

VILNIAUS UNIVERSITETAS

Andrius Poškus

**ATOMO FIZIKA
IR
BRANDUOLIO FIZIKOS EKSPERIMENTINIAI METODAI**

(1 – 6 skyriai)

Vilniaus universiteto leidykla

2008

UDK 539.1(075.8)
Po216

Lietuvos Respublikos švietimo ir mokslo ministerijos
Aukštųjų mokyklų bendrųjų vadovėlių leidybos
komisijos rekomenduota
2007 m. gruodžio 7 d. (protokolas Nr. 07-375)

Recenzavo:
doc. dr. Diana Adlienė,
Kauno technologijos universitetas,
prof. dr. Vidmantas Remeikis,
Fizikos institutas

Vadovėlio leidimą rėmė:
Lietuvos Respublikos švietimo ir mokslo ministerija
Vilniaus universiteto Fizikos fakultetas

Turinys

Pratarmė	vi
I dalis Atomo ir branduolio fizika	1
1. Kvantinės mechanikos atsiradimo istorinės prielaidos	3
1.1. Šiluminės spinduliuotės sąvoka ir ją apibūdinantys dydžiai	3
1.2. Šiluminio spinduliavimo dėsniai	6
1.3. Harmoninio osciliatoriaus energijos diskretumas	7
1.3.1. <i>Elektromagnetinės bangos kubinėje ertmėje. „Ultravioletinė katastrofa“</i>	7
1.3.2. <i>Planko hipotezė. Osciliatoriaus energijos kvantas</i>	10
1.4. Elektromagnetinės spinduliuotės fotoninė teorija	12
1.5. Fotoefektas. Einšteino lygtis	12
1.6. Komptono efektas	14
1.7. Branduolinis atomo sandaros modelis. Rezerfordo tyrimai	16
1.8. Vandenilio atomo spektro linijų dažniai	17
1.9. Boro postulatai	18
1.10. Boro vandenilio atomo modelis	19
1.11. Atomo magnetinės savybės pagal Boro teoriją	23
1.12. Boro atomo teorijos ribotumas	24
1.13. Bangos-dalelės dvejopumas. Heizenbergo nelygybė	25
1.14. Elektronų banginių savybių eksperimentinis patvirtinimas	27
1.14.1. <i>Bangų difrakcija kristale</i>	27
1.14.2. <i>Brego lygtis</i>	29
1.14.3. <i>Devisono ir Džermerio bandymas</i>	29
1.15. Banginė funkcija ir jos statistinė samprata	30
Uždaviniai	32
2. Paprasčiausių sistemų Šrėdingerio lygties sprendimas	33
2.1. Šrėdingerio lygtis ir energijos lygmenys	33
2.1.1. <i>Nuostovioji ir nenuostovioji Šrėdingerio lygtis</i>	33
2.1.2. <i>Nuostoviosios Šrėdingerio lygties tikrinės funkcijos ir tikrinės vertės</i>	33
2.1.3. <i>Dalelių srauto tankio išraiška bangine funkcija pagal Šrėdingerio lygtį</i>	34
2.1.4. <i>Daugelio dalelių sistemos Šrėdingerio lygtis ir banginė funkcija</i>	35
2.2. Laisvosios dalelės banginė funkcija. Potencialo šuolio arba barjero įtaka	37
2.2.1. <i>Laisvoji dalelė</i>	37
2.2.2. <i>Potencialo šuolis, $E > U_0$</i>	38
2.2.3. <i>Potencialo šuolis, $E < U_0$</i>	39
2.2.4. <i>Potencialo barjeras, $E > U_0$</i>	40
2.2.5. <i>Potencialo barjeras, $E < U_0$. Tunelinis reiškiny</i>	41
2.3. Dalelė potencialo duobėje	43
2.3.1. <i>Potencialo duobės Šrėdingerio lygties sprendinio bendrosios savybės</i>	43
2.3.2. <i>Dalelė be galo gilioje vienmatėje stačiakampėje potencialo duobėje</i>	46
2.3.3. <i>Dalelė be galo gilioje trimatėje stačiakampėje potencialo duobėje</i>	48
2.3.4. <i>Dalelė baigtinio gylio vienmatėje stačiakampėje potencialo duobėje</i>	48
2.3.5. <i>Vienmatis harmoninis osciliatorius</i>	50

2.3.6. Elektronas branduolio elektriniame lauke	52
Uždaviniai	53
3. Dalelės būseną apibūdinantys fizikiniai dydžiai ir jų operatoriai	54
3.1. Operatoriai kvantinėje mechanikoje. Kvantinės mechanikos postulatai	54
3.1.1. Pagrindinės apibrėžtys	54
3.1.2. Kvantinės mechanikos postulatai	55
3.1.3. Pagrindinių fizikinių dydžių operatoriai	56
3.1.4. Lyginumas. Lyginumo tvermės dėsnis	58
3.1.5. Neapibrėžtumų sąryšiai	59
3.1.6*. Operatorių ir banginių funkcijų matricinės išraiškos	60
3.2. Centriname jėgų lauke judančios dalelės banginė funkcija ir kvantiniai skaičiai	61
3.2.1. Judesio kiekio momento ir jo projekcijos tikrinės vertės. Sferinės harmonikos	61
3.2.2. Radialiosios lygties pakeitimas vienmačio judėjimo potencialiniame lauke lygtimi	63
3.2.3*. Vandeniliškojo atomo radialioji banginė funkcija ir energijos lygmenys	64
3.2.4. Vandeniliškojo atomo būsenų klasifikacija ir banginių funkcijų bendrasis pavidalas	65
3.2.5. Šarminių metalų atomų energijos lygmenys	66
3.3. Sukinys. Elektrono sukinio ir orbitos sąveika. Momentų sudėtis	67
3.3.1. Sukinio kvantiniai skaičiai	67
3.3.2. Sukinio ir orbitos sąveikos potencinė energija	68
3.3.3. Elektrono pilnutinis judesio kiekio momentas	70
3.3.4. Elektrono energijos lygmenų skilimas dėl sukinio ir orbitos sąveikos	71
3.3.5*. Sukinio ir orbitos sąveikos analizė kvantinės mechanikos metodais	71
3.3.6*. Sukinio operatorius ir sukininė banginė funkcija	72
3.4*. Dirako lygtis ir elektrono sukinys	74
Uždaviniai	78
4. Daugiaelektroniai atomai	79
4.1. Vienodų dalelių sistemos banginė funkcija. Paulio draudimo principas	79
4.1.1. Vienodų dalelių sistemos banginės funkcijos simetrija dalelių transpozicijos atžvilgiu	79
4.1.2. Nesąveikaujančių vienodų dalelių sistemos banginė funkcija	79
4.1.3. Banginė funkcija, kai viendalelis hamiltonianas nepriklauso nuo sukininės koordinatės	81
4.1.4. Dviejų vienodų dalelių, kurių sukinys yra $1/2$, sistemos banginė funkcija	82
4.2. Daugiaelektronio atomo judesio kiekio momentas ir magnetinis momentas	86
4.3. Helio atomas. Elektronų pakaitinė sąveika	89
4.3.1*. Helio atomo analizė, pagrįsta trikdymų teorija. Pakaitinė sąveika	89
4.3.2. Kiti reiškiniai, kuriuose pasireiškia elektronų pakaitinė sąveika	91
4.4. Elektronų sluoksniai	92
4.5. Periodinė elementų sistema	94
Uždaviniai	96
5. Atomų kvantiniai šuoliai ir elektromagnetinė spinduliuotė	97
5.1. Elementarioji kvantinė spinduliavimo teorija	97
5.2*. Kvantinių šuolių teorija	99
5.2.1. Priverstinių kvantinių šuolių tikimybė per laiko vienetą	99
5.2.2. Savaiminių kvantinių šuolių tikimybė per laiko vienetą	102
5.2.3. Spinduliuotės linijos forma. Natūralusis linijos plotis	104

5.3. Atomo kvantinių šuolių atrankos taisyklės	105
5.4. Atomų spektro linijų smulkioji sandara	107
Uždaviniai	108
6. Rentgeno spinduliuotė	109
6.1. Rentgeno spinduliuotės šaltiniai	109
6.2. Stabdomoji rentgeno spinduliuotė	109
6.3. Būdingoji rentgeno spinduliuotė	111
6.4. Mozlio dėsnis	114
6.5. Būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro smulkioji sandara	115
Uždaviniai	116

Pratarmė

Atomas – tai mažiausioji materijos dalelė, kuri turi cheminio elemento būdingąsias savybes. Atomas sudarytas iš branduolio ir aplink jį pasiskirsčiusių elektronų „debesies“. Šias dvi atomo dalis nagrinėja dvi fizikos šakos – atomo fizika ir branduolio fizika. *Atomo fizika* – tai fizikos sritis, kuri nagrinėja atomo elektronų sluoksnių sandarą ir reiškinius, kuriuos lemia atomo elektronų sluoksnių savybės. *Branduolio fizika* – tai fizikos šaka, kuri nagrinėja atomo branduolio sandarą ir jo savybes.

Šis vadovėlis skirtas aukštųjų mokyklų III kurso fizikos studentams. Knygos pirmojoje dalyje (1–13 skyriuose) išdėstyti atomo ir branduolio fizikos pagrindai. Knygos antrojoje dalyje (14–23 skyriuose) aptarti kai kurie branduolio fizikos eksperimentiniai metodai.

Knygos pagrindu tapo dviejų studijų dalykų paskaitų konspektai – „Taikomosios branduolio fizikos“ (dėstoma nuo 2005 m. Vilniaus universiteto fizikos fakulteto III kurso studentams) ir „Atomo fizikos“ (dėstyta 2001–2003 m. VU matematikos fakulteto III kurso studentams). Be to, dalis čia pateiktos medžiagos remiasi autoriaus patirtimi, kurią jis įgijo 1997–2007 m., dirbdamas VU fizikos fakulteto kietojo kūno elektronikos katedroje, V bendrosios fizikos laboratorijoje (atomo ir branduolio fizika) ir Taikomosios branduolio fizikos laboratorijoje.

Kadangi knygos tematika yra gana plati, tai, siekiant sumažinti knygos apimtį, teko praleisti kai kuriuos klausimus, kurie aptariamai daugelyje kitų atomo fizikos ir eksperimentinės branduolio fizikos vadovėlių. Atrenkant medžiagą šiai knygai, pirmenybė buvo teikiama klausimams, kurie yra labiau susiję su jonizuojančiąja spinduliuote – jos kilmė, savybėmis ir detektavimu. Autoriaus tikslas buvo ne pateikti aptariamųjų klausimų gausą, o kiekvieną klausimą aptarti išsamiai ir nuosekliai. Siekta pagal galimybes pagrįsti kiekvieną teiginį, pateikti formulių išvedimus. Toks dėstymo stilius naudojamas ne tik pirmojoje („teorinėje“) knygos dalyje, bet ir antrojoje („eksperimentinėje“) dalyje, kur yra aptariamai dalelių greitintuvai, jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriai ir spektrometrai.

Medžiaga pateikiama „dviem srautais“: elementarios pradinės žinios ir gilesnė teorinė analizė. Priklausomai nuo skaitytojo poreikių, skaitant šią knygą, galima praleisti skyrius, kurie yra labai „matematizuoti“ arba yra silpnai susiję su likusiąja knygos dalimi. Tokių skyrių ir poskyrių numeriai yra pažymėti žvaigždute „*“.

Knygoje stengiasi vartoti tradicinius fizikinių dydžių žymenis. Dėl didelio šioje knygoje vartojamų fizikinių dydžių skaičiaus kai kurie žymenys yra bendri keliems fizikiniams dydžiams. Skirtingi dydžiai su vienodais žymenimis niekada nevartojami viename skyriuje, todėl visada aišku, kurią prasmę turi kiekvienas žymuo. Knygos gale yra fizikinių dydžių žymenų lentelė. Visoje knygoje vektoriniai fizikiniai dydžiai žymimi storesniu pasvirusiu šriftu, o skaliariniai – įprastinio storio pasvirusiu šriftu. Vektorių skaliarinė sandauga žymima simboliu „ $\cdot$ “ (pvz., $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$), o vektorinė sandauga žymima simboliu „ $\times$ “ (pvz., $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$).

Dėkoju recenzentams – Kauno technologijos universiteto dėstytojai doc. dr. Dianai Adlienei ir Fizikos instituto direktoriui prof. dr. Vidmantui Remeikiui – už kritinės pastabas, Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto kietojo kūno elektronikos katedros mokslo darbuotojui dr. Romaldui Purliui už medžiagą knygos 6 skyriui („Rentgeno spinduliuotė“) ir buvusiai Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto dėstytojai doc. dr. Jadvygai Zofijai Jasevičiūtei, kad paskatino rašyti šią knygą.

I dalis

Atomo ir branduolio fizika

1. Kvantinės mechanikos atsiradimo istorinės prielaidos

1.1. Šiluminės spinduliuotės sąvoka ir ją apibūdinantys dydžiai

Kvantinė mechanika – tai teorija, kuri aprašo atomų ir mažesnių už atomą dalelių savybes. Pirmuoju žingsniu, kuriant kvantinę teoriją, tapo vokiečių fiziko Makso Planko 1900 m. padaryta prielaida apie spinduliuotės kvantinę prigimtį. Planko hipotezė buvo pagrįsta šiluminės spinduliuotės dėsningumų analize. Todėl šį skyrių pradedame šiluminės spinduliuotės aptarimu.

Elektringosios dalelės (elektronai, jonai), kurios įeina į medžiagos sudėtį, nuolat chaotiškai juda. Tai yra vadinamasis šiluminis judėjimas. Šio judėjimo metu krūvininkų greitis nuolat kinta. Iš elektrodinamikos dėsnių išplaukia, kad su pagreičiu judantys krūvininkai spinduliuoja elektromagnetines bangas. Dėl šio spinduliavimo kūnas netenka energijos. Jeigu šie energijos nuostoliai nebūtų papildomi, tada krūvininkų judėjimo vidutinė energija (t. y. vidutinis greitis) nuolat mažėtų, o kūno temperatūra kristų. Tačiau kūnai ne tik spinduliuoja, bet ir sugeria spinduliuotės energiją, krintančią į juos iš aplinkinių kūnų. Bet kuris kūnas, netekdamas energijos dėl spinduliavimo ir tuo pačiu metu ją įgydamas dėl sugerties, anksčiau ar vėliau tampa pusiausvyros būsenos, kai jis per laiko vienetą išspinduliuoja tiek pat energijos, kiek sugeria. Tokią sistemos būseną, kai visos sistemos dalys per laiko vienetą išspinduliuoja tiek pat energijos, kiek sugeria, vadinsime **termodinamine pusiausvyra**. Tikslesnė termodinaminės pusiausvyros apibrėžtis yra tokia: tai yra izoliuotos sistemos būseną, kai sistemos makroskopiniai parametrai nepriklauso nuo laiko. Svarbiausias iš šių parametrų – tai sistemos temperatūra. Termodinaminės pusiausvyros sąlygomis visų sistemos dalių (taip pat ir elektromagnetinės spinduliuotės) temperatūra yra vienoda.

Elektromagnetinė spinduliuotė, kuri yra termodinaminės pusiausvyros su visais sistemą sudarančiais kūnais, yra vadinama **šilumine spinduliuote**. Žemesnės negu 10^5 K temperatūros šiluminės spinduliuotės energijos didžioji dalis atitinka infraraudonųjų spindulių, regimosios šviesos ir ultravioletinių spindulių diapazoną (atitinkami bangos ilgiai yra pateikti 12.1 lentelėje 12 skyriaus pradžioje).

Kūnų spinduliavimui apibūdinti vartojami keli fizikiniai dydžiai:

Spinduliuotės srautas Φ – tai energijos kiekis, kurį kūnas išspinduliuoja visomis kryptimis per laiko vienetą. Kitaip sakant, tai yra kūno spinduliavimo galia. Spinduliuotės srauto matavimo vienetas yra vatas (W), kuris lygus džauliui per sekundę (J/s).

Energinis šviesis R_T – tai spinduliuotės srautas iš kūno ploto vieneto, t. y. energijos kiekis, kurį išspinduliuoja kūno ploto vienetas visomis kryptimis per laiko vienetą:

$$R_T = \frac{\Delta \Phi}{\Delta s}; \quad (1.1.1)$$

čia Δs yra ploto elementas, o $\Delta \Phi$ yra spinduliuotės srautas iš to ploto elemento. Energinis šviesis matuojamas vatais kvadratiniam metrui (W/m^2). Apatinis indeksas „ T “ energinio šviesio žymenyje „ R_T “ (kaip ir kituose žymenyse, kurie vartojami 1.1 ir 1.2 poskyriuose) nurodo, kad šis dydis bendruoju atveju yra temperatūros funkcija. Kuo aukštesnė temperatūra, tuo didesnis energinis šviesis.

Spektrinis šviesis. Kūno spinduliuotės poveikis aplinkiniams kūnams priklauso ne vien nuo jo energinio šviesio vertės, bet ir nuo spinduliuotės bangos ilgio. Todėl dažnai reikia žinoti, koks yra kūno energinis šviesis tam tikrame bangos ilgių intervale. Tarkime, kad kūno energinis šviesis, kuris atitinka nykstantą bangos ilgių intervalą nuo λ iki $\lambda + d\lambda$, yra lygus dR_T . Tada kūno **spektrinis šviesis**, atitinkantis bangos ilgį λ , yra lygus

$$r_{\lambda,T} = \frac{dR_T}{d\lambda}. \quad (1.1.2)$$

Spektrinio šviesio žymenyje vartojami du indeksai (λ ir T), nes spektrinis šviesis priklauso nuo bangos ilgio λ ir temperatūros T .

Kadangi bangos ilgis gali įgyti visas vertes nuo 0 iki ∞ , tai iš spektrinio šviesio apibrėžties (1.1.2) išplaukia, kad energinis šviesis lygus spektrinio šviesio integralui nuo 0 iki ∞ :

$$R_T = \int dR_T = \int_0^{\infty} r_{\lambda,T} d\lambda. \quad (1.1.3)$$

Kartais mus domina spinduliuotės savybės tam tikroje erdvės srityje nepriklausomai nuo tą spinduliuotę skleidžiančio kūno. Tada vietoj minėtų spinduliuojančio kūno parametrų vartojami toliau apibrėžti spinduliuotės parametrai.

Spinduliuotės energijos tankis W_T – spinduliuotės energijos kiekis erdvės tūrio vienetė (matavimo vienetas – J/m^3).

Spinduliuotės energijos spektrinis tankis $W_{\lambda,T}$ – spinduliuotės energijos tankis, kuris atitinka vienetinį bangos ilgių intervalą (matavimo vienetas – J/m^4). „Energijos spektriniu tankiu“ taip pat vadinamas ir energijos tankis, kuris atitinka vienetinį *dažnių* intervalą. Jis žymimas $W_{\omega,T}$ arba $W_{\nu,T}$, priklausomai nuo to, ar argumento vaidmenį atlieka dažnis ν , ar kampinis (ciklinis) dažnis $\omega = 2\pi\nu$. Spektrinį tankį $W_{\omega,T}$ galima išreikšti spektriniu tankiu $W_{\lambda,T}$ pasinaudojus tokia tapatybe:

$$W_{\omega,T} |d\omega| \equiv W_{\lambda,T} |d\lambda|. \quad (1.1.4)$$

Kadangi

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi c}{\omega}, \quad (1.1.5)$$

kur c yra šviesos greitis, tai $|d\lambda| = (2\pi c / \omega^2) |d\omega|$. Įrašę tai į (1.1.4), matome:

$$W_{\omega,T} \equiv \frac{2\pi c}{\omega^2} W_{\lambda(\omega),T}; \quad (1.1.6)$$

čia žymuo $W_{\lambda(\omega),T}$ reiškia spektrinio tankio $W_{\lambda,T}$ išraišką, kurioje bangos ilgis λ pakeistas (1.1.5) reiškiniu.

Spinduliuotės intensyvumas duotąja kryptimi – duotosios krypties spinduliuotės energijos kiekis, kuris krinta per laiko vienetą iš vienos pusės į vienetinio ploto paviršių, kuris statmenas spinduliuotės kryptčiai (matavimo vienetas – W/m^2). Spinduliuotės intensyvumą žymėsime didžiąja raide I . Kadangi elektromagnetinė spinduliuotė sklinda šviesos greičiu c , tai spinduliuotės intensyvumas yra lygus tos krypties spinduliuotės energijos tankio W ir šviesos greičio sandaugai:

$$I = cW. \quad (1.1.7)$$

Kadangi šiluminė spinduliuotė nėra kryptinga, tai anksčiau pateiktoji intensyvumo apibrėžtis netinka apibūdinant šiluminę spinduliuotę (siekiant tai pabrėžti, (1.1.7) lygybėje nėra vartojamas indeksas „ T “).

Spinduliuotės spektrinis intensyvumas I_λ arba I_ν (arba I_ω) – spinduliuotės intensyvumas, kuris atitinka vienetinį bangos ilgių intervalą (matavimo vienetas – W/m^3) arba vienetinį dažnių intervalą (matavimo vienetas – $\text{W}\cdot\text{s/m}^2$). Spektrinio intensyvumo funkcinė priklausomybė nuo bangos ilgio arba dažnio vadinama **spinduliuotės spektru**. Sąryšis tarp spektrinio intensyvumo ir energijos spektrinio tankio yra toks pats kaip sąryšis tarp intensyvumo I ir energijos tankio (žr. (1.1.7)):

$$I_\lambda = cW_\lambda. \quad (1.1.8)$$

Ta pati lygybė lieka galioti ir tada, kai apatinis indeksas yra ν arba ω . Todėl sąryšis tarp I_λ ir I_ω yra toks pats kaip sąryšis tarp W_λ ir W_ω (žr. (1.1.6)).

Kadangi šiluminę spinduliuotę sudaro visų kryptčių bangos ir visos kryptys yra lygiavertės, tai ją patogiau apibūdinti **spinduliuotės kampiniu intensyvumu** – spinduliuotės energijos kiekiu, kuris krinta iš vienos pusės į vienetinio erdvinio kampo sferinį segmentą, kurio plotas yra lygus vienetui (erdvinis kampas – tai sferos segmento ploto ir sferos spindulio kvadrato santykis). Spinduliuotės kampinio intensyvumo matavimo vienetas yra $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{sr}^{-1}$; čia „sr“ žymi erdvinio kampo matavimo vienetą – steradianą. 1 steradianas – tai toks erdvinis kampas, kurį atitinkančio sferos segmento plotas yra lygus sferos spindulio kvadratui (t. y. 4π kartų mažesnis už visos sferos plotą). Atsižvelgus į tai, kad šiluminės spinduliuotės intensyvumas visomis kryptimis yra vienodas, o jos sklaidimo greitis lygus c , gaunama tokia šiluminės spinduliuotės kampinio intensyvumo I'_T išraiška energijos tankiu W_T :

$$I'_T = \frac{cW_T}{4\pi}. \quad (1.1.9)$$

Spinduliuotės spektrinis kampinis intensyvumas $I'_{\lambda,T}$ – tai spinduliuotės kampinis intensyvumas, kuris atitinka vienetinį bangos ilgių intervalą (matavimo vienetas – $\text{W}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{sr}^{-1}$).

Taškinio šaltinio spinduliuotės energijos spektrinis tankis ir intensyvumas priklauso nuo atstumo iki spinduliuotės šaltinio: didėjant atstumui, energijos spektrinis tankis ir intensyvumas mažėja¹. Tačiau

¹ Tuo lengva įsitikinti sudarius įsivaizduojamą sferą, kurios centre yra šaltinis ir kuri eina per matavimo tašką. Atstumas iki šaltinio – tai tos sferos spindulys. Jeigu spinduliuotė nėra sugerama sferos viduje, tada iš energijos tvermės dėsnio išplaukia, kad pilnutinis spinduliuotės srautas pro sferos paviršių nepriklauso nuo sferos spindulio. Tačiau energijos srauto *tankis* (t. y. spinduliuotės intensyvumas) yra atvirkščiai proporcingas sferos plotui, t. y. atstumo iki šaltinio kvadratui. Kadangi šis intensyvumo mažėjimas yra grynai geometrinės prigimties, tai visų bangos ilgių spinduliuotės intensyvumas nuo atstumo priklauso vienodai. Vadinasi, *spektrinis* intensyvumas taip pat mažėja didėjant atstumui. Kadangi intensyvumas yra proporcingas energijos tankiui (žr. (1.1.7) ir (1.1.8)), tai spinduliuotės energijos tankis W bei spektrinis energijos tankis W_λ taip pat mažėja didėjant atstumui.

šiluminės spinduliuotės energijos spektrinis tankis ir intensyvumas nepriklauso nuo jų matavimo taško. Šiluminės spinduliuotės energijos spektrinis tankis ir spektrinis intensyvumas priklauso tik nuo bangos ilgio λ ir temperatūros T .

Kai į kūną krinta spinduliuotė, dalis kritusios spinduliuotės energijos atsispindi, dalis pereina pro kūną, o likusioji dalis lieka kūno viduje ir virsta šiluma (tiksliau – kūno vidine energija). Kūno **sugerties geba** $a_{\lambda,T}$ rodo, kokia dalis kritusios λ bangos ilgio spinduliuotės energijos lieka kūno viduje ir virsta šiluma. Kaip ir spektrinio šviesio atveju, žymenyje vartojami du indeksai (λ ir T), nes sugerties geba priklauso nuo kritusios spinduliuotės bangos ilgio λ ir nuo kūno temperatūros T . Sugerties geba yra bedimensis dydis (nes pagal apibrėžtį sugerties geba yra lygi sugertosios ir kritusios energijų santykiui).

Iš sugerties gebos apibrėžties matyti, kad $a_{\lambda,T}$ visada yra tarp 0 ir 1. Kūnas, kurio $a_{\lambda,T} \equiv 1$, t. y. kuris bet kokiaje temperatūroje sugeria bet kokio bangos ilgio spinduliuotės visą energiją, yra vadinamas **absoliučiai juodu kūnu**. Idealių absoliučiai juodų kūnų gamtoje nėra. Absoliučiai juodu kūnu galima laikyti mažą angą tuščiaiduriame rutulyje (žr. 1.1 pav.). Spinduliuotė, patekusi pro tokią angą į rutulio vidų, po daugelio atspindžių rutulio viduje yra beveik visa sugerama, todėl angos sugerties geba beveik tiksliai lygi vienetui, t. y. anga veikia kaip absoliučiai juodas kūnas.

Kad būtų lengviau suprasti absoliučiai juodo kūno svarbą fizikoje, išnagrinėkime tokią sistemą. Tarkime, spinduliuojantis kūnas yra apsuptas idealiai atspindinčiu apvalkalu. Taigi, sistema, kurią sudaro kūnas ir spinduliuotė, yra izoliuota. Tokia sistema būtinai anksčiau ar vėliau taps termodinaminės pusiausvyros būsenos. Todėl šiluminę spinduliuotę galima stebėti padarius minėtame apvalkale pakankamai mažą angą – tokią, kad termodinaminės pusiausvyros sutrikimas būtų nežymus. Tačiau, kaip minėta, tokia anga veikia kaip absoliučiai juodas kūnas. Taigi, *šiluminės spinduliuotės savybės yra tokios pačios kaip tos pačios temperatūros absoliučiai juodo kūno spinduliuotės savybės*.

