегишли частоталар қуйидаги формуладан аниқланади:

$$\nu_n = n \frac{c}{2L} \text{ ёки } \frac{\lambda_n}{2} = \frac{L}{n}, \quad (9.57)$$

бу ерда L — резонатор кўзгулари орасидаги масофа, n — бутун сон. Шундай қилиб, резонатор майдонини унинг бирор резонанс частотасида турғун тўлқин ёки бир-бирига қараб резонатор ўқи бўйича ҳаракатланаётган икки тўлқин сифатида тасаввур қилиш мумкин. Агар бу тўлқинлар частотаси актив муҳитнинг кучайтириш соҳасига, яъни атом ўтишлари частотасига тенг бўлса, тўлқинларнинг муҳит орқали ўтишида кучайиши кузатилади.

Газли лазернинг актив қисми. Газли лазерларнинг актив қисми кучайтирувчи модда (газ) билан тўлдирилган узунлиги бир неча сантиметрлардан бир неча метрларгача, диаметри 1 мм дан бир неча сантиметрларгача бўлган шиша ёки кварц трубкадан иборат. Трубканинг учлари электродлар вазифасини бажарувчи металл қопқоқ билан маҳкамланган. Газдан иборат актив муҳит атомларининг пастки i -сатҳи атомлар билан электрон тўқнашуви ёки бошқа сорт атомлар тўқнашувида уйғониш энергияси бериш йўли билан уйғотилади. Газларнинг бир сорт атомларидан уйғониш энергиясини иккинчи сорт атомларга берилиши бу икки сорт атомлар энергетик сатҳларининг бир-бирига етарлича яқин бўлганидагина мумкин. Электрон тўқнашиши билан уйғотиш электр разряд йўли билан амалга оширилиши мумкин.

Актив муҳити гелий—неон газидан иборат бўлган лазерда инверсион тўлдирилиш механизминини кўрамыз. 92- расмда He ва Ne учун пастки энергетик сатҳларининг схемаси келтирилган. Сатҳлар тагидаги қавслар ичида тегишли атом электрон конфигурацияси кўрсатилган. ns - ва np - сатҳлар энергиянинг камайиши тартибида номерланган. Ne атомининг ns -сатҳлари тўрттадан сатҳчаларга, np -сатҳлари эса ўн тадан сатҳчаларга ажралган бўлади. Сатҳларнинг бу ажралишини но- зик структура билан боғлиқ.



92- расм. Гелий ва неон атомларининг энергетик сатҳлари.

Ne атомининг 2^1S_0 ва 2^3S_1 сатҳлари метастабил бўлиб, катта (10^{-3} сек) яшаш вақтига эга, чунки бу сатҳлардан нурланиш чиқариш йўли билан спонтан ўтишлар квант танлаш қондалари орқали тақиқланган. Шу сабабдан разряд шаронтида электронларнинг He атомлари билан тўқнашуви орқали ушбу метастабил сатҳларни инверсион тўлдирилиши амалга оширилади.

Ne нинг метастабил 2^1S_0 ва 2^3S_1 сатҳлар энергияси Ne нинг $3s$ ва $2s$ сатҳларига етарлича яқин. Шу сабабдан, уйғотилган Ne атомларидан уйғотилмаган Ne атомларига резонанс равишда энергия узатиш эҳтимоли мавжуд. Ушбу энергия узатилиши рўй берадиган тўқнашувдан сўнг Ne атоми асосий ҳолатга, Ne атоми эса асосий ҳолатдан $3s$ ва $2s$ ҳолатларга ўтади. Шундай қилиб, мазкур сатҳларнинг яқинлигидан, He ва Ne атомларининг ўзаро ушбу иккинчи тур деб аталувчи тўқнашувларида уйғотилиш энергияси узатилиб неоннинг $3s$ ва $2s$ сатҳларида ҳам $2s \rightarrow 2p$ ва $3s \rightarrow 3p$ ўтишларга нисбатан инверсион тўлдириш вужудга келади. Расмда уйғотиш энергиясининг узатилишини узлукли чизиқ орқали тасвирланган.

Неон атомининг $s \rightarrow p$ ўтишлари эса a , b , c ҳарфлари орқали белгиланган.

a ва b чизиклар учун $3s$ умумий юқори сатҳ бўлганлиги учун a чизик тўлқинининг генерацияси b чизик тўлқинининг генерацияси ривожланишига тўсқинлик қилади. b чизикқа тааллуқли тўлқинни ривожлантириш учун инфрақизил a нурланишни ютувчи бирор воситадан, масалан, инфрақизил a нурланишни ютувчи шиша дарчали разряд трубкасида фойдаланиш мумкин. Шундай қилиб, $3s$, $2s \rightarrow 2p$ ўтишлар ривожлантирилади. Бу ўтишлардаги нурланиш тўлқин узунлиги 0,6 дан 5,4 мк гача ўзгарадиган спектрни ташкил этади. Улардан айниқса, 11530 Å тўлқин узунликли чизик интенсивдир.

Неон атомининг $1s$ сатҳи лазер нурланишининг интенсивлигини пасайтиради. Лазер ишлаши учун юқори сатҳни эффектив тўлдирилишигина талаб қилинмасдан, пастки сатҳларнинг ҳам тез бўшатилиши зарур. Гелий-неон лазерда неоннинг пастки $2p$ ва $3p$ сатҳлари асосан $1s$ сатҳга спонтан ўтишлар натижасида бўшатилади. Ушбу спонтан ўтишларнинг эҳтимоллиги анча катта. Масалан, $2p$ сатҳларнинг яшаш вақти $\sim 2 \cdot 10^{-8}$ сек. Аммо, $1s$ сатҳларнинг (тўртта) иккитаси метастабил, қолганлари эса жуда секин ўтишлар билан бўшатилади. Шундай қилиб, $2p$ ва $3p$ сатҳлардан спонтан нурланишларни $1s$ сатҳдаги атомлар билан ютилиши натижасида $2p$ ва $3p$ сатҳларда қўшимча тўпланиш вужудга келади. (Неон атомида p -сатҳларнинг асосий сатҳга ($2p^6$ га) дипол ўтишлар танлаш қоидасига кўра тақиқланган).

Неон атомларининг $1s$ сатҳдан $2p$ ва $3p$ сатҳларга электрон уйғотилишининг мумкинлиги бу p -сатҳларни янада кўп тўлдирилишига олиб келади. Шунинг учун разряд токини маълум чегарадан ортиб кетиши лазер нурининг генерациясини узилишига ҳам олиб келиши мумкин. Одатда, $1s$ сатҳларнинг бўшатилиши $1s$ ҳолатдаги неон атомларининг разряд трубкаси деворлари билан тўқнаш келишида юз беради. Шу сабабдан трубка диаметрини кичик танлаш зарур. Умуман, гелий-неон газли лазер эффектив ишлаши учун разряд токини, аралашманинг умумий босимини, аралашма таркибий қисмлари нисбатининг ҳамда разряд трубкаси диаметрининг оптимал қийматлари экспериментал тапланади.

Биз юқорида уч ишчи сатҳларга асосланган лазерларга мисол кўрдик. Умуман, мажбурий индукцион ўтишларга асосланган ҳолда нурланиш интенсивлигининг спектрал кичик соҳада кучайтириш ҳамда спектрнинг микротўлқин ва кўринувчи соҳаларида нурланиш генерацияси устида 1954 йилдан бошлаб кенг кўламда тадқиқотлар олиб борилади. Бинобарин, бу хил нурланиш кучайтиргич асбобларга *квант генераторлари* деб аталади. Спектрнинг сантиметрлар соҳасидаги квант генераторлари *мазерлар* деб аталади. Мазер сўзи инглизча «микротўлқинларни мажбурий нурланиш ёрдамида кучайтириш» деган сўзларнинг биринчи ҳарфларидан ташкил топган. Мазер типидagi квант генераторлари биринчи марта 1954 йилда совет физиклари Н. Г. Басов, А. М. Прохоров ва Ч. Таунс бошчилигидаги бир гуруҳ америкалик олимлар томонидан яратилди. Уларга 1964 йилда Нобель мукофоти берилган. Биринчи яратилган генератор уйғотилган аммиак молекуласининг $\lambda = 1,27$ см тўлқин узунлигидаги мажбурий нурланишига асосланган эди. 1960 йилда эса Меман (США) томонидан оптикaviй диапазонда ишловчи квант генератори—лазер яратилди (лазер сўзи «ёруғликни мажбурий нурланиш ёрдамида кучайтириш», деган инглизча сўзларнинг биринчи ҳарфларидан тузилган). Бу лазер ёқут кристаллининг $\lambda = 6943 \text{ \AA}$ тўлқин узунлигидаги мажбурий нурланишига асосланган.

Ишлаш усулига қараб лазерларни импульсли ва узлуксиз режимда ишловчи манбаларга ажратилади. Узлуксиз ишловчи лазерларда ишчи модда сифатида газлар, жумладан, биз юқорида кўрган гелий-неон аралашмасидан фойдаланилади. Бу каби лазерлар ниҳоятда ўткир йўналишли ва монохроматик нурланиш беради. Бинобарин, яхши газ лазерларида ёруғлик частотаси секундига фақат бир неча ўн герцга ўзгаради. Агар оптикaviй частоталарни 10^{15} герц соҳада ётишини эътиборга олсак, газли лазерларнинг монохроматиклиги ақл бовар қилмайдиган даражада юқоридир.

ҚАТТИҚ ЖИСМЛАР

Қаттиқ жисмлар зич жойлашган атомлар, ионлар ва молекулалардан иборат тузилишга эга. Модданинг қаттиқ жисм ҳолати шу таркибий зарраларнинг бир-бирига яқин масофаларда улар ўртасида вужудга келадиган ўзаро таъсир хусусиятлари билан боғлиқ. Бинобарин, модданинг қаттиқ жисм каби тузилишга эга бўлиши таркибий зарралари ўртасида икки хил умумий характерга эга кучлар: зарраларнинг бир-бирдан узоқлашишига қаршилик кўрсатувчи тортишиш ҳамда уларнинг бир-бирига яқинлашишига тўсқинлик қилувчи итарилиш кучларининг мавжудлигини тақозо қилади. Чунончи, қаттиқ жисм зарралари ўртасида умумий характерга эга бўлган ион, ковалент, Ван-дер-Ваальс ҳамда металл ва водород боғланиш кучлари мавжуд. Мазкур кучларнинг ҳаммаси ҳам электростатик табиатга эга.

Модданинг агрегат ҳолати тушунчаси, қатъий айтганда қаттиқ жисмларнинг муҳим группасини ҳосил қилувчи кристалларгагина тааллуқлидир. Кристалларда таркибий зарраларнинг маълум катта соҳа бўйича қатъий тартибда жойлашиши кузатилади. Қаттиқ жисмнинг аморф ҳолати ҳам мавжуд. Аморф ҳолатда, худди суюқликлардагидек, жисмнинг таркибий зарраларини катта соҳа бўйича эмас, фақат кичик соҳадагина аниқ жойлашиши кузатилади. Демак, аморф жисмларда таркибий тузилишнинг я қ и н т а р т и б и амалга оширилади. Бунга аксинча, кристаллар тузилиши яқин тартибга ҳам, о л и с т а р т и б г а ҳам эга. Модомики, аморф жисмларда олис тартиб йўқ экан, унинг таркибий зарралари (молекулалари) ўртасидаги боғланиш қиймат жиҳатдан ҳар хил кучда вужудга келади, натижада улар аниқ эриш температурага эга бўлмайди. Чунончи бундай қаттиқ жисм қиздирилганида энг кучсиз

боғланишлар пастроқ температурада узилади, шунинг учун аморф жисм температурасини аста-секин оширилишида аввал юмшаш, кейин эриш юз беради.

Қаттиқ жисмларнинг кристалл тузилишининг характери асосан боғланиш кучлари характери билан аниқланади. Боғланишларнинг мавжуд бешта асосий турига мос равишда беш хил кристалл тузилиш: ион боғланишнинг ионли кристалл панжараси; Ван-дер-Ваальс кучларининг молекуляр ёки қутбланган кристалл панжараси; ковалент боғланишнинг атомлардан тузилган панжараси; металл боғланишнинг металл панжараси ва, ниҳоят, водород боғланишнинг кристалл панжараси мавжуд. Қаттиқ жисмларнинг кристалл панжараси деганимизда, кристалл бўйлаб таркибий зарраларнинг даврий қайтарилувчи тўғри жойлашишини тушунамиз. Кристалл панжара, боғланиш кучларининг туридан қатъи назар, бу кучларнинг масофага нисбатан тортишиш ёки итарилиш характери оқибатида таркибий зарраларнинг фақат ўзаро маълум масофалардагина вужудга келадиган турғун мувозанат ҳолатини тасвирлайди.

69- §. Қаттиқ жисмларнинг кристалл тузилиши

Ион боғланиш энергияси. Атомларнинг электрон бериши ва олиши натижасида мусбат ва манфий зарядланиши орқали ион боғланишнинг вужудга келиши ҳақида юқорида қисман танишган эдик. Ушбу схема кристаллар учун ҳам, молекулалар учун ҳам ўринли. Ион боғланиш бир-биридан r масофада жойлашган ионнинг электростатик тортилиш энергияси

$$V = \frac{B}{r^n} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

билан характерланади. Бу ерда B ва n — доимийлар, чунончи $n > 1$. Ионларнинг ўзаро мувозанат ҳолати потенциал энергия минимуми орқали аниқланади:

$$\frac{dV}{dr} = 0.$$

У ҳолда потенциал энергия учун

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left(1 - \frac{r_0^{n-1}}{nr^{n-1}} \right) \quad (10.1)$$

ифодага келамиз. Бу ерда r_0 — молекулада ионлар орасидаги мувозанат масофа. (10.1) формула ион боғланишли молекуланинг потенциал энергиясини ифодалайди. Молекуланинг мувозанат ҳолат потенциал энергияси

$$V_{\text{мув.}}(r_0) = - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

ифодасидан N та молекуладан ташкил топган кристалл панжаранинг потенциал энергиясини аниқлаш мумкин:

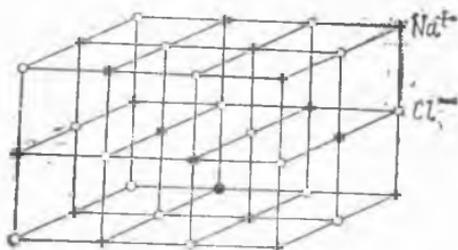
$$V_{\text{потен.}} = - NA \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right). \quad (10.2)$$

Бу ерда A — Маделунг доимийси деб аталади. Маделунг доимийсининг (10.2) формуладаги таърифига биноан, у кристалда муайян молекулани қўшни молекула билан ўзаро таъсир энергиясини ҳисобга олади. n ни ион кристалларининг сиқилувчанлигини кузатиш йўли билан аниқлаш мумкин.

(10.1) ёки (10.2) потенциал энергиянинг итарилиш энергияси қисми (мусбат ҳад) ионлар орасидаги масофанинг n - даражасига тескари пропорционал бўлиб, Паули принципи таъсири сабабли вужудга келади. Ҳақиқатан ҳам, молекула ёки кристалл панжарада қарама-қарши ишорали ионларнинг бир-бирига жуда яқин келишига Паули принципина йўл қўймайди. Чунки атомларнинг бир-биринга жуда яқин келишида уларнинг тўлган қобиқларидаги электронлар сони ошиб кетиши юз бермаслиги учун ортиқча электронлар ядролардан узоқроқ юқори ҳолатларга ўтади. Натижада ядроларнинг эффектив заряди ортиб итарилиш вужудга келади.

Ион боғланишли кристаллар. Ион боғланишли кристаллар аорганик бирикмаларнинг кўпчилигини ташкил этади. Жумладан, ош тузи NaCl ва KJ ион кристалларига типик мисол бўла олади. Бу каби кристалларда ва уларнинг молекулаларида ионларнинг электрон қобиқлари инерт газ атомларининг электрон қобиқларига ўхшаш. Биз юқорида айтганимиздек, кристаллардан айрим молекулаларни ажратиб олиш мумкин эмас. Кристаллни мусбат ва манфий ионларнинг алмашилиб қайтариловчи (такрорланувчи), зич жойлашиши тарзида қараш керак. Ионли кристалларнинг бу хил тузилиши қўш-

ни қарама-қарши ишорали ионлар ўртасида мумкин бўлган максимал электростатик тортилишнинг вужудга келиши билан амалга оширилади.



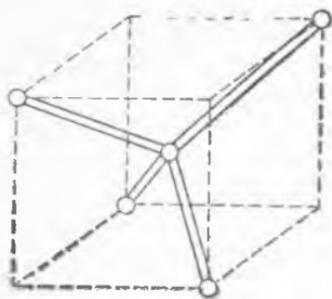
93- расм. NaCl кристалл панжараси.

93- расмда NaCl нинг кристали тасвирланган. Натрий ионлари ўзлари ҳосил қилган кубларнинг учларида ва ён томонларининг ўртасида жойлашган. Хлор ионлари ҳам худди шундай ёқлари марказлашган куб панжара ҳосил қилади. Шундай қилиб, NaCl панжараси бир-бирига киритилган иккита ёқлари марказлашган куб панжаралардан тузилган. Ушбу тузилишида ҳар бир Na⁺ иони ўзига яқин жойлашган олтига Cl⁻ ионлари билан ўралган ва уларга кучли электростатик тортилади. Na⁺га энг яқин Na⁺ (5,62Å) ионлари ўн иккита бўлиб хлор ионларидан узоқроқ жойлашган. Улар ўртасида итарилиш мавжуд. Лекин, бу ўн иккита Na⁺ ионларининг ҳар бири ўз навбатида энг яқин Cl⁻ ионларига тортилади. Ҳар бир атомга тўғри келадиган NaCl молекуласининг боғланиш энергияси NaCl кристали учун худди шундай атомлар боғланиш энергиясидан 1,5 марта кичикдир. Бу натижани (10.2) дан осон келтириб чиқариш мумкин.

Ковалент боғланишли кристаллар. Ковалент боғланиш табиати ҳақида ўтган бобда айтилганларнинг ҳаммаси ковалент кристаллар учун ҳам ўринли. Ковалент боғланишли кристалларни уларни ташкил этган атомлари ўртасида электронларни умумлаштирилишида ҳосил бўладиган алмашинув ўзаро таъсир вужудга келтиради. Бундай кристалл панжара тугунларида атомлар жойлашган бўлади. Атомлари соф ковалент боғланган кристалга типик мисол сифатида олмосни олиш мумкин. 94-расмда олмос кристаллининг тузилиши тасвирланган. Расмда тасвирланган тетраэдрик боғланишли кубик тузилиш ҳар бир углерод атомининг тўртта бошқа углерод атомлари билан ковалент боғланиш ҳосил қила олиши натижасида вужудга келади.

Олмосда ҳар бир боғланишнинг узунлиги 1,54 Å га тенг.

Соф ковалент боғланишли кристаллар нисбатан кам учрайди. Буларга олмосдан ташқари, кремний, германий, кремний карбиди кристаллари киради. Кремний карбидида (SiC) ҳар бир атом тўртта бошқа сорт атомлар билан ўралган бўлиб, олмос каби, тетраэдрик тузилиш ҳосил қилади.



94-расм. Олмос кристалл панжарасида углерод атомларини ўзаро ковалент боғланиши.

қилган ҳар бир атомга энг яқин бўлган атомларнинг умумий сонини билдиради. Одатда, катта координацион сон кристалнинг ион боғланишли табиатидан дарак беради. Масалан, NaCl каби ҳар қандай ёқлари марказлашган куб тузилишга эга бўлган кристалнинг координацион сони олтига тенг. Олмос туридаги ковалент боғланишли кристалларнинг координацион сони тўртга тенг.

Кўп ҳолларда кристаллар бир неча боғланишга эга бўлади. Масалан, AgCl тузилиш жиҳатдан NaCl га ўхшаш бўлса-да, оралиқ характердаги боғланишга эга.

Олмосда, NaCl даги каби, углерод атомларининг ҳаммаси бирдай бир-бири билан боғланган. Ҳар бир C атоми тетраэдрнинг марказида жойлашган. Лекин, яхлит олмос кристаллини ҳам NaCl каби улкан молекула сифатида қараш мумкин эмас, чунки молекуланинг характерли томони— уни химиявий хусусиятларини ўзгартирмасдан таркибий зарраларга ажратиб бўлмайди. Олмос ёки NaCl кристаллининг ўлчамларини ўзгартиришимиз билан уларнинг химиявий хусусиятлари ўзгармайди.

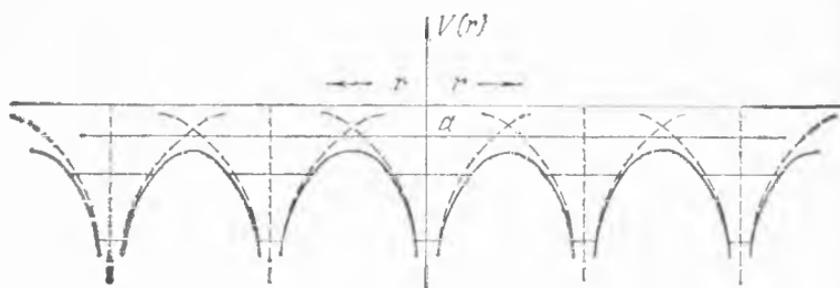
Металл боғланиш. Ион боғланиш нуқтаи назаридан ҳам, ковалент боғланиш орқали ҳам тушунтириб бўлмайдиган металл боғланишлар соф ҳолда ҳамма металлларда амалга оширилган. Биламизки, ион боғланиш металлларни галлоидларга электрон бериши билан юзага келади. Равшанки, бундай боғланиш иккита айнан атомлар ўртасида ҳосил бўлмайди. Иккинчи томондан, ўзларининг қўшни атомлари

Ҳамма ковалент боғланишли кристаллар қаттиқ, жумладан, олмос жисмлар ичида энг қаттиқ эканлигини биламиз. Мазкур кристалларнинг эриш температураси юқори ва оддий суюқликларда эримайди. Ковалент боғланишли кристалларнинг боғланиш энергияси 3 дан 5 эВ атом гача бўлади.

Металмас кристалнинг ион ёки ковалент боғланишини кристалнинг *координацион сони* характерлайди. Кристалнинг координацион сони уни ташкил

билан валент электронларини умумлаштириш орқали ҳосил бўладиган ковалент боғланиш ҳам металл кристаллини тушунтира олмайди. Масалан, мис атоми битта валент электронга эга ва шу валент электрон орқали бошқа битта мис атоми билан валент боғланиш ҳосил қилиши мумкин. Лекин мис кристалл панжарасида ҳар бир атом ўн иккита қўшни атомлар билан ўралган. Бу ҳол фақат металл боғланиш деб аталувчи боғланиш асосида тушунтирилади. Ушбу боғланиш табиатини водород ва литий атомларини ўзига ўхшаш атомлар билан боғланиш ҳосил қилишини таққослаш билан кўрамыз. H_2 молекуласи қарама-қарши спинли иккита $1s$ электронларга эга, яъни K -қобиқ максимал мумкин бўлган электронлар билан тўлдирилган. Литий атоми ҳам худди шундай боғланиш ҳосил қила олиши мумкиндек туюлади, чунки унинг электрон конфигурацияси $1s^2 2s$. Демак, ҳар бир литий атомида $2p^6$ қобиқча бўш, яъни олтига $2p$ ҳолатлар тўлдирилмаган. Иккита литий атомининг бир-бирига яқинлашишида улар осон Li_2 молекулага ковалент боғланади. Лекин молекуланинг L -қобиғи тўлдирилмаганлиги сабабли Паули принципига қарши келмаган ҳолда янада кўпроқ литий атомлари ковалент бирикиши мумкин. Лекин литий атомларининг мумкин бўлган энг зич жойлашишида вужудга келган ҳажми марказлашган куб панжарали кристаллида битта атомга саккизта қўшни атом тўғри келади. Айни вақтда, ҳар бир атомдан фақат биттадан электронгина боғланишни вужудга келтиришда қатнашади. Шундай қилиб, ҳар бир боғланишга ковалент боғланишда тўғри келадиган иккитадан электрон ўрнига чорактадан электрон тўғри келади. Бошқача айтганда, боғланишлар ҳали тўлдирилишдан узоқ. Ҳамма металл атомлари учун бу ҳол ўринли.

Маълумки, Менделеев жадвалининг биринчи группа атомларининг ташқи электрон қобиғида фақат озгина ўринлар тўлдирилган. Ушбу қобиқдаги электронлар тўлқин функцияси тўлдирилган қобиқ электронлари функциясига қараганда фазода катта соҳага ёйилган бўлади. Атомларнинг бир-бирига яқин келишида ташқи электронларнинг бегона ядрогача масофаси ўз ядросигача масофадан кичик бўлиши ҳам мумкин. Ташқи электронларнинг ўз ядросига ва бегона ядрога яқинлашишида системанинг энергияси камайди. Лекин электроннинг кинетик энергияси камай-



95-расм. Мусбат ионлар кристалл панжарасидаги электронларнинг потенциал энергияси. Атомларнинг бир-бирига яқинлашиши билан потенциал энергиянинг юқори қисми уланиб пастлаша бошлайди.

майди. Тўла энергиянинг камайиши атомларнинг зич жойлашишида улар ўртасида тортишиш кучининг вужудга келганлиги сабабдан юз беради. Атомларнинг ушбу яқинлашишида электрон ҳаракати потенциал ўрасининг устки қисми 95-расмда тасвирланганидек бир-бирига тутшиб кетади. Натижада, боғланишда қатнашган электронлар кристалнинг ҳамма атомлари учун умумлаштирилади. Жумладан, юқоридаги мисолда, ҳар бир литий атомининг боғланишда қатнашадиган ягона электрони саккизта боғланишга тааллуқли деган эдик. Бунинг учун электрон ҳар бир боғланишда қисқа вақт бўлиши, сўнгра бошқасига ўтиши керак. Натижада, электрон ўзини қайси ионга қарашли эканлигини «унутиб» қўяди ва дастлаб ўзига қарашли бўлган атомдан мутлақо бошқа атом боғланишига ўтиб қолиши мумкин. Шундай қилиб, металда валент электронлари потенциал ўрадаги газ зарралари сингари ҳолатда бўлади. Металл боғланиш шундай вужудга келади. Потенциал ўрадаги умумлаштирилган электронларни кўпинча *электрон гази* деб атайдилар.

Ван-дер-Ваальс кучлари: Ван-дер-Ваальс кучлари ҳар қандай атомлар, молекулалар (ҳатто, инерт газ атомлари) ўртасида энг умумий кўринишдаги боғланишни вужудга келтиради. Бу кучлар таъсирида газларнинг конденсацияси, яъни суюқ ҳолатга ўтиши, суюқликларнинг қаттиқ жисмга ўтишидаги музлаши юз беради. Кўпчилик моддаларнинг бизга яхши таниш характеристикалари: ишқаланиш, сирт таранглик, қовушоқлик ва ҳоказолар Ван-дер-Ваальс кучларининг намоён бўлиш белгиларидир. Соф ҳолда Ван-дер-Ваальс кучлари химиявий боғланишлари тўйинган молекулалар (масалан: O_2 , H_2 , N_2 , CH_4 ва ҳо-

казо) ҳамда инерт газ атомлари ўртасида уларнинг суяқ ва қаттиқ ҳолатларининг вужудга келишида мавжуд. Умумий ҳолда у дисперсион, ориентация ва индукцион ўзаро таъсирларда вужудга келади.

Дисперсион ўзаро таъсир. Инерт газга кирувчи иккита гелий атомининг ўзаро таъсирини кўрайлик. Маълумки, гелий атомининг электрон зичлиги сферик симметрияли тақсимотга эга ва шунинг учун ўртача электр моменти нолга тенг. Лекин вақтнинг ҳар бир моментинда электронларнинг ҳаракати туфайли электрон тақсмоти асимметрик бўлиб, жуда тез ўзгариб турувчи электр дипол моменти мавжуд. Иккита гелий атомининг ўзаро яқинлашишида дипол моментининг ўзгариши билан боғланиш вужудга келади, бу эса ўз навбатида, ўзаро таъсир кучини юзага келтиради.

Қўшни атомларда электронларнинг мосланган ҳаракати туфайли вужудга келадиган боғланиш кучларини *дисперсион кучлар* деб аталади. Одатда, дисперсион ўзаро таъсир қуйидагича ифодаланади:

$$V_{\text{дис.}} = -\frac{3}{4} \sigma^2 \frac{E^*}{r^6} \quad (10.3)$$

бу ерда r — атомлар ўртасидаги масофа, E^* — уларнинг уйғониш энергияси, σ — қўшни атомнинг оний электр дипол моменти таъсирида атомнинг қутбланганлигини характерловчи доимий.

Қўпчилиқ молекулалар ва атомлар учун оний электр дипол моменти ($P = \sigma \mathcal{E}$) квадратининг ўрта қиймати ($\overline{P^2}$) ва қутбланувчанлик (σ) доимийси бир хил. Шунинг учун ҳам, баъзи моддаларнинг молекулалар кучлар билан характерланувчи хоссалари: зичлиги ва суяқликларнинг боғланиш иссиқлиги бир-бирига яқин.

Ориентация ўзаро таъсир. Агар молекула ўзгармас дипол моментига эга бўлса, масалан, сув молекуласи H_2O бир-бирига яқинлашишида улар ўртасида электростатик ўзаро таъсир вужудга келади. Бу ўзаро таъсир қутбли молекулалар деб аталувчи ушбу молекулаларни қатъий тартибда жойлаштиришга ҳаракат қилади, чунки бу ҳолда системанинг энергияси камаяди.

Агар молекуланинг ўзгармас дипол моментини M орқали белгиласак, паст температурада ориентация ўзаро таъсир қуйидаги ифода билан аниқланади:

$$V_{\text{ор.}} = -\frac{M^2}{2\pi \epsilon_0 r^3},$$

бу ерда ϵ_0 — диэлектрик доимий. Юқори температураларда эса

$$V_{\text{ор.}} = -\frac{M^2}{24\pi^2 \epsilon_0^2 kT} \frac{1}{r^6} \quad (10.4)$$

Индукцион ўзаро таъсир. Қутбли молекулалар нормал ҳолатда ўзгармас дипол моментига эга бўлмаган молекулаларни ҳам ўзига торта олади. Қутбли молекуланинг электр майдони қутбсиз молекуладаги қарама-қарши ишорали зарядларни силжитади ва индуктив дипол моментини вужудга келтиради.

Биринчи молекуланнинг диполи асосида вужудга келган иккинчи молекуланнинг индукцион диполи температурага боғлиқ бўлмаган ҳолда бирламчи диполга қуйидаги куч билан тортилади:

$$V_{\text{инд.}} = - \frac{\sigma M^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^6}. \quad (10.5)$$

Ушбу ўзаро таъсир индукцион ёки деформацион ўзаро таъсир дейилади.

Шундай қилиб, умумий ҳолда икки молекуланнинг бир-бирига яқинлашишида мазкур учта ўзаро таъсирларнинг ҳаммаси ҳам вужудга келиши мумкин. Умумий ҳолда, ўзаро таъсир энергияси

$$V = V_{\text{дис.}} + V_{\text{ор.}} + V_{\text{инд.}}$$

йиғиндига тенг.

Ван-дер-Ваальс кучлари ион ва ковалент боғланишларда намоён бўладиган кучларга нисбатан кўп марта кичик. Шунинг учун молекуляр (панжара тугунларида молекулалар жойлашган) кристаллларнинг эриш ва қайнаш температураси жуда паст бўлади ва уларнинг механик мустақамлиги кичик. Масалан, боғланиш энергияси қаттиқ аргон учун 0,08 эВ. атом (қайнаш температураси — 189°С); қаттиқ водород учун 0,01 эВ. атом (қайнаш температураси — 259°С) ва ҳоказо.

Водород боғланиш. Водород атомининг юқори даражада электр жиҳатдан манфий атомлар, масалан, кислород, фтор, азот, хлор ва бошқалар билан боғланиши водород боғланиш орқали юз беради. Электр жиҳатдан манфий атом боғланиш электронларини тортиб олади ва ўзи манфий зарядланади. Боғланиш электронини берган водород атоми эса мусбат зарядланади. Натижада улар ўртасида электростатик тортишиш асосида водород боғланиш вужудга келади.

Айниқса, сув молекуласи водород боғланишнинг ҳосил қилишга мойил. Сувда бирор молекуланing кислород атоми билан бошқа молекуланing водород атоми ўртасида ўрнатиладиган водород боғланиш (O—H) ўзини —δ заряди кислородда, +δ заряди водородда бўлган кичик дипол каби тутаяди. Ушбу икки (—δ, +δ) заряднинг ўзаро тортишиши водород боғланишини вужудга келтиради. Водород атомининг кичик ўлчами тортилишга янада яхшироқ имкон беради, чунки водород атоми кичиклиги тугайли кислородга яқинроқ кела олади. Сув молекуласида вужудга келадиган водород боғланиш узунлиги $r_{\text{OH}} = 2,76 \text{ \AA}$,

яъни худди шу молекуладаги валент боғланиш узунлигидан ($r_0 = 0,96 \text{ \AA}$) анча катта. Бу табиий, чунки ковалент боғланиш энергияси водород боғланиш энергиясидан тахминан бир тартибга катта.

Водород боғланиш суюқлик молекулаларининг ассоциациясини (уюшмасини) вужудга келтиради. Суюқликларнинг қовушоқлигининг қайнаш нуқтасини ҳажмининг қиздиришда аномал ошиши водород боғланиш билан боғлиқ. Масалан, агар сув молекулалари ўртасида водород боғланиш мавжуд бўлмаса, у нормал босимда +100°С эмас, балки 80°С да қайнар эди. Сувнинг қовушоқлиги эса бир тартибга паст бўлар эди. Сувни 0° С дан юқори температурагача иситишда молекулалар бир-биридан 2,76 Å масофада турган уюшмали ғовак тузилишни вужудга

келтирувчи водород боғланиш узилади. Равшанки, говак структура (музни) бузилиши сувни зичлашишига олиб келади. Иккинчи томондан, температуранинг кўтарилиши молекулаларнинг иссиқлик ҳаракатини оширади, бу эса зичликнинг камайишига олиб келади. Тажрибанинг кўрсатишича, ҳақиқатан ҳам, 0°C дан 4°C гача биринчи фактор, яъни водород боғланишларнинг узилиши билан зичликнинг ошиши катта ҳиссага эга экан. Шунинг учун температуранинг ушбу соҳасида сув зичлиги ошади. 4°C дан юқори температурада эса термик кенгайишнинг ҳиссаси катта. Натижада сувни 4°C дан юқори температураларда иситилиши зичлик камайиши билан кузатилади.

70- §. Қаттиқ жисмларга атом энергетик сатҳларининг зоналарга ажралиши

Водород молекуласи мисолида кўрдикки, атомларни бир-бирига яқинлашишида атом энергетик сатҳларининг ажралиши юз беради. Энергия сатҳларининг ушбу ажралиши хусусий ҳолдир. Умуман, бир хил системаларни улар ўртасида боғланиш пайдо бўлгунча бир-биринга яқинлаштирилса, системаларнинг эркин ҳолдаги сатҳлари энергия бўйича ажралади. Чунончи, сатҳларининг умумий сони боғланиш юз беришида ўзгармайди.