Susiesime šiluminės spinduliuotės energijos tankį W_T ir absoliučiai juodo kūno energinį šviesį, kurį žymėsime S_T . Pasirinkus pakankamai mažą kūno paviršiaus ploto elementą Δs (tokį mažą, kad jį būtų galima laikyti plokščiu), spinduliuotės energiją prie pat to paviršiaus elemento galima išskaidyti į dvi lygias dalis: energija, kuri krinta į tą paviršiaus elementą, ir energija, kurią tas paviršiaus elementas spinduliuoja. Kiekvienos iš šių dalių indėlis į pilnutinį energijos tankį W_T yra lygus $W_T/2$. Jeigu paviršiaus elementas spinduliuotų tik kryptimi, kuri yra jam statmena, tada per laiko vienetą iš Δs išspinduliuojamas energijos kiekis būtų lygus $\Delta s \cdot c \cdot W_T/2$, o energinis šviesis būtų lygus $c \cdot W_T/2$. Taip yra todėl, kad elektromagnetinės bangos intensyvumas yra lygus spinduliuotės energijos tankio ir spinduliuotės greičio (t. y. šviesos greičio c) sandaugai. Tačiau paviršiaus elementas spinduliuoja visų krypčių bangas. Jeigu bangos kryptis sudaro kampą θ su paviršiaus normale (žr. 1.2 pav.), tai spinduliuotės srauto skerspjūvio plotas yra mažesnis už Δs ir lygus

$$\Delta s' = \Delta s \cdot \cos \theta.$$

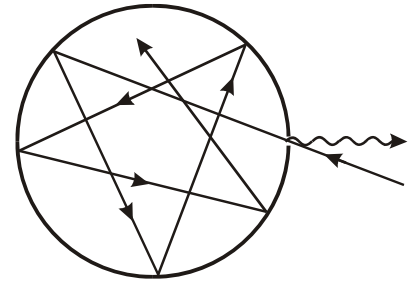
Todėl tokios krypties spinduliuotės energijos srautas iš ploto elemento Δs yra tiek pat kartų mažesnis už spinduliuotės, kurios $\theta = 0$, energijos srautą iš to paties ploto elemento. Tai yra vadinamasis **Lamberto dėsnis**. Tačiau bangų, kurios sudaro kampą θ su normale, skaičius yra proporcingas $\sin \theta$ (šis skaičius yra proporcingas ilgiui apskritimo, kurį brėžia vektorius OO' , sudarantis kampą θ su normale). Kadangi θ gali įgyti visas vertes nuo 0 iki $\pi/2$, tai energinio šviesio išraiškoje atsiranda dar vienas daugiklis

$$\int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta = \frac{1}{2}.$$

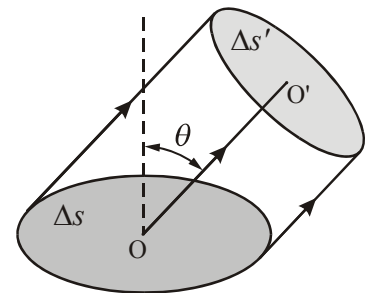
Taigi, absoliučiai juodo kūno energinis šviesis yra

$$S_T = \frac{c W_T}{4}. \quad (1.1.10a)$$

Atitinkami spektriniai dydžiai (absoliučiai juodo kūno spektrinis šviesis $S_{\lambda,T}$ ir šiluminės spinduliuotės spektrinis energijos tankis $W_{\lambda,T}$) susiję tokiu pačiu sąryšiu:



1.1 pav. Absoliučiai juodo kūno modelis



1.2 pav. Lamberto dėsnio aiškinimas

$$S_{\lambda,T} = \frac{cW_{\lambda,T}}{4}. \quad (1.1.10b)$$

1.2. Šiluminio spinduliavimo dėsniai

1859 m. vokiečių fizikas Gustavas Kirchhofas (*Kirchhoff*) įrodė, kad spektrinio šviesio ir sugerties gebos santykis yra vienodas visiems kūnams nepriklausomai nuo jų prigimties. Šis santykis priklauso tik nuo spinduliuotės bangos ilgio λ ir temperatūros T . Taigi, santykis $r_{\lambda,T}/a_{\lambda,T}$ yra universali bangos ilgio λ ir temperatūros T funkcija. Šis teiginys vadinamas **Kirchhofo dėsniu**. Pažymėjus absoliučiai juodo kūno spektrinį šviesį $S_{\lambda,T}$, o jo sugerties gebą $A_{\lambda,T}$ ($A_{\lambda,T} \equiv 1$), Kirchhofo dėsnį galima užrašyti šitaip:

$$\left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_1 = \left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_2 = \dots = \frac{S_{\lambda,T}}{A_{\lambda,T}} \equiv S_{\lambda,T}; \quad (1.2.1)$$

čia indeksai 1, 2, ... atitinka skirtingus kūnus. Taigi, visų kūnų spektrinio šviesio ir sugerties gebos santykis lygus absoliučiai juodo kūno spektriniam šviesiui, atitinkančiam tą pačią temperatūrą T ir tą patį bangos ilgį λ .

Iš Kirchhofo dėsnio (1.2.1) išplaukia, kad

$$r_{\lambda,T} = a_{\lambda,T} S_{\lambda,T}. \quad (1.2.2)$$

Kadangi visų realių kūnų sugerties geba $a_{\lambda,T} < 1$, tai pagal (1.2.2) visų realių kūnų spektrinis šviesis $r_{\lambda,T}$ yra mažesnis už absoliučiai juodo kūno spektrinį šviesį, kuris atitinka tą pačią temperatūrą T ir tą patį bangos ilgį λ .

Iš Kirchhofo dėsnio (1.2.1) arba (1.2.2) išplaukia, kad kiekvienas kūnas sugeria tuos spindulius, kuriuos pats spinduliuoja. T. y. jeigu spektrinis šviesis $r_{\lambda,T}$ turi maksimumą esant tam tikram bangos ilgiui λ , tai to paties kūno sugerties geba $a_{\lambda,T}$ taip pat turi maksimumą esant tam pačiam bangos ilgiui. Dėl šios priežasties dujų sugerties spektrai turi tamsias linijas tose vietose, kuriose būtų šviesios linijos, jeigu dujos pačios spinduliuotų.

1879 m. slovėnų fizikas Jozefas Stefanas (*Stefan*), remdamasis matavimų rezultatais, padarė išvadą, kad *bet kurio* kūno suminis energinis šviesis R_T yra proporcingas absoliučiosios temperatūros T ketvirtajam laipsniui. 1884 m. austrų fizikas Liudvigas Bolcmanas (*Boltzmann*) teoriškai įrodė, kad *absoliučiai juodo* kūno energinis šviesis išreiškiamas šitaip:

$$S_T = \sigma T^4. \quad (1.2.3)$$

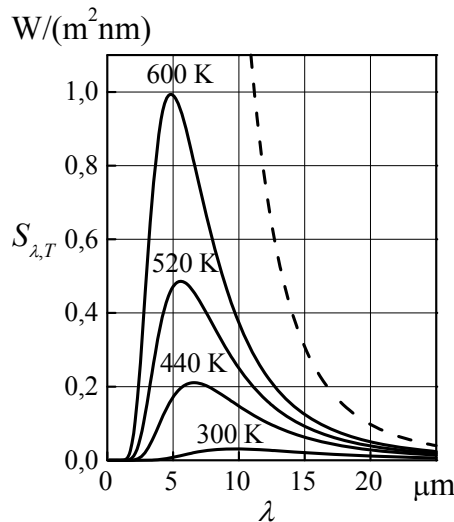
Šis dėsnis vadinamas **Stefano ir Bolcmano dėsniu**. Čia σ yra **Stefano ir Bolcmano konstanta**: $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/(m}^2 \cdot \text{K}^4)$. Absoliučiosios temperatūros matavimo vienetas yra kelvinas (K). Norint gauti absoliučiosios temperatūros T vertę kelvinais, reikia prie Celsijaus laipsniais išreikštos temperatūros pridėti skaičių 273,15. Iš Stefano ir Bolcmano dėsnio (1.2.3) išplaukia, kad kūnai spinduliuoja esant bet kokiai absoliučiai temperatūrai, išskyrus nulinę, ir tuo intensyviau, kuo aukštesnė temperatūra.

Pasinaudojus energinio šviesio ir energijos tankio sąryšiu (1.1.10a), Stefano ir Bolcmano dėsnį galima užrašyti šitaip:

$$W_T = \frac{4\sigma}{c} T^4. \quad (1.2.4)$$

Tai yra šiluminės spinduliuotės energijos tankio išraiška.

Absoliučiai juodo kūno spektrinio šviesio $S_{\lambda,T}$ priklausomybės nuo bangos ilgio λ , esant skirtingoms temperatūroms T , matavimų duomenys pateikti 1.3 pav. Matome, kad kylant temperatūrai didėja spektrinis šviesis visose spektro srityse. T. y. didėja energinis šviesis S_T (jis yra lygus $S_{\lambda,T}$ integralui λ atžvilgiu nuo 0 iki ∞). Tai atitinka Stefano ir Bolcmano dėsnį (1.2.3). Be to, akivaizdu, kad visose temperatūrose spektrinio šviesio priklausomybė nuo bangos ilgio λ turi maksimumą esant tam tikram bangos ilgiui $\lambda_{\max}$ ir kylant temperatūrai šis maksimumas slenka į trumpųjų bangų pusę. 1893 m. vokiečių fizikas Vilhelmas Vynas (*Wien*) suformulavo dėsnį, kuris susieja abso-



1.3 pav. Absoliučiai juodo kūno spektrinis šviesis įvairiose temperatūrose: ištisinės linijos – matavimų duomenys, brūkšninė linija – klasikinės teorijos rezultatas, kai $T = 600 \text{ K}$

liučiai juodo kūno spektrinio šviesio maksimumo bangos ilgį $\lambda_{\max}$ su kūno temperatūra T . Šis dėsnis, kuris vadinamas *Vyno poslinkio dėsniu*, teigia, kad $\lambda_{\max}$ yra atvirkščiai proporcingas temperatūrai:

$$\lambda_{\max} = \frac{C}{T}. \quad (1.2.5)$$

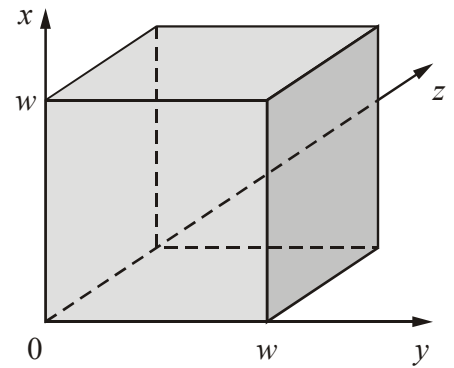
Čia C yra *Vyno konstanta*: $C = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$.

1.3. Harmoninio osciliatoriaus energijos diskretumas

1.3.1. Elektromagnetinės bangos kubinėje ertmėje. „Ultravioletinė katastrofa“

Stefano ir Bolcmano dėsnis (1.2.3) nusako absoliučiai juodo kūno energinio šviesio, t. y. 1.3 pav. pavaizduotų funkcijų integralo bangos ilgio atžvilgiu, priklausomybę nuo temperatūros, o Vyno poslinkio dėsnis (1.2.5) nusako tų pačių kreivių maksimumo padėties priklausomybę nuo temperatūros. Tačiau šie du dėsniai nieko nesako apie absoliučiai juodo kūno spektrinio šviesio $S_{\lambda,T}$ funkcinę priklausomybę nuo λ ir T . XIX a. pabaigoje daugelis mokslininkų bandė teoriškai nustatyti šią funkciją, tačiau šie bandymai buvo nesėkmingi, nes jie rėmėsi prielaida, kad kiekvienas atomas arba molekulė gali spinduliuoti bet kokio bangos ilgio elektromagnetinę spinduliuotę, t. y. kad spinduliuotės energija kinta tolydžiai. Tada gaunama, kad, neribotai mažėjant bangos ilgiui, spektrinis šviesis turėtų artėti į begalybę dėsniu $S_{\lambda,T} \sim \lambda^{-4}$, o tai neturi fizikinės prasmės ir neatitinka matavimų duomenų (žr. 1.3 pav.). Tai yra vadinamoji *ultravioletinė katastrofa*.

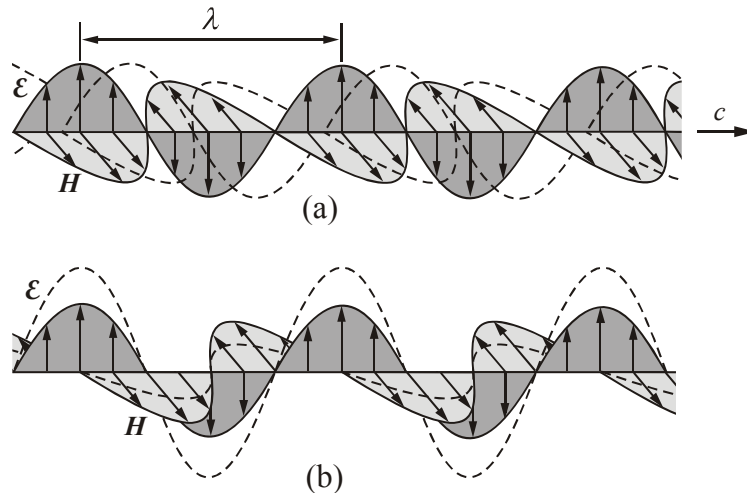
Išsiaiškinsime, kokių būdu klasikinėje fizikoje yra gaunamas rezultatas $S_{\lambda,T} \sim \lambda^{-4}$. Nagrinėkime kubinę ertmę, kuri yra termodinaminės pusiausvyros būsenos. Tarkime, kad šio kubo briaunos yra lygiagrečios Dekarto koordinatės ašims, o vienos briaunos ilgis lygus w (žr. 1.4 pav.). Kadangi termodinaminės pusiausvyros sąlygomis nėra energijos srautų, tai ertmės viduje elektromagnetinė spinduliuotė egzistuoja stovinčiųjų bangų pavidalu. Stovinčioji banga gaunama sudedant dvi priešingų kryptų, tačiau vienodos amplitudės, dažnio ir poliarizacijos plokščiąsias bangas. Stovinčiosios elektromagnetinės bangos ypatybė yra ta, kad jos energija nėra pernešama erdvėje, o tik periodiškai pereina iš elektrinio lauko energijos į magnetinio lauko energiją ir atgal (žr. 1.5b pav.). Erdvės taškai, kuriuose stovinčiosios elektromagnetinės bangos elektrinis laukas visada lygus nuliui, yra vadinami stovinčiosios bangos elektrinio lauko *mazgais* (analogiškai apibrėžiami ir magnetinio lauko mazgai).



1.4 pav. Kubinė ertmė šiluminės spinduliuotės energijos spektriniam tankiui skaičiuoti

Suformuluosime stovinčiosios bangos susidarymo kubo viduje sąlygą. Elektrinio lauko stiprio vektoriaus priklausomybę nuo koordinatės ir laiko plokščiojoje tiesiškai poliarizuotoje bangoje yra tokia:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos(\varphi_0 + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - \omega t) = \mathcal{E}_0 \cos(\varphi_0 + k_x x + k_y y + k_z z - \omega t); \quad (1.3.1)$$

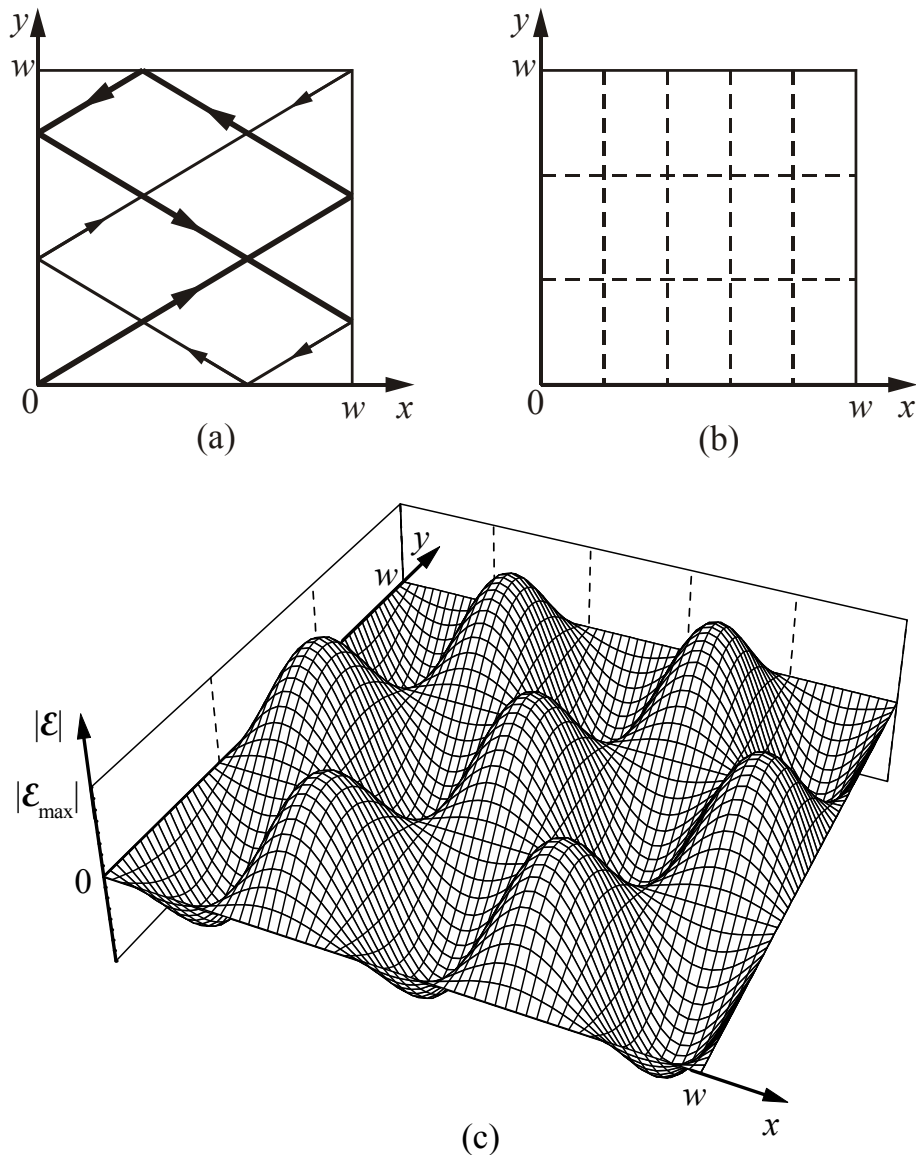


1.5 pav. Elektrinio ir magnetinio laukų stiprių pasiskirstymas elektromagnetinėje bangoje: (a) bėgančioji banga dviem laiko momentais (brūkšninės linijos atitinka vėlesnįjį laiko momentą); (b) stovinčioji banga dviem laiko momentais

čia t yra laikas, $\mathbf{r}$ yra erdvės taško spindulys vektorius, ω yra bangos kampinis dažnis ($\omega = 2\pi\nu$, kur ν yra dažnis), o $\mathbf{k}$ yra vadinamasis **bangos vektorius**, kurio kryptis sutampa su bangos sklidimo kryptimi, o modulis (absoliučioji vertė) lygus **bangos skaičiui** $k = 2\pi / \lambda$, kur λ yra bangos ilgis¹. Dydžiai x , y ir z – tai erdvės taško Dekarto koordinatės, o k_x , k_y ir k_z yra bangos vektoriaus Dekarto komponentės. Kosinuso argumentas (1.3.1) reiškinyje vadinamas **bangos faze**, o dėmuo φ_0 – pradine faze. Kubo viduje stovinčiosios bangos susidaro daug kartų atsispindint įvairių krypčių plokščiosioms bangoms nuo kubo sienų (žr. 1.6a pav.). Stovinčioji banga susidaro tik tada, kai po atspindžių banga grįžta į pradinį tašką, turėdama fazę, kuri skiriasi nuo pradinės fazės dydžiu $2\pi n$, kur n yra sveikasis skaičius. Atsižvelgę į tai, kad du atspindžiai nuo priešingų sienų atitinka $2w$ nueitą kelią, iš (1.3.1) gauname, kad bangos vektoriaus komponentės turi atitikti sąlygas $k_x \cdot 2w = 2\pi n_x$, $k_y \cdot 2w = 2\pi n_y$, $k_z \cdot 2w = 2\pi n_z$, t. y.

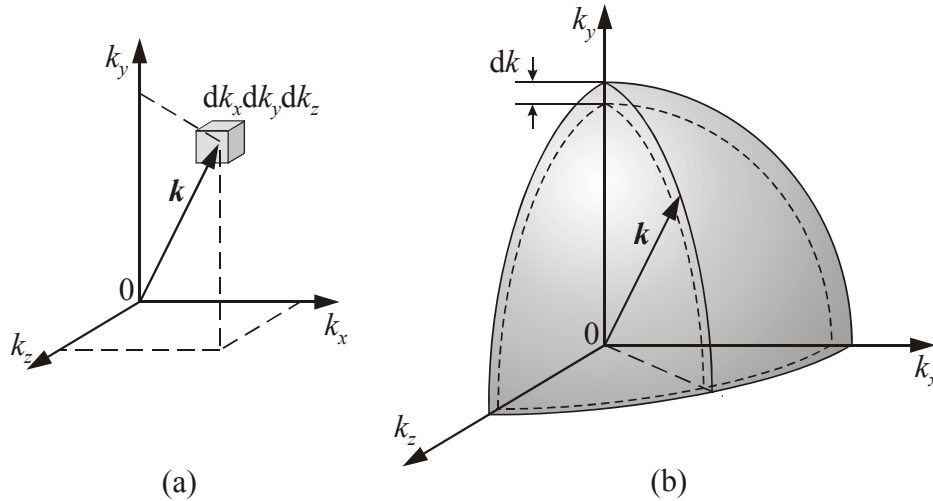
$$k_x w = \pi n_x, \quad k_y w = \pi n_y, \quad k_z w = \pi n_z; \quad (1.3.2)$$

čia n_x , n_y ir n_z yra bet kokie sveikieji skaičiai. Pvz., 1.6b pav. pavaizduotos elektrinio lauko mazgų linijos, kai $n_x = 5$, $n_y = 3$, $n_z = 0$ (t. y. bangos vektorius yra statmenas z ašiai). 1.6c pav. pavaizduotas elektrinio lauko pasiskirstymas xy plokštumoje. Bangos atspindžio nuo kubo sienos vienintelė pasekmė yra ta, kad



1.6 pav. Stovinčioji banga kubinėje ertmėje, kai $n_x = 5$, $n_y = 3$, $n_z = 0$: (a) stovinčiosios bangos susidarymas po atspindžių (keturios bėgančiosios bangos, kurių suma sudaro stovinčiąją bangą, pažymėtos storesnėmis linijomis); (b) elektrinio lauko mazgų linijos; (c) elektrinio lauko pasiskirstymas plokštumoje xy

¹ Vektorinius dydžius žymėsime storesniu pasvirusiu šriftu, o skaliarinius dydžius – įprastinio storio pasvirusiu šriftu.



1.7 pav. $\mathbf{k}$ erdvės tūrio elementas Dekarto koordinatėse (a) ir sferinėse koordinatėse (b)

atitinkama bangos vektoriaus komponentė ir elektrinio lauko stipris keičia ženklą. Tai reiškia, kad visų bėgančiųjų bangų, kurių suma sudaro vieną stovinčiąją bangą, bangos vektorius galima sudaryti paeiliui pakeičiant kiekvienos pradinio bangos vektoriaus komponentės ženklą. Pvz., 1.6c pav. pavaizduotasis lauko pasiskirstymas gaunamas sudedant keturias bėgančiąsias bangas: pradinę bangą, kuri išeina iš kairiojo apatinio kampo (taškas $x = 0, y = 0$) ir tris atsispindėjusias bangas, kurios 1.6a pav. pažymėtos storesnėmis linijomis (kitų atspindžių metu atsiradusios bangos yra tapačios šioms keturioms bangoms). Todėl, nemažinant bendrumo, galima sakyti, kad (1.3.2) lygybėse dydžiai k_x, k_y ir k_z yra teigiami (taigi, n_x, n_y ir n_z tai pat yra teigiami).

Dabar galime atsakyti į klausimą, kiek yra stovinčiųjų bangų, kurių bangos vektoriaus Dekarto komponentės priklauso nykstamo pločio intervalams¹ $[k_x, k_x + dk_x], [k_y, k_y + dk_y], [k_z, k_z + dk_z]$ (žr. 1.7a pav.). Čia reikia atsižvelgti į tai, kad stovinčiąją bangą vienareikšmiškai apibūdina ne vien vektorius $\mathbf{k}$ ir elektrinio lauko stipris, bet ir elektrinio lauko kryptis, t. y. bangos **poliarizacija**. Bet kurios poliarizacijos bangą galima gauti sudedant dvi statmenose plokštumose poliarizuotas bangas su duotaisiais k_x, k_y ir k_z . Todėl $\mathbf{k}$ erdvės tūrio elemente $dk_x dk_y dk_z$ esančių stovinčiųjų bangų skaičiaus išraiškoje atsiranda daugiklis 2:

$$dN = dn_x dn_y dn_z = 2 \left(\frac{w}{\pi} \right)^3 dk_x dk_y dk_z \quad (1.3.3a)$$

(čia antroji lygybė gauta išreiškus skaičius n_x, n_y, n_z pagal (1.3.2)). Norint nustatyti, kiek yra stovinčiųjų bangų, kurių bangos skaičius priklauso nykstamo pločio intervalui $[k, k + dk]$, kubo formos tūrio elementą $dk_x dk_y dk_z$ reikia pakeisti nykstamo storio sferinio segmento formos tūrio elementu (žr. 1.7b pav.). Šis segmentas – tai 1/8 sferinio sluoksnio (oktantas), nes pagal sąlygą dydžiai k_x, k_y ir k_z yra teigiami. Kadangi k spindulio sferos paviršiaus plotas lygus $4\pi k^2$, tai dk storio sferinio sluoksnio tūris lygus $4\pi k^2 dk$. Vadinasi,

$$dN = 2 \left(\frac{w}{\pi} \right)^3 \frac{1}{8} 4\pi k^2 dk = V \frac{k^2}{\pi^2} dk; \quad (1.3.3b)$$

čia $V = w^3$ yra kubinės ertmės tūris. Kadangi $k = 2\pi / \lambda$, o $dk = -(2\pi / \lambda^2) d\lambda$, tai stovinčiųjų bangų, kurių bangos ilgis λ priklauso nykstamo pločio intervalui $[\lambda, \lambda + d\lambda]$, skaičius yra

$$dN = V \frac{8\pi}{\lambda^4} d\lambda. \quad (1.3.4)$$

Todėl elektromagnetinio lauko energija, kuri sukaupta šiose stovinčiose bangose, yra lygi

$$dE = dN \cdot \langle \varepsilon_\lambda \rangle = V \frac{8\pi}{\lambda^4} \langle \varepsilon_\lambda \rangle d\lambda; \quad (1.3.5)$$

¹ Į fizikinių dydžių nykstamųjų pokyčių (diferencialų) žymenis įeinančią raidę „d“ rašysime stačiu šriftu, o skaliarinius fizikinius dydžius, kurių žymuo yra „d“ – kursyvu.