Юқорида кўрдикки, металл кристаллида электроннинг потенциал энергияси (потенциал тўсиқ қалинлиги ва баландлиги) камаяди. Айни вақтда валент электронларининг кинетик энергияси эса ортади. Металда эркин электронлар ягона системани ташкил қилиб, Паули принципига биноан ҳар бир энергетик сатҳда қарама-қарши спинли иккиталина электрон жойлашиши мумкин. Бир қарашда, масалан, литийда, бутун Li кристаллида $n = 2$ қобикда атиги ($2s^2 2p^6$) саккизта электрон жойлашиши, қолганлари эса юқори ва яна юқори сатҳларга ўтиши керакдек туюлади. Ҳақиқатан ҳам, агар саккизтадан ортиқ электрон юқори сатҳларга жойлашганларида эди, энергиянинг (кинетик) чексиз ошиши кузатилиб, кристалл бузилиб кетарди. Аслида, ҳар қайси металл атомларининг ҳамма валент энергия сатҳлари салгина ўзгаради ва улар, умумий сони ўзгармаган ҳолда, бир-бирига яқин жойлашган сатҳлардан тузилган энергетик йўллар—зоналарни ташкил этади. Умуман, агар кристалли N та атомдан тузилган десак, ҳар бир атомнинг эркин ҳолатдаги сатҳи кристалда N марта қайтарилади. Бошқача айтганда, эркин атомнинг ҳар бир сатҳи кристалда N каррали айниган бўлади. Буни баъзан

Ғрин алмашинув айниши деб юрнтилади. Атомлар бир-бирига етарлича яқинлашганида N каррали айниш йўқолади, атом сатҳи N тага ажралади. Агар эркин атом сатҳи даставвал $(2l + 1)$ каррали айниган бўлса, кристалда бир-бирига жуда яқин жойлашган $N(2l + 1)$ та сатҳчаларга ажралади. Жумладан, ns сатҳ кристалда бир-бирига яқин N та сатҳчадан ташкил топган ва $2N$ та электронни жойлай оладиган S зонани вужудга келтиради; np сатҳ эса кристалда $6N$ та электрон жойлаштира оладиган $3N$ та сатҳчадан иборат P зонани беради.

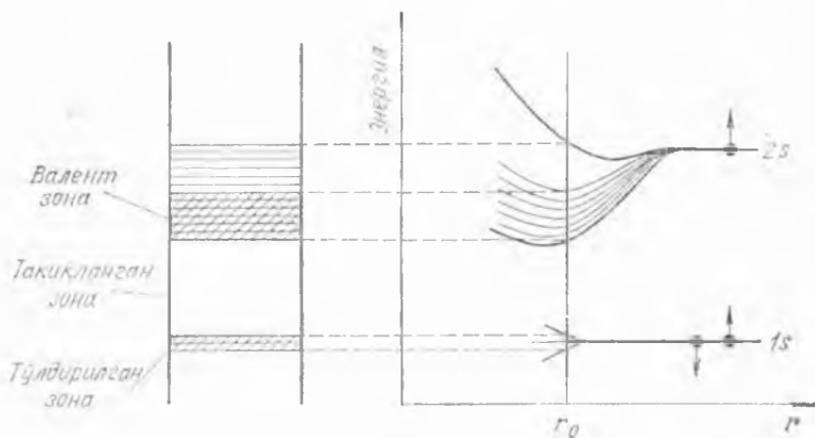
Кристалл зоналарида ушбу сатҳчалар орасидаги масофа жуда кичик. Масалан, зона кенглигини эВ масштабида 1 эВ га тенг десак, зона сатҳчалари орасидаги масофа тахминан 10^{-N} эВ га тенг бўлади. Бу масофа албатта боғланиш кучига ва характериға боғлиқ, лекин ҳар доим сатҳларнинг ажралиши шунчалик кичикки, одатда, шунинг учун ҳам кристалл зоналарини N та чизиқни бир-бирига зич жойлашишидан иборат бўлган яхлит йўл деб қаралади. Аммо яхлит деб ҳисобланадиган зонанинг аслида мавжуд сатҳчалари электронларни ҳолатлар бўйича тақсимланишини таъминлайди. Шунинг учун ҳар доим ёдда тутишимиз керакки, электронларнинг бу ҳолатлари тахминан бир хил потенциал энергия билан характерланса-да, кинетик энергиялар билан бир-биридан фарқ қилади. Шундай қилиб, зоналардаги шартли эркин электронларнинг кинетик энергияси 0 дан бошлаб, деярли узлуксиз равишда, унча катта бўлмаган бирор қийматгача (E_F) ўзгаради. E_F — Ферми энергияси ёки Ферми чегараси ва унга мос сатҳни Ферми сатҳи дейилади. Масалан, литий учун Ферми энергияси $4,72$ эВ, зонадаги электронларнинг ўртача кинетик энергияси эса $2,80$ эВ га тенг.

Кристалл панжаранинг майдони атомларнинг ташқи қобиқдаги валент электронларига энг кўп таъсир кўрсатади. Шунинг учун ҳам, ушбу электронлар ҳолатлари энг кўп ўзгаради, уларнинг энергетик сатҳлари кристалнинг энг кенг энергетик зонасини ҳосил қилади. Атомнинг ички қобиқ электронлари ядро билан кучли боғланган бўлиб, кристалл панжарадаги қўшни атомлар таъсирини деярли сезмайди, натижада уларнинг энергия сатҳлари кристалда деярли ингичка чизиқлилигича қолади.

Шундай қилиб, эркин атомнинг ҳар бир энергетик сатҳи-

га кристалда, тегишли равишда, тақиқланмаган энергетик зонаси мос келади: $1s$ сатҳга — $1s$ зона, $2s$ сатҳга — $2s$ зона, $2p$ сатҳга — $2p$ зона ва ҳоказо. Атомнинг уйғотилмаган (эркин атом) сатҳлари орасидаги масофа етарлича катта бўлганлиги учун, одатда, кристалда атомнинг сатҳларини тегишли зоналарга ёйилиши ΔE уйғотилмаган сатҳлар орасидаги масофадан анча кичик. Натижада кристалнинг тақиқланмаган энергетик зоналари бир-биридан тақиқланган энергетик зоналари билан ажратилган бўлади. Атомдаги электрон сатҳлари энергиясининг ортиши билан кристалнинг унга мос тақиқланмаган зоналари кенглиги ортади, тақиқланган зоналар кенглиги эса кичраяди.

96-расмда мисол тариқасида литий кристаллининг энергетик зоналарининг вужудга келиши тасвирланган. Литий гелийдан кейинги атом бўлгани учун унинг электрон конфигурацияси $1s^2 2s^1$ дан иборат. Расмнинг чап томонида кристалл панжаранинг мувозанатли масофаси r_0 гача атомларни бир-бирига яқинлашишида вужудга келган зоналар кўрсатилган. Расмдан кўрамизки, $2s$ зона $1s$ га нисбатан анча кенг. Сатҳлар ажралишининг ушбу тасвири фақат литий кристаллига хос бўлмасдан ҳамма металлларга ҳам



96-Расм. Литий атомлари Сир-Сирга яқинлашганда атом сатҳларининг зоналарга ажралиши. r_0 — литий кристаллида атомларнинг ўзаро масофаси.

хосдир. Бошқа қаттиқ жисмларда зоналар сони, кенглиги ва тақсимоти ўзгача бўлса ҳам, сатҳлар ажралишининг умумий характери бир хил.

Жумладан, ҳамма қаттиқ жисмларда валент электронларининг сатҳлари энг кенг зонани ҳосил қилади. Шу сабабдан қаттиқ жисмдан яратилган манбаларнинг нурланишида оптикавий чизиқли спектрлар кузатилмайди. Қаттиқ жисмларни юқори температураларгача қиздиришда «қора жисмнинг» узлуксиз спектри ҳосил бўлади. Айни вақтда кристалл атомининг ички илгичка зоналари ўртасидаги ўтишлар натижасида вужудга келувчи рентген спектри эса ўз характерини ўзгартирмайди, яъни деярли чизиқли бўлади.

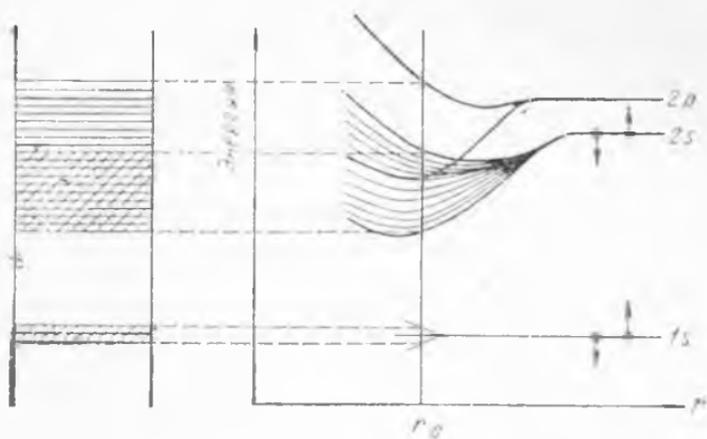
71- §. Зоналарнинг электронлар билан тўлдирилиши. Электр ўтказувчанлик

Зоналар ҳақидаги тушунчани қаттиқ жисмларнинг электр ўтказувчанлик хоссаларини тушунтириш учун қўллайлик. Биз кўрдикки, ҳар бир энергетик зона чекли бўлган энергетик сатҳлардан иборат. Паули принципига биноан, ҳар бир сатҳда иккитадан ортиқ бўлмаган электрон жойлашиши мумкин. Қаттиқ жисмларда, одатда, фақат бир неча пастки зоналаргина тўлдирилган бўлади. Масалан, 96-расмда тасвирланган, литий атомининг банд қилинган иккита $1s$ ҳолати ($1s$ -сатҳи) литий кристаллида ҳам бутунлай тўлдирилган $1s$ зонани ҳосил қилади. N та атомдан иборат кристаллнинг $1s$ зонасида ҳаммаси бўлиб $2N$ дона электрон жойлашиши мумкин. Аксинча $2s$ зонада N та ҳолат тўлдирилмаган.

Кристалл зоналарининг тўлдирилиш характерига қараб ҳамма жисмларни икки катта гурпуга ажратиш мумкин.

Биринчи гурпуга бутунлай тўлдирилган зоналари устида қисман тўлдирилган зоналари жойлашган жисмлар киради. Маълумки, тўлдирилмаган зонани эркин атом ҳолида тўлдирилмаган энергетик сатҳлари вужудга келтирилади.

Қисман тўлдирилган зона ташқи электрон қобиқнинг тўла тўлдирилган сатҳлари билан бутунлай бўш сатҳлари ҳамда тўла тўлдирилган ва бўш зонанинг ўзаро бир-



97- расм. Бериллий кристаллида $2s$ ва $2p$ зоналарнинг ўзаро қопланиши.

бирини қисман қоплашида вужудга келади. Масалан, 97-расмда тасвирланган бериллий кристаллида ушбу ҳол юз беради. Бериллийнинг $1s$ зонаси «тор» ва батамом тўлдирилган. $2s$ зона ҳам тўлдирилган, чунки уни вужудга келтирган $2s$ сатҳнинг иккита ҳолати эркин атомда иккита электрон билан банд. Бериллий атомида $n = 2$ қобиқнинг $2p$ сатҳи эса умуман электрондан холис. Бериллий кристаллида эса бу икки сатҳнинг $2s$ ва $2p$ зоналари (сатҳлар бир-бирига яқин бўлгани учун) ўзаро бир-бирини қоплаган. Натижада $2s$ ва $2p$ зоналар бир зонани ташкил қилади ва бу бирлашган зонада мавжуд $8N$ та ($2N$ — $2s$ зонада, $6N$ — $2p$ зонада) ҳолатдан фақат $2N$ тасигина банд.

Иккинчи группага бутунлай тўлдирилган зоналари устида, маълум масофада, бутунлай бўш зоналари жойлашган жисмлар киради. Менделеев жадвалининг IV группа элементлари ушбу жисмларга мисол бўла олади, жумладан, олмос ва унинг структурасига эга кремний, германий ва қул ранг қалайи. Ушбу иккинчи группа жисмларга химиявий бирикмалар, металл оксидлари, нитридлар, карбидлар ва ҳоказо ҳам киради.

Қагитқ жисмларнинг зоналар назариясига биноан пастки (тўлдирилган) зоналарнинг электронлари жисм электр ўтказувчанлигида икки сабабга кўра қатнашмайди. Бирин-

чидан, пастки зона электронлари ўзларининг атомлари билан боғланган. Иккинчи сабаб, ушбу зоналарнинг тўлдирилганлигидир. Ҳатто энг юқорида жойлашган ва электронлари умумлаштирилган бўлса ҳам, тўлдирилган зона электронлари электр ўтказувчанликда қатнаша олмайди.

Металларда электр токининг мавжуд бўлиши учун, айтайлик, чапга ҳаракат қилаётган электронларнинг тўла сони ўнгга ҳаракат қилаётган электронларнинг тўла сонидан кўп бўлиши зарур. Одатда, чап томонга йўналган ҳаракатларга мос квант ҳолатларининг тўла сони, Паули принципига мувофиқ, ўнг томонга йўналган ҳаракатларнинг квант ҳолатлари сонига тенг бўлади. Агар зонадаги ҳамма квант ҳолатлари тўлдирилган бўлса, электронлар ҳаракати йўналишининг қарама-қарши томонларга мувоzanатли бўлиниши сақланади ва бирор томонга ҳаракатланаётган электронлар сонининг ортиши ёки камайиши юз бермайди. Демак, электр токи вужудга келмайди.

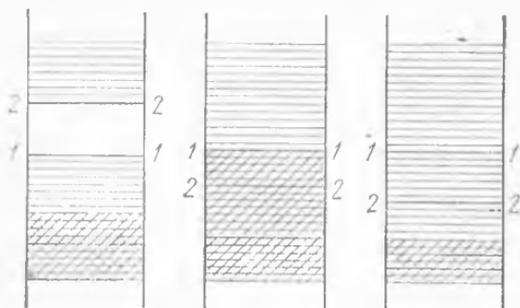
Қисман тўлдирилган зоналарда эса аҳвол ўзгача бўлади, қарама-қарши томонга ҳаракатланаётган электронларнинг сони дастлаб тенг бўлса-да, бирор ташқи таъсир (потенциаллар фарқи) воситасида электронларни зонанинг юқори бўш сатҳларига чиқариш ва бир томонга ҳаракатланаётган электронлар сонини ошириш, яъни зонанинг ҳар хил йўналишга мос ҳолатлари электронлар билан (сон жиҳатдан) ҳар хил тўлдирилиши мумкин. Мисол тариқасида 96-расмда тасвирланган литий кристаллининг тўлдирилмаган $2s$ зонасини кўрайлик. Юқорида кўрдикки, литий кристаллининг $2s$ зонаси «ярмигача» тўлдирилган. Ташқи электр майдоннинг йўқлигида қарама-қарши йўналган ҳаракатларга мос келадиган ҳолатлардаги электронлар сони тенг ва шунинг учун ток йўқ. Агар, энди ташқи электр майдон қўйсақ, электронларнинг қисман тўлдирилган зонадаги ушбу ҳаракати ўзгаради: энергетик жиҳатдан майдон йўналишига мос ҳолатлар қулай бўлади ва шу сабабдан улар кўпроқ электронлар билан тўлдирилади. Кристалларда электр токи вужудга келади. Шунинг учун қисман тўлдирилган зоналарни *ўтказувчанлик зонаси* дейилади.

Шундай қилиб, ташқи электр майдоннинг (\mathcal{E}) электронга $F = -e\mathcal{E}$ куч билан кўрсатган таъсири натижасида электронларнинг тезликлар бўйича тенг тақсимооти бузи-

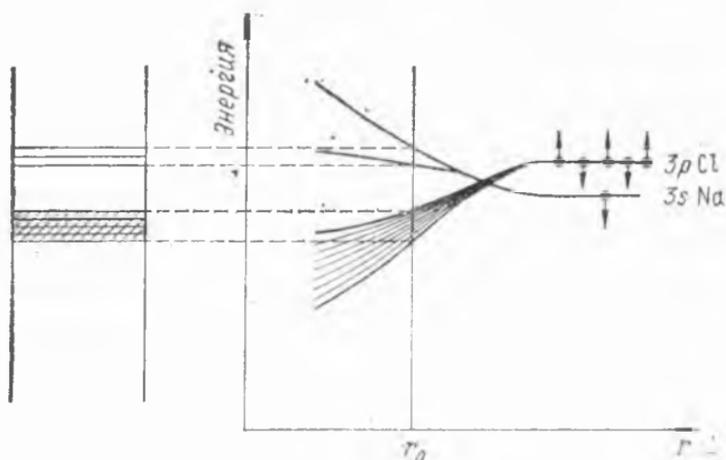
лади. Бу эса электронлар энергиясининг ўзгаришига ва уларнинг янги юқори (катта тезликка мос) ва пастки (секин ҳаракатга мос) ҳолатларга силжишига сабаб бўлади. Зоналарда сатҳлар деярли бир-бирига зич жойлашганлиги сабабли электронлар ҳолатини ҳар қандай кичик ташқи майдон ҳам ўзгартира олади.

Қаттиқ жисмларнинг ўтказгич ёки изолятор бўлишлиги уларнинг қисман тўлдирилган зоналарининг мавжудлиги билан боғлиқ экан. Демак, юқоридаги мулоҳазаларга биноан, бир валентли ёки икки валентли атомлардан ташкил топган қаттиқ жисмларнинг (${}^3\text{Li}$, ${}^{11}\text{Na}$, ${}^{19}\text{K}$, ${}^{29}\text{Cu}$, ${}^4\text{Be}$, ${}^{12}\text{Mg}$ ва ҳоказо) электр ўтказувчанлик хоссаси тушунарли. Бериллий атоми мисолида кўрдикки, ташқи ns қобиқ билан бўш np қобиқ қисман тўлдирилган ягона зонани вужудга келтиради. Умуман, зоналарнинг жойлашиш бўйича бир, икки ва уч валентли атомлардан ташкил топган қаттиқ жисмлар яхши ўтказгичлардир ва улар биринчи гурпуага киради. Яхши ўтказгичларда зоналарнинг жойлашиши умумий ҳолда 98-расмда тасвирлангандек бўлади. 1 сони (қисман ёки бутунлай) тўлдирилган энг юқори зоналарнинг юқори чегарасини, 2 сони эса бутунлай бўш зоналардан энг пасткисининг пастки чегарасини билдиради. Тўлдирилмаган соҳа фақат параллел чизиқлар билан, тўлдирилган соҳа эса кесишган параллел чизиқлар билан кўрсатилган. Тақиқланган зона бўш қолдирилган.