čia $\langle \varepsilon_\lambda \rangle$ yra vidutinė bangos ilgio λ stovinčiosios bangos energija. Iš (1.3.5) išplaukia šiluminės spindulių energijos spektrinio tankio išraiška:

$$W_{\lambda,T} = \frac{1}{V} \cdot \frac{dE}{d\lambda} = \frac{8\pi}{\lambda^4} \langle \varepsilon_\lambda \rangle. \quad (1.3.6)$$

Vidutinės energijos $\langle \varepsilon_\lambda \rangle$ išraiška, kurią numato klasikinė statistinė mechanika, yra tokia:

$$\langle \varepsilon_\lambda \rangle = k_B T; \quad (1.3.7)$$

čia k_B yra Bolcmano konstanta¹ ($k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K), o T yra absoliučioji temperatūra. Ši lygybė išplaukia iš klasikinės statistinės mechanikos **vienodo energijos pasiskirstymo dėsnio**, kuris teigia, kad, išreiškus sistemos pilnutinę energiją apibendrintosiomis koordinatėmis ir apibendrintaisiais impulsais, kiekvieną tos išraiškos kvadratinį dėmenį atitinka vidutinė energija $k_B T/2$ (tikslesnė šio dėsnio formuluotė yra pateikta H priedo H.1 skyrelyje). Stovinčioji elektromagnetinė banga yra vienmačio harmoninio osciliatoriaus pavyzdys. **Vienmatis harmoninis osciliatorius** – tai vieno laisvės laipsnio fizikinė sistema, kurios apibendrintoji koordinatė q , kai nėra išorinių poveikių, yra šios diferencialinės lygties sprendinys:

$$\frac{d^2 q}{dt^2} + \omega^2 q = 0; \quad (1.3.8a)$$

čia ω yra osciliatoriaus **savasis dažnis**. (1.3.8a) lygties bendrasis sprendinys yra harmoninė funkcija

$$q(t) = q_0 \cos(\omega t + \varphi_0), \quad (1.3.8b)$$

kurios amplitudė q_0 ir pradinė fazė φ_0 priklauso nuo pradinių sąlygų. Apibendrintosios koordinatės q prasmė priklauso nuo osciliatoriaus prigimties. Harmoninio osciliatoriaus, kuris nusako stovinčiąją elektromagnetinę bangą, apibendrintąją koordinatę galima pasirinkti lygią elektrinio lauko stipriui $\mathcal{E}$ kuriame nors viename sistemos taške, o apibendrintąjį impulsą – lygų magnetinio lauko stipriui H tame pačiame taške (tas taškas turi nebūti elektrinio arba magnetinio lauko mazgas). Kadangi stovinčiosios elektromagnetinės bangos energija yra sudaryta iš dviejų dėmenų, kurių vienas proporcingas $\mathcal{E}^2$, o kitas – H^2 , tai iš vienodo energijos pasiskirstymo dėsnio išplaukia, kad stovinčiosios elektromagnetinės bangos, kurios kryptis, bangos ilgis ir poliarizacija yra apibrėžti, vidutinė energija termodinaminės pusiausvyros sąlygomis lygi $2 \cdot (k_B T/2) = k_B T$. Tai ir teigia (1.3.7) lygybė.

Įrašę (1.3.7) į (1.3.6), išvedame šiluminės spindulių energijos spektrinio tankio klasikinę išraišką:

$$W_{\lambda,T} = \frac{8\pi}{\lambda^4} k_B T \quad (1.3.9)$$

arba, įrašę (1.3.9) į (1.1.6), išvedame:

$$W_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T. \quad (1.3.10)$$

Šis rezultatas akivaizdžiai neatitinka matavimo duomenų. Pvz., iš (1.3.9) išplaukia, kad šiluminės spindulių energijos tankis ((1.3.9) reiškinių integralas λ atžvilgiu nuo 0 iki ∞ arba (1.3.10) reiškinių integralas ω atžvilgiu nuo 0 iki ∞) yra lygus begalybei, nors matavimai rodo, kad šis dydis išreiškiamas (1.2.4) formule. Iš (1.3.9) išplaukia, kad $W_{\lambda,T}$ neribotai didėja mažėjant λ (žr. brūkšninę liniją 1.2 poskyrio 1.3 pav.), nors matavimai rodo, kad $W_{\lambda,T}$ turi maksimumą, kurio padėtį nusako Vyno poslinkio dėsnis (1.2.5) (žr. ištisines kreives 1.3 pav.).

1.3.2. Planko hipotezė. Osciliatoriaus energijos kvantas

1900 m. vokiečių fizikas Maksas Plankas (*Planck*) paaiškino absoliučiai juodo kūno spinduliuotės eksperimentinius dėsningumus remdamasis prielaida, kad harmoninio osciliatoriaus energija ε gali būti ne bet kokia, o lygi diskrečioms vertėms, kurios yra tam tikro dydžio ε_1 kartotiniai:

$$\varepsilon \equiv \varepsilon_n = n\varepsilon_1 \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (1.3.11)$$

Dydis ε_1 šiame reiškinyje – tai mažiausioji duotojo dažnio spinduliuotės energijos porcija, kuri vadinama **energijos kvantu** (iš lotynų kalbos žodžio *quantum* – „kiek“). Taigi, osciliatoriaus energija yra diskreti (kvantuota). **Diskrečiu dydžiu** vadinamas dydis, kurio galimų verčių skaičius bet kuriame baigtinio pločio intervale yra baigtinis arba lygus nuliui (**tolydaus dydžio** galimų verčių skaičius baigtinio pločio intervale yra begalinis). Esant prielaidai (1.3.11), vidutinė osciliatoriaus energija $\langle \varepsilon_\lambda \rangle$, kurią numato statistinė

¹ Dažniausiai Bolcmano konstanta žymima raide k be indekso, tačiau šiame skyriuje raide k žymimas bangos skaičius, todėl Bolcmano konstantą žymėsime k_B .

mechanika, skiriasi nuo klasikinės išraiškos (1.3.7). Išvesime $\langle \varepsilon \rangle$ išraišką, kuri išplaukia iš (1.3.11). Tam pasinaudosime **Bolcmano pasiskirstymo** formule, kuri išreiškia tikimybę P , kad osciliatoriaus energija laisvai pasirinktu laiko momentu termodinaminės pusiausvyros sąlygomis yra lygi diskrečiai vertei ε_n :

$$P(\varepsilon_n) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}\right); \quad (1.3.12)$$

čia Z yra vadinamoji **statistinė suma**, kurios vertė gaunama iš sąlygos

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(\varepsilon_n) = 1. \quad (1.3.13)$$

(1.3.13) lygybė gaunama atsižvelgus į tai, kad osciliatoriaus energija tikrai yra lygi vienai iš verčių, kurias nusako (1.3.11) formulė, ir pasinaudojus nesutaikomųjų įvykių tikimybių sumos taisykle. Įrašę (1.3.12) į (1.3.13) ir pasinaudoję geometrinės progresijos sumos formule, gauname:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}\right) = \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_1}{k_B T}\right)}. \quad (1.3.14)$$

Dabar galime išreikšti osciliatoriaus, kurio energijos kvantas lygus ε_1 , vidutinę energiją. Pasinaudosime bendrąja diskreta atsitiktinio dydžio vidurkio išraišką (žr. G priedas, (G.4.2) formulė):

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n P(\varepsilon_n) = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}\right) \equiv \frac{1}{Z} \left[\frac{\partial}{\partial (-1/(k_B T))} \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}\right) \right] = \\ &= \left(1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_1}{k_B T}\right) \right) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial (-1/k_B T)} \left(1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_1}{k_B T}\right) \right)^{-1} \right] = \frac{\varepsilon_1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_1}{k_B T}\right) - 1}. \end{aligned} \quad (1.3.15)$$

Absoliučiai juodo kūno spinduliuotės energijos spektrinio tankio $W_{\lambda,T}$ eksperimentinę priklausomybę nuo bangos ilgio λ galima paaiškinti tik remiantis prielaida, kad osciliatoriaus energijos kvantas ε_1 yra proporcingas osciliatoriaus dažniui ν . Proporcingumo koeficientas vadinamas **Planko konstanta** ir žymimas h :

$$\varepsilon_1 = h\nu = \hbar\omega; \quad (1.3.16a)$$

čia $\omega = 2\pi\nu$ yra kampinis dažnis, o $\hbar = h/2\pi$ yra **mažoji Planko konstanta**. Planko konstanta lygi $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ J·s. Kadangi $\nu = c/\lambda$, kur c yra šviesos greitis, tai osciliatoriaus energijos kvantą (1.3.16a) galime išreikšti ir šitaip:

$$\varepsilon_1 = h \frac{c}{\lambda}. \quad (1.3.16b)$$

Įrašę (1.3.15) į bendrąją formulę (1.3.6) ir atsižvelgę į (1.3.16b), išvedame šiluminės spinduliuotės energijos spektrinio tankio išraišką, kuri tiksliai atitinka matavimų duomenis:

$$W_{\lambda,T} = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1}. \quad (1.3.17)$$

Ši formulė išreiškia vadinamąją **Planko spinduliavimo dėsni** (kartais ji vadinama **Planko formule**). Įrašę (1.3.17) į (1.1.6), gauname energijos spektrinio tankio, kurio argumentas yra kampinis dažnis ω , išraišką:

$$W_{\omega,T} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) - 1}. \quad (1.3.18)$$

Tai yra kitokia Planko spinduliavimo dėsnio išraiška.

Klasikinė energijos spektrinio tankio išraiška (1.3.9) – tai (1.3.17) reiškinio riba, kai energijos kvantas (1.3.16a,b) artėja į nulį. Norint įsitikinti šio teiginio teisingumu, reikia tarti, kad $h \rightarrow 0$ arba kad $\lambda \rightarrow \infty$, ir pasinaudoti apytiksle tapatybe $\exp(x) \approx 1 + x$, kuri galioja, kai $|x| \ll 1$. T. y., kai $hc/\lambda k_B T \ll 1$, $\exp(hc/\lambda k_B T) \approx 1 + hc/\lambda k_B T$. Todėl, kuo didesnis bangos ilgis, tuo tikslesnis klasikinis aprašymas.

Prielaida, kad osciliatoriaus energija yra diskreti, gali būti taikoma visiems osciliatoriams, kurie sudaro nagrinėjamą sistemą – ir stovinčiosioms elektromagnetinėms bangoms, ir osciliatoriams, kuriais modeliuojami erdmės sienelių atomai. Todėl iš teiginio apie osciliatoriaus energijos diskretumą išplaukia,

kad *atomo energija negali būti bet kokia, o gali būti lygi tik atskiroms (diskrečioms) vertėms*. Kitaip sakant, *atomo energija yra kvantuota*. Atomo energijos diskretumo idėja pirmą kartą buvo suformuluota Boro postulatuose (žr. 1.9 poskyrį).

1.4. Elektromagnetinės spinduliuotės fotoninė teorija

M. Planko hipotezės pagrindu (žr. 1.3 poskyrį) vokiečių fizikas Albertas Einšteinas (*Einstein*) 1905 m. sukūrė *šviesos kvantinę (fotoninę) teoriją*. Remiantis Einšteinu, elektromagnetinė spinduliuotė egzistuoja diskrečių energijos porcijų pavidalu. Elektromagnetinės spinduliuotės energijos kvantą galima laikyti materialia dalele, kuri juda šviesos greičiu c ir perneša energiją

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}. \quad (1.4.1)$$

Ši dalelė vadinama **fotonu**. Kadangi fotonas veikia kaip materialioji dalelė, tai jis turi masę ir judesio kiekį. Fotono masę m_f galima išreikšti pasinaudojus reliatyvistiniu energijos ir masės sąryšiu: $h\nu = m_f c^2$. Iš čia

$$m_f = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{h}{c\lambda}. \quad (1.4.2)$$

Reikia turėti omenyje, kad tai yra šviesos greičiu judančio fotono masė: *fotono rimties masė lygi nuliui*. Tuo fotonas skiriasi nuo materialiuoju dalelių (tokių kaip elektronas, protonas ir neutronas), kurių rimties masė nelygi nuliui ir kurios gali būti rimties būsenos. Fotonas negali būti rimties būsenos, o jo greitis visada lygus šviesos greičiui c . Fotono judesio kiekis p_f (masės ir greičio sandauga) yra

$$p_f = m_f c = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (1.4.3)$$

Fotono judesio kiekio vektorius $\mathbf{p}_f$ susijęs su jo bangos vektoriumi $\mathbf{k}$ šitaip:

$$\mathbf{p}_f = \hbar \mathbf{k}. \quad (1.4.4)$$

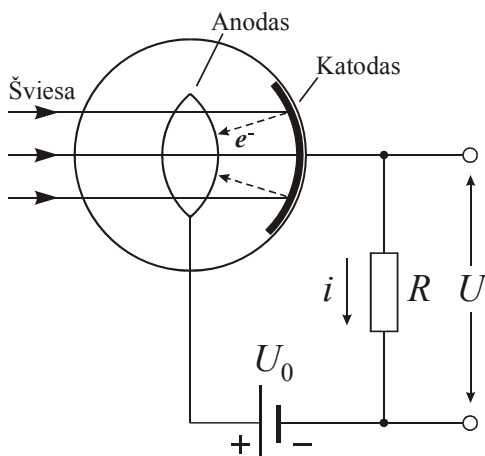
Taigi, elektromagnetinę spinduliuotę galima apibūdinti ne vien bangų parametrais λ ir ν , bet ir dydžiais m_f ir p_f , kurie mechanikoje vartojami apibūdinant materialiuoju dalelių judėjimą. Tai rodo, kad elektromagnetinio spinduliavimo reiškiniuose pasireiškia **bangos-dalelės dvejopumas** (angl. *wave-particle duality*): vieni reiškiniai (interferencija, difrakcija ir poliarizacija) rodo, kad elektromagnetinė spinduliuotė yra banginis procesas, o kiti reiškiniai (šiluminės spinduliuotės savybės ir toliau aprašytieji fotoefektas bei Komptono efektas) rodo, kad elektromagnetinė spinduliuotė yra diskretusis, arba **kvantinis**, procesas, kurį sukelia atskirų dalelių (fotonų) veikimas.

1.5. Fotoefektas. Einšteino lygtis

XIX a. pabaigoje buvo atrastas dar vienas optinis reiškinys, kurio neįmanoma paaiškinti remiantis klasikine fizikos dėsniais. Buvo pastebėta, kad, apšvietus neigiamai įelektrintą metalo plokštelę ultravioletine šviesa, metalas išsielektrina greičiau, o jeigu metalas įelektrintas teigiamai, tada apšvietus jo išsielektrinimas nepagreitėja. Tai rodo, kad šviesa išlaisvina iš metalo neigiamą elektros krūvį. To neigiamojo krūvio prigimtį 1900 m. nustatė vokiečių fizikas F. Lenardas (*Lennard*). Jis įrodė, kad neigiamieji krūvininkai, kuriuos iš metalo išlaisvina šviesa, yra elektronai. Elektronas yra elementarioji dalelė, kurią

1897 m. atrado anglų fizikas Dž. Dž. Tomsonas (*J. J. Thomson*). Elektrono krūvio absoliučioji vertė (modulis) dažniausiai žymima raide e ir yra lygi $1,6022 \cdot 10^{-19}$ C. Šis krūvis vadinamas **elementariuoju krūviu**, nes visų gamtoje egzistuojančių dalelių krūviai yra krūvio e kartotiniai. Elektrono masė yra lygi $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg.

Taigi, ultravioletinė spinduliuotė išlaisvina iš metalo elektronus. Šis reiškinys vadinamas **išoriniu fotoefektu**, o išlaisvinti elektronai vadinami **fotoelektronais**. Išorinio fotoefekto kiekybinių charakteristikų tyrimui naudojamas įrenginys, kurio schema pavaizduota 1.8 pav. Stikliniame balione, iš kurio išsiurbtas oras, įtaisomi du metaliniai elektrodai. Vienas elektrodas – tai šviesai jautrus metalo (pvz., Na, Cs arba Sb) sluoksnis, kuris dengia iš vidaus didžiąją dalį stiklinio baliono, išskyrus mažą plotelį šviesai įeiti. Kitas elektrodas – tai vielinis žiedas arba tinklėlis, įtvirtintas baliono viduryje. Toks balionas su



1.8 pav. Išorinio fotoefekto tyrimo schema (vakuuminis fotoelementas)

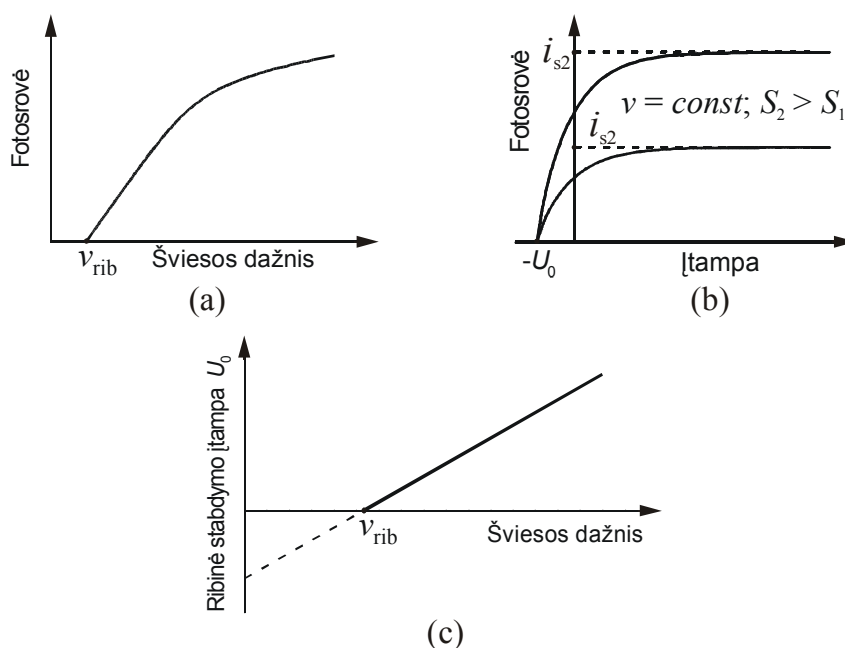
dviem elektrodais vadinamas **vakuuminis fotoelementas**. Matavimų metu prie tinklelio prijungiama teigiama įtampa atžvilgiu elektrodo, kuris dengia stiklinio baliono paviršių. T. y. tinklelis atlieka **anodo** vaidmenį, o kitas elektrodas yra **katodas**. Jeigu katodas nėra apšviestas, tai elektros srovė neteka. Apšvietus katodą, atsiranda elektros srovė, kurios stipris i priklauso nuo potencialų skirtumo, spinduliuotės intensyvumo, katodo medžiagos ir šviesos dažnio. Aišku, kad srovę sukuria fotoelektronai. Ši srovė vadinama **fotosrove**. Fotosrovės stipris i nustatomas pagal įtampos kritimą $U = iR$ rezistoriuje R (žr. 1.8 pav.).

Pagal klasikinę teoriją elektronus iš metalo „išplėšia“ šviesos elektrinis laukas. Tačiau klasikinė teorija negali paaiškinti šių fotoefekto dėsningumų:

a) Kiekvienam metalui būdingas tam tikras mažiausias fotoefekto šviesos dažnis ν_{rib} . Kitaip sakant, egzistuoja maksimalus šviesos bangos ilgis, kurį viršijus fotoefektas nevyksta. Pvz., apšvietus cinko plokštelę regimosios šviesos spinduliais, jie neišlaisvins iš cinko elektronų kad ir koks stiprus būtų šviesos srautas. Tačiau ultravioletiniai spinduliai, net jeigu jų srautas yra labai silpnas, išlaisvina iš cinko elektronus. Taigi, bandymo su cinku atveju mažiausias šviesos dažnis, kuriam esant vyksta fotoefektas, yra ultravioletinių spindulių diapazone. Šis mažiausias dažnis, arba didžiausias bangos ilgis, vadinamas **fotoefekto raudonąja riba**. Raudonosios ribos egzistavimą iliustruoja 1.9a pav.: fotosrovė skiriasi nuo nulio tik tada, kai $\nu > \nu_{\text{rib}}$. Be to, fotosrovė stiprėja didėjant šviesos dažniui. Tokia priklausomybė prieštariauja klasikinei teorijai, pagal kurią šviesos elektrinis laukas „išsiūbuoja“ metalo elektronus ir, kai elektrodo priverstinių virpesių amplitudė tampa pakankamai didelė, jis išlekia iš metalo. Vadinasi, pagal klasikinę teoriją fotosrovė turėtų būti didžiausia tada, kai šviesos dažnis lygus elektrono savųjų virpesių dažniui, t. y. fotosrovės priklausomybė nuo šviesos dažnio turėtų būti rezonansinė.

b) Fotoelektronų didžiausias greitis v_{max} nepriklauso nuo katodo energinės apšvietos S (**energinė apšvieta** – tai spinduliuotės energijos kiekis, kuris krinta per laiko vienetą į ploto vienetą). Greitis v_{max} praktikoje matuojamas taip. Prie anodo (t. y. elektrodo, kuris surenka fotoelektronus) prijungiama neigiama įtampa atžvilgiu katodo (t. y. elektrodo, iš kurio išlekia fotoelektronai). Tada fotoelektronai yra lėtinami ir pasiekusių anodą elektronų skaičius mažėja didėjant lėtinimo įtampai. Atitinkamai fotosrovė mažėja (žr. 1.9b pav.). Kai lėtinimo įtampa pasiekia vertę U_0 , kuriai esant netgi greičiausi elektronai nepasiekia anodo, fotosrovė sumažėja iki nulio (žr. 1.9b pav.). Pagal įtampos U_0 vertę galima apskaičiuoti didžiausią fotoelektronų greitį v_{max} . Esant šiai įtampai, greičiausieji elektronai kelyje nuo katodo iki anodo praranda visą savo kinetinę energiją, kuri lygi $mv_{\text{max}}^2/2$ (čia m yra elektrono masė). Antra vertus, įtampos U_0 poveikis pasireiškia tuo, kad elektrono kinetinę energiją sumažėja dydžiu eU_0 (čia e yra elektrono krūvis). Todėl

$$eU_0 = \frac{mv_{\text{max}}^2}{2} \quad \text{ir} \quad v_{\text{max}} = \sqrt{\frac{2eU_0}{m}}. \quad (1.5.1)$$



1.9 pav. Fotoefekto dėsningumai: (a) raudonoji riba; (b) fotoelektronų didžiausias greitis nepriklauso nuo energinės apšvietos S ; (c) fotoelektronų didžiausia energija proporcinga šviesos dažniui

Kaip parodyta 1.9b pav., U_0 nepriklauso nuo energinės apšvietos S . Tai prieštarauja klasikinei teorijai, pagal kurią energinė apšvieta yra proporcinga elektromagnetinės bangos elektrinio lauko amplitudės kvadratui. Ši amplitudė, savo ruožtu, yra proporcinga didžiausiai jėgai, kuria šviesa veikia metalo elektronus. Didėjant šiai jėgai, turėtų didėti ir išlaisvintų elektronų didžiausias greitis. T. y. pagal klasikinę teoriją fotoelektronų didžiausias greitis $v_{\max}$ (ir ribinė stabdymo įtampa U_0) turėtų didėti didėjant energinei apšvietai.

c) Fotoelektronų didžiausia energija yra proporcinga šviesos dažniui (žr. 1.9c pav.). Pagal klasikinę teoriją fotoelektrono didžiausia energija turėtų didėti didėjant jo priverstinių virpesių amplitudei, t. y. didžiausios energijos priklausomybė nuo dažnio turėtų būti su maksimumu (žr. ankstesnį aptarimą).

d) Laiko tarpas tarp metalo apšvietimo ir fotoelektrono išlėkimo yra labai mažas (mažesnis negu 10^{-9} s). Pagal klasikinę teoriją elektronų „įsiūbavimo“ trukmė turėtų būti daug kartų didesnė.

Šiuos fotoefekto dėsningumus 1905 m. paaiškino Einšteinas pasinaudojęs fotonine šviesos prigimties hipoteze. Remiantis Einšteinu, fotonas, pataikęs į metalą, gali atiduoti savo energiją $h\nu$ vienam metalo elektronui. Šios energijos dalis išeikvojama darbui A , kuris atliekamas išlaisvinant elektroną iš metalo (**elektrono išlaisvinimo darbu**), o likusioji dalis virsta išlaisvinto elektrono kinetine energija. Išlaisvinto elektrono greitis yra lygus didžiausiam fotoelektronų greičiui $v_{\max}$, kuris nustatomas pagal stabdymo įtampą U_0 (tai paaiškinta anksčiau), o jo kinetinė energija lygi $mv_{\max}^2/2$ (čia m yra elektrono masė). Pagal energijos tvermės dėsni fotono energija turi būti lygi išlaisvinimo darbo A ir išlaisvinto elektrono kinetinės energijos sumai:

$$h\nu = A + \frac{mv_{\max}^2}{2}. \quad (1.5.2)$$

Tai yra **fotoefekto Einšteino lygtis**. Fotoelektronai dalį savo energijos praranda sąveikaudami su metalo atomais. Todėl iš metalo jie išlekia greičiu, kuris mažesnis už didžiausią greitį $v_{\max}$.

Pagal (1.5.2) lygtį galima paaiškinti visus tris minėtus fotoefekto dėsningumus:

- a) *Fotoefekto raudonosios ribos (žr. 1.9a pav.) aiškinimas*. Pagal (1.5.2) lygtį fotoelektronų didžiausia energija lygi fotono energijos ir išlaisvinimo darbo skirtumui:

$$\frac{mv_{\max}^2}{2} = h\nu - A. \quad (1.5.3)$$

Jeigu fotono energija $h\nu$ yra mažesnė už išlaisvinimo darbą A , tada (1.5.3) lygybės dešinioji pusė yra neigiama. Tačiau kinetinė energija negali būti neigiama. Todėl, jeigu $h\nu < A$, fotoefekto nėra. Taigi, fotoefekto raudonoji riba ν_{rib} atitinka lygybę

$$h\nu_{\text{rib}} = A. \quad (1.5.4)$$

Elektrono išlaisvinimo darbas A – būdingas katodo medžiagai dydis, todėl skirtingų katodo medžiagų ribinis dažnis ν_{rib} yra skirtingas. A vertė lemia fotoefekto raudonąją ribą.

- b) *Didžiausiojo greičio $v_{\max}$ nepriklausomumo nuo energinės apšvietos (žr. 1.9b pav.) aiškinimas*. Pagal (1.5.3) lygtį fotoelektronų didžiausias greitis $v_{\max}$ priklauso tik nuo fotonų dažnio ν ir nuo išlaisvinimo darbo A . Taigi, jis nepriklauso nuo energinės apšvietos.
- c) *Fotoelektronų didžiausios energijos tiesinė priklausomybė nuo šviesos dažnio (žr. 1.9c pav.)* taip pat tiesiogiai išplaukia iš (1.5.3) lygties.
- d) *Maža fotoefekto vėlinimo trukmė* susijusi su tuo, kad ją lemia fotono sąveikos su medžiaga tikimybė, o ne medžiagos elektronų „įsiūbavimo“ trukmė.

Kai kurie fotoelektronai visą savo energiją praranda katodo medžiagoje, t. y. neišlekia iš katodo ir neturi įtakos matuojamai elektros srovei. Didėjant dažniui ν (t. y. didžiausiam fotoelektronų greičiui $v_{\max}$), tokių fotoelektronų skaičius mažėja, todėl srovė didėja (žr. 1.9a pav.).

1.6. Komptono efektas

Kitas reiškinys, kuriame ypač ryškiai pasireiškia šviesos dalelinės (kvantinės) savybės, yra Komptono efektas. 1922 m. amerikiečių fizikas Arturas Komptonas (*Compton*), tirdamas trumpabangių rentgeno spindulių sklaidą įvairiose medžiagose, pastebėjo, kad išsklaidytos spinduliuotės bangos ilgis yra didesnis už kritusios spinduliuotės bangos ilgį. Šis elektromagnetinės spinduliuotės bangos ilgio padidėjimas sklaidos metu vadinamas **Komptono efektu**.

Klasikinė teorija, kuri remiasi banginiu spinduliavimo modeliu, negali paaiškinti Komptono efekto. Pagal klasikinę teoriją elektromagnetinės bangos ilgis sklaidos metu neturėtų pasikeisti. Klasikinė teorija elektromagnetinių bangų sklaidą aiškina šitaip. Medžiagos jonai ir elektronai, veikiami elektromagnetinės bangos elektrinio lauko, virpa dažniu, kuris lygus bangos dažniui. Su pagreičiu judantis krūvininkas (šiuo atveju – jonas arba elektronas) spinduliuoja elektromagnetines bangas. Tuo atveju, kai krūvininko judėjimo pagreitis yra harmoninė laiko funkcija, krūvininkas spinduliuoja to paties dažnio antrines monochromatines bangas. Tai ir yra išsklaidytos bangos. Taigi, klasikinė teorija teigia, kad sklaidos metu spinduliuotės dažnis nepakinta.

Fotoninės teorijos požiūriu elektromagnetinės spinduliuotės sklaidos įvykis – tai dviejų dalelių – fotono ir elektrono arba fotono ir atomo – susidūrimas („susidūrimu“ vadinsime bet kurią trumpą sąveiką, kai yra svarbios tik dalelių būsenos prieš sąveiką ir po jos). Čia aptarsime tik fotono sąveiką su laisvuju elektronu (apie fotono sąveiką su atomu bus kalbama 12.3 poskyryje). Fotono ir laisvojo elektrono susidūrimas yra *tamprusis*, nes jo metu nekinta sąveikaujančių dalelių kinetinių energijų suma (kinetinė energija tik persiskirsto tarp dalelių). Fotonas, kurio energija lygi $h\nu$, sąveikaudamas su elektronu, perduoda jam dalį savo energijos. Dėl šios sąveikos elektronas įgyja tam tikrą greitį, o fotonas pakeičia judėjimo kryptį (žr. 1.10 pav.). Kadangi dalis fotono energijos perduota elektronui, tai aišku, kad išsklaidytojo fotono energija yra mažesnė negu krintančiojo. Kadangi fotono energija proporcinga dažniui (žr. (1.4.1) formulę), tai, sumažėjus fotono energijai, sumažėja ir spinduliuotės dažnis, o bangos ilgis padidėja.

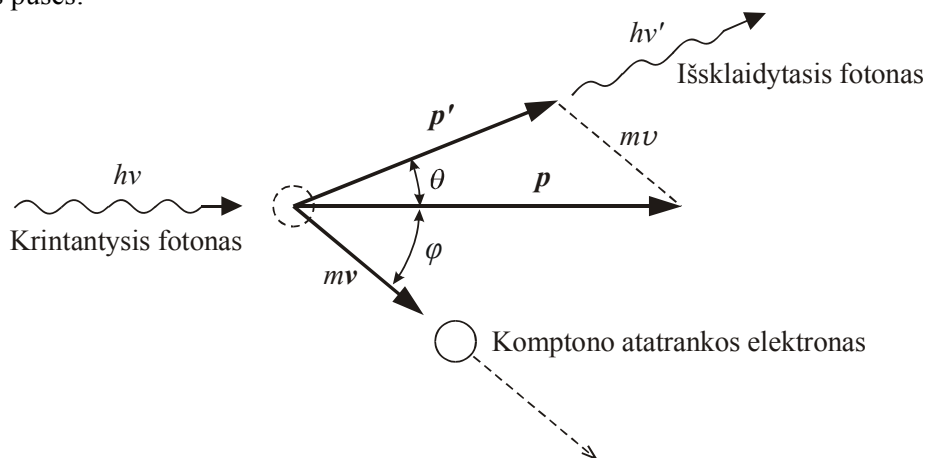
Taigi, Komptono efektas yra grynai dalelinis reiškinys: jis aprašomas taip pat kaip dviejų rutuliukų tamprusis susidūrimas. Tai reiškia, kad spinduliuotės bangos ilgio padidėjimą Komptono sklaidos metu galima išreikšti remiantis energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniais. Vienintelis skirtumas, palyginti su dviejų rutuliukų tampriuoju susidūrimu, yra tas, kad fotono energiją reikia skaičiuoti pagal (1.4.1) formulę, o fotono judesio kiekį – pagal (1.4.3) formulę. Kadangi elektronas dėl sąveikos su fononu gali įgyti reliatyvistinį greitį, tai energijos tvermės dėsnio išraiškoje naudosime reliatyvistinę elektrono kinetinės energijos išraišką $(m - m_0) c^2$, kur m yra elektrono reliatyvistinė masė:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - (\nu/c)^2}}. \quad (1.6.1)$$

Čia ν yra elektrono greitis, o $m_0 = 9,10939 \cdot 10^{-31}$ kg yra elektrono rimties masė. Tą pačią masės m išraišką (1.6.1) reikia naudoti ir elektrono judesio kiekio išraiškoje $m\nu$. Reliatyvistiniai energijos ir judesio kiekio tvermės dėsniai, kai fotonas tampriai susiduria su nejudančiu elektronu, yra tokio pavidalo:

$$\begin{cases} h\nu = h\nu' + (m - m_0)c^2, & (1.6.2a) \\ \mathbf{p} = \mathbf{p}' + m\nu & (1.6.2b) \end{cases}$$

(žr. 1.10 pav.). Čia $h\nu$ ir $h\nu'$ yra fotono energija iki ir po susidūrimo, ν ir m yra elektrono greičio vektorius ir masė po susidūrimo, o $\mathbf{p}$ ir $\mathbf{p}'$ yra fotono judesio kiekio vektoriai iki ir po susidūrimo (šių vektorių moduliai yra $p = h\nu/c$ ir $p' = h\nu'/c$). (1.6.2b) lygtį perkeliame $\mathbf{p}'$ į kairiąją pusę ir pakeliame kvadratu abi šios lygties puses:



1.10 pav. Judesio kiekio tvermės dėsnis, kai nejudantis laisvasis elektronas sklaido fotoną: ν ir $h\nu$ – krintančiojo fotono dažnis ir energija, ν' ir $h\nu'$ – išsklaidytojo fotono dažnis ir energija, ν ir $m\nu$ – elektrono greičio ir judesio kiekio vektoriai po susidūrimo, $\mathbf{p}$ ir $\mathbf{p}'$ – fotono judesio kiekio vektoriai iki ir po susidūrimo (jų moduliai yra $p = h\nu/c$ ir $p' = h\nu'/c$), θ – fotono sklaidos kampas, h yra Planko konstanta, m yra elektrono masė

$$\begin{cases} h\nu = h\nu' + (m - m_0)c^2, \\ (mv)^2 = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\frac{h\nu}{c} \cdot \frac{h\nu'}{c} \cos \theta. \end{cases} \quad (1.6.3a)$$

$$(1.6.3b)$$

Čia θ yra kampas tarp vektorių $\mathbf{p}'$ ir $\mathbf{p}$, t. y. sklaidos kampas (žr. 1.10 pav.). Įrašę (1.6.1) į (1.6.3a,b), turime dviejų lygčių sistemą atžvilgiu dviejų nežinomųjų ν ir ν' . Ją išsprendę ir pasinaudoję sąryšiu tarp bangos ilgio λ ir dažnio $\nu = c/\lambda$, išvedame tokią fotono bangos ilgio pokyčio išraišką:

$$\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda = c \left(\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} \right) = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta). \quad (1.6.4)$$

Taigi,

$$\Delta\lambda = \lambda_C (1 - \cos \theta); \quad (1.6.5)$$

$$\lambda_C \equiv \frac{h}{m_0 c} = 0,024263 \text{ Å}. \quad (1.6.6)$$

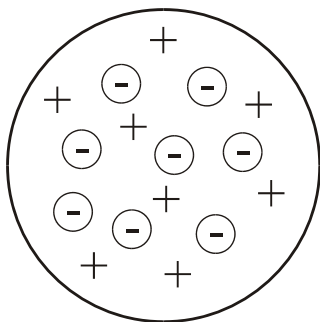
(1.6.5) formulė vadinama **Komptono formule**, o dydis λ_C vadinamas **Komptono bangos ilgiu**.

Komptono formulė (1.6.5) išvesta be jokių elektrono greičio v apribojimų. Todėl ta formulė galioja esant bet kokiems v , taip pat ir nereliatyvistiniams greičiams. Vadinas, jeigu išvedimo metu vietoj reliatyvistinių kinetinės energijos ir judesio kiekio išraiškų $((m - m_0)c^2$ ir mv , kur m išreiškiamas (1.6.1) reiškiniu) naudojamos nereliatyvistinės išraiškos ($m_0 v^2/2$ ir $m_0 v$), galutinis rezultatas nepasikeičia.

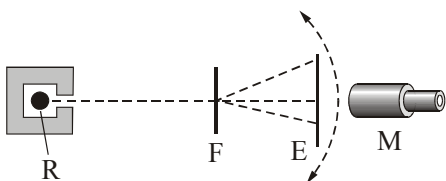
Smulkesnė Komptono sklaidos analizė bus pateikta 12.3.1–12.3.4 poskyriuose.

1.7. Branduolinis atomo sandaros modelis. Rezerfordo tyrimai

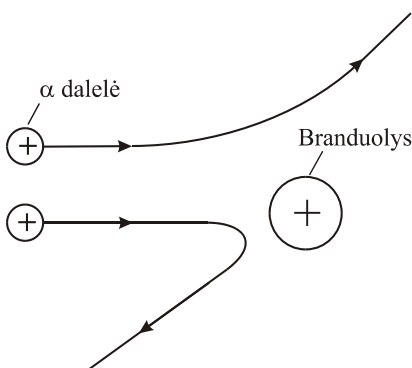
Ankstesniuose poskyriuose buvo aprašyti trys reiškiniai, kuriuose pasireiškia elektromagnetinės spinduliuotės bangos-dalelės dvejopumas. XX a. pradžioje paaiškėjo, kad toks bangos-dalelės dvejopumas yra būdingas ne vien fotonams, bet ir kitoms mikrodalelėms,



1.11 pav. Tomsono atomo modelis



1.12 pav. Rezerfordo matavimų schema



1.13 pav. α dalelių sklaidos aiškinimas remiantis branduoliniu atomo modeliu

pvz., elektronams. Per kelis dešimtmečius buvo sukurta teorija, kuri aprašo ir elektromagnetinę spinduliuotę, ir materialųjų dalelių (pvz., elektronų ir atomų branduolių) judėjimą bei tarpusavio sąveiką. Ši teorija – tai kvantinė mechanika. Pirmuoju kvantinės mechanikos kertiniu akmeniu tapo Planko hipotezė apie spinduliavimo kvantinį pobūdį. Maždaug tuo pačiu metu, kai Maksas Plankas suformulavo savo hipotezę, prie kvantinės mechanikos kūrimo buvo artėjama ir kitaip: tiriant atomo sandarą.

XIX a. pabaigoje elektrono atradėjas – anglų fizikas Dž. Dž. Tomsonas – nustatė, kad elektronai yra atomų dalelės. Kadangi atomo elektros krūvis lygus nuliui, Tomsonas padarė išvadą, kad atome turi būti ir teigiamasis krūvis, kuris yra priešingas elektronų krūviui. Pagal **Tomsono modelį** atomą sudaro sferinis tolygiai pasiskirsčiusio teigiamojo krūvio debesėlis, kuriame „plaukioja“ neigiamieji elektronai (žr. 1.11 pav.).

1909 m. kitas anglų fizikas Ernestas Rezerfordas (*Rutherford*) tyrė alfa dalelių („ α dalelių“) pereigą pro plonas aukso bei kitų metalų folijas (apie α daleles bus smulkiau rašoma 9.2 poskyryje). Tuo metu jau buvo žinoma, kad α dalelės yra teigiamosios dalelės, kurių krūvis lygus dvigubam elementariajam krūviui ($+2e$), o masė maždaug 7000 kartų didesnė už elektrono masę. Rezerfordo matavimų schema pavaizduota 1.12 pav. Radioaktyvi medžiaga R spinduliuoja siaurą pluoštelį α dalelių, kurių kelyje įtaisyta metalinė folija F. Perėjusios pro foliją, α dalelės atsimuša į fluorescuojantį ekraną E ir sukelia blyksnius, kurie matomi mikroskopu M. Mikroskopą kartu su ekranu galima sukroti aplink foliją (žr. 1.12 pav.). Šitaip galima nustatyti, kokia dalis α dalelių nukrypsta bet koku duotuoju kampu. Rezerfordas pastebėjo, kad dalis α dalelių, pereidamos foliją, yra išsklaido-

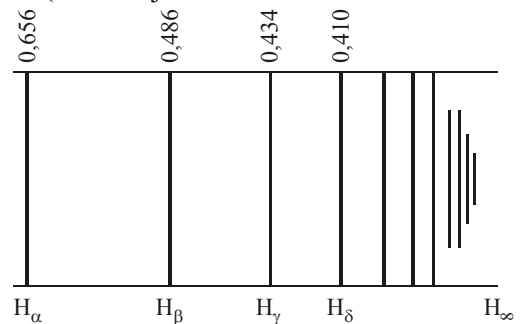
mos, t. y. pakeičia judėjimo kryptį. Jis padarė išvadą, kad α dalelė pakeičia judėjimo kryptį dėl to, kad ją stumia atomo teigiamasis elektros krūvis (žr. 1.13 pav.). Tačiau nuostabiausia buvo tai, kad vidutiniškai viena iš 8000 dalelių buvo išsklaidomos didesniu negu 90° kampu, t. y. atšokdavo atgal. Atsižvelgdamas į didelį α dalelių greitį (maždaug 20 000 km/s), Rezerfordas matematiškai įrodė, kad tai įmanoma tik tuo atveju, kai α dalelę veikiantis teigiamasis krūvis yra sutelktas erdvės srityje, kurios matmenys maždaug 10 000 kartų mažesni už atomo matmenis. Kad α dalelė būtų išsklaidyta didesniu negu 90° kampu, jos smūgis į šią erdvės sritį turi būti beveik centrinis (žr. apatinę trajektoriją 1.13 pav.). [Elektringųjų dalelių tampriosios Kulono sklaidos matematinis aprašymas bus pateiktas 11.3 poskyryje.]

Apibendrinęs α dalelių sklaidos tyrimų rezultatus, Rezerfordas 1911 m. pateikė naują atomo sandaros modelį, kuris vadinamas **branduoliniu atomo modeliu**. Pagal šį modelį beveik visa atomo masė ir visas teigiamasis atomo krūvis yra sutelkti atomo **branduolyje**, kurio matmenys maždaug 10 000 kartų mažesni už viso atomo matmenis. Branduolio krūvis lygus elemento atominio numerio Z ir elementariojo krūvio e sandaugai Ze . Branduolio matmenys yra 10^{-15} – 10^{-14} m eilės (palyginimas: atomo matmenys yra 10^{-10} m eilės). Išorinė atomo erdvė yra užpildyta elektronų, kurie skrieja aplink branduolį uždarois trajektorijomis panašiai kaip planetos aplink Saulę. Elektronų pilnutinis neigiamasis krūvis yra lygus branduolio teigiamajam krūviui, todėl atomas yra elektriškai neutralus.

Tačiau pagal klasikinę teoriją tokia sistema yra nestabili. Pagal klasikinę elektrodinamiką elektronas, judėdamas aplink branduolį, turėtų nuolat spinduliuoti elektromagnetines bangas (nes judėjimas uždara orbita – tai judėjimas su pagreičiu, o su pagreičiu judantis krūvininkas spinduliuoja elektromagnetines bangas). Tas faktas, kad elektronas spinduliuoja, reiškia, kad jo energija nuolat mažėja. Vadinasi, elektronas turėtų spirale artėti prie branduolio. Per mažą sekundės dalį elektronas turėtų nukristi į branduolį, t. y. atomas nustotų egzistuoti. Tačiau patirtis rodo, kad atomai gali egzistuoti neribotai ilgai, nespinduliuodami elektromagnetinių bangų ir neprarasdami energijos. Taigi, priėmus branduolinį atomo modelį, paaiškėjo, kad klasikinė elektrodinamika negali paaiškinti atomų egzistavimo.

1.8. Vandenilio atomo spektro linijų dažniai

Žinias apie atomų sandarą teikia jų elektromagnetinės spinduliuotės spektrai. Kaip minėta 1.1 poskyryje, spinduliuotės dažnių spektrą nusako dažnio funkcija, kuri yra dviejų nykstančių dydžių santykis: $dI/d\nu$; čia dI yra spinduliuotės su dažniais nuo ν iki $\nu + d\nu$ intensyvumas. Analogiškai spinduliuotės bangos ilgių spektrą nusako bangos ilgio funkcija, kuri yra dviejų nykstančių dydžių santykis: $dI/d\lambda$; čia dI yra spinduliuotės su bangos ilgiais nuo λ iki $\lambda + d\lambda$ intensyvumas. Matavimai rodo, kad atomų spinduliuotės dažniai priklauso tam tikriems labai siauriems intervalams. T. y. funkcija $dI/d\nu$ skiriasi nuo nulio tik tam tikruose siauruose dažnių intervaluose (o funkcija $dI/d\lambda$ skiriasi nuo nulio tik tam tikruose siauruose bangos ilgių intervaluose). Tie dažnių intervalai yra tokie siauri, kad visus tokio intervalo dažnius galima laikyti praktiškai vienodais. Todėl galima laikyti, kad atomai spinduliuoja tik atskirų tiksliai apibrėžtų dažnių elektromagnetines bangas. Leidžiant tokią spinduliuotę pro spektrinį prietaisą, pvz., pro difrakcinę gardelę, matomos siauros ryškios linijos (žr. 1.14 pav.). Todėl sakoma, kad atomų spektrai yra **linijiniai**. Kiekviena linija atitinka apibrėžto dažnio (ir apibrėžto bangos ilgio) šviesą. 1.14 pav. pavaizduotos kelios vandenilio atomo spektro linijos. Virš kiekvienos linijos nurodytas atitinkamas bangos ilgis (μm). Po kiekvieno linija pateiktas jos sutartinis žymuo.



1.14 pav. Vandenilio atomo spektro linijos, kurios atitinka regimąją šviesą

Matavimai rodo, kad linijos atomų spektruose išsidėsčiusios dėsningai. Anksčiausiai šis dėsningumas buvo pastebėtas lengviausiojo elemento – vandenilio – atomų spektre. 1885 m. šveicarų matematikas Johanas Balmeris (*Balmer*) paskelbė paprastą formulę vandenilio atomo spektro regimosios dalies linijų bangos ilgiui λ skaičiuoti:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{l^2} \right) \quad (l = 3, 4, 5, \dots); \quad (1.8.1)$$

čia R yra koeficientas, kuris vėliau buvo pavadintas **Rydbergo konstanta**: $R \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$. l yra bet koks sveikasis skaičius pradedant trimis. (1.8.1) formulė vadinama **Balmerio formule**. Jeigu (1.8.1) formulėje vietoj l įrašytume 3, tai apskaičiuavę gautume bangos ilgį, kuris tiksliai sutampa su vandenilio spektro raudonosios linijos bangos ilgiu (ši linija žymima H_α). Įrašę $l = 4$, gautume žydrosios linijos H_β

bangos ilgį ir t. t. Ši vandenilio atomo linijų seka vadinama **Balmerio serija**. Balmerio serijos pirmųjų keturių linijų bangų ilgiai nurodyti 1.14 pav. Atitinkami linijų dažniai ν apskaičiuojami tiesiog padauginus (1.8.1) reiškinį iš šviesos greičio c (nes $\nu = c/\lambda$).

1888 m. švedų fizikas Johanas Rydbergas (*Rydberg*), tirdamas šarminių metalų spektrus, pastebėjo, kad tuose spektruose galima išskirti artimų linijų grupes – serijas. Pamatęs Balmerio formulę, Rydbergas nustatė, kad ta formulė yra atskiras atvejis bendresnės formulės, kuri nusako įvairių vandenilio spektro serijų linijų bangos ilgius:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{l^2} \right) \quad (l > n). \quad (1.8.2)$$

(1.8.2) formulė vadinama **Balmerio ir Rydbergo formulė**. Šioje formulėje n yra serijos numeris (Balmerio seriją atitinka $n = 2$). Vėlesni vandenilio spektro tyrimai patvirtino Balmerio ir Rydbergo formulę. 1908 m. austrų ir vokiečių fizikas Fridrichas Pašenas (*Paschen*) atrado linijų seriją vandenilio spektro infraraudonojoje srityje. Ši serija atitinka $n = 3$ (1.8.2) formulėje ir vadinama **Pašeno serija**:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{l^2} \right) \quad (l = 4, 5, 6, \dots).$$

1914 m. amerikiečių fizikas Teodoras Laimanas (*Lyman*) atrado linijų seriją vandenilio spektro ultravioletinėje srityje. Ši serija atitinka $n = 1$ (1.8.2) formulėje ir vadinama **Laimano serija**:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{l^2} \right) \quad (l = 2, 3, 4, \dots).$$

Vandenilio atomo spektro dėsningumai prieštarauja klasikiniam požiūriui į atomą. Pagal klasikinę elektrodinamiką atomo spinduliuotės dažnis turėtų būti lygus elektrono apsisukimų dažniui. Tačiau pagal klasikinę teoriją elektronas turėtų nuolat spirale artėti prie branduolio (žr. 1.7 poskyrį). Tada elektrono sukimosi dažnis didėtų. Atitinkamai didėtų ir spinduliuotės dažnis. T. y. klasikiniu požiūriu atomas turėtų spinduliuoti ištisinio spektro spinduliuotę (o ne diskretaus dažnio spinduliuotę).

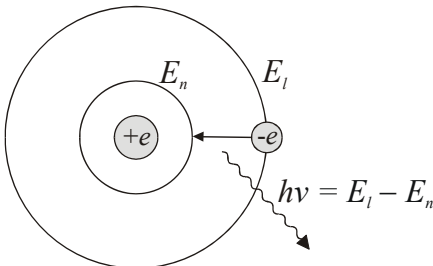
1.9. Boro postulatai

Danų fizikas Nilsas Boras (*Bohr*) 1913 m. suformulavo atomo teoriją, kuri susiejo tris tuo metu žinomus eksperimentinius faktus, prieštaraujančius klasikinei mechanikai:

- 1) spinduliavimo kvantinis pobūdis (žr. 1.4 poskyrį),
- 2) branduolinis atomo modelis (žr. 1.7 poskyrį),
- 3) vandenilio atomo spektro dėsningumai (žr. 1.8 poskyrį).

Boras atsisakė bandymų paaiškinti atomo sandarą klasikinės teorijos metodais. Jis pabandė atrasti kelis esminius principus, kurie yra suderinami su anksčiau minėtais eksperimentiniais faktais. Šiuos principus Boras suformulavo trijų postulatų pavidalu. „Postulatas“ – tai teiginys, kuris vartojamas kaip išankstinė prielaida formuluojant teoriją. Taigi, **Boro postulatai** yra šie.

Pirmasis postulas (nuostoviųjų būsenų postulas). Elektronas gali skrieti apie branduolį tik tam tikromis orbitomis, nespinduliuodamas energijos. Šios orbitos vadinamos **nuostoviomis**. Kiekvieną orbitą atitinka apibrėžta atomo energija E_n (n – orbitos numeris).



1.15 pav. Antrasis Boro postulas

Antrasis postulas (dažnių taisyklė). Peršokant elektronui iš toliau nuo branduolio esančios orbitos l į artimesnę branduoliui orbitą n , atomas išspinduliuoja energiją, kuri lygi atitinkamų nuostoviųjų energijų E_l ir E_n skirtumui (žr. 1.15 pav.). Šios elektromagnetinės spinduliuotės dažnis susijęs su išspinduliuotąja energija taip pat kaip harmoninio osciliatoriaus dažnis susijęs su osciliatoriaus energijos kvantu, t. y. (1.3.16a) sąryšiu:

$$h\nu = E_l - E_n. \quad (1.9.1)$$

Trečiasis postulas (orbitų kvantavimo taisyklė) susieja orbitos numerį n su toje orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momento modulių $|L|$. Pagal trečiąjį Boro postulatą n -tojoje orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momento modulis lygus

$$L_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (1.9.2)$$

Sveikasis skaičius n vadinamas **pagrindiniu kvantiniu skaičiumi**.

Pirmasis postulatas, viena vertus, konstatuoja akivaizdų empirinį faktą, kad elektronas gali sukurti aplink branduolį nespinduliuodamas energijos (nors tai prieštarauja klasikinei elektrodinamikai), o kita vertus, teigia, kad ne visos orbitos yra galimos. Pagal *antrąjį postulatą* (1.9.1) atomo spektro linijų dažniai yra lygūs atomo orbitų energijų skirtumams, padalytiems iš Planko konstantos. Taigi, vandenilio atomo spektro linijinis pobūdis (dažnio diskretumas) yra pasekmė to fakto, kad vandenilio atomo energija gali būti lygi tik tam tikroms tiksliai apibrėžtomis vertėms. Antrasis postulatas taip pat prieštarauja klasikinei fizikai, pagal kurią elektrono spinduliuotės dažnis turėtų sutapti su jo sukimosi aplink branduolį dažniu. *Trečiasis postulatas* apibrėžia fizikinį dydį, kuris apibūdina kiekvieną orbitą. Tas fizikinis dydis – tai orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momentas. Kaip toliau pamatysime, pagal elektrono judesio kiekio momentą galima apskaičiuoti visus elektrono judėjimą apibūdinančius dydžius – n -tosios orbitos spindulį r_n , elektrono judėjimo greitį v_n ir elektrono judesio kiekį bei energiją. Žinant elektrono energijos galimasias vertes, pagal antrąjį postulatą (1.9.1) galima apskaičiuoti atomo elektromagnetinės spinduliuotės dažnius. Šie skaičiavimai pateikti 1.10 poskyryje.