Зоналарнинг тўлдирилиши жиҳатдан иккинчи гурпуага, яъни изоляторларга кирувчи қаттиқ жисмларга мисол



98-расм. Ўтказгичларда зоналарнинг ўзаро мумкин бўлган жойлашишлари.



99- расм. NaCl кристаллида натрийнинг 3s зонасидан электронлари хлорнинг 3p зонасига ўтиши.

тариқасида NaCl нинг зоналарини кўрамиз. 99- расмда NaCl кристаллининг юқори зоналари тасвирланган. Юқори зоналар натрий ва хлорнинг ташқи электрон қобиқларининг ажралишидан вужудга келган. Na нинг ташқи электрон қобиғи 3s да битта электрон бўлса, Cl нинг ташқи электрон қобиғи 3p нинг тўлишига битта электрон етишмайди. Na нинг 3s сатҳи электронини йўқотиши натижасида (Na дан электронни ажратиб олиш учун энергия сарфланади) юқорига силжийди ва S ҳолатининг қарама-қарши спинли ҳолатларига мос бўш сатҳларга ажралади. Cl нинг 3p сатҳи эса электрон қўшиб олишида энергия йўқотгани учун шу электроннинг боғланиш энергиясига тенг масофада пастга силжийди. Хлорнинг 3p сатҳи ва унинг 3p зонаси шу электрон билан тўлади. Натрийнинг 3s сатҳи эса бутунлай бўшайди. NaCl кристаллида ушбу 3p ва 3s зоналар бир-биридан тахминан 10 эВ энергия билан ажралган. Оддий шароитда, 3p да мавжуд электронларнинг бирортасини юқори 3s зонага ўтиши жуда кам эҳтимоллидир. Шунинг учун ҳам NaCl яхши изолятор ҳисобланади.

Демак, қаттиқ жисмнинг яхши изолятор бўлиши учун уларнинг электронлари сони тўлдирилган зоналарнинг квант ҳолатлари сонига тенг бўлиши керак. Бу шарт одатда тоза жисмлар учун масалан, биз кўрган NaCl крис-

талида бажарилади. Агар жисм тоза бўл-маса, аралашма бегона атомлар ўз электронларини изоляторнинг тўлдирилмаган зонасига бериши мумкин ва натижада бу зона тўлдирилмаган зонага айланади. Бундай «изолятор» ток ўткази башлайди. Шундай қилиб, юқори зоналари 100-расмдаги кўринишга эга тоза (соф) кристалларгина яхши изолятор бўла олади.



72- §. Кристалл панжарада электрон энергиясининг импульсга ўзгача боғлиғи

100- расм. Диэлектрикларда (изоляторлар) зоналарнинг ўзаро жойлашиши.

Ўтган параграфда электронларнинг кристалдаги энергия спектри зонали характерга эга бўлишини кўрдик. Ушбу масалани кўришда электронлар ҳаракатига потенциал ўра тубининг қандай таъсир кўрсатишини ҳисобга олмаган эдик. Энди биз кристалл панжараси потенциалда ҳаракатланаётган электрон энергиясининг импульсга боғлиқлиги ҳар бир зонада қандай бўлишини кўрамиз. Умуман, энергия импульсга боғлиқлигини *дисперсия қонун* ёки *дисперсион муносабат* деб аталади.

Кристалда электроннинг ҳаракати даврий ўзгарувчи потенциал майдонда юз беради. Бошқача айтганда, кристалда тарқалаётган электрон тўлқини кристалнинг ҳажмий «дифракцион» панжараси орқали ўтади. Кристалда оптиквий дифракцион панжарадан фарқли равишда шаффофлик эмас, балки синдириш коэффициенти даврий ўзгаради. Ҳақиқатан ҳам, потенциал энергиянинг даврий ўзгариши тегишли равишда кинетик энергиянинг ўзгаришига ва демак, де-Бройль тўлқинининг тўлқин сони ўзгаришига олиб келади. Шундай қилиб, дифракцион ҳаракат натижасида кристалда электрон импульсининг қийматлари маълум соҳалар билан чекланади. Ушбу ўзгариш электрон энергияси зоналарини вужудга келтиради.

Кристалда электрон ҳаракати ҳақидаги масалани аниқ қараш учун 95- расмда тасвирланган потенциал энергия билан Шредингер тенгламасини ечиш керак бўлади. Агар осонлик учун, бир ўлчовли ҳаракатга қарашли масала билан чеклансак, электроннинг даврий потенциалдаги ҳаракати

қуйидаги Шредингер тенгламаси орқали тасвирланади:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \kappa^2(x) \psi = 0, \quad (10.10)$$

бу ерда

$$\kappa^2(x) = \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - V(x)]. \quad (10.11)$$

(10.10) тенгламага кирувчи $\kappa^2(x)$ функция x нинг мураккаб функцияси бўлиб, кристалл панжаранинг даврийлигига мос равишда даврийдир, яъни

$$\kappa^2(x + d) = \kappa^2(x), \quad (10.12)$$

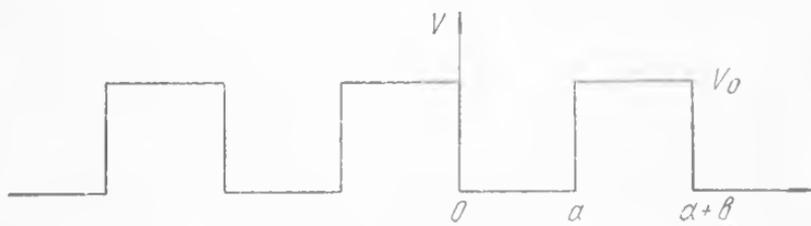
бу ерда d — кристалл панжара даври, бизнинг ҳолда атомлар орасидаги масофа. (10.12) га биноан (10.10) Шредингер тенгламасида x ни $x + d$ га алмаштирадик, тенглама ўзгармайди. Даврий коэффициентли (10.10) тенгламани Матье тенгламаси дейилади ва уни умумий ҳолда, аналитик ечиш мумкин эмас.

Крониг-Пенн модели. Қаттиқ жисмнинг юқори зоналаридаги электронлар учун Крониг-Пенн моделини кўрайлик. Бу модель асосига 101-расмда тасвирланган даврий ($d = a + b$) тўғри бурчакли потенциал ўралардан иборат $V(x)$ потенциал қўйилган.

Шредингер тенгламасининг ечимини

$$\psi = U_k(x) e^{ikx} \quad (10.13)$$

кўринишда излаймиз. Бу ерда $U(x)$ — d даврли функция, яъни $U_k(x + nd) = U_k(x)$; n — ҳар қандай бутун сон.



101-расм. Бир ўлчовли даврий потенциал ўралар.

(10.13) ни Шредингер тенгласига қўйиб ушбу функция учун

$$\frac{d^2 U_k}{dx^2} + 2ik \frac{dU_k}{dx} + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - E_k - V] U_k = 0 \quad (10.14)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Бу ерда

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \quad (10.15)$$

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{ҳар бир потенциал ўрада} \\ V_0, & \text{ҳар бир потенциал тўсиқда.} \end{cases}$$

(10.14) тенгламанинг $V = 0$ соҳа, яъни масалан, $0 < x < a$ учун ечими қуйидаги кўринишга эга:

$$U_k(x) = A e^{i(\beta - k)x} + B e^{-i(\beta + k)x}. \quad (10.16)$$

Бу ерда

$$\beta^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2} E.$$

Потенциал тўсиқ, яъни $a < x < b$ соҳада (10.14) тенгламанинг ечимини

$$U_k(x) = C e^{i(\kappa - k)x} + D e^{-i(\kappa + k)x} \quad (10.17)$$

кўринишда ёзишимиз мумкин. Бу ерда κ (10.11) орқали аниқланади. (10.16) ва (10.17) ечимлардаги A , B , C , D ўзгармас коэффициентлар $U_k(x)$ ни ва унинг ҳосиласини икки соҳада бир-бирига узлуксиз ўтиш (узлуксизлик) шартидан аниқланади. $U_k(x)$ нинг даврийлигини ҳисобга олган ҳолда узлуксизлик шартидан A , B , C , D номаълумлар учун тўртта тенгламадан иборат бир жинсли тенгламалар системасини ҳосил қиламиз. Бир жинсли тенгламалар системаси учун тривиал бўлмаган ечимнинг мавжуд бўлиш шартидан қуйидаги

$$-\frac{\kappa^2 + \beta^2}{2i\kappa\beta} \sin \kappa b \cdot \sin \beta a + \cos \kappa b \cdot \cos \beta a = \cos k(a + b)$$

ифода ҳосил бўлади. Бу тенгликни содда кўринишга келтириш учун $V_0 b$ юза ўзгармай қоладиган қилиб потенциал тўсиқ кенглигини нолга, яъни $b \rightarrow 0$, потенциал тўсиқ

баландлигини эса чексизга, яъни $V_0 \rightarrow \infty$ интиштирамиз. Агар

$$\lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty \\ b \rightarrow 0}} \frac{\kappa^2 ab}{2} = 0$$

деб белгиласак ва ушбу лимитда $\cos \kappa b \rightarrow 1$, $\sin \kappa b \rightarrow i\kappa b$ га интилишини ҳисобга олсак,

$$\frac{0}{\beta a} \sin \beta a + \cos \beta a = \cos ka \quad (10.18)$$

тенгламани ҳосил қиламиз. Ушбу тенгламанинг ўнг томони $+1$ ва -1 оралиқдаги қийматларга тенг. Демак, тенгликнинг бажарилиши учун чап томондаги катталиқ ва яъни E фақат маълум соҳаларда, яъни зоналарда аниқланувчи қийматлар қабул қилади.

Энергиянинг (10.18) шарт билан тақиқланмаган қийматларига мос келувчи (10.13) тўлқин функция $U_k(x)$ нинг (10.16) кўринишига биноан, у кристалл бўйлаб қарама-қарши томонга тарқалаётган тўлқинларнинг чизиqli комбинациясидан иборат булади. (10.13) кўринишидаги даврий функцияларни *Блох функциялари* деб аталади.

Ушбу даврий потенциал учун Шредингер тенгламасининг иккинчи тип ечими, (10.17) га биноан, тез сўнувчи ва тез ўсувчи тўлқинлардан иборат. Бу ҳолда электрон ҳаракати тез ўзгариб кетади ва натижада у кристалл бўйлаб қаршиликсиз ҳаракат қила олмайди, яъни энергетик тақиқланган зонада электрон мавжуд бўла олмайди.

Электрон энергиясининг зоналарга ажралиши билан потенциал ўра ўртасидаги боғланишни кўрайлик. Дастлаб кристалда ҳаракатланаётган электрон импульсига таъриф берамиз. Маълумки, зарра импульси p унинг тўлқин сонини Планк доимийсига кўпайтмасига тенг, яъни $p = k\hbar$. Лекин кристалл панжаранинг даврий майдонида тўлқин сони бир қийматли бўлмаганлиги сабабли электрон импульси ҳам бир қийматли бўлиб аниқланиши мумкин эмас. Шунинг учун ҳам, эркин электроннинг аниқ импульсидан фарqli равишда, кристалдаги электрон учун қуйидагича аниқланган импульс киритилади:

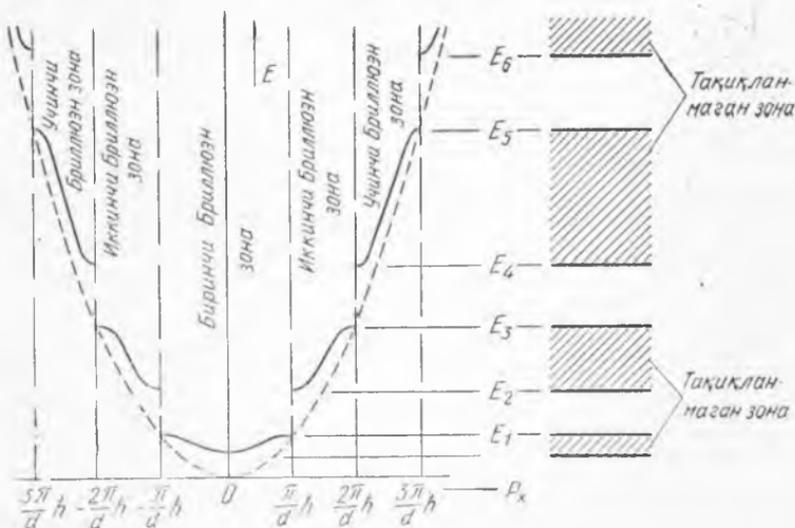
$$p = k\hbar = \frac{m_e}{\hbar} \frac{dE_k}{dk} \quad (10.19)$$

У электроннинг квазиимпульси деб аталади. (10.19) билан аниқланган квазиимпульс тўлқин сони (10.15) каби электрон энергияси билан монотон боғланган деб ҳисобланади. Бу ерда E_k (10.15) орқали аниқланган. Кристалл учун электрон энергияси билан импульсининг ўзаро боғланиш чизиғини кўрайлик. 102-расмда пунктир чизиқ билан эркин электрон учун характерли энергиянинг импульс билан одатдаги парабolik боғланиши тасвирланган. Кристалл панжаранинг даврий майдонида электрон энергиясининг квазиимпульс билан боғланиш чизиғи квазиимпульсининг

$$p = k\hbar = \frac{\pi}{a} n \cdot \hbar \quad (10.20)$$

га тенг қийматларида тақиқланган зоналарнинг вужудга келиши билан характерлидир.

102-расмда тасвирланган $E(p)$ чизиқнинг узлукли характери панжара потенциал майдони билан боғлиқ табиатга эга. Ушбу расм потенциал тўсиқ параметрлари $V_0 b$ нинг маълум бир қийматига тўғри келади. Агар, $V_0 b$ юз етарлича катта бўлганда, яъни потенциал ўралар бир-



102- расм. Электрон энергиясини p_x йуналишида импульс P га боғлиқлиги. Пунктир парабола эркин электронлар учун $E(p)$ ни тасвирлайди.

бирдан бутунлай ажратилган ҳолида тақиқланмаган зоналар ингичкалашиб чизикли кўринишга интилади. Бу ҳолда электрон энергияси яккаланган потенциал ўрадаги электрон энергияси

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} n^2$$

га тенг бўлади.

Кристалл панжаранинг потенциал ўра параметри $V_0 b$, яъни ўраларнинг бир-бирдан ажратувчи тўсиқ юзи нолга интилса, зоналар бир-бири билан уланиб электрон энергияси учун узлуксиз қийматларнинг ягона зонаси вужудга келади. Энергиянинг импульсга боғланиши эркин электронлар учун характерли кўринишга ўтади:

$$E = \frac{p^2}{2m_e}.$$

Демак, кристалларда электрон энергияси зоналарининг вужудга келиши панжаранинг даврий потенциал майдони билан боғлиқ экан. Ушбу модель (даврий потенциал) орқали пастки зона электронларини тасвирлаш учун $V_0 b$ нинг катта қийматларини олиш керак, чунки пастки қобиқ электронлари ядро билан кучлироқ боғланган. Натижада, пастки зоналар кенглиги кичик, уларга қўшни тақиқланган зоналар эса катта кенгликка эга бўлади. Бошқача айтганда, квазимпульснинг классик кинетик энергия манфий бўлган соҳаси катта бўлади. Ушбу тасаввурга кўра юқори зоналарга ўтган сари $V_0 b$ кичиклаша бошлайди.

Бриллюэн зоналари. Кристалл панжара бўйлаб ҳаракатланаётган электрон учун тўлқин сонининг $k = \frac{\pi}{d} n$ га тенг ҳоли диққатга сазовордир. Ушбу ҳолда электрон тўлқинининг $\left(\lambda = \frac{2\pi}{k}\right)$ қайтиши учун Брэгг — Вульф шarti

$$2d = n\lambda \quad (10.21)$$

бажарилади. Тўлқин узунлиги (10.21) шартни қаноатлантирувчи электрон кристалл панжарада тарқала олмайди. Электрон тўлқинларнинг кристалл панжара атомларида сочилиши юз беради. Тўлқин узунлигининг бу қийматлари тақиқланган зоналарга мос келади. Шундай қилиб, $k = 0$,

$\frac{\pi}{d}, \frac{2\pi}{d}, \dots$ қийматларга тақиқланмаган зонадан, тақиқланган зонага, ёки аксинча ўтишлар тўғри келади. Ушбу ҳолларда электрон тўлқиннинг тўла қайтиши юз беради.

Тўлқин сонининг $\frac{\pi}{d} n$ дан бир оз кичик ёки катта қийматларида тўлқин тарқалиши бутунлай бошқача бўлади. Масалан, $0 < k < \frac{\pi}{d}$ ҳолда, электрон кристалл панжара бўйлаб исталган томонга ҳаракат қила олади. Тўлқин сонининг $\frac{\pi}{d} n < k < \frac{\pi}{d} (n + 1)$ оралиқлардаги ўзгариши E ни тақиқланмаган зонанинг бир чеккасидан иккинчисига ўзгариши билан мос келади. Электрон тўлқини эса дифракцияга учрамайди. Дифракцияга учрамаётган электронларнинг тўлқин сони k учун k -фазодаги энг кичик қийматлар соҳасига *биринчи Бриллюэн зонаси* дейилади. 102-расмдаги бир ўлчовли кристалл (яъни атомлар занжири) учун биринчи Бриллюэн зонаси $-\frac{\pi}{d} \leq k \leq \frac{\pi}{d}$ соҳага тўғри келади. Зонанинг чеккасига яқинлашганда электрон энергияси (узлуксиз чизиқ) эркин электрон энергиясига (штрих чизиқ) нисбатан секинроқ ортади.

Зонанинг чеккасида энергиянинг ортиши деярли тўхтайдди. $k = \frac{\pi}{d}$ да эса энергия иккита қийматга эга: пасткиси биринчи Бриллюэн зонасига, юқоридагиси эса иккинчи Бриллюэн зонасига тегишли. Энергиянинг биринчи ва иккинчи зоналарда мумкин бўлган қийматлари ўртасидаги узилиш соҳаси тақиқланган зонани характерлайди. 102-расмдан кўрамизки, юқори Бриллюэн зоналари ўртасида худди шу тасвир қайтарилди.

Шундай қилиб, бир ўлчовли кристалда (атомлар занжирида) биринчи Бриллюэн зонаси $2\pi/d$ узунликдаги соҳани эгаллаган. Дисперсион чизиқ, яъни $E(k)$ ёки $E(p)$ биринчи Бриллюэн зонанинг ўртасида ($k = 0$) ва чеккаларида ($k = \pm \frac{\pi}{d}$) экстремумга эришади. Бриллюэн зонада энергиянинг максимал ва минимал қийматларининг фарқи тақиқланмаган зона кенглигига тенг. Бриллюэн зонанинг чегараси энергияни тақиқланмаган ва тақиқланган зоналарига ажратади.

73- §. Электроннинг эффектив массаси

Энергиянинг импульс билан оддий параболик боғланишининг бузилиши муҳим натижаларга олиб келади. Квазиимпульснинг (10.19) ифодасига биноан электрон тезлигини аниқлайлик:

$$v = \frac{p}{m_e} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{dp} \quad (10.22)$$

Электроннинг (10.22) тезлиги кристалл панжарада тарқалаётган электрон тўлқинининг группа тезлигига тенг.

Кристалга ташқи электр майдон қўйилсин. Агар ташқи майдон кучланганлигини \mathcal{E} орқали белгиласак, бу майдон электронга

$$\vec{F} = -e \vec{\mathcal{E}}$$

куч билан таъсир кўрсатади. v тезлик билан ҳаракат қилаётган электронга dt вақт давомида таъсир этган ушбу куч

$$dA = Fvdt = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt$$

га тенг иш бажаради. Бу иш эса электрон энергиясининг ўзгаришига кетади, яъни

$$dE = dA = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt.$$

Охириги муносабатдан

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar}$$

келиб чиқади.

Электрон тезлигининг dt вақт ичида ўзгариши, яъни тезланиши охириги тенгликни эътиборга олган ҳолда, (10.22) орқали қуйидагича аниқланади:

$$\begin{aligned} \omega = \frac{kv}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{dE}{dk} \right) \frac{dk}{dt} = \\ &= \frac{F}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} = \frac{Fd^2V}{dp^2}. \end{aligned} \quad (10.23)$$

Бу формула электрон тезланиши билан ташқи куч ўртасидаги боғланишни беради. Ушбу формуладан электроннинг ташқи куч таъсири остида кристалл панжараси даврий майдони бўйлаб ҳаракатини худди массаси

$$m_{эф} = \frac{\hbar^2}{v \frac{d^2 E}{dk^2}} \quad (10.24)$$

га тенг бўлган эркин электроннинг шу куч таъсиридаги ҳаракати каби юз бериши келиб чиқади. Кристалл панжарадаги электрон учун (10.24) масса *эффектив масса* дейилади. Электрон учун ушбу эффектив массани белгилаб, уни ташқи майдон таъсирида кристалл панжара бўйлаб «эркин» ҳаракат қилади, деб қараш мумкин.

Кристалл панжарадаги электроннинг эффектив массаси ўзига хос катталиқ бўлиб, манфий ёки мусбат қийматга ортиши мумкин. Маълумки, эркин электрон учун ташқи куч бажарган ишнинг ҳаммаси электроннинг кинетик энергияси ўзгаришига кетади:

$$A = T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

Ушбу энергияни k бўйича икки марта дифференциаллаб, (10.24) га қўйсақ, $m_{эф.} = m_e$ келиб чиқади.

Кристаллдаги электрон учун эса аҳвол бутунлай бошқача. У ҳам кинетик, ҳам потенциал энергияга эга. Унинг ташқи майдон таъсирида ҳаракатланишида бажарилган иш қисман кинетик энергиясининг, қисман эса потенциал энергиясининг ўзгаришига кетади. Ушбу ҳолда, кинетик энергиянинг ва демак, тезликнинг ўзгариши секинроқ бўлади, электрон оғир зарра каби ҳаракатланади.

Агар ташқи куч бажарган ишнинг ҳаммаси электроннинг потенциал энергиясининг ўзгаришига кетса, унинг кинетик энергияси ва тезлиги ўзгармайди. Бу ҳолда электрон ўзини худди чексиз катта массага эга зарра каби тутуди.

Ташқи куч таъсиридаги электрон ҳаракатида унинг потенциал энергиясига шу кучнинг бажарган ишигина ўтмасдан, электрон кинетик энергиясининг бир қисми ҳам потенциал энергияга айланиши мумкин. Бу ҳолда кристалл бўйлаб электроннинг ташқи куч таъсиридаги ҳаракати

лавомида унинг тезлиги камаяди. Электрон ўзини худди манфий массага эга зарра каби тутади. Бу электрон энергиясини зона бўйлаб импульсига биз юқорида кўрган ўзгача боғлиқлигидан келиб чиқади. Мисол тариқасида 102-расмдаги биринчи Бриллюэн зонасини кўрайлик. Зона остида $p=0$ атрофида $E(p)$ ни p^2 га пропорционал ўсувчи функция деб ҳисоблаш мумкин. Демак, ушбу соҳада электроннинг эффектив массаси

$m_{\text{эфф.}} \sim \frac{1}{d^2 E/dp^2}$ ўзгармас чекли мусбат қийматга тенг. $E(p)$ нинг ўзгариш нуқтасида, яъни $\frac{d^2 E}{dp^2} = 0$ да $m_{\text{эфф.}} \rightarrow \infty$.

Айни вақтда $\frac{dE}{dp} \neq 0$ биринчи ҳосила нолдан фарқли, $v = \frac{dE}{dp}$ максимумга эришади. Ушбу нуқтадан юқорида $\frac{dE}{dp}$ камай бошлайди, шунинг учун v тезлик камаяди, тезланиш манфий бўлади. Лекин ташқи таъсир кучининг йўналиши ўзгармаганлиги сабабли электрон ўзини худди манфий массага эга бўлган зарра каби тутади, чунки $F = m(-\omega) = -m\omega$. Шундай қилиб, кристалдаги электроннинг массаси тақиқланмаган зонанинг остида мусбат, юқорисида манфий экан, яъни электроннинг тезлиги унинг импульси ортиши билан камаяди, массаси эса мусбат чекли қийматдан чексиз қиймат орқали манфийга айланади.

74-§. Ярим ўтказгичлар

Ярим ўтказгичларга абсолют электр ўтказувчанлиги ўтказгич ва диэлектрикларнинг ўтказувчанлиги ўртасида ётган кристаллар киради. Ярим ўтказгич хусусиятига баъзан шишасимон ёки макромолекуляр моддалар, ҳатто суюқликлар ҳам эга бўлиши мумкин. Химиявий таркибига кўра ярим ўтказгичлар бир-биридан кескин фарқ қилади. Ҳозирги замонда ковалент боғланишли ва атом панжарали, яъни металл боғланишли ярим ўтказгич кристаллар энг катта аҳамиятга эга.

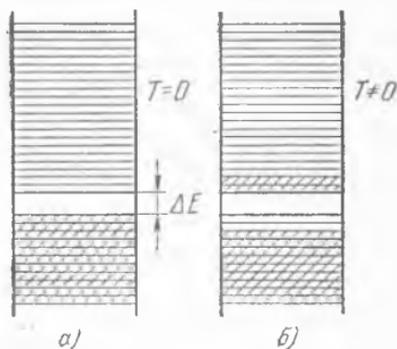
Ярим ўтказгичлар тузилишининг асосий хусусиятларини ва уларни металлдан фарқланишининг сабабини кўрамыз. Ярим ўтказгичларнинг ўтказувчанлигида қатнашувчи электронлар даставвал кристалл панжарадаги

атомлардан, ионлардан ёки молекулалардан ажратиб олиниши керак. Бу, асосан, иссиқлик ҳаракати натижасида юз беради. Шунинг учун, температуранинг пасайиши билан бу хил электронларнинг сони камаяди ва ярим ўтказгичнинг ўтказувчанлиги пасаяди.

Зоналар нуқтаи назардан кристалнинг бу хил ўтказувчанлиги қуйидагича тушунтирилади. Ярим ўтказгичларнинг валент зонаси абсолют ноль температурада худди изоляторлардаги сингари, тамомила тўлдирилган, ўтказувчанлик зонаси эса бутунлай бўш бўлади. Лекин ярим ўтказгичларда валент зона билан ўтказувчанлик зонаси ўртасидаги тақиқланган зона кенглиги изоляторлардагига нисбатан жуда кичик бўлади. Масалан, германий учун тақиқланган зона кенглиги 1,1 эВ, кремний учун эса ~0,7 эВ га тенг. Шундай қилиб, одатдаги температура-ларда ярим ўтказгичларда маълум сондаги электронлар валент зонасидан ўтказувчанлик зонасига кўчган бўлади. 103- расмда ярим ўтказгичлар учун зоналар жойлашиши тасвирланган.

Соф ярим ўтказгичлар. Соф ярим ўтказгичлар деб, химиявий таркиби жиҳатдан тоза ярим ўтказгич жисмларни айтамыз. Уларга қатор химиявий тоза элементлар: германий, кремний, селен, теллур ва қатор химиявий бирикмалар: галлий арсениди ($GaAs$), индий арсениди ($InAs$), индий антимониди ($InSb$), кремний карбиди (SiC) ва ҳоказолар киради. Соф ярим ўтказгичлар зоналарининг тузилиш схемаси 103- расмда тасвирланганидек бўлади. Абсолют нолда валент зонаси тўла банд этилган, ўтказувчанлик зонаси эса тамомила бўш.

Абсолют нолда соф ярим ўтказгич, диэлектрик сингари, нолга тенг ўтказувчанликка эга бўлади. Аммо ушбу ярим ўтказгичларнинг электр ўтказувчанлиги температурага кескин боғлиқ бўлиб, ярим ўтказгич температурасининг



103- расм. Ярим ўтказгичларда зоналарнинг тўлдирилиши ва ўзаро жойлашиши.

ортиши билан валент зонадаги электронларнинг термик уйғониши натижасида уларнинг бир қисми тақиқланган зонани ўта олишга етарли энергияга эга бўлади. Оқибатда, ўтказувчанлик зонасида электронлар, валент зонасида эса бўш сатҳлар пайдо бўлиши кузатилади. Бундай кристалга ташқи майдонни қўйилиши электронларнинг ўтказувчанлик зонасида ҳам, валент зонасида ҳам йўналтирилган ҳаракатини вужудга келтиради. Валент зонада электронларнинг ҳаракати шу зонадаги бўшаб қолган сатҳларга ўтишлар билан юз беради.

Агар битта электроннинг вужудга келтирган токини $I_i = -ev_i$ деб белгиласак, абсолют ноль температурада валент электронларининг вужудга келтирган токи $I = -e\sum v_i = 0$, чунки $+v_i$ га эга бўлган ҳар қандай электрон учун тезлиги тенг, лекин тескари йўналган, яъни $-v_i$ бўлган электрон мавжуд. Агар, энди валент зонада битта сатҳ, масалан, v_s тезлик билан характерланувчи ҳолат бўш бўлса, ташқи майдон таъсирида вужудга келган ток қолган электронлар ҳиссасига тенг бўлиши керак, яъни

$$I_s = -e \sum_{i/s} v_i = -e \sum_{i=1} v_i + ev_s = +ev_s.$$

Шундай қилиб, битта бўш ҳолатга эга бўлган валент зонанинг ҳамма электронлари вужудга келтирган ток худди шу бўш ҳолатга жойлаштирилган битта мусбат зарядланган зарранинг ҳаракати билан боғлиқ экан. Бундай сохта заррани «тешик» деб аталади. Тешик учун сон жиҳатдан электрон зарядига тенг, лекин мусбат заряд ($+e$) белгилаб, биз унинг массасини ҳам мусбат эффектив массага тенг деб ҳисоблашимиз керак, чунки шу юқори ўрин даставвал манфий эффектив массага эга электрон билан банд этилган эди. Айни шу ҳолдагина тешик вужудга келтирган ток ҳам миқдор, ҳам йўналиши жиҳатдан валент зонанинг тўлдирилган ҳолида яъни электронлари вужудга келтирган ток билан мос келади.

Умумий ҳолда, соф ярим ўтказгичларда вужудга келадиган ток валент ва ўтказувчанлик зоналари электр ўтказувчанлиги билан характерланади. Соф ярим ўтказгич-

нинг электр ўтказувчанлиги қўйидаги икки ҳад йиғиндисига тенг:

$$\sigma = n_n e c_n + n_p e c_p.$$

Бу ерда c_n ва c_p — электрон ва тешик тезлиги билан боғлиқ ҳаракатчанлик коэффициентлари, n_n ва n_p — электрон ва тешик концентрацияси, соф ярим ўтказгичларда n индекс инглизча манфий (негатив) сўзидан олинган бўлиб, электронни билдиради, p — инглизча мусбат (позитив) сўзидан олиниб, тешикни характерлайди.

А р а л а ш м а л и я р и м ў т к а з г и ч л а р. Ҳар қандай юқори даражали тоза ярим ўтказгичлар ҳам ҳар доим аралашма (бегона) атомларни ўз ичига олган бўлади. Ушбу атомлар ўзларининг локал энергия сатҳларини вужудга келтиради. Бу сатҳлар эса ярим ўтказгичнинг тақиқланмаган ёки тақиқланган зонасида валент зонанинг устидан ва ўтказувчанлик зонасининг остидан ҳар хил масофада жойлашган бўлиши мумкин. Баъзан ярим ўтказгич зарур ҳоссага эга бўлиши учун унга атайлаб аралашма атомлар киритилади.

Кристалда бегона атомлар вужудга келтирган ушбу эффект кристалл панжараси учун идеал даврий тузилишнинг амалда бузилишида ҳам ҳосил бўлади. Панжаранинг идеал тузилиши унинг бўғинларида (тугунларида) атомларнинг етишмаслигидан ёки бўғинлар ўртасида ортиқча атомларнинг мавжудлигидан бузилиши мумкин.

Кристалл панжаранинг дефектлари ва аралашма атомлар вужудга келтирган локал сатҳлар ярим ўтказгичларда электр ўтказувчанликни бошқариш билан боғлиқ муҳим аҳамиятга эга. Бўш зонанинг энг пастки чеккасига яқин локал сатҳларга эга аралашма ярим ўтказгични кўрайлик. Ушбу сатҳлардан электронлар осон ўтказувчанлик зонасига ўтиши мумкин, натижада, ярим ўтказгичда электрон вужудга келтирган, яъни n -тип электр ўтказувчанлик пайдо бўлади. Худди соф ўтказувчанликдаги сингари n -тип ўтказувчанлик температуранинг кўтарилиши билан ортади, сўнгра маълум температурадан бошлаб ўзгармайди. Бу ҳол қўшимча электронларнинг ҳаммасини ўтказувчанлик зонасига ўтишида юз беради.

Ярим ўтказгичда ўтказувчанлик зонасининг пастки чегарасига яқин сатҳларни ҳосил қилувчи аралашма (атом)

ларга *донорлар* дейлади. Масалан, кремний ва германий учун Менделеев жадвалининг V группа элементлари: P, As, Sb донорлар вазифасини ўташи мумкин.

Кремний (ёки германий) кристалл панжарасида Si (ёки Ge) атомини, масалан, As атоми билан алмаштирилса, ушбу атомнинг бешта электронларидан фақат тўрттаси кристалл панжара тузилишида қатнашади, бешинчиси эса «ортиқча» бўлиб қолади. Ортиқча электроннинг кристаллда боғланиш энергияси катта эмас ва у ўтказувчанлик зонасининг пастки чегарасига тахминан 0,01 эВ масофада жойлашади. Ушбу сатҳдан электронни ўтказувчанлик зонасига ўтиш эҳтимоллиги анча катта.

Агар аралашма атом электрони вужудга келтирган сатҳ валент зонанинг юқори чегарасига яқин жойлашган бўлса, валент зонадаги электронларнинг бир қисми шу сатҳга ўтиши мумкин. Натижада, валент зонада тешиklar пайдо бўлади ва ярим ўтказгичнинг тешик билан боғлиқ ўтказувчанлиги юзага келади. Бу хил ўтказувчанлик *p*-тип ўтказувчанлик дейлади. *p*-тип ўтказувчанликни вужудга келтирган аралашма (бегона) атомларни акцепторлар деб атаёмиз. Мазкур кремний ва германий учун Менделеев жадвалининг учинчи группа элементларидан: B, Al, Ga ва In акцепторлар вазифасини бажаради. Кремний (ёки германий) кристалл панжарасидаги тўртта энг яқин қўшни Si (ёки Ge) атомлари билан ковалент боғланиш ҳосил қилиши учун акцептор атомларда битта электрон етишмайди. Шу сабабдан, панжаранинг бирор Si (ёки Ge) атомини B (ёки бошқа акцептор) атоми билан алмаштирилса, битта икки электронли ковалент боғланиш тугалланмай қолади, чунки акцептор атомда битта электрон етишмайди. Боғланишни тугалланиши учун валент зонадан битта электрон ишлатилади, зонада эса унинг ўрни бўш қолади. Натижада ярим ўтказгичда *p*-тип ўтказувчанлик пайдо бўлади.