Boro teiginio apie atomo energijos diskretumą pirmuoju tiesioginiu įrodymu tapo vokiečių fizikų Dž. Franko (*Franck*) ir G. L. Herco (*Hertz*) bandymai, kurie buvo atlikti 1914 m. Jie matavo energiją, kurią elektriniame lauke pagreitintieji elektronai, judantys mažo slėgio gyvsidabrio (Hg) garuose, perduoda Hg atomams netampriųjų susidūrimų metu. *Netamprusis susidūrimas* – tai toks dviejų dalelių susidūrimas, kurio metu dalis jų kinetinės energijos virsta vienos arba abiejų dalelių vidine energija (šiuo atveju – Hg atomo vidine energija). Paaiškėjo, kad mažiausioji elektrono energija, kuri netampriojo susidūrimo metu virsta Hg atomo vidine energija, yra lygi 4,9 eV. Tai reiškia, kad dviejų mažiausių galimų Hg atomo energijų skirtumas yra 4,9 eV.

1.10. Boro vandenilio atomo modelis

Prieš skaičiuojant vandenilio atomo spektro linijų bangos ilgį pagal Boro teoriją, reikia prisiminti kelių mechanikoje vartojamų fizikinių dydžių apibrėžtis ir kelis mechanikos dėsnius:

- 1) Dalelę veikianti *jėga* F – tai dalelės masės m ir pagreičio a sandauga (II Niutono dėsnis):

$$F = ma. \quad (1.10.1)$$

- 2) Dalelę veikiančios jėgos F atliktas *darbas* A – tai jėgos vektoriaus F ir dalelės poslinkio vektoriaus Δr skaliarinė sandauga:

$$A = F \cdot \Delta r = F \Delta r \cos \theta; \quad (1.10.2)$$

čia θ yra kampas tarp vektorių F ir Δr .

- 3) Dalelės *judesio kiekio momento* (arba *mechaninio momento*) vektorius yra lygus

$$L = r \times p; \quad (1.10.3a)$$

čia r yra vektorius, kuris jungia atskaitos tašką ir dalelę, p yra dalelės judesio kiekio (kitai vadinamo dalelės impulsu) vektorius, $r \times p$ yra tų dviejų vektorių vektorinė sandauga. Jeigu dalelė juda apskrita orbita, kurios spindulys yra r , o judesio kiekio momentas matuojamas atžvilgiu orbitos centro, tada vektoriai r ir p yra statmeni, todėl vektoriaus L modulis yra lygus vektorių r ir p modulių sandaugai:

$$|L| = rp = rmv; \quad (1.10.3b)$$

čia $p = mv$ yra dalelės judesio kiekio modulis, m yra jos masė, v yra greitis.

- 4) Pastoviu greičiu v spindulio r apskrita orbita judanti dalelė turi įcentrinį pagreitį, kuris lygus

$$a = \frac{v^2}{r}. \quad (1.10.4)$$

- 5) Greičiu v judančios m masės dalelės *kinetinė energija* W lygi

$$W = \frac{mv^2}{2}. \quad (1.10.5)$$

- 6) Dviejų dalelių sąveikos *potencinė energija* U , kai dalelės yra duotuoju atstumu viena nuo kitos – tai darbas, kurį atliktų dalelių sąveikos jėga F , kai tos dalelės yra nutolinamos viena nuo kitos be galo dideliu atstumu. Jeigu dalelės traukia viena kitą, tada, nutolinamos viena nuo kitos, dalelės juda priešinga sąveikos jėgai kryptimi, t. y. kampas tarp jėgos vektoriaus ir poslinkio vektoriaus lygus $\theta = 180^\circ$. Taigi, pasinaudojus darbo apibrėžtimi (1.10.2), dviejų dalelių tarpusavio traukos potencinė energija, kai tos dalelės yra atstumu r viena nuo kitos, yra lygi

$$U = -\int_r^\infty F dr \quad (1.10.6)$$

(integralas čia vartojamas dėl to, kad sąveikos jėga F priklauso nuo atstumo r). Iš (1.10.6) formulės išplaukia, kad dviejų dalelių tarpusavio traukos potencinė energija yra neigiama.

7) Dalelių sistemos ***pilnutinė mechaninė energija*** E lygi jų kinetinės ir potencinės energijų sumai:

$$E = W + U. \quad (1.10.7)$$

Be to, bus taikomas ***Kulono dėsnis***, kuris teigia, kad dviejų dalelių, kurių elektros krūviai lygūs q_1 ir q_2 , sąveikos jėga lygi

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 q_2}{r^2}; \quad (1.10.8)$$

čia r yra atstumas tarp dalelių, o ϵ_0 yra elektrinė konstanta: $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{N} \cdot \text{m}^2)$. Jeigu dalelių elektros krūviai yra priešingo ženklo, tada pagal Kulono dėsnį (1.10.8) gaunama, kad jėga F yra neigiama. Tai reiškia, kad dalelės traukia viena kitą.

Kai dalelių sąveikos jėga priklauso tik nuo atstumo tarp jų, dviejų dalelių sąveikos uždavinį galima pakeisti vienos dalelės judėjimo centriniame jėgų lauke uždaviniu. Šios „efektinės“ dalelės masė yra lygi vadinamajai ***redukuotajai masei***. Branduolio ir elektrono sistemos redukuotoji masė lygi

$$m = \frac{Mm_e}{M + m_e} = \frac{m_e}{1 + (m_e / M)}; \quad (1.10.9)$$

čia M yra branduolio masė, o m_e yra elektrono masė. Kadangi $M \gg m_e$, tai $m \approx m_e$. Todėl minėtąją „efektinę“ dalelę natūralu sutapatinti su elektronu, o jėgos centrą – su branduoliu. Toliau šiame poskyryje redukuotoji masė m bus vadinama „elektrono mase“.

Remdamiesi Boro postulatais ir anksčiau minėtais dėsniais bei apibrėžtimis, apskaičiuosime vandenilio atomo energijas ir šitaip teoriškai pagrįsime Balmerio ir Rydbergo formulę (1.8.2). Šio uždavinio sprendimas susideda iš trijų dalių:

- 1) elektrono orbitų spindulių skaičiavimas,
- 2) elektrono kinetinės energijos kiekvienoje orbitoje skaičiavimas,
- 3) elektrono potencinės energijos kiekvienoje orbitoje skaičiavimas.

Elektrono orbitų spindulių skaičiavimas

Visų pirma išreikšime elektrono orbitų spindulius r_n ($n = 1, 2, 3, \dots$). Pasinaudojame elektrono įcentrinio pagreičio išraiška (1.10.4). Pažymėjus elektrono greitį n -tojoje orbitoje v_n , elektrono įcentrinis pagreitis lygus

$$a = \frac{v_n^2}{r_n}. \quad (1.10.10)$$

Kita vertus, pagal antrąjį Niutono dėsnį (1.10.1) dalelės pagreitis yra lygus jį veikiančios jėgos ir elektrono masės m santykiui:

$$a = \frac{F_n}{m}; \quad (1.10.11)$$

čia F_n yra traukos jėga tarp branduolio ir elektrono, kai elektronas yra n -tojoje orbitoje. Šią jėgą nusako Kulono dėsnis (1.10.8). Vandenilio atomo branduolio krūvis lygus $+e$, o elektrono krūvis lygus $-e$. Įrašę tai į Kulono dėsnį (1.10.8), matome:

$$F(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \quad (1.10.12)$$

(čia nėra minuso ženklo, nes raide F susitarta žymėti jėgos modulį). Prilyginę (1.10.10) ir (1.10.11) lygybių dešiniąsias puses vieną kitai ir pasinaudoję jėgos $F_n = F(r_n)$ išraiška (1.10.12), išvedame:

$$r_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{mv_n^2}. \quad (1.10.13)$$

Šioje orbitos spindulio išraiškoje yra vienas nežinomasis – elektrono greitis v_n . Jį galima išreikšti orbitos spinduliu r_n pasinaudojus trečiuoju Boro postulatu (1.9.2). Taigi įrašome judesio kiekio momento apibrėžtį (1.10.3b) į (1.9.2). Išreiškiame v_n :

$$v_n = n \frac{h}{2\pi m r_n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots); \quad (1.10.14)$$

Įrašę (1.10.14) į (1.10.13), išvedame:

$$r_n = n^2 \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2} \approx n^2 \cdot 0,529 \text{ Å} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.10.15)$$

Šioje išraiškoje matyti, kad orbitos spindulys yra proporcingas orbitos numerio kvadratui. T. y. orbitos sunumeruotos spindulio r_n didėjimo tvarka. Pirmosios orbitos ($n = 1$) spindulys pagal (1.10.15) formulę lygus $r_1 \approx 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,529 \text{ Å}$. Šis dydis vadinamas **pirmuoju Boro spinduliu** (tiksliau, „pirmuoju Boro spinduliu“ vadinama (1.10.15) reiškinio vertė, kai vietoj redukuotosios masės m vartojama elektrono masė m_e , kuri, kaip minėta, yra labai artima redukuotajai masei (1.10.9)). Įrašę šią vertę į (1.10.14) formulę, apskaičiuojame elektrono greitį pirmojoje orbitoje: $v_1 \approx 2,2 \cdot 10^6 \text{ m/s}$.

Elektrono kinetinės energijos kiekvienoje orbitoje skaičiavimas

Pagal kinetinės energijos apibrėžtį (1.10.5) elektrono kinetinė energija n -tojoje orbitoje lygi

$$W_n = \frac{mv_n^2}{2}. \quad (1.10.16)$$

Įrašę v_n išraišką (1.10.14) į (1.10.16), išvedame kinetinės energijos išraišką orbitos spinduliu r_n :

$$W_n = n^2 \frac{h^2}{8\pi^2 m r_n^2}. \quad (1.10.17)$$

Įrašę r_n išraišką (1.10.15) į (1.10.17), gauname:

$$W_n = \frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2}. \quad (1.10.18)$$

Elektrono potencinės energijos kiekvienoje orbitoje skaičiavimas

Dabar išreikšime potencinę energiją U . Pagal potencinės energijos apibrėžtį (1.10.6) tam reikia žinoti elektrono ir branduolio traukos jėgą. Šią jėgą nusako Kulono dėsnis (1.10.12). Įrašę (1.10.12) į (1.10.6) ir integravę nuo r iki ∞ , gauname tokią potencinės energijos priklausomybę nuo r :

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}. \quad (1.10.19)$$

Įrašę r_n išraišką (1.10.15) į (1.10.19), gauname n -tojoje orbitoje esančio elektrono potencinę energiją:

$$U_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{me^4}{4\varepsilon_0^2 h^2}. \quad (1.10.20)$$

H atomo spektro linijų dažnių skaičiavimas. Pagrindinė ir sužadintoji būsenos

Dabar galime apskaičiuoti vandenilio atomo energiją, kuri vartojama antrajame Boro postulate (1.9.1). Pagal (1.10.7), kai elektronas yra n -tojoje orbitoje, vandenilio atomo pilnutinė mechaninė energija, kurią žymėsime E_n , yra lygi kinetinės energijos (1.10.18) ir potencinės energijos (1.10.20) sumai (čia neatsižvelgiama į atomo slenkamojo judėjimo kinetinę energiją). Taigi,

$$E_n = W_n + U_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{\hbar^2}{2r_1^2 m} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.10.21)$$

Žinant atomo energijos vertes, galima apskaičiuoti atomo spektro linijų dažnius. Tačiau prieš tai reikia apibrėžti kelias naujas sąvokas. Atomas, kurio neveikia jokios išorinės jėgos, anksčiau ar vėliau pereina į mažiausios energijos būseną. Kaip matome energijos išraiškoje (1.10.21), atomo energijos algebrinė vertė yra mažiausia, kai elektronas skrieja pirmąja orbita ($n = 1$). Tokia atomo būseną yra stabiliausia ir vadinama **pagrindine būsena**. Kol nėra jokių išorinių poveikių, atomas yra pagrindinės būsenos. Norint perkelti elektroną iš pirmosios orbitos į toliau nuo branduolio esančią orbitą, kurios numeris $l > 1$, atomui reikia suteikti energiją, kuri lygi orbitų energijų skirtumui $E_l - E_1$. Tokios būsenos atomas nėra stabilus. Sakoma, kad atomas **sužadintas**. Dingus išoriniam poveikiui, sužadintasis atomas per labai trumpą laiką (10^{-8} s eilės) savaime grįžta į pagrindinę būseną. Vandenilio atomo atveju tai reiškia, kad elektronas pereina iš aukštesnės orbitos į pirmąją orbitą. Tačiau sužadintojo atomo elektronas gali peršokti ne vien į pirmąją orbitą, bet ir į bet kurią arčiau branduolio esančią orbitą. Pvz., jeigu elektronas yra trečiojoje orbitoje, tada jis gali visų pirma pereiti į antrąją orbitą, o paskui – į pirmąją. Kai elektronas peršoka iš tolesnės l -tosios orbitos į artimesnę n -tąją orbitą, atomas išspinduliuoja energijos kvantą $h\nu = E_l - E_n$. Kadangi $\nu = c/\lambda$, atitinkamos atomo spektro linijos atvirkštinis bangos ilgis lygus

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_l - E_n}{hc}. \quad (1.10.22)$$

Įrašę energijos išraišką (1.10.21) į (1.10.22), gauname visų vandenilio atomo spektro linijų atvirkštinius bangos ilgius:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{l^2} \right) \quad (l > n). \quad (1.10.23)$$

Ši formulė labai panaši į eksperimentiškai gautą Balmerio ir Rydbergo formulę (1.8.2). Be to, (1.10.23) formulėje prieš skliaustus esančio daugiklio vertė gana tiksliai sutampa su empirine Rydbergo konstantos verte (žr. 1.8 poskyrį):

$$\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = \frac{(9,11 \cdot 10^{-31}) \cdot (1,6022 \cdot 10^{-19})^4}{8 \cdot (8,854 \cdot 10^{-12})^2 \cdot (6,626 \cdot 10^{-34})^3 \cdot 3 \cdot 10^8} \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

Taigi, Boro atomo teorija paaiškino ne tik empirinės Balmerio formulės fizikinę prasmę, bet ir vandenilio atomo spektro serijų kilmę. Pagal Boro teoriją Balmerio ir Rydbergo formulės (1.8.2) pirmojo dėmens vardiklyje esantis skaičius n yra eilės numeris orbitos, į kurią peršoka elektronas, o antrojo dėmens vardiklyje esantis skaičius l yra eilės numeris orbitos, iš kurios prasideda elektrono šuolis. Elektronui peršokant į pirmąją nuostoviąją orbitą ($n = 1$), išspinduliuojamos Laimano serijos linijos, peršokant į antrąją orbitą ($n = 2$) – Balmerio serijos linijos ir t. t. 1.16 pav. šie šuoliai pažymėti rodyklėmis.

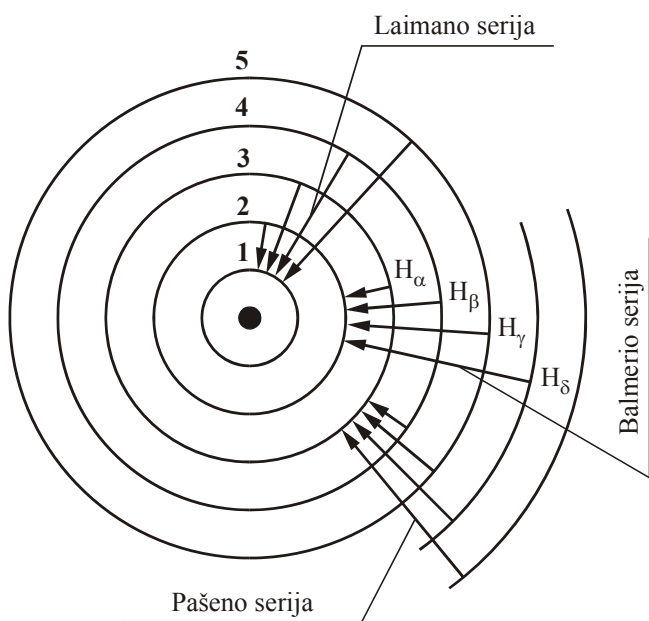
Visos atomo energijos vertės (1.10.21) vadinamos atomo **energijos lygmenimis**. Žemiausiasis energijos lygmuo, kuris atitinka atomo pagrindinę būseną, vadinamas **pagrindiniu lygmeniu**. Visi aukštesnieji lygmenys, kurie atitinka atomo sužadintąsias būsenas, vadinami **sužadintaisiais lygmenimis**. Grafiškai energijos lygmenys vaizduojami horizontaliomis atkarpomis (žr. 1.17 pav.). Įrašę konstantų m , e , ε_0 ir h vertes į energijos išraišką (1.10.21), vandenilio atomo energijos lygmenys galime išreikšti šitaip:

$$E_n = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.10.24)$$

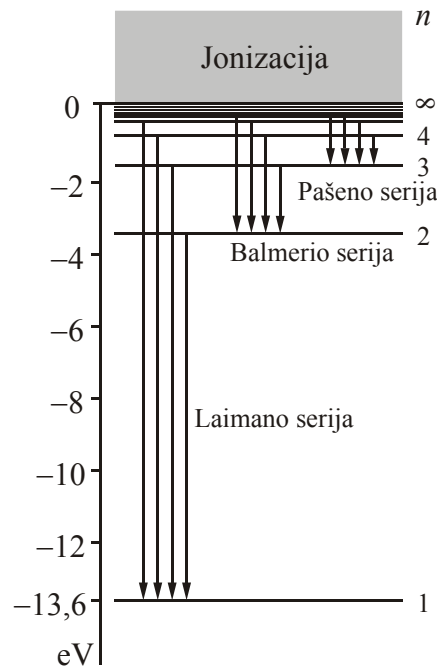
Čia „eV“ reiškia elektronvoltą – dažniausiai atomo fizikoje vartojamą energijos vienetą. 1 eV atitinka energiją, kurią įgyja elektronas, pagreitintas 1 V įtampa:

$$1 \text{ eV} = e \cdot 1 \text{ V} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1 \text{ V} = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ J}.$$

Kaip matome (1.10.24) formulėje, visos galimos atomo pilnutinės energijos vertės yra neigiamos. Matematinio požiūriu taip yra todėl, kad neigiamos potencinės energijos modulis $|U|$ yra didesnis už teigiamos kinetinės energijos vertę W . Fizikiniu požiūriu taip yra todėl, kad elektroną ir branduolį sieja traukos jėga.



1.16 pav. Vandenilio spektro serijų susidarymas



1.17 pav. Vandenilio atomo energijos lygmenys

Visų fizikinių sistemų, kurių dalelės susietos tarpusavyje traukos jėgomis, pilnutinė mechaninė energija yra neigiama.

Kuo didesnis orbitos numeris n , tuo energija E_n yra arčiau nulio. Nulinė energijos vertė atitinka laisvą, atitrūkusį nuo branduolio elektroną (tada $n = \infty$). Kai elektronas yra laisvas, tada jo ir branduolio tarpusavio traukos potencinė energija lygi nuliui, todėl pilnutinė energija tampa lygi elektrono kinetinei energijai. Pagal kinetinės energijos apibrėžtį (1.10.5) ji gali įgyti bet kokias neneigiamas vertes. Todėl virš nulinės energijos yra ištisinio spektro sritis (žr. 1.17 pav.).

Kuo žemesnis atomo energijos lygmuo, tuo stipriau elektronas susietas su branduoliu (tuo atomas patvaresnis). Pvz., pagrindinės būsenos energija $E_1 = -13,6$ eV rodo, kad, norint išlaisvinti elektroną (t. y. jonizuoti atomą), atomui reikia suteikti 13,6 eV energiją; tuo tarpu elektronui išlaisvinti iš pirmojo sužadintojo lygmens ($n = 2$) reikia $13,6 / 4 = 3,4$ eV energijos ir t. t. Ši energija vadinama **elektrono ryšio energija**. Jeigu atomo gautoji energija yra didesnė už elektrono ryšio energiją, tada energijos perteklius virsta išlaisvintojo elektrono kinetine energija, kuri gali būti bet kokia.

Orbitų spindulių išraišką (1.10.15) ir kinetinės, potencinės bei pilnutinės energijų išraiškas (1.10.18), (1.10.20) ir (1.10.21) ir spektro linijų bangos ilgių formulę (1.10.23) galima nesunkiai apibendrinti bet kokiam jonizuotam atomui, kuris yra praradęs visus elektronus, išskyrus vieną (tokie atomai vadinami **vandeniliškaisiais atomais**). Toks atomas skiriasi nuo vandenilio atomo tuo, kad branduolio krūvis lygus ne $+e$, o $+Ze$, kur Z yra sveikasis teigiamas skaičius. Tada Kulono dėsnyje (1.10.12) dydį e^2 reikia pakeisti dydžiu Ze^2 (nes branduolio ir elektrono krūvių sandaugos modulis bendruoju atveju lygus $Ze \cdot e = Ze^2$). Kadangi visose anksčiau pateiktose formulėse elektrono krūvis e „atsirado“ tik iš Kulono dėsnio, tai lygiai tą patį pakeitimą reikia atlikti ir kitose formulėse. T. y., norint pritaikyti bet kurią anksčiau pateiktą formulę jonui su vieninteliu elektronu, dydį e^2 reikia pakeisti dydžiu Ze^2 . Pvz., vandeniliškojo atomo n -tosios orbitos spindulys lygus

$$r_n = n^2 \frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m Z e^2} \approx n^2 \frac{0,529 \text{ Å}}{Z}. \quad (1.10.25)$$

Kaip matome, didėjant branduolio krūviui Z , orbitų spinduliai mažėja. Kadangi $e^4 = e^2 \cdot e^2$, tai energijos išraiškose dydį e^4 reikia pakeisti dydžiu $Z^2 e^4$. Taigi, jono, aplink kurio branduolį sukasi vienintelis elektronas, pilnutinė mechaninė energija gali įgyti šias vertes:

$$E_n = W_n + U_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{\hbar^2}{2r_1^2 m} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13,6 \text{ eV} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.10.26)$$

Toks pats papildomas daugiklis Z^2 atsiranda ir spektro linijų bangos ilgių formulėje (1.10.23), kuri yra tapati Balmerio ir Rydbergo formulei (1.8.2). Todėl spinduliuotės, kuri atsiranda, kai vandeniliškojo atomo elektronas peršoka iš l -tosios į n -tąją orbitą, atvirkštinis bangos ilgis lygus

$$\frac{1}{\lambda} = Z^2 R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{l^2} \right) \quad (l > n). \quad (1.10.27)$$

Čia R yra Rydbergo konstanta.

1.11. Atomo magnetinės savybės pagal Boro teoriją

Apskrita orbita judantis elektronas yra tapatus apskritu kontūru tekančiai elektros srovei. Kaip žinoma iš elektrodinamikos, tokia srovė turi magnetinį momentą, kuris lygus

$$\mu = \frac{eS}{T} = \frac{\pi e r^2}{T}; \quad (1.11.1)$$

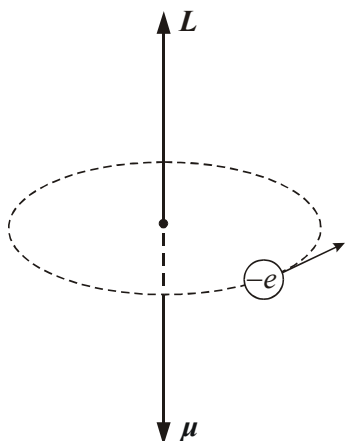
čia T yra apsisukimo periodas, $S = \pi r^2$ yra orbitos plotas, o r yra orbitos spindulys. Antra vertus, greičiu v apskrita orbita judantis elektronas turi judesio kiekio momentą (1.10.3b). Kadangi $v = 2\pi r/T$, tai

$$|\mathbf{L}| = \frac{2\pi m r^2}{T}.$$

Išreiškę r^2/T iš pastarosios formulės ir įrašę į (1.11.1), išvedame elektrono magnetinio ir judesio kiekio momentų sąryšį:

$$\mu = \frac{e}{2m} |\mathbf{L}|.$$

Magnetinis ir judesio kiekio momentai yra vektoriniai dydžiai. Magnetinio momento vektoriaus $\boldsymbol{\mu}$ kryptis susijusi su srovės kryptimi pagal dešiniojo sraigto taisyklę, t. y., jeigu vektoriaus $\boldsymbol{\mu}$ pradžia yra srovės kontūro centre, tada, žiūrint iš šio vektoriaus galo, srovė turi tekėti prieš laikrodžio rodyklę. Elektrono



1.18 pav. Apskrita orbita judančio elektrono mechaninis momentas L ir magnetinis momentas μ

judėsio kiekio momento L kryptis susijusi su jo judėjimo kryptimi taip pat pagal dešiniojo sraigto taisyklę (žr. 1.18 pav.). Kadangi elektrono krūvis yra neigiamas, tai jo sukuriama elektros srovės kryptis yra priešinga judėjimo kryptčiai. Todėl elektrono magnetinio ir judėsio kiekio momentų kryptys yra priešingos:

$$\mu = -\frac{e}{2m} L \quad (1.11.2)$$

(žr. 1.18 pav.). Kadangi judėsio kiekio momento „natūralusis“ matavimo vienetas yra $\hbar$ (žr. III Boro postulata (1.9.2)), tai (1.11.2) patogiau užrašyti šitaip:

$$\mu = -\mu_B \frac{L}{\hbar}; \quad (1.11.3)$$

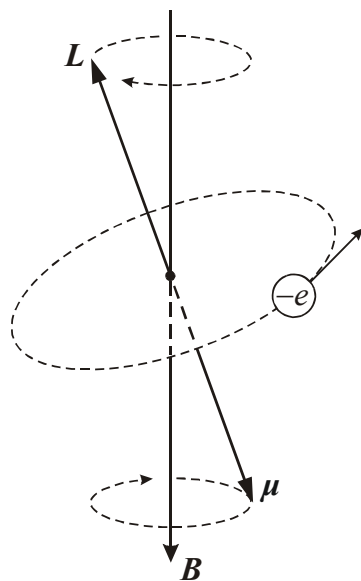
čia μ_B yra **Boro magnetonas**:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274009 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 5,78838 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}; \quad (1.11.4)$$

čia m_e yra elektrono masė (iki šiol ji buvo žymima m), o „T“ yra teslos (magnetinės indukcijos matavimo vieneto) žymuo. Boro magnetonas yra elektrono magnetinio momento natūralusis matavimo vienetas: pagal Boro teoriją elektrono orbitinio magnetinio momento modulis lygus Boro magnetono ir orbitos numerio n sandaugai.

Esant išoriniam magnetiniam laukui, magnetinį momentą veikia jėga, kuri stengiasi nukreipti magnetinį momentą lauko kryptimi. Kadangi elektronas turi orbitinį mechaninį momentą, tai, esant išorinei jėgai, jis veikia kaip vilkelis: jo mechaninis momentas precesuoja aplink išorinės jėgos (magnetinio lauko) kryptį (žr. 1.19 pav.). Ši precesija vadinama **Larmoro precesija**, o jos dažnis vadinamas **Larmoro dažniu**. Elektrono Larmoro dažnis lygus

$$\nu_L = \frac{eB}{4\pi m_e} = \frac{\mu_B B}{2\pi\hbar} = \frac{\mu_B B}{h}; \quad (1.11.5)$$



1.19 pav. Larmoro precesija. Mechaninis momentas L ir magnetinis momentas μ precesuoja aplink išorinio magnetinio lauko magnetinės indukcijos vektorių B . Akivaizdu, kad šios precesijos kryptis yra priešinga elektrono sukimosi kryptčiai

čia B yra magnetinė indukcija. Šis dažnis yra labai didelis, todėl pasireiškia tik magnetinio momento vektoriaus vidurkis, kurio kryptis lygiagreti su išorinio magnetinio lauko kryptimi. Šio vidurkio vertė lygi magnetinio momento (1.11.3) projekcijai į išorinio magnetinio lauko kryptį.