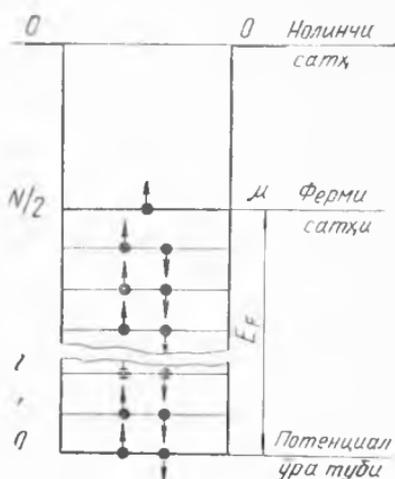
75- §. Металларда Ферми сатҳи. Ферми-Дирак тақсимоти

Электронларни зоналарда тезликлар (кинетик энергия) бўйича тақсимланишини кўрайлик. Металда электронлар эркин ҳаракати кристалл панжаранинг ўзига хос потенциал майдонида — потенциал ўрада юз беради. Электрон-

нинг ушбу потенциал ўрадан (металдан) чиқиши шу потенциал кучни енгил билан боғлиқ маълум чиқиш ишининг бажарилишини талаб қилади. 104-расмда шундай потенциал ўрада электронларнинг жойлашиши тасвирланган. Горизонтал чизиқлар орқали электронлар жойлашиши мумкин бўлган энергетик сатҳлари кўрсатилган. Ушбу сатҳлар тўплами металнинг тегишли зонасини ташкил қилади.

Паули принципига биноан ҳар бир сатҳда қарама-қарши спинли фақат иккита электронгина жойлашиши мумкин. Электрон энергиясининг импульси (ёки тезлиги) га боғлиқлиги $E(p)$ нуқтаи назардан ушбу принципга кўра металнинг тақиқланмаган зонасида мавжуд электронларнинг энг кўпи билан иккитасининг тезлиги ва тезлик йўналиши бир хил бўлиши мумкин. Зонанинг аниқ тезлик билан характерланувчи ҳар бир ҳолати тезликнинг энг кичик қийматидан бошлаб тўлдирилади. Натижада электронларнинг бирин-кетин ҳолатлар сари жойлашиши тезликнинг катта қийматлар сари монотон ўсишига мос келади.

Масалан, бир валентли атом кристалда, юқори зонада, $2N$ та ҳолат ёки N та сатҳ мавжуд бўлиб, $N/2$ та сатҳгина тўлдирилган. Пастдан ушбу $N/2$ сатҳ энг катта тезлик v_F ва демак, энг катта кинетик энергия E_F билан характерланади. Агар металл температураси абсолют нолга тенг бўлса, шу $N/2$ сатҳларнинг ҳаммаси тўлдирилган, яъни энергияси $E < E_F$ соҳадаги ҳамма ҳолатлар электронлар билан банд этилган бўлади. Энергияси $E > E_F$ ҳолатлар эса (N та) аксинча, батамом бўш. Шундай қилиб, абсолют ноль температурада E_F энергия зонасидаги электронлар банд этган сатҳларнинг энг юқори чегаравий сатҳини ха-



104-расм. Металлнинг юқори зонасидаги электронларнинг потенциал ўрада жойлашиши. E_F — Ферми энергияси.

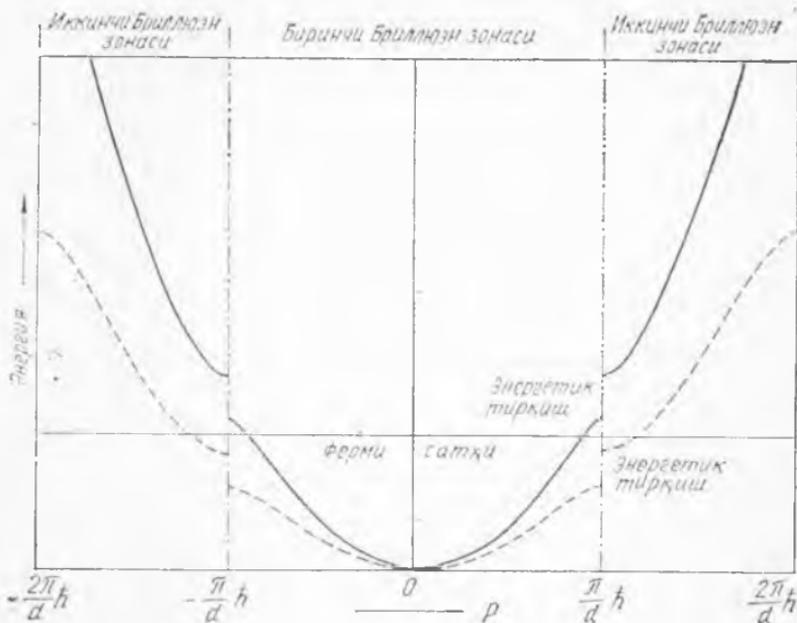
рактарлайди. Ушбу E_F энергияга ва унга мос v_F тезликка Ферми энергияси ва Ферми тезлиги деб аталади. Ферми энергияси билан характерланувчи энг юқори чегаравий сатҳ эса *Ферми сатҳи* дейилади.

Демак, абсолют ноль температурада зонадаги Ферми сатҳидан пастки ҳамма сатҳлар электронлар билан тўлдирилган. Паули принципи эса ушбу электронларни нолдан бошлаб Ферми тезлигигача бўлган тезликларда ҳаракат қилишини тақозо қилади, яъни электронлар абсолют ноль температурада ҳам катта тезликларга эга.

Ферми сатҳига кристалл панжаранинг таъсири кучли. Фараз қилайлик, атомлари оддий куб учларига жойлашган кристалл панжара бўйлаб электрон ҳаракатлансин. У ҳолда куб диагонали йўналишидагига қараганда ёқлари бўйлаб ҳаракатда электронлар атомлар билан тез-тез тўқнаш келади, яъни энергиясини ўзгартиради. Демак, электрон энергияси (тезлиги) унинг ҳаракат йўналишига боғлиқ. Бунинг натижасида, ҳар хил йўналишларда Ферми сатҳи ҳар хил эгрилади, мураккаблашади.

Панжаранинг электростатик таъсири билан бир қаторда электроннинг тўлқин характери ҳам Ферми сатҳининг эгриланишига олиб келади. Биз юқорида кўрганимиздек, электроннинг тўлқин узунлиги ҳаракат йўналиши бўйича атомлараро масофа d га бутун сон n марта қаррали бўлса, яъни $\lambda = 2d/n$, электронлар тўлқинининг қайтиши, сочилиши юз беради. Қайтган тўлқин иккита турғун тўлқинни вужудга келтиради. Ушбу тўлқинларнинг кристалл панжара билан ўзаро таъсири ҳар хил бўлганлиги учун уларни характерловчи энергия ҳам ҳар хил бўлади. Турғун тўлқинлар энергияси орасидаги соҳа эса тақиқланган. 105-расмда металда икки қарама-қарши йўналишда ҳаракатланаётган электронлар энергиясининг импульсга боғлиқлик чизиғи тасвирланган. Ферми сатҳидан паст ҳолатларнинг ҳаммаси тўлдирилган юқори сатҳлари эса бўш. Расмдан кўрамизки, Ферми сатҳининг бир қисми биринчи зонада, бошқа қисми эса иккинчи зонада жойлашган. Баъзи металлларда $E(p)$ шунчалик мураккабки, Ферми сатҳи бир неча Бриллюэн зоналари бўйича тақсимланиши мумкин.

Зонадаги электронлар «гази» учун тезликларнинг, яъни энергиянинг тақсимланиши 1926 йилда Э. Ферми ва П. Ди-



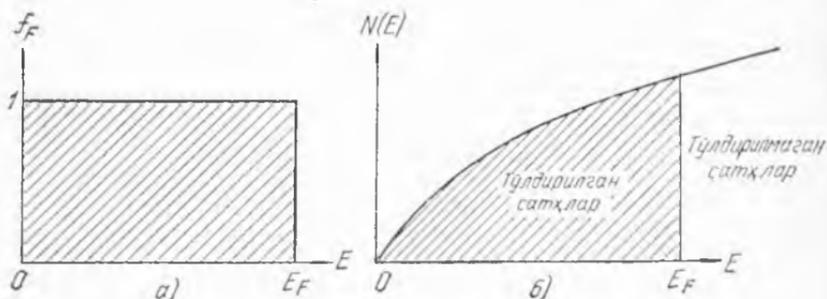
105- расм. Электрон энергиясининг импульсга боғлиқлиги. Эгри чизиқлар қарама-қарши ҳаракатдаги электронларни тасвирлайди. Ферми сатҳи электронлар жойлашиши мумкин бўлган энг юқори сатҳни кўрсатади. Энергия эгри чизиғи билан Ферми сатҳининг кесилган нуқта-сига тўғри келган импульс P (тўлқин сон k) қиймати импульс фазоде шу йўналишдаги Ферми сатҳини белгилайди.

рак томонидан таклиф қилинган. Электронларни энергия бўйича тақсимоти Ферми—Дирак тақсимоти функцияси билан тавсифланади:

$$f_F(E, T) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad (10.25)$$

Ушбу функция E энергияли квант ҳолат бандлигининг эҳтимоллигини ифодалайди. Жумладан, абсолют температурада $E < E_F$ ҳолатлар бандлигининг эҳтимоллиги бирга тенг, $E > E_F$ ҳолатлар бандлигининг эҳтимоллиги эса нолга тенг, яъни

$$f_F(E, 0) = \begin{cases} 1, & \text{агар } E < E_F; \\ 0, & \text{агар } E > E_F. \end{cases} \quad (10.26)$$



106-расм. Ферми—Дирак тақсимоти функцияси.

Ҳақиқатан ҳам, (10.25) га кўра $T = 0$ да $E < E_F$ учун $e^{(E-E_F)/kT} \rightarrow 0$, $E > E_F$ учун эса, $e^{(E-E_F)/kT} \rightarrow \infty$. Ферми — Дирак функциясининг абсолют ноль температурадаги графиги 106-а расмда тасвирланган тўғри бурчакли тўртбурчакдан иборат бўлади.

(10.25) га асосан энергияси E қиймат атрофидаги dE интервалида жойлашган электронлар сони $N(E)dE$ ни ҳисоблаш учун Ферми функциясини энергиянинг шу dE интервалидаги сатҳлар сони $g(E)dE$ га кўпайтириш лозим, яъни

$$N(E) dE = f_F(E, T) \cdot g(E) dE. \quad (10.27)$$

Бу ерда $g(E)$ — мазкур зонада энергиянинг E қиймати атрофидаги сатҳлар зичлиги. Энергиянинг dE интервалидаги электронлар сони $N(E)dE$ ни баъзан Ферми—Дирак тўла тақсимот функцияси деб ҳам айтилади. Агар сатҳлар зичлиги маълум бўлса, (10.27) тенгликнинг икки томонини энергия бўйича нолдан E_F гача интеграллаб, ушбу зонадаги электронларнинг тўла сонини аниқлаш мумкин. Масалан, қисман тўлдирилган зонада электронлар даврий потенциал майдонда тақрибан эркин ҳаракат қилади, деб ҳисоблаш мумкин. У ҳолда электронларнинг энергияси, импульси, тўлқин узунлиги ўртасидаги муносабатлар худди эркин электронлар ҳолидагидек, яъни $E = p^2/2m_e$, $\lambda = h/p$ бўлади.

Ушбу яқинлашишда энергиянинг dE интервалидаги сатҳлар сонини ҳисоблаш учун V ҳажмдаги электромагнит

майдон эркинлик даражасининг сонини ҳисоблашдаги мулоҳазаларни V ҳажмдаги электрон тўлқинлари учун ҳам қайтариш мумкин. У ҳолда E , p , λ лар ўртасидаги юқорида эслатилган боғланишдан

$$|d\lambda| = \frac{h}{\sqrt{2m_e}} \cdot \frac{dE}{2\sqrt{E^3}}, \quad \frac{1}{\lambda^4} = \frac{(2m_e E)^2}{h^4}$$

тенгликлар келиб чиқади. Уларни (1.16) га қўйсақ,

$$dj_{э.л.} = g(E)dE = V \cdot \frac{8\pi}{\lambda^4} d\lambda = V \cdot \frac{4\pi}{h^3} (2m_e)^{3/2} \sqrt{E} dE$$

ҳосил бўлади. Ушбу муносабатни (10.27) га қўйиб, абсолют ноль температурада энергияси нолдан E_F гача бўлган электронлар сонини ҳисоблаш мумкин:

$$N = \int_0^{E_F} N(E)dE = \int_0^{E_F} g(E)dE = V \frac{8\pi}{3h^3} E_F^{3/2} (2m_e)^{3/2}.$$

Бу тенгликдан Ферми энергиясини аниқлаймиз:

$$E_F = \frac{h^2}{2m_e} \left(\frac{3\gamma}{8\pi} \right)^{2/3}, \quad (10.28)$$

бу ерда $\gamma = \frac{N}{V}$ — металлдаги эркин электронлар концентрацияси. (10.28) га кўра Ферми энергияси металл намунасининг ўлчамларига боғлиқ эмас экан.

Мис учун Ферми энергиясини ҳисоблайлик. Мис атоми асосий ҳолатининг электрон конфигурацияси ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s$) га биноан ҳар бир атом ички тўлдирилган қобикларидан ташқарида битта $4s$ электронга эга. Демак, ҳар бир мис атоми кристалл панжаранинг ўтказувчанлик (қисман тўлдирилган) зонасига биттадан электрон беради. У ҳолда электронлар концентрацияси (зичлиги) бирлик ҳажмдаги мис атомларининг сонига тенг, яъни

$$\begin{aligned} \text{атомлар сони/ҳажм} &= \\ &= \left[\frac{\text{атомлар сони}}{\text{кмоль}} \cdot \frac{\text{масса}}{\text{ҳажм}} \right] \cdot \left[\frac{\text{масса}}{\text{кмоль}} \right]^{-1} = N_0 \cdot \rho \cdot A_{\text{Cu}}, \end{aligned}$$

бу ерда $N_0 = 6,02 \cdot 10^{26}$ атом/кмоль — Авогадро сони; $\rho = 8,94 \cdot 10^3$ кг/м³ — миснинг зичлиги; $A_{\text{Cu}} = 63,5$ кг/кмоль —

мис атоми массаси. Демак, $\gamma = 8,5 \cdot 10^{28}$ электрон/м³. Ферми энергиясини (10.28) га биноан ҳисобласак,

$$E_F = \frac{(6,65 \cdot 10^{-34})^2 (\text{Ж/сек})^2}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{кг/электрон}} \cdot \left[\frac{3 \cdot 8,5 \cdot 10^{28} \text{ электрон/м}^3}{8\pi} \right]^{2/3} = 1,13 \cdot 10^{-18} \text{ Ж} = 7,04 \text{ эВ.}$$

Шундай қилиб, мис электронлари абсолют ноль температурада ҳам 7,04 эВ гача энергияга эга бўлар экан. Одатда, идеал газ молекулалари (зарралари) нинг $T = 0$ К даги энергияси нолга тенг бўлиши керак. Металда электронлар гази тамомила аксинча катта энергияга ҳам эга бўлиши мумкин. Шунинг учун электронлар газини айниган газ дейилади.

Юқоридаги ҳисоблашларга биноан энергияси E дан $E + dE$ гача бўлган электронлар сонини умумий ҳолда қуйидагича аниқлаш мумкин:

$$N(E) dE = \frac{3N}{2} \sqrt{\frac{E}{E_F^3}} dE \cdot [e^{(E-E_F)/kT} + 1]^{-1}. \quad (10.29)$$

Ушбу тўла тақсимот функциясидан электронлар газининг абсолют ноль температурадаги тўла энергиясини аниқлаб, уни электронлар сони N га бўлсак, электронларнинг ўртача энергиясини аниқлаймиз, яъни

$$\bar{E}_0 = \frac{\int_0^{E_F} E \cdot N(E) \cdot dE}{N} = \frac{3}{5} E_F.$$

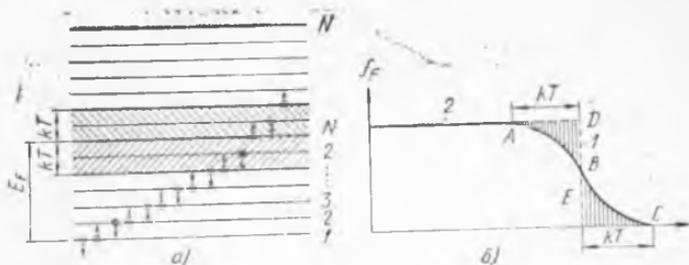
Демак, электронларнинг абсолют ноль температурадаги ўртача энергияси тартиб жиҳатдан Ферми энергиясига тахминан тенг экан.

Абсолют ноль температурада электронларнинг тезлиги ва уларнинг ўртача квадратик тезлиги $\bar{v}_{\text{кв}}$

$$v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}}, \quad \bar{v}_{\text{кв}} = \sqrt{\frac{2\bar{E}_0}{m_e}}$$

га тенг. Мис учун $v_F = 1,6 \cdot 10^6$ м/сек; $\bar{v}_{\text{кв}} = 1,25 \times 10^6$ м/сек.

Температуранинг нолдан фарқли ҳолида электронларнинг иссиқлик уйғотилиши мавжуд ва $f_F(E, T)$ функция энергия E нинг $E_F - kT$ дан $E_F + kT$ гача ўзгаришида



107- расм. Ферми-Дирак тақсимотига температуранинг таъсири. Уйғотилган ҳолатлар штрихланган (а).

деярли 1 га тенг қийматдан 0 га тенг қийматгача ўзгаради. Эриш нуқтасидан паст температураларда $kT \sim 0,1$ эВ. Шунинг учун иссиқлик уйғотилишига Ферми сатҳига яқин жойлашган электронлар учрайди. Айни ҳолда паст сатҳлардаги электронларда ўзгариш юз бермайди. 107-а расмда Ферми тақсимотининг характерининг ушбу ўзгариши тасвирланган.

76- §. Ўта ўтказувчанлик

Абсолют полга яқин температураларда баъзи металлларнинг электр қаршилигини бирданига бутунлай йўқотиш ҳодисаси билан боглиқ ўта ўтказувчанлик ҳолати 1911 йилда голландиялик физик Г. Камерлинг-Оннес томонидан кашф қилинган. Ҳозирги пайтгача ўта ўтказувчанлик ҳодисаси устида кенг миқёсда изланишлар олиб борилмоқда ва бу ҳодисани тушунтириш борасида катта ютуқларга эришилган. Ўрганишлар асосида ҳозирги вақтда йиғирмадан ортиқ соф металллар, юздан ортиқ қотишма ва химиявий бирикмалардан иборат ўта ўтказгичлар аниқланган. Шу нарса қизиқки, одатдаги температураларда энг яхши ўтказгич бўлиб ҳисобланадиган металллар абсолют ноль температурада ўта ўтказгичларга айланмайди.

Металлнинг ўта ўтказувчанлик ҳолатига ўтиш температураси критик температура T_k деб юритилади. Масалан, ўта ўтказгичлардан таллий, қалайи ва қўرғошнинг учун критик температура, мос равишда 2,35 К, 3,73 К ва 7,19 К га тенг.

Ўта ўтказгич ҳолатнинг иккинчи асосий хусусияти 1933 йилда В. Мейсснер ва Р. Ошенфельд томонидан кашф қилинган ва ташқи магнит майдонни ўта ўтказгич ичидан итариб чиқарилиш ҳодисаси— *Мейсснер эффект*идан иборат. Демак, ўта ўтказгич ферромагнитга тескари идеал диамагнетик хоссага эга: темир магнит ташқи магнит майдон куч чизиқларини йиғса, ўта ўтказгич уларни ўз соҳасидан итариб чиқаради, яъни ўта ўтказгич ичида магнит майдон нолга тенг. Мейсснер эффектини ички майдонни ўзгармаслигидан иборат идеал ўтказувчанликнинг зарурий шarti деб ҳисоблаш нотўғри эканлиги Максвелл тенгламаларига асосланган анализдан кўринади. Шундай қилиб, ўта ўтказувчанлик бир вақтда мавжуд икки ҳодиса: идеал ўтказувчанлик ва идеал диамагнетик сифатида намоён бўлади.

Металлнинг ўта ўтказгич ҳолатига ўтишида унинг ўтказувчанлик зонасидаги электрон ҳаракати билан боғлиқ бошқа хоссалари ҳам ўзгаради. Жумладан, металлнинг иссиқлик ўтказувчанлиги, электрон иссиқлик сифими, термо-э. ю. к. ва магнит резонанс эффектларида кескин ўзгариш юз беради. Ушбу ўзгаришлар металлнинг ўта ўтказгич ҳолати унинг электрон структурасини сифат жиҳатдан ўзгариши билан юз беришини кўрсатади. Айни ҳолда, металлнинг ҳолат ўзгаришини паст температураларда юз бериши нормал ва ўта ўтказгич ҳолатларини бир-биридан энергия ва энтропия жиҳатдан кескин фарқ қилмаслигидан дарак беради. Бу хил ҳолат ўзгаришлари иккинчи тур фаза ўтишларига киради.

Металлнинг ўта ўтказгич ҳолатини ташқи магнит майдон H таъсирида бузиш мумкин. Майдон кучланганлигининг ушбу қийматини критик кучланганлик H_k дейилади. 108- расмда тасвирланган H_k ва T ўртасидаги боғлинишни қуйидаги муносабат билан яхши ифодалаш мумкин:

$$H_k = H_0(1 - T^2/T_k^2). \quad (10.30)$$

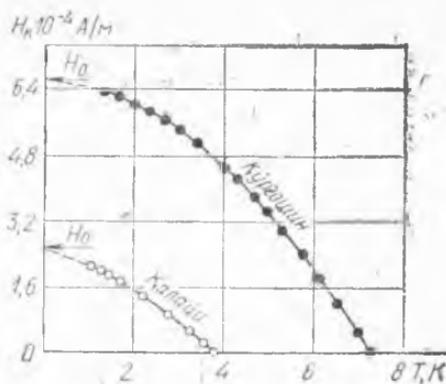
Магнит майдон кучланганлигининг критик қиймати H_k металл температурасига боғлиқ: $T = T_k$ да $H_k = 0$ бўлса, $T < T_k$ да H_k нинг ўсиши кузатилади. Температуранинг абсолют ноль қийматида H_k максимумга эришади.

Химиявий тоза металл учун критик температура унинг ҳар хил изотоплари ядросининг массасига боғлиқ. Тажри-

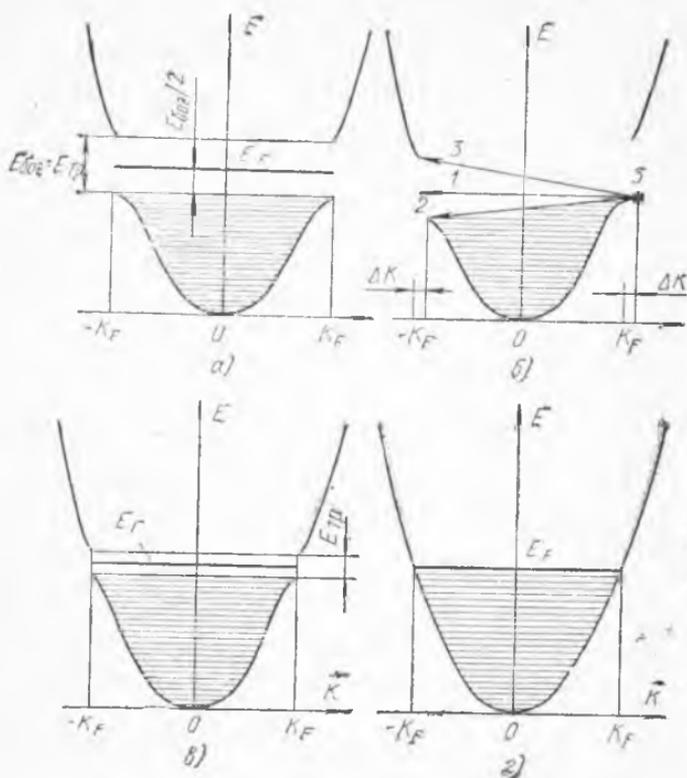
банинг кўрсатишича, критик температура $T_k \sim M^{-1/2}$. Қаттиқ жисм назариясидан маълумки, электронларнинг кристалл панжара тебранишлари билан ўзаро таъсири, яъни электрон — фонон ўзаро таъсири ҳам, тартиб жиҳатдан изотоп массасига шундай пропорционал характерга эга.

Ўта ўтказгичларда электрон сатҳларнинг ўтказувчанлик зонаси энергетик тирқишга, яъни ҳолатлар зичлигининг энергияга боғлиқлик диаграммаси энергиянинг маълум қийматида тирқишга эга. Аниқланишича, ушбу тирқиш Ферми сатҳи атрофида ҳосил бўлар экан. Зонанинг ушбу айтилганларни акс эттирувчи тасвири 109- расмда келтирилган. Ўтказувчанлик зонасининг пастки қисми электронлар билан тўлдирилган, юқори бўш қисми эса тирқишдан юқорида жойлашган. Тирқиш кенглиги $T \rightarrow 0$ да kT_k га пропорционал бўлиб, температурани критик нуқтага яқинлашишида бутунлай нолга айланади, яъни $T \rightarrow T_k$ да $E_{тр} \rightarrow 0$. Ушбу энергетик тирқиш тасаввурига асосан ўта ўтказгичнинг кўп хусусиятларини тушунтириш мумкин.

Юқори ўтказувчанликни $T \rightarrow 0$ К да ҳам мавжуд бўлиши учун ташқи электр майдон таъсирида энергетик тирқишнинг 109-б расмда кўрсатилгандек силжиши юз бериши керак. Расмда ташқи электр майдонни ўнгдан чапга қараб йўналган деб қаралади. Ҳақиқатан ҳам, агар ҳамма электронлар эркин бўлганида улар майдонга қарама-қарши йўналишда ҳаракат қилар эди, яъни тақсимланиш диаграммасида фақат ўнг қисмигина тўлдирилган бўларди. Кристалда эса, ташқи майдон зона электронларининг импульсини чапдан ўнгга йўналиш бўйича маълум Δp қийматга оширади. Ҳамма электронлар ҳам ташқи



108- расм. Ўта ўтказувчанлик ҳолатига ўтиш температурасининг ташқи магнит майдонга боғлиқлиги.



109- расм. Электронларнинг сочилиш жараёнлари юз бер-
майдиган энергия $E(k)$ спектрининг модели.

майдоннинг ушбу таъсирида бўлгани учун, тўлдирилган зона 109-а расмда тасвирланган ҳолатдан 109-б расмдаги ҳолатга силжийди. Δt вақт ичида тўлқин векторини, яъни электрон импульсининг $\Delta K = \frac{\Delta p_e}{\hbar} = \frac{F \Delta t}{\hbar} = \frac{e \mathcal{E} \Delta t}{\hbar}$ га ўз-
гариши ва $E_{\text{тр}}$ ни тақсимлашни билан бир томонга сил-
жиши кузатилади. Умумий ҳолда, электронларнинг им-
пульс (ҳолат) ўзгариши, яъни сочилиши ушбу силжиш
натijasида уч хил: 1) \vec{k} ни $-\vec{k}$ га ўзгартирилиши билан
боғлиқ эластик сочилиш; 2) ярим зонанинг чапки паст
сатҳига ўтиш; 3) ярим зонанинг юқори чап бўш сатҳига
ўтишлар орқали мавжуд бўлиши мумкин. Лекин тақиқ-
ланган зонага, яъни энергетик тирқиш соҳасига 1-ўтиш

тақиқланган. Паули принципига биноан эса 2- ўтиш ҳам мумкин эмас, чунки электроннинг ўтиши мумкин бўлган сатҳ бошқа электрон билан банд; 3- ўтиш эса тақиқланмаганлигига қарамасдан амалга оширилиши учун маълум миқдор энергия $E = E_{\text{тp}}$ ни талаб қилади. Агар металл температураси етарлича паст бўлса, ушбу учинчи ўтиш ҳам амалга ошмайди.

Шундай қилиб, ўтказувчанлик энергетик зонасида силжий оладиган тирқишга эга металл учун электрон ўтказувчанликни чекловчи сочилиш жараёнининг юз бермаслиги келиб чиқади. Натижада, металда ташқи электр майдон E таъсирида Δp_e импульсли электронлар ҳолати—сўнмайдиган ток вужудга келади.

Ўтказувчанлик зонасидаги тирқишнинг вужудга келиш табиатини кўрайлик. Биз юқорида кўрдикки, кристалларда зоналарни вужудга келиши электронларнинг панжара билан ўзаро таъсир натижасида рўй беради. Табиийки, ўта ўтказгичнинг ўтказувчанлик зонасидаги тирқиш ҳам электронларнинг қандайдир ўзаро таъсири асосида вужудга келади, деб ҳисоблаш мумкин.

Ўтказувчанлик зонасининг шартли эркин электронлари кристалл панжара ионлари билан ўзаро таъсирда бўлиб, уларни билинар-билмас ўз ҳаракат изига тортиши мумкин. Бу ҳол албатта панжаранинг иссиқлик тебраниши нолга яқин, яъни $T = 0$ К да сезиларли бўлади. Натижада, ушбу электроннинг ортиқча мусбат зарядли изига иккинчи электрон тортилиши юз беради. Бошқача айтганда, кристалл панжаранинг электрон билан ўзаро таъсирида вужудга келадиган тебраниши икки электронни бир-бирига боғлаш учун билвосита ўзаро таъсир сифатида хизмат қилиши мумкин. Агар электронларнинг ўзаро электр итарилишига қараганда ушбу билвосита таъсирлашуви кучли бўлса, улар боғланган купер жуфтларига бирикади. Электронларнинг купер жуфтларига бирикишида системанинг энергияси электронларнинг жуфтга боғланиш энергияси $E_{\text{боф}}$ га тенг қийматга камаяди. Лемак, агар оддий металнинг ўтказувчанлик зонаси электронлари учун $T = 0$ К да тўлдирилган энг юқори сатҳ энергияси E_F га тенг бўлса, металнинг ўта ўтказувчан ҳолатга ўтиши билан электронлар жуфтиниңг энергияси $E_{\text{боф}}$ га, ҳар бир электрон энергияси эса $E_{\text{боф}} / 2$ га камаяди.

Шундай қилиб, жуфтга боғланган электронларнинг юқори сатҳи билан оддий электронларнинг пастки сатҳи ўрта-сида $E_{\text{бор}}$ га тенг тирқиш юзага келади. Ушбу тирқиш ташқи майдон таъсирида 109-а расмда тасвирлангандек силжий олади. Натижада, кристалл панжарада электронларнинг йўналтирилган, тартибли ҳаракатини бузувчи сочилиш жараёнлари йўқолади. Ўта ўтказувчанлик учун шароит вужудга келади.

Ўта ўтказгичнинг ташқи электр майдон бўлмагандаги асосий ҳолати қарама-қарши спинли ва импульсли (яъни умумий импульси нолга тенг) электрон жуфтлари билан характерланса, ташқи майдон таъсирида ушбу қарама-қарши импульслар бир-биридан фарқ қилади ва Δp_g натижавий импульсни вужудга келтиради.

Ўта ўтказгичда ташқи электр майдон қўйилгандан сўнг вужудга келган Δp_g ва демак, электр токи

$$i = env_g = en \frac{\Delta p_g}{2m_e} = \frac{en}{2m_e} e \mathcal{E} \Delta t = \frac{e^2 n}{2m_e} \Delta t \mathcal{E},$$

каби вақтга пропорционал чексиз ўсиши керакдек туюлади. Аслида ўтказгичда токнинг ўсиши уни вужудга келтирадиган магнит майдон H нинг ҳам ўсишига олиб келади. Натижада, ташқи электр майдон \mathcal{E} га қарама-қарши йўналган индукцион электр майдон $\mathcal{E}_{\text{инд}}$ вужудга келади. Бу эса, ўз навбатида, i га тескари индукцион токни $i_{\text{инд}}$ ҳосил қилади. $i_{\text{инд}}$ эса индукцион магнит майдонни $H_{\text{инд}}$ вужудга келтиради. Ташқи майдон \mathcal{E} таъсирида i токнинг ўсиши маълум вақтдан сўнг $E_{\text{ички}} = \mathcal{E} - \mathcal{E}_{\text{инд}} = 0$ ва $H_{\text{ички}} = H - H_{\text{инд}} = 0$ га олиб келади. Ушбу мувозанатнинг сақланиши учун купер жуфтлари (i) токининг исталганча узоқ сақланиши талаб қилинади. Бунинг учун ўта ўтказгичнинг электр қаршилиги нолга тенг бўлиши керак. Демак, маълум вақтдан сўнг ўта ўтказгичда қуйидаги ҳолат вужудга келади:

$$\mathcal{E}_{\text{ички}} = 0, H_{\text{ички}} = 0, i = \text{const.}$$

Энди ўта ўтказгичда электр токнинг мавжуд бўлиши учун ташқи майдон бўлиши керак эмас. Қаршиликнинг нолга тенглиги сабабли ўта ўтказгичда вужудга келган ток исталганча узоқ вақт сақланади. Бу метални ўта ўтказгич ҳолатида эканлигидан дарак беради.

77- §. Қаттиқ жисмнинг иссиқлик хоссалари

Кристалнинг тебранма ҳолатлари. Акустик ва оптиквий тебранишлар. Қаттиқ жисм кристалл панжарасининг иссиқлик тебранишлари, бир томондан, унинг одатдаги температураларда электр қаршилигини тушутирса, иккинчи томондан, Ферми сатҳи ва Ферми тақсимотининг тўғрилигини тасдиқловчи қўшимча экспериментал далил беради.

Кристалда ҳар бир атом ўз мувозанат ҳолати атрофида иссиқлик тебранишида бўлади. Атомларнинг бир-бири билан кучли ўзаро таъсир орқали боғланиши уларнинг тебранма ҳаракатларини фазовий тартибланган системанинг яхлит ҳолидаги тебраниши сифатида қарашга имкон беради. Чунки кристалдаги бир атомда туғилган тебранма ҳаракат атомларнинг кучли ўзаро боғланганлиги сабабли дарҳол қўшни атомларга узатилади ва шундай йўл билан кристалда ҳамма атомларнинг коллектив тебранишини вужудга келтиради. Ушбу коллектив тебранишларга кристалл панжаранинг нормал тебранишлари дейилади. Кристалда вужудга келиши мумкин бўлган нормал тебранишлар сони кристалл зарраларининг эркинлик даражаси сонига, яъни кристални N та атомдан ташкил топган десак, $3N$ га тенг.

Кристаллардаги тўлқин процессларни характерлаш учун ҳам тўлқин тарқалишига мос йўналган тўлқин вектори \vec{q} дан фойдаланиш қулайлик туғдиради.