Jeigu medžiagos atomai turi nenulinį magnetinį momentą, šie momentai iš dalies orientuojasi magnetinio lauko kryptimi (tiksliai orientuotis trukdo šiluminis judėjimas). Tada medžiaga įmagnetėja lauko kryptimi. Tokios medžiagos vadinamos **paramagnetikais**. Kai kurių atomų elektronų magnetiniai momentai tiksliai kompensuoja vienas kitą, todėl atomo magnetinis momentas lygus nuliui ir medžiagos įmagnetėjimo mechanizmas yra kitoks. Tokios medžiagos įmagnetėja dėl minėtosios Larmoro precesijos. Mat Larmoro precesija sukelia papildomą sukamąjį judėjimą aplink lauko kryptį. Larmoro precesijos kryptis susijusi su lauko kryptimi pagal dešiniojo sraigto taisyklę (žr. 1.19 pav.). Dėl Larmoro precesijos atsiranda papildoma sukurinė elektros srovė, kurios kryptis priešinga precesijos kryptčiai (nes elektrono krūvis neigiamas). Šios papildomos srovės magnetinio momento kryptis yra priešinga išorinio magnetinio lauko kryptčiai. Todėl medžiagos, kurių atomai neturi pastovaus magnetinio momento, įmagnetėja priešinga laukui kryptimi. Tokios medžiagos vadinamos **diamagnetikais**.

1.12. Boro atomo teorijos ribotumas

Nors Boro teorija gana tiksliai nusako vandenilio atomo spektro linijų dažnius, tačiau ji turi kai kurių esminių trūkumų, dėl kurių šiuo metu jau nėra naudojama praktiniuose skaičiavimuose. Pagrindinis trūkumas yra tas, kad ši teorija nebuvo nei nuosekliai kvantinė, nei nuosekliai klasikinė. Kaip ką tik

įsitikinome, kiekybinėje analizėje Boro teorija rėmėsi klasikinės mechanikos dėsniais (pvz., antrasis Niutono dėsnis, potencinės ir kinetinės energijos išraiškos) bei trimis Boro postulatais, kurie atspindi kvantinę šios teorijos pusę. Tačiau šie postulatai buvo naudojami kaip formalios išankstinės prielaidos nebandant jų paaiškinti. Dėl šių priežasčių Boro atomo teorija negalėjo paaiškinti platesnio masto atominių reiškinių. Pvz., buvo neįmanoma paaiškinti helio spektro, molekulinio spektro susidarymo, cheminių ryšių tarp atomų ir kt.

Boro teorija tapo pereinamuoju etapu tarp klasikinės fizikos ir kvantinės mechanikos, kurios pagrindai buvo sukurti XX a. trečiajame dešimtmetyje. Kvantinė mechanika dabartiniame mokslo etape geriausiai paaiškina atominius reiškinius. Kvantinės mechanikos požiūriu atomo elektronas tolydžiai pasiskirstęs erdvėje aplink branduolį, t. y. sudaro „elektronų debesį“, o ne sukasi aplink branduolį tiksliai apibrėžta orbita ir tiksliai apibrėžtu greičiu (kaip teigė Boro atomo teorija).

Tačiau Boro atomo teorija, nors ir blogiau atspindinti tikrovę, yra daug vaizdesnė ir paprastesnė už kvantinę mechaniką, kurios matematinis aparatas yra gana sudėtingas. Be to, atomo energijos lygmenų sąvoka, kuri pirmą kartą pavartota Boro teorijoje, vartojama ir kvantinėje mechanikoje. Todėl, jeigu siekiama vaizdžiai aprašyti kokį nors atominį reiškinį, ir šiuo metu dažnai remiamasi Boro atomo modeliu.

1.13. Bangos-dalelės dvejojimas. Heizenbergo nelygė

Atradus šviesos dalelines savybes (žr. 1.4–1.6 poskyrius), iškyla klausimas, ar materialiosios dalelės, savo ruožtu, neturi banginių savybių. Į šį klausimą 1924 m. teigiamai atsakė prancūzų fizikas Luji de Broilis (*de Broglie*) iškėlęs hipotezę, kad visos materialiosios dalelės (elektronai, protonai ir kt.) turi banginių savybių.

Taigi, kiekvieną mikrodalelę galima apibūdinti ne tik dalelių parametrais – energija E ir judesio kiekio vektoriumi $\mathbf{p}$, bet ir banginiais parametrais – dažniu ν , bangos ilgiu λ ir bangos vektoriumi $\mathbf{k}$. Dalelės banginių ir dalelinių savybių sąryšis kiekybiškai išreiškiamas tomis pačiomis lygtimis kaip ir fotonų (žr. (1.4.1) ir (1.4.4)):

$$E = h\nu, \quad (1.13.1a)$$

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad (1.13.1b)$$

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}. \quad (1.13.1c)$$

Todėl bet kuri dalelė, kuri turi judesio kiekį, yra susijusi su banga, kurios ilgis išreiškiamas **de Broilio formule**:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}. \quad (1.13.2)$$

Čia $p = mv$ yra dalelės, kurios masė m , o judėjimo greitis v , judesio kiekis. Šios bangos vadinamos **de Broilio bangomis**.

Bangos-dalelės dvejojimas rodo, kad, aprašant mikrodaleles, reikia vienu metu naudotis ir banginėmis, ir dalelinėmis sampratėmis.

Mikrodalelė negali vienu metu turėti tiksliai apibrėžtų judesio kiekio ir koordinatės. Tai išplaukia iš de Broilio formulės (1.13.2): jeigu dalelės judesio kiekis p yra tiksliai apibrėžtas, tai taip pat tiksliai apibrėžtas ir de Broilio bangos ilgis λ . Vadinasi, *dalelė, kurios judesio kiekis yra tiksliai apibrėžtas, pasireiškia kaip apibrėžto bangos ilgio plokščioji banga*. Tačiau plokščioji banga yra pasiskirsčiusi visoje erdvėje. Tai reiškia, kad bangos koordinatė yra absoliučiai neapibrėžta. Vadinasi, *mikrodalelė su apibrėžtu judesio kiekiu turi visiškai neapibrėžtą koordinatę* (t. y. vienoda tikimybė, kad dalelė yra bet kuriame erdvės taške). Yra teisingas ir atvirkščias teiginys: jeigu mikrodalelės koordinatės yra tiksliai žinomos, tai jos judesio kiekis yra visiškai neapibrėžtas.

„Neapibrėžtumo“ sąvoka reiškia, kad, matuojant dalelės koordinatę arba judesio kiekį, po skirtingų matavimų gausime šiek tiek skirtingas vertes. Šių verčių „išsibarstymo“ apie vidurkį didumas ir nusako neapibrėžtumą. Tiksliau, neapibrėžtumas yra lygus standartiniam nuokrypiui (standartinio nuokrypio matematinė apibrėžtis pateikta G priedo G.3 skyrelyje). Reikia turėti omenyje, kad mikrodalelių koordinatės ir judesio kiekio standartiniai nuokrypiai, apie kuriuos čia rašoma, nėra susiję su matavimo metodų netobulumais. Dalelės koordinatės ir judesio kiekio vertės yra *objektyviai* neapibrėžtos. Taip yra dėl mikrodalelių dvejos – dalelinės ir banginės – prigimties. Siekiant tai pabrėžti, vietoj „standartinio nuokrypio“ sąvokos vartojama „neapibrėžtumo“ sąvoka, nors matematiškai abi šios sąvokos apibrėžiamos vienodai.

Vokiečių fizikas Verneris Heizenbergas (*Heisenberg*) 1927 m. suformulavo **neapibrėžtumo sąryšį**, taip pat vadinamą **Heizenbergo nelygybę**. Pagal šį principą dalelės koordinatės ir judesio kiekio neapibrėžtumai susiję tokia nelygybe:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}; \quad (1.13.3)$$

čia Δx yra dalelės koordinatės neapibrėžtumas (standartinis nuokrypis), Δp_x yra atitinkamos judesio kiekio komponentės neapibrėžtumas, o $\hbar = h/(2\pi) \approx 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ yra mažoji Planko konstanta. Analogišką nelygybę atitinka ir kitų dviejų Dekarto koordinačių bei atitinkamų judesio kiekio komponentių neapibrėžtumai ($\Delta y, \Delta p_y$ ir $\Delta z, \Delta p_z$). Pvz., jeigu dalelės koordinatė x yra tiksliai nustatyta ($\Delta x = 0$), tada pagal (1.13.3) nelygybę $\Delta p_x = \infty$, t. y. judesio kiekio x komponentė yra visiškai neapibrėžta. Kadangi judesio kiekis yra lygus dalelės masės ir greičio sandaugai, tai iš (1.13.3) lengvai gaunamas koordinatės ir greičio neapibrėžtumų sąryšis. Pvz., x koordinatei galioja sąryšis:

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m} \quad (1.13.4)$$

(y ir z koordinatėms galioja tokie patys neapibrėžtumų sąryšiai).

Heizenbergo neapibrėžtumo sąryšis (1.13.3) arba (1.13.4) reiškia, kad dalelės judėjimo trajektorijos sąvoka, kuri vartojama klasikinėje mechanikoje, netinka mikrodalelių judėjimui apibūdinti. Klasikinės mechanikos dėsniai (pvz., II Niutono dėsnis) tiksliai nusako dalelės padėtį erdvėje kiekvienu laiko momentu, jeigu yra žinomos dalelę veikiančios jėgos. Todėl, taikant klasikinės mechanikos dėsnius, galima apskaičiuoti dalelės koordinačių x , y ir z priklausomybes nuo laiko. Šios trys laiko funkcijos nusako dalelės judėjimo trajektoriją (dalelės kelią erdvėje). Tačiau, jeigu tiksliai žinoma, pvz., koordinatės x priklausomybė nuo laiko $x(t)$, tada tiksliai žinoma ir šios funkcijos išvestinė laiko atžvilgiu, t. y. greičio komponentė v_x , o tai prieštarauja neapibrėžtumo sąryšiui (1.13.4). Taigi, Heizenbergo nelygybė nusako, koku tikslumu galima taikyti klasikinės mechanikos dėsnius (pvz., trajektorijos sąvoką) aprašant dalelės judėjimą. Toliau pateikti trys pavyzdžiai, kurie iliustruoja šį teiginį.

1. Tarkime, kad matuojama 1 g masės kūno, kuris juda išilgai x ašies 1 m/s greičiu, koordinatė tam tikru laiko momentu. Tarkime, kad kūno greitis išmatuotas 10^{-9} m/s tikslumu (tai yra labai didelis tikslumas). Tada pagal koordinatės ir greičio neapibrėžtumų sąryšį (1.13.4) mažiausias galimas koordinatės neapibrėžtumas lygus

$$(\Delta x)_{\min} = \frac{\hbar}{2m\Delta v} \approx 5,3 \cdot 10^{-23} \text{ m}.$$

Tai yra toks mažas dydis, kad jį galima laikyti lygiu nuliui. Taigi, greičio ir koordinatės neapibrėžtumai šiame pavyzdyje yra praktiškai lygūs nuliui. Tai reiškia, kad masyvių kūnų, kurie sudaryti iš daugelio milijardų atomų, judėjimą klasikinės mechanikos dėsniai apibūdina praktiškai idealiai tiksliai.

2. Kitas pavyzdys: elektrono, judančio vandenilio atome, koordinatės neapibrėžtumas yra apytiksliai lygus vandenilio atomo matmenims, t. y. maždaug 10^{-10} m. Vadinasi, pagal neapibrėžtumų sąryšį (1.13.4) elektrono greičio neapibrėžtumas vandenilio atome yra didesnis už

$$(\Delta v)_{\min} = \frac{\hbar}{2m\Delta x} \approx 6 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}}.$$

Ši vertė yra tos pačios eilės kaip vidutinis elektrono greitis atome. Pvz., ji yra tik 4 kartus mažesnė už pirmosios orbitos elektrono greitį Boro atomo modelyje (žr. (1.10.14)). Tai reiškia, kad nėra prasmės kalbėti apie elektrono judėjimą atome tam tikra orbita. Kitaip sakant, aprašant elektrono judėjimą atome, negalima taikyti klasikinės mechanikos dėsnių.

3. Tarkime, kad elektronas televizoriaus kineskope juda greičiu $v_x = 10^6$ m/s ir kad šis greitis nustatytas 0,01 % tikslumu, t. y. $\Delta v_x = 10^6 \cdot 0,0001 = 100$ m/s. Pagal (1.13.4) formulę mažiausias elektrono koordinatės neapibrėžtumas lygus

$$(\Delta x)_{\min} = \frac{\hbar}{2m\Delta v} \approx 5,8 \cdot 10^{-7} \text{ m},$$

t. y. daug mažesnis už kineskopo matmenis. Todėl klasikinės mechanikos dėsniai yra pakankamai tikslūs praktiniams taikymams (nors ir ne tokie tikslūs kaip pirmajame pavyzdyje).

Remiantis šiais pavyzdžiais, galima teigti, kad pagal Heizenbergo nelygybę judėjimas apibrėžta trajektorija yra galimas tik pakankamai masyviems kūnams arba labai greitoms mikrodalelėms.

Heizenbergo nelygybė tapo vienu iš pagrindinių (ir vienu iš pirmųjų) kvantinės mechanikos principų. **Kvantinė mechanika**, arba **banginė mechanika** – tai fizikos šaka, kuri tiria mikrodalelių

judėjimo išorinių jėgų laukuose dėsnius ir tų dalelių sistemų (pvz., atomų, molekulių, kristalų) vidines savybes. Kvantinės mechanikos dėsnius galima taikyti aprašant ne vien mikrodalelių judėjimą, bet ir visų kūnų judėjimą, tačiau masyvių kūnų arba labai didelės energijos mikrodalelių de Broilio bangos ilgis yra toks mažas, kad banginės savybės nepasireiškia ir tinka klasikinės Niutono mechanikos dėsniai. T. y. klasikinė mechanika – tai ribinis kvantinės mechanikos atvejis, kuris tinka aprašant didelių masių ir energijų kūnų judėjimą. Kvantinės mechanikos pagrindai buvo sukurti 1925–1926 m. Jos kūrėjai buvo minėtasis V. Heizenbergas ir austrų fizikas Ervinas Šrėdingeris (*Schrödinger*).

1.14. Elektronų banginių savybių eksperimentinis patvirtinimas

Norint eksperimentiškai aptikti materialųjų dalelių banginę prigimtį, reikia atlikti bandymą, kuriame pasireikštų dalelių interferencija arba difrakcija. Kaip žinoma iš banginės optikos, visus pagrindinius šviesos interferencijos dėsningumus galima paaiškinti remiantis tuo, kad elektromagnetinėje bangoje elektrinis laukas kinta erdvėje ir laike harmoniniu dėsniu:

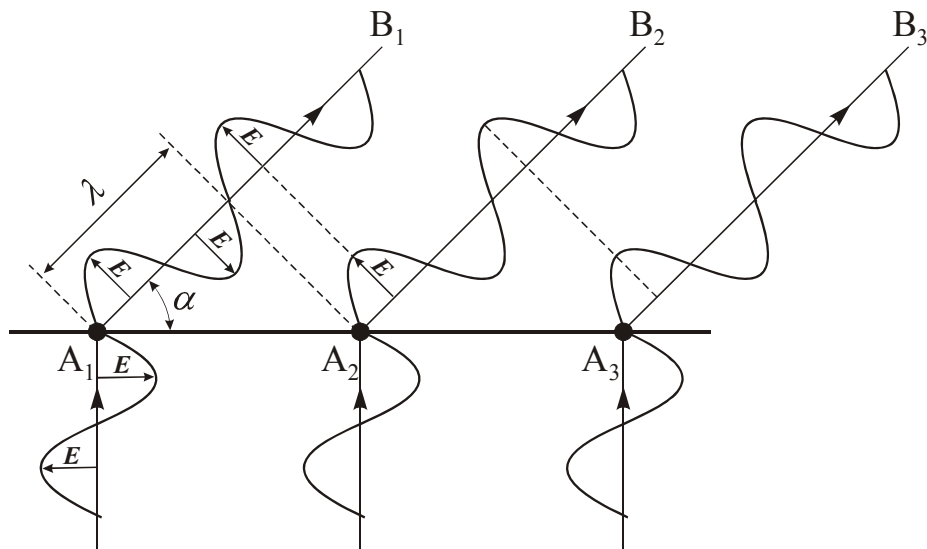
$$\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}_0 \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right]; \quad (1.14.1)$$

čia x yra koordinatė bangos sklidimo kryptimi, t yra laikas, λ yra bangos ilgis, ν yra dažnis, kuris lygus $\nu = c / \lambda$; c yra šviesos greitis. Interferencija atsiranda dėl to, kad, sudedant dvi bangas, gali atsirasti taip, kad vienuose erdvės taškuose abiejų bangų elektriniai laukai yra vienodos krypties, t. y. bangos stiprina viena kitą, o kituose erdvės taškuose elektriniai laukai yra priešingų krypčių, t. y. bangos silpnina viena kitą.

Šviesos difrakciją galima tirti naudojant difrakcinę gardelę (vienodų lygiagrečių siaurų plyšių sistemą). Apšvietus difrakcinę gardelę monochromatine šviesa ir padėjus ekraną už difrakcinės gardelės, vietoj geometriškai tikslaus plyšių atvaizdo gaunamos lygiagrečios šviesos ir tamsios juostos, kurių plotis priklauso nuo bangos ilgio ir nuo atstumo tarp gretimų plyšių (difrakcinės gardelės periodo). Todėl, žinant gardelės periodą ir išmatavus difrakcinių juostų plotį, galima nustatyti bangos ilgį. Ir atvirkščiai: žinant bangos ilgį, pagal difrakcinių juostų plotį galima nustatyti gardelės periodą. Tačiau ryškus difrakcinis vaizdas susidaro tik tuo atveju, kai gardelės periodas yra tos pačios eilės kaip bangos ilgis: jeigu periodas daug didesnis už bangos ilgį, tada gaunamas geometriškai tikslus plyšių sistemos atvaizdas, o jeigu daug mažesnis, tada gaunamas tolygus apšviestumas. Dešimčių arba šimtų elektronvoltų energijos elektronų de Broilio bangos ilgis yra angstromų eilės, t. y. atomų matmenų eilės. Būtų sudėtinga pagaminti difrakcinę gardelę su tokiu mažu periodu. Laimei, gamtoje egzistuoja natūralios difrakcinės gardelės, kurių periodas yra angstromų eilės. Tai yra **kristalai** – kietosios medžiagos, kurių atomų, molekulių arba jonų išsidėstymas erdvėje yra tvarkingas ir periodinis. Trumpabangės elektromagnetinės spinduliuotės (rentgeno spindulių) difrakcija kristaluose buvo pradėta tirti XX a. antrojo dešimtmečio pradžioje. Kai kurie šios difrakcijos dėsningumai aprašyti toliau. Tie dėsningumai galioja ir materijos dalelių (pvz., elektronų) de Broilio bangoms.

1.14.1. Bangų difrakcija kristale

Pirminė difrakcijos priežastis yra bangų koherentinė sklaida medžiagoje (**koherentinė sklaida** – tai sklaida, kurios metu nepakinta bangos dažnis). Kritus į kristalą apibrėžtos krypties bangai, atsiranda įvairiomis kryptimis sklindančios to paties dažnio **išsklaidytosios** bangos. Skirtinguose kristalo taškuose išsklaidytos bangos yra koherentinės, t. y. turi pastovų fazių skirtumą, kuris priklauso nuo sklaidos krypties, ir yra vienodai poliarizuotos. Kaip žinoma iš banginės optikos, koherentinės bangos interferuoja, t. y., susidedant dviem koherentinėms bangoms, suminis intensyvumas gali skirtis nuo tų bangų intensyvumų sumos priklausomai nuo jų fazių skirtumo. Skaičiuojant kristale išsklaidytų bangų interferencinių maksimumų ir minimumų kryptis, pakanka atsižvelgti tik į bangas, kurios išsklaidytos **vienarūšiuose** kristalo taškuose (t. y. taškuose, kurių aplinka yra vienoda), nes tuose taškuose išsklaidytų bangų amplitudės yra vienodos, todėl jos gali tiksliai „panaikinti“ viena kitą dėl interferencijos. Vienarūšių kristalo taškų (pvz., kurios nors vienos rūšies atomų) visuma sudaro vadinamąją **kristalo gardelę**, o tie taškai vadinami **gardelės mazgais**. Jeigu visuose gardelės mazguose duotąją kryptimi išsklaidytų bangų fazės sutampa (tiksliau, skiriasi dydžiu $2\pi n$, kur n yra sveikasis skaičius), tada visų ta kryptimi išsklaidytų bangų amplitudės susideda, t. y. bangos „stiprina“ viena kitą dėl tarpusavio interferencijos. Tokios kryptys vadinamos **difrakcinių maksimumų** kryptimis. Pvz., 1.20 pav. mazge A_1 išsklaidytos elektromagnetinės bangos A_1B_1 elektrinio lauko kryptis visais laiko momentais sutampa su gretimame mazge A_2 ta pačia kryptimi išsklaidytos bangos A_2B_2 elektrinio lauko kryptimi (fazių skirtumas lygus 2π), todėl abi

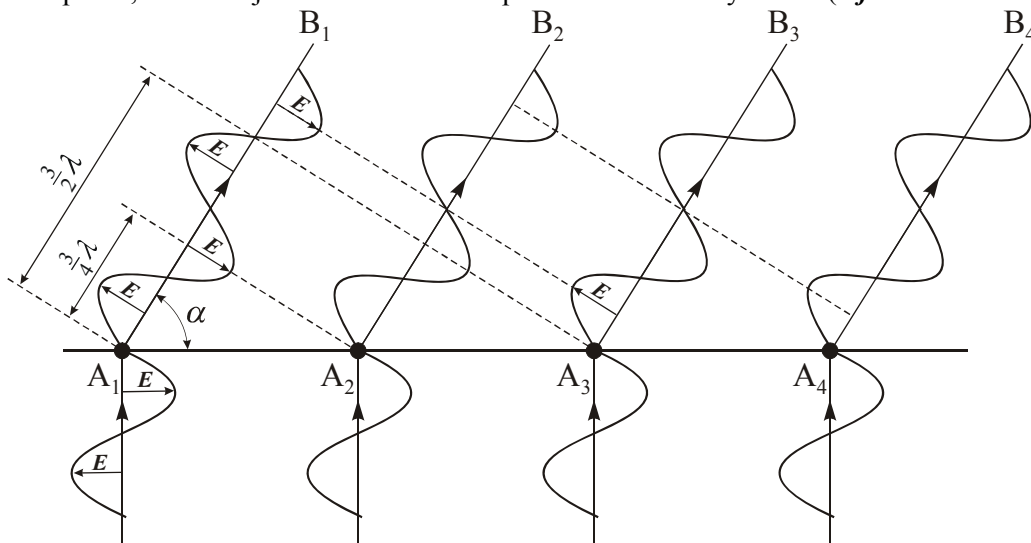


1.20 pav. Difrakcinio maksimumo susidarymas

bangos A_1B_1 ir A_2B_2 stiprina viena kitą. Kadangi visi gardelės mazgai yra išsidėstę vienodais intervalais vienas nuo kito, tai kitame mazge A_3 ta pačia kryptimi išsklaidytos bangos A_3B_3 amplitudė taip pat susideda su bangos A_1B_1 amplitude ir t. t. Todėl kryptis A_1B_1 , kurią nusako kampas α , atitinka difrakcinį maksimumą.

Reikia atkreipti dėmesį į tai, kad difrakcinio maksimumo sąlyga – tai sąlyga kampui α (žr. 1.20 pav.). T. y. neturi reikšmės, kuriuos kristalo gardelės mazgus laikysime sklaidos centrais, svarbu tik, kad sklaidos kryptis atitiktų difrakcinio maksimumo sąlygą. Mat atstumas tarp sklaidos srities (t. y. kristalo dalies, į kurią krinta pradinė spinduliuotė) ir skirtinguose atomuose išsklaidytų bangų spindulių sankirtos taško, kuriame matoma išsklaidytų bangų interferencija (pvz., fotografinės plėvelės) visada būna daug didesnis už sklaidos srities matmenis. Taigi, nors šie spinduliai nėra tiksliai lygiagretūs (kitaip jie nesikirstų), tas nuokrypis nuo lygiagretumo yra toks mažas, kad dažniausiai jo galima nepaisyti. Todėl, tiriant difrakciją kristaluose, galima teigti, kad visi spinduliai, kurie susikerta duotajame taške, yra lygiagretūs, t. y. sklinda viena kryptimi kaip pavaizduota 1.20 pav.

Dažniausiai būna kelios difrakcinių maksimumų kryptys. Visomis kitomis kryptimis kiekvienam gardelės mazgui galima surasti kitą mazgą, kuriame išsklaidytos bangos fazė yra priešinga, t. y. visus gardelės mazgus galima sugrupuoti į poras taip, kad kiekvienoje poroje išsklaidytos bangos duotąją kryptimi susidėdamos pasinaikintų. Pvz., 1.21 pav. atveju kryptimi A_1B_1 mazge A_1 išsklaidytos elektromagnetinės bangos elektrinio lauko vektorius visais laiko momentais yra priešingas mazge A_3 ta pačia kryptimi išsklaidytos bangos elektrinio lauko vektoriui, todėl abi išsklaidytosios bangos silpnina viena kitą. Analogiškai bangos A_2B_2 ir A_4B_4 taip pat susidėdamos pasinaikina ir t. t. Todėl kryptimi A_1B_1 , kurią nusako kampas α , šiuo atveju matomas nulinis spinduliuotės intensyvumas (**difrakcinis minimumas**). Iš



1.21 pav. Difrakcinio minimumo susidarymas

šio aiškinimo akivaizdu, kad svarbiausias veiksnys difrakcijoje yra periodinis vienerūšių atomų išsidėstymas erdveje. Jeigu atomai būtų išsidėstę netvarkingai, tada, nepriklausomai nuo pasirinktosios sklaidos krypties ir nuo pasirinkto atomų grupavimo į poras būdo, vienos atomų poros bangos silpnintų vieną kitą, o kitose – stiprintų vieną kitą, todėl išsklaidytoji spinduliuotė būtų tolygiai pasiskirsčiusi visomis kryptimis (be ryškių maksimumų ir minimumų).