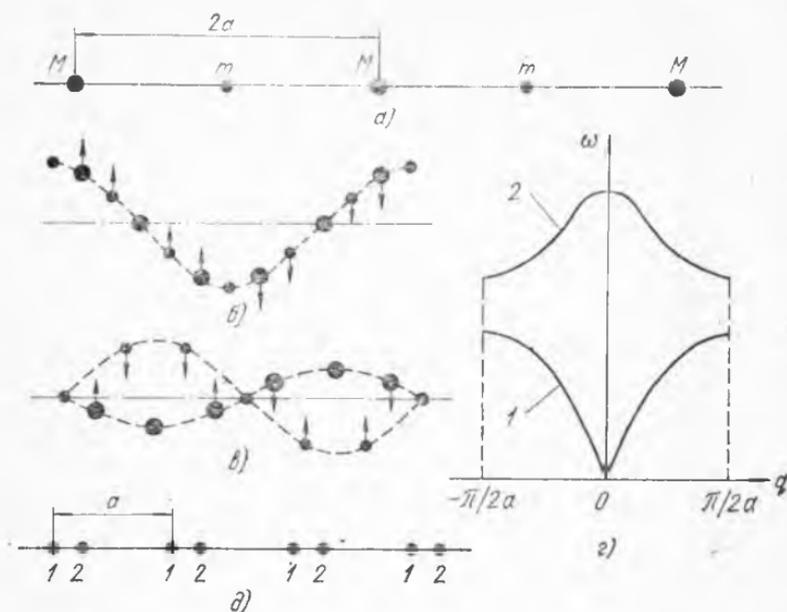
$$q = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{v}. \quad (10.31)$$

Бу ерда λ — тўлқин узунлик, ω — нормал тебраниш частотаси, $v = v(q)$ — тўлқин (товуш) тарқалиш фазавий тезлиги — тўлқин векторининг функцияси. Масалан, эластик боғланган атомларнинг чизиқли занжири учун

$$v = v_0 \frac{\sin(qa/2)}{qa/2},$$

v_0 — атомлар орасидаги масофа a ни нолга тенг ҳолидаги узлуксиз эластик торда тебранишнинг тарқалиш тезлиги.

Фараз қилайлик, чизиқли занжир массаси M ва m га тенг икки хил атомларнинг 110 - a расмдаги каби навбат билан жойлашишидан иборат бўлсин. У ҳолда икки хил нормал тебранишлар бўлиши мумкин. 110 - b расмдаги теб-



110-расм. Атомлар занжирида (а) вужудга келиши мумкин бўлган нормал тебранишлар;

б — акустик, в — оптикавий тебранишлар, г — дисперсион чизиқ.

раниш бир жинсли занжир тебранишидан фарқ қилмайди. Ушбу ҳолда ҳамма атомлар бир фазада тебранади. Тебраниш частотаси, (10.31) га кўра, $q = 0$ да 110-г расмда 1 чизиқ орқали тасвирланганидек нолга тенг. Бу хил тебранишларни акустик тебраниш дейилади. Акустик тебранишлар занжирдаги товуш тебранишларининг ҳамма спектрини $\omega(q)$ ўз ичига олади ва у кристалнинг иссиқлик хоссаларида деярли асосий роль ўйнайди.

110-в расмда тасвирланганидек, қўшни ҳар хил атомларнинг қарама-қарши фазада тебраниши кристалл панжаранинг оптикавий тебраниши дейилади. Оптикавий тебранишлар икки хил атомларнинг (масалан, NaCl) бир-бирига киритилган икки бир жинсли кристалл панжараларни ўзаро тебраниши сифатида қараш мумкин. Оптикавий нормал тебранишларнинг занжирсимон панжара ҳоли учун дисперсия чизиғи $\omega_{\text{опт}}(q)$ 110-г расмда 2 чизиқ орқали тасвирланган. Ушбу тебранишлар кристалнинг ёруғлик билан ўзаро таъсирлашув жараёнларини характерлайди.

Оптикавий тебранишлар умуман бир-бирига киритилган икки панжаранинг ўзаро тебранишида вужудга келади. Оптикавий тебранишнинг вужудга келиши учун, айрим ҳолда, бир жинсли бу икки панжаранинг атомлари ҳар хил бўлиши шарт эмас. Масалан, 110- § расмда тасвирланган бир хил атомлардан тузилган ва бир-бирига киритилган икки панжаранинг ўзаро тебраниши ҳам оптикавий тебранишдир.

Фононлар. Иссиқлик сизими. Қаттиқ жисмнинг ҳар бир атоми уч эркинлик даражасига ва демак, ўзаро тик уч йўналишдаги нормал тебранишга эга. Тебранишлар назариясида исботланаднки, нормал тебраниш энергияси осциллятор энергиясига тенг. Ҳар бир моментда осцилляторнинг тўла энергияси унинг кинетик ва потенциал энергиялари йиғиндисидан иборат бўлади:

$$E = \frac{mv^2}{2} + \frac{kx^2}{2} \quad (10.32)$$

бунда m — тебранувчи атом массаси. Муайян температурада осцилляторлар системасининг бир осцилляторга тўғри келган ўртача энергиясини ҳисоблаш учун (10.32) энергияни Больцман тақсимооти функциясига кўпайтириб, энергиянинг ҳамма қийматларида интеграллаш ва нормалаш учун, натижани $\exp(-E/kT)$ дан олинган интегралга бўлиш керак, яъни

$$E_{\text{осц.}} = \int E \exp(-E/kT) dv dx \Big| \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dv dx = kT. \quad (10.33)$$

Бу ерда ва (10.32) да v — зарра тезлиги. Демак, ҳар бир атомнинг классик ўртача энергияси $3kT$ га тенг экан. Бир киломоль қаттиқ жисмнинг T температурадаги тўла энергияси $3kT$ ни Авогадро сонига кўпайтириш билан аниқланади, яъни

$$E_{kT} = 4N_0 kT = rRT \quad (10.34)$$

бу ерда N_0 — Авогадро сони, k — Больцман доимийси, $N_0 k = R$ — эса газ учун универсал доимий.

Ўзгармас ҳажмда иссиқлик сизими қуйидагича аниқланади:

$$C_V \rightarrow \left(\frac{\partial E_{kT}}{\partial T}\right)_V = 3R. \quad (10.35)$$

Ушбу формула қаттиқ жисмлар иссиқлик сизимининг

Дюлонг-Пти қонунини ифодалайди. Дюлонг ва Пти қонуни энгил элемент кристаллари ва паст температуралар ҳолида экспериментдан кескин фарқ қилади.

(10.33) формула бўйича осциллятор энергиясини ҳисоблашда E ни узлуксиз деб, интеграллаш амалини қўллаган эди. 1907 йилда Эйнштейн C_h ни тўғри тушунтириш учун осциллятор энергиясини (E) узлукли

$$E_n = \left(n \pm \frac{1}{2} \right) h \nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

деб ўртача энергияни ҳисоблади. Бунинг учун (10.34) даги интегрални йиғинди билан алмаштириш керак. Эйнштейн осцилляторнинг ўртача энергияси учун

$$\bar{E}_{\text{осц.}} = h \nu / [e^{\frac{h \nu}{kT}} - 1] \quad (10.36)$$

ифодани ҳосил қилади. U ҳолда иссиқлик сифими учун Эйнштейн формуласи қуйидагича ифодаланати:

$$C_V = \left(\frac{\partial E_{kT}}{\partial T} \right)_V = \frac{R}{(e^{\frac{h \nu}{kT}} - 1)^2} e^{\frac{h \nu}{kT}} \left(\frac{h \nu}{kT} \right)^2. \quad (10.37)$$

Юқори температураларда ($kT \gg h \nu$):

$$e^{\frac{h \nu}{kT}} \sim 1 + h \nu / kT.$$

демак, Эйнштейн формуласидан Дюлонг ва Пти қонунига келамиз.

Паст температураларда Эйнштейн формуласи экспоненциал равишда нолга интилади. Тажрибада эса абсолют нолга яқин температураларда иссиқлик сифимининг T^3 каби нолга интилиши кузатилади. Шундай қилиб, Эйнштейн формуласи иссиқлик сифимининг температура бўйича ўзгаришини паст температураларда фақат сифат жиҳатдангина тавсифлай олади.

Қаттиқ жисмнинг Эйнштейн моделида ҳар бир атомнинг тебранишлари қўшни атомларга боғлиқ бўлмайди, деб ҳисобланган эди. Атомларнинг ўзаро боғлиқлигини ҳисобга олиш учун П. Дебай 1912 йилда қаттиқ жисмни яхлит эластик жисм сифатида қарашни таклиф қилади. Қаттиқ жисмнинг Дебай моделида жисмнинг ички энергияси атомларнинг мустақил тебранишига эмас, балки жисм бўйлаб тарқалувчи турғун нормал тўлқинларга боғлиқ. Ушбу нормал тўлқинлар (товуш) электромагнит тўлқин сингари квантланган энергияга эга бўлади. Қаттиқ жисм тебраниш

энергиясининг квантига ($h\nu$) фононлар деб ном берилган. Ҳар бир ($h\nu$) фонон жисм бўйлаб товуш тезлигида тарқалади, чунки худди шу товуш тўлқинларигина табиати жиҳатдан эластикдир.

Фононлар фотонлар сингари Бозе—Эйнштейн тақсимотига бўйсунди [(1.24) га қ.]:

$$f(E) = \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}.$$

Фононлар нуқтаи назаридан қиздирилган қаттиқ жисмни «Фонон гази» билан тўлдирилган идишга ўхшатиш мумкин. Қаттиқ жисм соҳасидаги турғун тўлқинлар сонини (1.16) орқали ифодаланишини ва ҳар бир тўлқин учун ўртача энергия (10.36) га тенглигини эътиборга олсак, ҳамма тўлқинларнинг умумий энергиясини шу икки ифодани бир-бирига кўпайтириб, частота бўйича интеграллаш орқали аниқлаш мумкин. Натижада, қаттиқ жисм иссиқлик сифими учун Дебай назарияси берадиган

$$C_V = 9R \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{\theta/T} \frac{e^x x^4 dx}{e^x - 1} \quad (10.38)$$

формулага келамиз. Бу ерда $\theta = h\nu_m/k$ — Дебай температураси дейилади, ν_m — мумкин бўлган энг катта частота. ν_m муҳитда тарқалаётган тўлқинларнинг мумкин бўлган энг кичик тўлқин узунлиги тахминан атомлараро масофага тенг бўлишини ва ундан кичик тўлқин узунликли тўлқинларни муҳитда тарқала олмаслигини кўрсатади. Шундай қилиб, θ — қаттиқ жисмдаги товуш тезлигининг ва атомлараро масофанинг функциясидир.

Қаттиқ жисм иссиқлик сифимининг Дебай назарияси тажриба натижаларини аниқ тавсифлайди. Дебай назариясига кўра электронларнинг иссиқлик сифимига қўшган ҳиссаси ҳисобга олмайдиган даражада экан. Металлнинг иссиқлик сифимига юқори зонадаги шартли эркин электронлар таъсирининг йўқлиги табиати уларнинг зона бўйлаб Ферми энергетик тақсимотидан бевосита келиб чиқади. Металл қиздирилганида, Ферми сатҳидан kT масофада, яъни энг юқори сатҳга яқин жойлашган электронларгина уйғотилади ва юқори бўш сатҳларга ўтиши мумкин бўлган kT масофадан узоқ электронлар уйғотилиши мумкин эмас, чунки улар ўтиши мумкин бўлган сатҳлар банддир.

Агар уйғотилиши мумкин бўлган электронлар сонини ҳисобласак, иссиқлик сизгимига электронлар ҳиссасини баҳолар олар эдик. Ҳисоблашлар кўрсатадики, электроннинг иссиқлик сизгими

$$C_{V_e} = R (\pi^2/2) kT/E_F \quad (10.39)$$

га тенг. Ҳар доним $kT \ll E_F$ сабабли жисм иссиқлик сизгимига электронларнинг қўшган ҳиссаси кичикдир. Ушбу ҳисса фақат $T \rightarrow \infty$ да ва $T \rightarrow 0$ да сезиларли бўлиши мумкин.

АДАБИЁТ

1. М. Борн. Атомная физика. «Мир», Москва, 1970.
2. Л. Л. Гольдин, Г. И. Новикова. Введение в атомную физику. «Наука», Москва, 1969.
3. А. Н. Матвеев. Квантовая механика и строение атома. «Высшая школа», Москва, 1965.
4. И. В. Савельев. Умумий физика курси. III том. «Ўқитувчи», Тошкент, 1976.
5. Р. Спроул. Современная физика. «Наука», Москва, 1974.
6. Шифф. Квантовая механика. ИЛ, Москва, 1959.
7. Э. В. Шпольский. Атом физикаси. I том. «Ўқитувчи», Тошкент, 1970.
8. Л. Н. Добрецов. Атомная физика. изд. Физика-математической литературы, Москва, 1960.
9. Т. Эрден—Груз. Основы строения материи, «Мир», Москва, 1976.

МУНДАРИЖА

К и р и ш

I б о б. Иссиқлик нурланиши ва квант ҳақидаги тушунчанинг вужудга келиши	6
1 - §. Иссиқлик нурланиши	6
2 - §. Қирхгоф қонуни	10
3 - §. Иссиқлик нурланишининг классик назарияси	13
4 - §. Люммер ва Прингсгейм тажрибаси	19
5 - §. Планк формуласи	22
6 - §. Планк доимийсини оптикавий пирометрия йўли билан аниқлаш	24
II б о б. Квант назарияси асослари	29
7 - §. Ёругликнинг корпускуляр ва зарраларнинг тўлқин табиати	29
8 - §. Фотозлектрик эффект	31
9 - §. Комптон эффекти	38
10 - §. Девиссон ва Жермер тажрибалари	44
11 - §. Фотонлар ва зарралар ҳаракатининг квант табиати	49
12 - §. Де-Бройль тўлқинининг хоссалари	52
III б о б. Атом тузилиши ва Бор назарияси	59
13 - §. Атомнинг чизиқли спектридаги қонуниятлар	59
14 - §. Атом тузилишининг Резерфорд модели	64
15 - §. Бор постулатлари. Атомнинг энергетик сатҳларини ўрганиш	73
16 - §. Водород атомининг Бор назарияси	83
IV б о б. Квант механикаси	90
17 - §. Тўлқин функция	90
18 - §. Шрёдингер тенгламаси	93
19 - §. Микродунёнинг ноаниқлик принципи	99
20 - §. Ўртача қиймат. Операторлар	107
21 - §. Хусусий қиймат ва хусусий функция	111
22 - §. Тўғри бурчакли потенциал ўра	114
23 - §. Потенциал тўсиқ. Туннель эффекти	
24 - §. Туннель эффектига доир мисоллар. Совуқ эмиссия	124
25 - §. Чизиқли гармоник осциллятор	127
26 - §. Марказий куч майдонидаги ҳаракат	149
V б о б. Водородсимон атомлар	158
27 - §. Водород атоми	158
28 - §. Водородсимон атомлар спектри	164
29 - §. Спектр чизиқларининг кенглиги	168
30 - §. Ядро ҳаракатининг ҳиссаси	171
31 - §. Энергетик сатҳларнинг Кулон айиши	175
32 - §. Водородсимон атомнинг тўлқин функцияси	180
33 - §. Электроннинг фазовий тақсимоти	182
VI б о б. Ҳаракат миқдори ва магнит моментлари	191
34 - §. Ҳаракат миқдорининг моменти ва унинг проекциясининг квантланиши	191
35 - §. Ҳаракат миқдори моментларини қўшиш	195
36 - §. Орбитал магнит моменти	200
37 - §. Электроннинг спини	204

38- §.	Фазовий квантланишнинг экспериментда кузатилиши . . .	208
39- §.	Электроннинг тула механик ва магнит моменти . . .	213
40- §.	Орбитал ва спин моментларнинг узаро таъсири. <i>LS-</i> ва <i>jj-</i> боғланиш	219
41- §.	Водород ва водородсимон атомлар сатҳларининг нозик структураси	224
42- §.	Магнитомеханик эффектлар	229
VII б о б.	Мураккаб атомлар	233
43- §.	Атом спектр чизиқларининг табиати	233
44- §.	Дипол нурланиш	236
45- §.	Танлаш қондаси	238
46- §.	Термнинг мультиплетлиги	243
47- §.	Паули принципи	245
48- §.	Ишқорий металллар атомининг энергетик сатҳлари ва спектри	250
49- §.	Мураккаб атомларнинг электрон қобиғи	260
50- §.	Менделеевнинг даврий системаси	262
51- §.	Хунд қондаси	270
52- §.	Мураккаб атомлар спектри	273
53- §.	Рентген нури	280
VIII б о б.	Атом ташқи электр ва магнит майдонда	286
54- §.	Зеemannнинг нормал эффекти	288
55- §.	Зеemannнинг аномал эффекти	291
56- §.	Пашен — Бак эффекти	298
57- §.	Штарк эффекти	30
IX б о б.	Молекулалар тузилиши	30
58- §.	Химиявий боғланиш кучлари	310
59- §.	Электронларнинг умумлаштирилиши	312
60- §.	Водород молекуласи. Алмашинув узаро таъсир . . .	318
61- §.	Валентлик	326
62- §.	Молекуланинг энергетик сатҳлари	327
63- §.	Ротацион спектрлар	331
64- §.	Табриқма- айланма ҳаракат спектрлари	334
65- §.	Электрон спектрлари	338
66- §.	Ўрагликнинг комбинацион сочилиши	340
67- §.	Спонтан ва мажбурий нурланиш	347
68- §.	Лазерлар	352
X б о б.	Қаттиқ жисмлар	358
69- §.	Қаттиқ жисмларнинг кристалл тузилиши	359
70- §.	Қаттиқ жисмларда атом энергетик сатҳларининг зоналарга ажралиши	367
71- §.	Зоналарнинг электронлар билан тўлдирилиши Электр ўтказувчанлик	370
72- §.	Кристалл панжарада электрон энергиясининг импульсига ўзгача боғланиши	375
73- §.	Электроннинг эффектив массаси	382
74- §.	Ярим ўтказгичлар	384
75- §.	Металлар Ферми сатҳи. Ферми- Дирак тақсимооти . . .	388
76- §.	Ўта ўтказувчанлик	395
77- §.	Қаттиқ жисмнинг иссиқлик хоссалари	401
А д а б и ё т		406