1.14.2. Brego lygtis

Kaip minėta, difrakcinis vaizdas, kuris susidaro dėl bangų difrakcijos kristale, yra *išsklaidytųjų* sferinių bangų, kurių centrai sutampa su gardelės mazgais, interferencijos pasekmė. Tačiau lygiai tą patį vaizdą gautume, jeigu tartume, kad krintančioji banga *atsispindi* nuo kristalografinių plokštumų (taip yra vadinamos plokštumos, kuriose išsidėstę kristalo gardelės mazgai). Vartojant tokį įvaizdį, difrakcinis vaizdas – tai nuo įvairių kristalografinių plokštumų atsispindėjusių bangų interferencijos pasekmė. Per

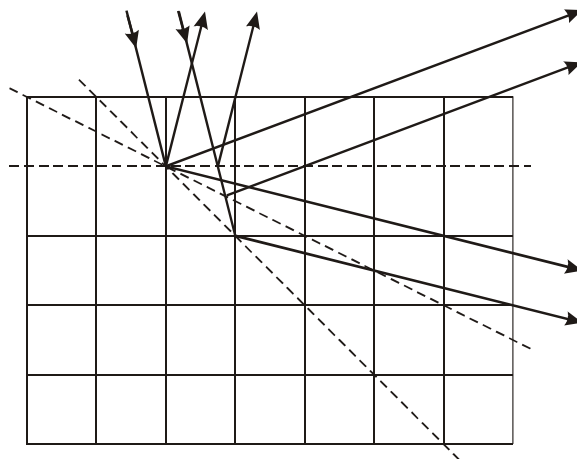
kiekvieną kristalo gardelės mazgą galima nubrėžti daug kristalografinių plokštumų (žr. 1.22 pav.), ir kiekviena plokštuma atspindės bangą tokia kryptimi, kad atspindžio kampas būtų lygus kritimo kampui. Tačiau reikia atsižvelgti į tai, kad atspindys duotąją kryptimi vyksta ne nuo vienos kristalografinės plokštumos, kuri eina per duotąjį mazgą, tačiau ir nuo visų kitų kristalografinių plokštumų, kurios lygiagrečios duotajai plokštumai. Gali atsitikti taip, kad kiekvienai kristalografinėi plokštumai, kuri atspindi bangą duotąją kryptimi, galima surasti kitą lygiagrečią plokštumą, nuo kurios atsispindėjusi banga turi priešingą fazę (tiksliau, šių dviejų atsispindėjusių bangų fazių skirtumas lygus $(2n + 1)\pi$, kur n yra sveikasis skaičius). Tada visos duotąją kryptimi atsispindėjusios bangos poromis pasinaikina ir ta kryptimi matomas nulinis intensyvumas (difrakcinis minimumas). Jeigu nuo gretimų lygiagrečių kristalografinių plokštumų atsispindėjusių bangų fazių skirtumas yra skaičiaus 2π kartotinis, tada visos ta kryptimi atsispindėjusios bangos viena kitą stiprina ir matomas difrakcinis maksimumas. Kadangi bangos fazės pokytis dydžiu 2π atitinka bangos ilgio nueitą kelią, tai difrakcinio maksimumo sąlygą galima suformuluoti šitaip: difrakcinių maksimumų kryptys – tai tos kryptys, kuriomis atsispindėjusių nuo gretimų lygiagrečių kristalografinių plokštumų bangų eigos skirtumas lygus sveikam bangos ilgiui skaičiui (žr. 1.23 pav.). Šios sąlygos matematinė išraiška, kurią 1912 m. išvedė anglų fizikas W. L. Bregas (*Bragg*), o 1913 m. – rusų fizikas G. V. Vulfas, yra vadinamoji **Brego lygtis** arba **Brego ir Vulfos sąlyga**:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (n = 0, 1, 2, \dots); \quad (1.14.2)$$

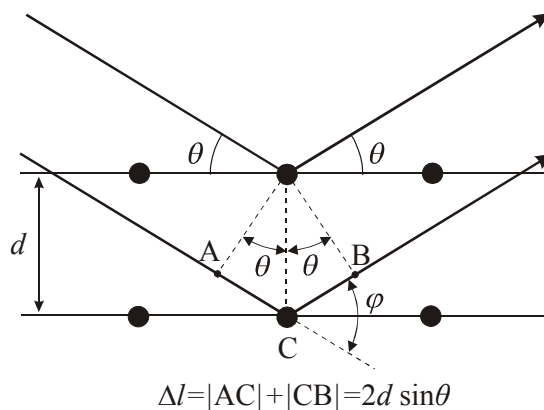
čia d yra atstumas tarp gretimų plokštumų duotoje kristalografinių plokštumų šeimoje, o θ yra kampas tarp krintančiojo spindulio ir kristalografinės plokštumos (žr. 1.23 pav.). Kampas θ vadinamas **spindesio kampu**. Skaičius n vadinamas **atspindžio eile**.

1.14.3. Devisono ir Džermerio bandymas

Vienas iš būdų patikrinti de Broilio hipotezę yra nuo kristalo atsispindėjusių elektronų pluošto intensyvumo tyrimas. Jeigu elektronai turi banginių savybių, tada, atsispindint maždaug 100 eV energijos elektronų pluošteliui nuo kristalo, atsispindėjusios spinduliuotės intensyvumo maksimumai turėtų būti



1.22 pav. Bangos atsispindys nuo plokštumų, kuriose išsidėstę kristalo gardelės mazgai (kristalografinių plokštumų). Gardelės mazgus vaizduoja tinklo mazgai, o kristalografinės plokštumos – brūkšninės linijos



1.23 pav. Bangų, kurios atsispindėjo nuo lygiagrečių kristalografinių plokštumų, eigos skirtumo Δl skaičiavimas. θ – spindesio kampas, φ – sklaidos kampas ($\varphi = 2\theta$)

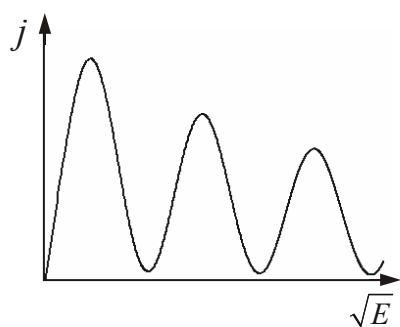
matomi kryptimis, kurios atitinka Brego lygtį (1.14.2). Tokį bandymą 1927 m. atliko amerikiečių fizikai K. Devisonas (*Davissan*) ir L. Džermeris (*Germer*). Bandymo metu kelių dešimčių elektronvoltų energijos elektronų pluoštas buvo nukreiptas į nikelio kristalo paviršių fiksuotu kampu. Kristalas buvo pagamintas taip, kad jo paviršius būtų lygiagretus su tam tikromis atominėmis (t. y. kristalografinėmis) plokštumomis, kurių atstumas vienos nuo kitos (d) buvo žinomas. Todėl kampas tarp krintančiojo elektronų pluošto ir kristalo paviršiaus buvo lygus kampui θ tarp elektronų pluošto ir tų plokštumų (žr. 1.23 pav.). Vadinasi, Brego lygties (1.14.2) kairiosios pusės vertė buvo žinoma. Eksperimento metu buvo matuojamas elektronų srauto tankis (t. y. elektronų skaičius ploto vienetui per laiko vienetą) kryptimi, kuri atitinka veidrodinį atspindį nuo kristalo paviršiaus. Pagal Brego lygtį (1.14.2) šis srauto tankis turėtų būti maksimalus, kai elektronų de Broilio bangos ilgis λ atitinka sąlygą

$$\lambda = \lambda_{\max} = \frac{2d \sin \theta}{n} \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (1.14.3)$$

T. y., mažinant bangos ilgį λ , atspindėjusio elektronų pluošto srauto tankis turėtų pakaitomis sumažėti ir padidėti, o jo maksimumai turėtų atitikti bangos ilgio vertes, kurias nusako (1.14.3) formulė. Eksperimento metu buvo keičiama elektronų kinetinė energija E . Išreiškę iš de Broilio formulės (1.13.2) elektrono greitį v , matome, kad elektrono kinetinė energija yra atvirkščiai proporcinga de Broilio bangos ilgio kvadratui λ^2 :

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{m}{2} \left(\frac{h}{m\lambda} \right)^2 = \frac{h^2}{2m\lambda^2}. \quad (1.14.4)$$

Vadinasi, didinant energiją, taip pat turėtų būti matomi srauto tankio padidėjimai ir sumažėjimai. Apskaičiuosime elektronų energijos vertes, kurios atitinka atspindėjusių elektronų srauto tankio maksimumus. Įrašę λ išraišką (1.14.3) į energijos formulę (1.14.4), gauname, kad srauto tankis turėtų būti didžiausias, kai elektronų kinetinė energija lygi



1.24 pav. Atspindėjusių nuo kristalo elektronų pluošto srauto tankio priklausomybė nuo kvadratinės šaknies iš elektrono energijos

$$E = E_{\max} = \frac{h^2}{2m\lambda_{\max}^2} = \frac{h^2}{8md^2 \sin^2 \theta} \cdot n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (1.14.5)$$

Taigi, nubrėžus atspindėjusių elektronų srauto tankio priklausomybę nuo kvadratinės šaknies iš elektronų energijos E , turėtume gauti kreivę su maksimumais, kurie išsidėstę vienodais atstumais vienas nuo kito. Būtent toks srauto tankio kitimas buvo gautas Devisono ir Džermerio eksperimente (žr. 1.24 pav.). Šie matavimai tapo pirmuoju eksperimentiniu de Broilio hipotezės patvirtinimu.

Vėliau buvo pastebėta ne tik elektronų, bet ir protonų, neutronų ir net molekulių difrakcija. Visi šie eksperimentai galutinai patvirtino, kad mikrodalelės turi banginių savybių. Atradus mikrodalelių bangines savybes, buvo sukurti nauji metodai medžiagos sandarai tirti, išsivystė nauja mokslo šaka – elektroninė optika. Elektroniniuose mikroskopuose vietoj šviesos pluošto naudojamas greitų elektronų pluoštas, o vietoj įprastinių lęšių naudojami magnetiniai lęšiai. Objektų, kuriuos galima pastebėti elektroniniu mikroskopu, mažiausi matmenys yra daug mažesni negu optinio mikroskopo atveju, nes šiuos matmenis lemia bangos ilgis, o elektronų de Broilio bangos ilgis gali būti angstromų eilės, t. y. kelis tūkstančius kartų mažesnis negu regimosios šviesos bangos ilgis.

De Broilio hipotezės patvirtinimas iš pagrindų pakeitė požiūrį į mikroobjektų savybes. Visiems mikroobjektams būdingos ir dalelinės, ir banginės savybės, tačiau nė vienos mikrodalelės negalima laikyti klasikine dalele (kuriai galioja klasikinės mechanikos dėsniai) arba banga (tokia kaip elektromagnetinės bangos).

1.15. Banginė funkcija ir jos statistinė samprata

1.14.3 poskyryje aprašyti matavimai patvirtino de Broilio hipotezę, kad materialios dalelės kai kuriomis sąlygomis pasireiškia kaip bangos, kurios gali interferuoti lygiai taip pat kaip elektromagnetinės bangos. Vadinasi, vienodos energijos ir vienos krypties materialųjų dalelių srautui galima priskirti (1.14.1) pavidalo bangą, ir tada dalelių interferencijos dėsningumus galima paaiškinti lygiai taip pat kaip elektromagnetinių bangų interferencijos dėsningumus. Tačiau de Broilio bangų prigimtis nėra elektromagnetinė. T. y., jeigu (1.14.1) formulė naudojama aprašant materialiąją dalelę, tada dydis $\mathcal{E}$ nėra elektrinio lauko stipris. Taigi, kyla klausimas, kokia yra de Broilio bangų prigimtis.

Norint atsakyti į šį klausimą, galima pasinaudoti analogija tarp materijos dalelių (pvz., elektronų) ir fotonų. Fotonams, kaip ir elektronams, yra būdingas bangos-dalelės dvejojumas. Banginės teorijos požiūriu šviesos intensyvumas kuriame nors ekrano taške yra proporcingas šviesos bangos amplitudės kvadratui. Fotoninės teorijos požiūriu šviesos intensyvumas yra proporcingas skaičiui fotonų, pataikiusių į ekrano ploto vienetą per laiko vienetą. Šis skaičius, savo ruožtu, yra proporcingas fotono pataikymo į duotąjį ekrano tašką tikimybei. Iš čia galima daryti išvadą: *šviesos bangos amplitudės kvadratas kuriame nors erdvės taške yra fotono pataikymo į tą tašką tikimybės matas*. Taikant šią išvadą reiškiniams, kuriuose pasireiškia materialijų dalelių difrakcija (pvz., 1.14.3 poskyryje aprašytam K. Devisono ir L. Džermerio bandymui), galima teigti, kad *materialijų dalelių (pvz., elektronų) de Broilio bangų amplitudės modulio kvadratas kuriame nors erdvės taške yra tų dalelių aptikimo tame erdvės taške tikimybės matas*.

Dydis, kuris apibūdina dalelės buvimo duotajame erdvės taške tikimybę, vadinamas tikimybės tankiu. **Tikimybės tankis** – tai dalelės radimo duotojoje nykstamojoje erdvės srityje tikimybės dP ir tos srities tūrio dV santykis dP/dV . Iš to, kas anksčiau pasakyta, išplaukia, kad dydžio, kuris kinta erdvėje pagal (1.14.1) dėsnį ir kuris aprašo materialijų dalelių interferenciją bei difrakciją, modulio kvadratas yra lygus tikimybės tankiui aptikti dalelę duotajame erdvės taške. Dabar jau galime tiksliai apibrėžti banginės funkcijos sąvoką. Dalelės **banginė funkcija** – tai koordinatinių ir laiko kompleksinė funkcija $\Psi(x,y,z,t)$, kuri apibūdina dalelės judėjimo būseną ir kurios modulio kvadratas lygus tikimybės tankiui aptikti duotosios būsenos dalelę erdvės taške su koordinatėmis x, y ir z laiko momentu t :

$$|\Psi|^2 = \frac{dP}{dV} \quad (1.15.1a)$$

arba

$$dP = |\Psi|^2 dV. \quad (1.15.1b)$$

Šioje banginės funkcijos apibrėžtyje reikia atkreipti dėmesį į teiginį, jog banginė funkcija apibūdina dalelės judėjimo būseną. Tai reiškia, kad, uždavus banginę funkciją, kartu visiškai apibūdinamas dalelės judėjimas visais laiko momentais. Skirtingų energijų dalelės turi skirtingas bangines funkcijas. Be to, reikia atkreipti dėmesį į tai, kad banginė funkcija yra kompleksinė. Taigi, analogija su elektromagnetinių bangų elektriniu lauku, kuris yra realusis dydis, yra tik dalinė.

Iš banginės funkcijos apibrėžties (1.15.1b) išplaukia, kad tikimybė aptikti dalelę baigtiniame tūryje V yra lygi

$$P = \int_V dP = \int_V |\Psi|^2 dV. \quad (1.15.2)$$

Jeigu tūris V artėja į begalybę, tada tikimybė P turi artėti į vienetą, nes dalelė tikrai yra kuriame nors erdvės taške. Iš čia išplaukia ši **banginės funkcijos normavimo sąlyga**:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1; \quad (1.15.3)$$

čia integruojama visoje erdvėje.

Dalelės banginė funkcija atitinka **superpozicijos principą**. Jo esmė yra tokia. Tarkime, kad kuris nors su dalele susijęs įvykis gali atsitikti keliais nepriklausomais būdais (pvz., kai elektronas krinta į kristalą, tą elektroną gali išsklaidyti bet kuris kristalo atomas). Tada *dalelės banginė funkcija yra lygi funkcijų, atitinkančių visus galimus įvykius, tiesiniam dariniui*. Pvz., jeigu krintančio į kristalą elektrono banginę funkciją pažymėsime Ψ_0 , o elektrono banginę funkciją po to, kai jį išsklaidė i -tasis kristalo atomas, pažymėsime Ψ_i ($i = 1, 2, \dots, N$; čia N yra kristalo atomų skaičius) ir tarsime, kad elektronas sąveikauja ne daugiau negu su vienu kristalo atomu, tada elektrono banginės funkcijos išraiška sklaidos metu yra

$$\Psi = \sum_{i=0}^N a_i \Psi_i; \quad (1.15.4)$$

čia a_i ($i = 0, 1, 2, \dots, N$) yra tam tikri kompleksiniai skaičiai, kurių vertės priklauso nuo nagrinėjamos sąveikos ypatybių. Be to, koeficientų a_i galimas vertes apriboja ir normavimo sąlyga (1.15.3): tie koeficientai turi būti tokie, kad banginės funkcijos modulio kvadrato integralas visa erdvė būtų lygus 1.

Būtent dėl superpozicijos principo vyksta materialijų dalelių interferencija ir difrakcija. Dviejų banginių funkcijų Ψ_1 ir Ψ_2 tiesinis darinys $a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$ gali būti ir didesnis, ir mažesnis už kiekvieną iš funkcijų Ψ_1 ir Ψ_2 . Banginės funkcijos padidėjimas kurioje nors erdvės srityje pagal (1.15.2) reiškia, kad toje erdvės srityje padidėja tikimybė aptikti dalelę. Banginės funkcijos sumažėjimas reiškia, kad toje erdvės srityje dalelės buvimo tikimybė sumažėja.

Gali kilti klausimas, kaip fotoninės teorijos požiūriu aiškinama elektromagnetinės spinduliuotės poliarizacija. Fotoninėje teorijoje poliarizacija yra fotono būsenos savybė, kuri susijusi su tuo, kad fotonas turi pastovų nenulinį sukinį (taip yra vadinamas vidinis dalelės judesio kiekio momentas). Šio sukinio projekcijos į bet kurią kryptį erdvėje gali būti lygios tik trims vertėms: 0 ir $\pm\hbar$ (taisyklės, pagal kurias nustatomos sukinio vektoriaus galimos kryptys, bus paaiškintos 3.3 poskyryje). Plokščiosios elektromagnetinės bangos poliarizaciją galima aprašyti, teigiant, kad fotono būsena yra dviejų būsenų, kurios atitinka dvi galimasias fotono sukinio projekcijas į bangos sklidimo kryptį ($\pm\hbar$), tiesinis darinys (smulkiau šis klausimas bus aptartas 3.3.6 poskyryje). Taigi, poliarizacijos aiškinimas taip pat remiasi superpozicijos principu (1.15.4). Šis teiginys yra analogiškas klasikinės elektrodinamikos teiginiui, kad bet kokios rūšies poliarizaciją (tiesinę, apskritiminę, elipsinę) galima nusakyti, išreiškus plokščiąją elektromagnetinę bangą dviejų (kairinės ir dešinės) apskritiminės poliarizacijos bangų suma, o poliarizaciją nusako tų bangų fazių skirtumas ir amplitudžių santykis.

Iš to, kas anksčiau pasakyta, išplaukia, kad banginė funkcija nėra tiesiogiai matuojamas dydis. Tiesiogiai matuoti galima tik jos modulio kvadratą, nes jis turi aiškią fizikinę prasmę (dalelės buvimo duotajame erdvės taške tikimybės tankis). Taigi, de Broilio bangos iš esmės skiriasi nuo klasikinių bangų. Pvz., elektromagnetinės bangos – tai kintantys erdvėje ir laike elektrinis ir magnetinis laukai, kurių vertės galima išmatuoti; garso bangos arba bangos ant vandens paviršiaus – tai kintantis erdvėje ir laike dalelių poslinkis atžvilgiu vidutinės padėties, kurį taip pat galima išmatuoti. Tuo tarpu banginės funkcijos, kurios priklausomybė nuo koordinatės ir laiko nusako de Broilio bangą, neišmanoma sutapatinti su jokių fizikinių dydžių. Banginės funkcijos sąvoka atspindi kvantinės mechanikos statistinį pobūdį, kuris susijęs su Heizenbergo nelygybe (1.13.3). Nors banginė funkcija neišgalina tiksliai nustatyti nei dalelės trajektorijos, nei dalelės greičio, tačiau ji yra išsamiausias dalelės judėjimo aprašymo būdas. Banginė funkcija pilnai nusako dalelės bangines savybes.

Uždaviniai

- 1.1. Saulės spinduliuotės intensyvumas prie Žemės paviršiaus vidurdienį yra maždaug $1,3 \text{ kW/m}^2$. Kad būtų paprasčiau, tarkime, kad Saulės spinduliuotė yra monochromatinė, o jos bangos ilgis $\lambda = 0,6 \text{ }\mu\text{m}$. Kokia yra fotonų koncentracija?
- 1.2. Elektronų išlaisvinimo iš ličio (Li) darbas lygus $2,46 \text{ eV}$, o cezio (Cs) fotoefekto raudonoji riba lygi 639 nm . Apskaičiuokite ličio raudonąją ribą ir elektronų išlaisvinimo iš cezio darbą (elektronvoltais).
- 1.3. Elektronų išlaisvinimo iš sidabro darbas lygus $A = 4,28 \text{ eV}$. Apskaičiuokite didžiausią potencialą, iki kurio išelektrins sidabro rutulys apšvietus jį monochromatine šviesa, kurios bangos ilgis lygus $\lambda = 10^{-7} \text{ m}$.
- 1.4. Koks turi būti elektronų greitis, kad jo impulsas būtų lygus fotono, kurio bangos ilgis $\lambda = 0,1 \text{ nm}$, impulsui?
- 1.5. Fotonas, kurio energija 2 eV , patiria centrinį susidūrimą su elektronu, kurio judėjimo kryptis yra priešinga fotono sklidimo kryptiai, o energija lygi 20 GeV . Kokia yra fotono energija po susidūrimo (elektronvoltais)?
- 1.6. Elektronų ir pozitronų, kurie juda aplink bendrą masės centrą, sistema yra vadinama pozitroniu. Pozitrono masė lygi elektronų masei, o pozitrono elektros krūvis yra priešingas elektronų krūviui. Apskaičiuokite atstumą tarp elektronų ir pozitronų, kai ši sistema yra pagrindinės būsenos, ir šios sistemos ryšio energiją (elektronvoltais).
- 1.7. Dvi vienodos nereliatyvistinės dalelės, kurių de Broilio bangos ilgiai yra λ_1 ir λ_2 , juda statmenomis kryptimis. Išreikškite kiekvienos dalelės de Broilio bangos ilgį jų masės centro sistemoje.
- 1.8. Kokia turi būti elektronų energija (elektronvoltais), kad jo de Broilio bangos ilgis būtų lygus Komptono bangos ilgiui?
- 1.9. Apskaičiuokite elektronų, kuris yra vandenilio atomo trečiojoje orbitoje ($n = 3$), de Broilio bangos ilgį.
- 1.10. Lygiagrečius monoenergetinių elektronų pluoštas krinta statmenai į nikelio kristalo paviršių. Kai krintančiųjų elektronų energija lygi 180 eV , tada kryptimi, kuri sudaro 55° kampą su kristalo paviršiaus normale, yra matomas ketvirtosios eilės atspindžio maksimumas. Apskaičiuokite atitinkamą atstumą tarp atominių plokštumų.

2. Paprasčiausių sistemų Šrėdingerio lygties sprendimas

2.1. Šrėdingerio lygtis ir energijos lygmenys

2.1.1. Nuostovioji ir nenuostovioji Šrėdingerio lygtys

1.15 poskyryje buvo apibrėžta banginės funkcijos $\Psi(x,y,z,t)$ sąvoka ir buvo paaiškinta jos prasmė: $|\Psi(x,y,z,t)|^2 dx \cdot dy \cdot dz$ nusako tikimybę aptikti dalelę erdvės tūrio elemente $dV = dx \cdot dy \cdot dz$ laiko momentu t . Taigi, jeigu žinomas banginės funkcijos pavidalas, tai bet kuriuo laiko momentu yra žinoma tikimybė aptikti dalelę bet kuriame erdvės taške, t. y. dalelės judėjimas yra išsamiai apibrėžtas. Vadinasi, norint išsamiai aprašyti dalelės judėjimą, reikia žinoti banginės funkcijos $\Psi(x,y,z,t)$ pavidalą.

Pagrindinė nereliatyvistinės kvantinės mechanikos lygtis, kuri matematiškai apibrėžia dalelės banginę funkciją Ψ , yra **Šrėdingerio lygtis**, kurią 1926 m. suformulavo austrų fizikas Ervinas Šrėdingeris (*Schrödinger*). Šrėdingerio lygtis, kaip ir visi pagrindiniai fizikos dėsniai (pvz., Niutono dėsniai), negali būti griežtai matematiškai išvesta, o yra postuluojuama. Jeigu dalelę veikianti jėga nepriklauso nuo dalelės greičio, tada Šrėdingerio lygtis yra tokio pavidalo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(x,y,z,t) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}; \quad (2.1.1)$$

čia $\hbar$ yra mažoji Planko konstanta, m yra dalelės masė, ∇ yra diferencialinis „nabla“ operatorius (žr. B priedą), ∇^2 yra Laplaso operatorius, $i = \sqrt{-1}$ yra menamasis vienetas, U yra dalelės potencinė energija¹. Šrėdingerio lygties (2.1.1) vaidmuo kvantinėje mechanikoje yra toks pat, koks yra Niutono dėsnių vaidmuo klasikinėje mechanikoje.

(2.1.1) yra **nenuostovioji Šrėdingerio lygtis**. Jeigu dalelės potencinė energija U išreikštu pavidalu nepriklauso nuo laiko (t. y. jeigu dalelė juda **nuostoviajame potencialiniame lauke**), tada (2.1.1) lygties sprendiniai yra tokio pavidalo:

$$\Psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z) e^{-iEt/\hbar}, \quad (2.1.2)$$

o erdvinių koordinačių funkciją $\psi(x,y,z)$ nusako ši lygtis:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x,y,z)] \psi = 0; \quad (2.1.3)$$

čia E yra pilnutinė mechaninė dalelės energija. (2.1.2) reiškinyje „e“ yra Eulerio konstanta² ($e \approx 2,7182818$). (2.1.3) lygtis vadinama **nuostoviąja Šrėdingerio lygtimi**. Jeigu dalelės potencinė energija išreikštu pavidalu nepriklauso nuo laiko (pvz., elektrono judėjimas atome arba dalelių laisvasis judėjimas vakuume), „banginė funkcija“ dažniausiai vadinama būtent erdvinių koordinačių funkcija $\psi(x,y,z)$, o ne pilnoji funkcija (2.1.2). Sistemos (arba dalelės) būsenos, kurias aprašo nuostoviosios Šrėdingerio lygties (2.1.3) sprendiniai, vadinamos **nuostoviosiomis būsenomis**, nes kvantinės mechanikos požiūriu tokios būsenos izoliuotoji sistema turėtų nekeisti savo būsenos neribotai ilgai.

2.1.2. Nuostoviosios Šrėdingerio lygties tikrinės funkcijos ir tikrinės vertės

Bendruoju atveju ne visi galimi nuostoviosios Šrėdingerio lygties (2.1.3) sprendiniai gali atlikti dalelės banginės funkcijos vaidmenį. Taip yra todėl, kad banginės funkcijos modulio kvadratas turi tikimybės tankio prasmę. Tai reiškia, kad banginė funkcija turi būti:

- 1) baigtinė (tikimybės tankis negali būti begalinis);
- 2) vienareikšmė (tikimybė negali būti daugiareikšmė);
- 3) tolydi (tikimybės tankis erdvėje negali kisti šuoliais).

¹ Čia ir toliau „dalelės potencinė energija“ vadinsime dalelės koordinačių ir laiko funkciją, kurios gradientas su minuso ženklu nusako dalelę veikiančias jėgas, kurios nepriklauso nuo dalelės greičio (tačiau gali išreikštu pavidalu priklausyti nuo laiko). Tokia apibrėžtis yra šiek tiek bendresnė už įprastąją potencinės energijos apibrėžtį, pagal kurią potencinė energija išreikštu pavidalu nepriklauso nuo laiko (pastaroji sąlyga yra būtina, kad dalelės pilnutinė mechaninė energija nepriklausytų nuo laiko).

² Raide „e“ žymimas ir elementarusis krūvis. Šioje knygoje Eulerio konstanta e rašoma stačiu šriftu, o elementariojo krūvio žymuo – pasvirusiu šriftu (e).

Tolydumo sąlygą turi atitikti ne tik pati banginė funkcija, bet ir jos pirmosios išvestinės koordinačių atžvilgiu (taip pat, kaip ir klasikinių bangų atveju). Vienintelis atvejis, kai banginės funkcijos išvestinė koordinatės atžvilgiu gali turėti trūkį – tai begalinio aukščio potencinės energijos šuolis (pvz., žr. begalinio gylio potencialo duobės analizę 2.3.2 poskyryje).

Vadinasi, iš visų galimų (2.1.3) lygties sprendinių reikia atrinkti tik tuos, kurie atitinka minėtųs tris reikalavimus. Diferencialinių lygčių teorijoje įrodoma, kad bendruoju atveju (2.1.3) lygties sprendiniai, kurie yra baigtiniai, vienareikšmiai ir tolydūs, egzistuoja tik tada, kai pilnutinė energija E yra lygi tam tikroms vertėms: $E = E_n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$). Vartojant diferencialinių lygčių teorijos terminologiją, šios vertės yra (2.1.3) lygties **tikrinės vertės**, o jas atitinkantys sprendiniai $\psi = \psi_n$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) yra (2.1.3) lygties **tikrinės funkcijos**. Vartojant kvantinės mechanikos terminologiją, kiekviena tikrinė funkcija ψ_n – tai dalelės būsenos, kai dalelės pilnutinė energija E yra tiksliai apibrėžta ir lygi atitinkamai tikrinei vertei E_n , banginė funkcija. Dalelės būseną, kai energija yra tiksliai apibrėžta, atitinka tam tikrą dalelės **energijos lygmenį**. Taigi, nuostovioji Šrėdingerio lygtis (2.1.3) nusako visus dalelės energijos lygmenis E_n ir dalelės bangines funkcijas ψ_n , kai ji yra kiekviename iš tų lygmenų. Žemiausiasis energijos lygmuo vadinamas **pagrindiniu lygmeniu**. Energijos diagramose energijos lygmenys vaizduojami horizontaliomis atkarpomis (pvz., žr. 1.17 pav.).

Kvantinė sistema (pvz., atomas arba branduolys), kurios neveikia jokios išorinės jėgos, anksčiau ar vėliau savaime pereina į pagrindinį energijos lygmenį. Tokia sistemos būseną yra stabiliausia ir vadinama **pagrindine būsena**. Kol nėra jokių išorinių poveikių, sistema yra pagrindinės būsenos. Norint perkelti sistemą iš pagrindinio lygmens E_1 į aukštesnį lygmenį E_n , sistemai reikia suteikti energiją, kuri lygi lygmenų skirtumui: $\Delta E = E_n - E_1$. Tokios būsenos sistema nėra stabili. Sakoma, kad sistema **sužadinta**. Dingus išoriniam poveikiui, sistema savaime grįžta į pagrindinę būseną. Atomo atveju tai atsitinka per 10^{-8} s eilės laiką. Kvantinės sistemos perėjimas iš vieno energijos lygmens į kitą vadinamas **kvantiniu šuoliu**. Vykstant kvantiniam šuoliui iš aukštesnio energijos lygmens E_l į žemesnį energijos lygmenį E_n , išspinduliuojamas fotonas, kurio energija lygi tų lygmenų skirtumui:

$$h\nu = E_l - E_n. \quad (2.1.4)$$

Priešingas šuolis gali įvykti tik sugėrus tos pačios energijos fotoną.

2.1.3. Dalelių srauto tankio išraiška bazine funkcija pagal Šrėdingerio lygtį

Jeigu duotojoje erdvės srityje dalelės nėra sukuriamos ir neišnyksta (pvz., dėl jų vartimo kitos rūšies dalelėmis), tada tų dalelių skaičius toje erdvės srityje gali kisti tik dėl jų įtekėjimo arba nuotėkio pro tos sritys paviršių. Šį akivaizdų teiginį išreiškia vadinamoji **tolydumo lygtis**:

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0; \quad (2.1.5)$$

čia $\rho(\mathbf{r}, t)$ yra vidutinė dalelių koncentracija taške, kurio spindulys vektorius $\mathbf{r}$, laiko momentu t , o $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ yra vidutinis **dalelių srauto tankis**. $\mathbf{j}$ yra vektorius, kurio kryptis sutampa su dalelių judėjimo kryptimi, o modulis lygus vidutiniam skaičiui dalelių, kurios pereina pro statmeną jų judėjimui vienetinio ploto paviršių per laiko vienetą. Dalelių vidutinė koncentracija taške $\mathbf{r}$ yra lygi pilnutiniam tos rūšies dalelių skaičiui N , padaugintam iš tikimybės tankio aptikti dalelę tame taške. Tikimybės tankis – tai dalelės banginės funkcijos modulio kvadratas (žr. (1.15.1a)), kuri galima išreikšti šitaip: $|\Psi|^2 \equiv \Psi^* \Psi$ (čia Ψ^* yra funkcija, kuri kompleksiskai jungtinė funkcijai Ψ). Vadinasi,

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = N \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = N \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right). \quad (2.1.6)$$

Pagal nenuostoviąją Šrėdingerio lygtį (2.1.1)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi - \frac{i}{\hbar} U \Psi, \quad (2.1.7a)$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi^* + \frac{i}{\hbar} U \Psi^*; \quad (2.1.7b)$$

Padauginę (2.1.7a) lygtį iš Ψ^* , o (2.1.7b) lygtį – iš Ψ ir sudėję, matome:

$$\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi). \quad (2.1.8)$$

Vadinasi, dalelių koncentracijos laikinė išvestinė (2.1.6) yra lygi vektoriaus $N \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$ divergencijai su minuso ženklu. Antra vertus, pagal tolydumo lygtį (2.1.5) dalelių koncentracijos laikinė

išvestinė turi būti lygi jų srauto tankio divergencijai su minuso ženklu. Vadinasi, minėtojo vektoriaus prasmė – vidutinis dalelių srauto tankis:

$$\mathbf{j} = N \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi). \quad (2.1.9)$$

Kadangi duotosios būsenos laisvoji dalelė gali būti bet kuriame erdvės taške, tai dalelių srauto tankio sąvoka turi prasmę net ir tais atvejais, kai nagrinėjamas vyksmas, kuriame dalyvauja tik viena dalelė (pvz., dalelės sklaida). Tokiu atveju (2.1.9) reiškinys $N = 1$, o dydžio $\mathbf{j}$ prasmė – **tikimybės srauto tankis**.

2.1.4. Daugelio dalelių sistemos Šrėdingerio lygtis ir banginė funkcija

Nenuostovioji Šrėdingerio lygtis (2.1.1) ir nuostovioji Šrėdingerio lygtis (2.1.3) aprašo vienos dalelės būseną. Daugelio dalelių sistemos atveju (2.1.1) lygties kairiojoje pusėje vietoj pirmojo dėmens yra tokio paties pavidalo dėmenų suma visų dalelių atžvilgiu, o vietoj antrojo dėmens yra visų dalelių pilnutinė potencinė energija:

$$-\sum_{n=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_n^2 \Psi + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \Psi \equiv \hat{H} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}; \quad (2.1.10)$$

čia m_n yra n -tosios dalelės masė, $\mathbf{r}_n$ yra n -tosios dalelės spindulys vektorius (t. y. Dekarto koordinačių trejetas), N yra pilnutinis dalelių skaičius sistemoje, ∇_n^2 yra Laplaso operatorius, kuris veikia tik n -tosios dalelės erdvines koordinates, o diferencialinis operatorius $\hat{H}$ vadinamas sistemos **hamiltonianu**. Taigi, daugelio dalelių sistemos hamiltonianas yra

$$\hat{H} = -\sum_{n=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_n^2 + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t). \quad (2.1.11)$$

Atitinkamai banginė funkcija Ψ taip pat yra N spindulių vektorių ir laiko funkcija, kurios modulio kvadratas $|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2$ nusako sistemos pasiskirstymo konfigūracinėje erdvėje tikimybės tankį. T. y. dydis $|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N$ nusako tikimybę, kad laiko momentu t pirmoji dalelė bus tūrio elemente dV_1 , esančiame taško $\mathbf{r}_1$ aplinkoje, antroji dalelė bus tūrio elemente dV_2 , esančiame taško $\mathbf{r}_2$ aplinkoje, ir t. t. Jeigu potencinė energija U išreikštu pavidalu nepriklauso nuo laiko (t. y. jeigu ją galima išreikšti pavidalu $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$), visų vienos energijos būsenų bangines funkcijas galima išreikšti šitaip:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right); \quad (2.1.12)$$

čia E yra sistemos pilnutinė energija. Tada funkcijos $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ yra nuostoviosios Šrėdingerio lygties

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (2.1.13)$$

tikrinės funkcijos.

Jeigu potencinė energija $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ priklauso tik nuo sistemos vidinių jėgų (kurios priklauso tik nuo atstumų tarp sistemos dalelių), tada sistemos masės centro judėjimas nepriklauso nuo sistemos dalelių judėjimo masės centro atžvilgiu. Šis teiginys galioja ir klasikinei mechanikai, ir kvantinei mechanikai. Jis pasireiškia tuo, kad daugelio dalelių sistemos nuostoviosios Šrėdingerio lygties sprendinį galima išreikšti sandauga dviejų nepriklausomų funkcijų, kurių viena priklauso tik nuo sistemos masės centro koordinačių, o kita – tik nuo dalelių koordinačių masės centro sistemoje (tos koordinatės nusako visų dalelių padėtis atžvilgiu masės centro). Įsitikinsime šio teiginio teisingumu paprasčiausiu atveju – kai sistemą sudaro dvi sąveikaujančios dalelės.

Dviejų dalelių sistemos nuostovioji Šrėdingerio lygtis yra

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 \psi + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi = E \psi; \quad (2.1.14)$$

čia

$$\nabla_1 \equiv \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x_1} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y_1} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z_1}, \quad \nabla_2 \equiv \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x_2} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y_2} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z_2}, \quad (2.1.15)$$

kur (x_1, y_1, z_1) ir (x_2, y_2, z_2) yra kiekvienos dalelės Dekarto koordinačių rinkiniai, o $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ ir $\mathbf{e}_z$ yra Dekarto koordinačių sistemos baziniai vektoriai. Atliksime tokį koordinačių pakeitimą: vietoj $\mathbf{r}_1$ ir $\mathbf{r}_2$ naudosime šiuos du spindulius vektorius:

$$\mathbf{R} \equiv \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad (2.1.16)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (2.1.17)$$

Vektorius $\mathbf{R}$ – tai sistemos masės centro spindulys vektorius, o vektorius $\mathbf{r}$ nusako pirmosios dalelės koordinatas antrosios atžvilgiu. Šių dviejų spindulių vektorių Dekarto komponentės žymėsime atitinkamai (X, Y, Z) ir (x, y, z) . Diferencialiniai operatoriai ∇_1 ir ∇_2 naujose koordinatėse skaičiuojami pagal sudėtinės funkcijos diferencijavimo taisykles:

$$\frac{\partial \dots}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial \dots}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial \dots}{\partial x}; \quad (2.1.18)$$

analogiškai sąryšiai galioja ir kitoms dviem Dekarto koordinatėms (norint gauti tuos sąryšius, reikia (2.1.18) reiškinyje žymenį „ x_1 “ pakeisti žymeniu „ y_1 “ arba „ z_1 “, o žymenį „ X “ pakeisti žymeniu „ Y “ arba „ Z “). Iš (2.1.16)–(2.1.18) išplaukia, kad

$$\frac{\partial X}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}, \quad \frac{\partial x}{\partial x_1} = 1; \quad (2.1.19a)$$

tokie patys sąryšiai galioja ir kitoms dviem Dekarto koordinatėms. Operatoriaus ∇_2 , kuris veikia antrosios dalelės koordinatas, komponentės taip pat išreiškiamos (2.1.18) pavidalo sąryšiais (pakanka indeksą „1“ pakeisti indeksu „2“). Tokiu pačiu būdu kaip ir pirmajai dalelei gauname:

$$\frac{\partial X}{\partial x_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}, \quad \frac{\partial x}{\partial x_2} = -1. \quad (2.1.19b)$$

Vadinasi, vektorinius diferencialinius operatorius ∇_1 ir ∇_2 galima išreikšti šitaip:

$$\nabla_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \nabla_{\mathbf{R}} + \nabla_{\mathbf{r}}, \quad (2.1.20a)$$

$$\nabla_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \nabla_{\mathbf{R}} - \nabla_{\mathbf{r}}; \quad (2.1.20b)$$

čia

$$\nabla_{\mathbf{R}} \equiv \mathbf{e}_x \frac{\partial \dots}{\partial X} + \mathbf{e}_y \frac{\partial \dots}{\partial Y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial \dots}{\partial Z}, \quad \nabla_{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{e}_x \frac{\partial \dots}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial \dots}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial \dots}{\partial z}. \quad (2.1.21)$$

Irašę (2.1.20a,b) į (2.1.14), išvedame Šrėdingerio lygtį naujomis koordinatėmis:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \psi + U(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \psi = E \psi; \quad (2.1.22)$$

čia M yra pilnutinė sistemos masė ($M \equiv m_1 + m_2$), o m yra vadinamoji **redukuotoji masė**:

$$m \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (2.1.23)$$

Dabar, tarkime, kad potencinė energija U priklauso tik nuo dalelių spindulių vektorių skirtumo (2.1.17), t. y.

$$U(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \equiv U(r). \quad (2.1.24)$$

Tada Šrėdingerio lygtyje (2.1.22) kintamieji $\mathbf{R}$ ir $\mathbf{r}$ atsiskiria, t. y. Šrėdingerio lygties sprendinį galima išreikšti šitaip:

$$\psi(X, Y, Z, x, y, z) = \psi_{\text{MC}}(X, Y, Z) \varphi(x, y, z). \quad (2.1.25)$$

Funkciją ψ_{MC} nusakanti lygtis yra tokia pati kaip laisvos dalelės, kurios masė lygi $M = m_1 + m_2$, Šrėdingerio lygtis (2.1.3) (toje lygtyje $U \equiv 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \psi_{\text{MC}} = E' \psi_{\text{MC}}, \quad (2.1.26a)$$

o funkciją φ nusako (2.1.3) lygtis, kurioje m reiškia redukuotąją masę¹:

¹ Norint tuo įsitikinti, pakanka įrašyti (2.1.25) išraišką į (2.1.22) lygtį ir abi tos lygties puses padalyti iš ψ . Tada, atsižvelgus į (2.1.24), kairiojoje lygties pusėje turime sumą, kurios vienas dėmuo priklauso tik nuo $\mathbf{R}$, o kitas – tik nuo $\mathbf{r}$. Kadangi dešiniojoje pusėje turime konstantą E , tai, kad ta lygybė virstų tapatybe, abu minėti dēmenys turi būti konstantos. T. y. vienas iš minėtųjų dēmenų (pvz., tas, kuris priklauso nuo $\mathbf{R}$) turi būti lygus tam tikrai konstantai E' , o kitas – konstantai $E - E'$. Šitaip gauname (2.1.26a,b) lygtis. Toks diferencialinių lygčių sprendimo metodas, kai sprendinys išreiškiamas nuo skirtingų kintamųjų priklausančių funkcijų sandauga (pvz., (2.1.25)), o paskui pradinė lygtis pakeičiama keliomis nepriklausomomis lygtimis (pvz., (2.1.26a,b), kurių kiekviena nusako vieną iš dauginamųjų funkcijų, yra vadinamas **kintamųjų atskyrimo metodu** (jis bus dar kartą taikomas 2.3.3 ir 3.2 poskyriuose).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\varphi + U(\mathbf{r})\varphi = (E - E')\varphi; \quad (2.1.26b)$$

čia E' yra vadinamoji „atskyrimo konstanta“. Ji nusako sistemos slenkamojo judėjimo energiją. Dydis $E - E'$ nusako sistemos vidinę energiją (kuri nepriklauso nuo sistemos slenkamojo judėjimo). Jeigu mus domina tik vidinė energija, tada reikia spręsti (2.1.26b) lygtį, kurioje $E' = 0$.

Jeigu dalelių masės m_1 ir m_2 labai skiriasi, tai redukuotoji masė m (2.1.23) mažai skiriasi nuo lengvesniosios dalelės masės. Todėl šiuo atveju dviejų dalelių sistemos analizė beveik nesiskiria nuo lengvesniosios dalelės judėjimo centriniame jėgų lauke, kurio centre yra nejudanti sunkesnioji dalelė, analizės. Pvz., vandenilio atomo analizės rezultatai mažai pasikeis, jeigu mes vietoj dviejų dalelių (protono ir elektrono) nagrinėsime tik vieną dalelę – elektroną, kuris juda protono elektrostatiname lauke (tokia analizė bus atlikta 3.2 poskyryje).

2.2. Laisvosios dalelės banginė funkcija. Potencialo šuolio arba barjero įtaka

Išspręsimė Šrėdingerio lygtį keliais paprastais dalelės judėjimo atvejais. Laikysime, kad potencinė energija U ir banginė funkcija ψ priklauso tik nuo vienos koordinatės x (t. y. judėjimas yra vienmatis). Tada nuostovioji Šrėdingerio lygtis (2.1.3) įgyja tokį pavidalą:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U(x) - E)\psi. \quad (2.2.1)$$

2.2.1. Laisvoji dalelė

Laisvąją dalelę vadinama dalelė, kurios neveikia jokios jėgos. Kadangi jėga susijusi su potencine energija U sąryšiu

$$F = -\frac{dU}{dx}, \quad (2.2.2)$$

tai jėgų nebuvimas reiškia, kad potencinė energija nepriklauso nuo koordinatės. Kadangi energijos atskaitos vertę visada galima pasirinkti laisvai, tai šiuo atveju galima teigti, kad $U = 0$. Tada Šrėdingerio lygtis (2.2.1) yra šitokia:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0. \quad (2.2.3)$$

Pažymėjus

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (2.2.4)$$

(2.2.3) lygtį galima užrašyti trumpesniu pavidalu:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0. \quad (2.2.5)$$

Šios diferencialinės lygties bendrasis sprendinys yra tokio pavidalo:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (2.2.6a)$$

Pasinaudojus tuo, kad $e^{ikx} = \cos(kx) + i\sin(kx)$, šį sprendinį galima užrašyti ir šitaip:

$$\psi(x) = A'\cos kx + B'\sin kx; \quad (2.2.6b)$$

čia $A' = A + B$, o $B' = i(A - B)$. Pilnoji (priklausanti nuo laiko) banginė funkcija gaunama pasinaudojus (2.1.2) lygybe:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}; \quad (2.2.7)$$

čia $\omega = E/\hbar$. Pirmasis dėmuo yra teigiamąja x ašies kryptimi sklindanti banga, o antrasis dėmuo yra neigiamąja x ašies kryptimi sklindanti banga. Šių bangų intensyvumai (tikimybės srauto tankiai) yra proporcingi atitinkamų amplitudžių modulių kvadratams $|A|^2$ ir $|B|^2$. Jeigu dalelių šaltinis yra taške $x = -\infty$, tada nėra fizikinių priežasčių, dėl kurių galėtų atsirasti x mažėjimo kryptimi sklindanti banga, todėl $B = 0$. Kadangi nėra kraštinių sąlygų, tai nėra ir apribojimų dalelės energijai E : visos neneigiamos E vertės yra leistinos. Normavimo sąlyga (1.15.3) šiuo atveju negali būti panaudota, nes funkcijų $\sin^2 kx$ ir $\cos^2 kx$ integralai nuo $x = -\infty$ iki $x = \infty$ yra neapibrėžti.

Vienos dalelės srauto tankis (2.1.9) vienmačiu atveju yra lygus

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right). \quad (2.2.8)$$

Irašę banginės funkcijos išraišką (2.2.7) su $B = 0$ į (2.2.8), gauname:

$$j = \frac{\hbar k}{m} |A|^2. \quad (2.2.9)$$

2.2.2. Potencialo šuolis, $E > U_0$

Tarkime, kad dalelės potencinės energijos U priklausomybė nuo koordinatės x yra šuolio pavidalo:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \quad (\text{I sritis}); \\ U_0, & x \geq 0 \quad (\text{II sritis}); \end{cases} \quad (2.2.10)$$

čia $U_0 > 0$. I srityje Šrėdingerio lygtis yra (2.2.3), todėl šioje srityje dalelės banginę funkciją nusako (2.2.6a) reiškiny:

$$\psi_1(x) = A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x); \quad (2.2.11)$$

čia $k_1 = k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Sprendinio pavidalas II srityje priklauso nuo to, ar $E > U_0$, ar $E < U_0$. Tarkime, kad $E > U_0$. Tada Šrėdingerio lygtį (2.2.1) II sričiai galima užrašyti šitaip:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0; \quad (2.2.12)$$

čia

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}. \quad (2.2.13)$$

(2.2.12) lygties bendrasis sprendinys yra

$$\psi_2(x) = C \exp(ik_2x) + D \exp(-ik_2x). \quad (2.2.14)$$

Matome, kad šiuo atveju banginė funkcija II srityje yra osciliuojančio pavidalo. Nežinomieji koeficientai A , B , C ir D bei atitinkamos energijos vertės E gaunami remiantis banginės funkcijos bei jos pirmosios išvestinės tolydumo sąlyga (žr. 2.1.2 poskyrį). Vaizdžiai kalbant, funkcijas (2.2.11) ir (2.2.14) reikia „susieti“ taške $x = 0$ taip, kad viena funkcija glodžiai pereitų į kitą, t. y. kad tame taške nebūtų trūkio arba lūžio. Trūkio nebuvimo sąlyga yra

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad (2.2.15a)$$

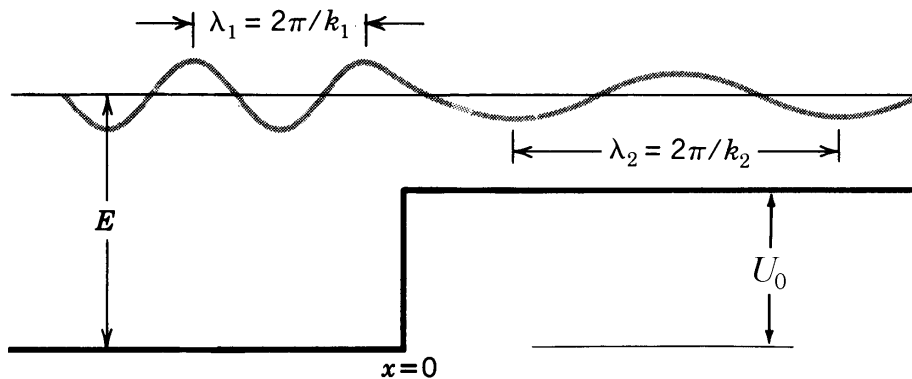
o sąlyga, kuri reikalinga, kad tame taške nebūtų lūžio, yra

$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0}. \quad (2.2.15b)$$

Vartojant diferencialinių lygčių teorijos terminologiją, (2.2.15a) ir (2.2.15b) sąlygos yra Šrėdingerio lygties (2.2.1) **kraštinės sąlygos**. Irašę funkcijų $\psi_1(x)$ ir $\psi_2(x)$ išraiškas į (2.2.15a,b), išvedame du sąryšius tarp keturių nežinomųjų koeficientų A , B , C ir D :

$$A + B = C + D; \quad (2.2.16a)$$

$$k_1(A - B) = k_2(C - D). \quad (2.2.16b)$$



2.1 pav. Dalelės banginė funkcija, kai egzistuoja potencialo šuolis, kurio aukštis U_0 yra mažesnis už dalelės energiją E (šis paveikslas iš [18])

Tarkime, kad dalelių šaltinis yra taške $x = -\infty$. Tada funkcijos ψ_1 išraiškos (2.2.11) dėmuo $A \exp(ik_1x)$ atitinka **krintančiąją bangą**, dėmuo $B \exp(-ik_1x)$ atitinka **atsispindėjusiąją bangą**, o funkcijos ψ_2 išraiškos (2.2.14) dėmuo $C \exp(ik_2x)$ atitinka **perėjusią bangą**. Dėmuo $D \exp(-ik_2x)$ neturi fizikinės prasmės, nes II srityje negali atsirasti dalelių, kurios judėtų neigiamąja x ašies kryptimi. Todėl koeficientas D turi būti lygus nuliui. Išsprendę lygčių sistemą (2.2.16a,b) su $D = 0$, gauname:

$$B = A \frac{1 - k_2/k_1}{1 + k_2/k_1}, \quad (2.2.17a)$$

$$C = A \frac{2}{1 + k_2/k_1}. \quad (2.2.17b)$$

Atspindžio koeficientas R apibrėžiamas kaip atsispindėjusiojo ir krintančiojo dalelių srauto tankių santykis:

$$R = \frac{j_{\text{ats}}}{j_{\text{krit}}}. \quad (2.2.18)$$

Pasinaudoję laisvosios dalelės srauto tankio išraiška (2.2.9), matome:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{1 - k_2/k_1}{1 + k_2/k_1} \right)^2. \quad (2.2.19)$$

Skaidris apibrėžiamas kaip perėjusio ir krintančiojo dalelių srauto tankių santykis:

$$T = \frac{j_{\text{per}}}{j_{\text{krit}}}. \quad (2.2.20)$$

Šiuo atveju skaidris lygus

$$T = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{4k_2/k_1}{(1 + k_2/k_1)^2}. \quad (2.2.21)$$

Visada galioja sąryšis $R + T = 1$. Banginė funkcija pavaizduota 2.1 pav.

Šiame poskyryje išnagrinėtas atvejis – tai paprasčiausias dalelių **sklaidos** pavyzdys.

2.2.3. Potencialo šuolis, $E < U_0$

Šiuo atveju potencinės energijos priklausomybę nuo koordinatės taip pat nusako (2.2.10) reiškiny, o sprendinio pavidalas I srityje yra toks pat kaip ir anksčiau išnagrinėtu atveju, t. y. funkciją $\psi_1(x)$ nusako (2.2.11) formulė. II srityje Šrėdingerio lygtis (2.2.1) yra šitokia:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 = 0; \quad (2.2.22)$$

čia

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}. \quad (2.2.23)$$

Šios lygties bendrasis sprendinys yra

$$\psi_2(x) = C \exp(k_2x) + D \exp(-k_2x). \quad (2.2.24)$$

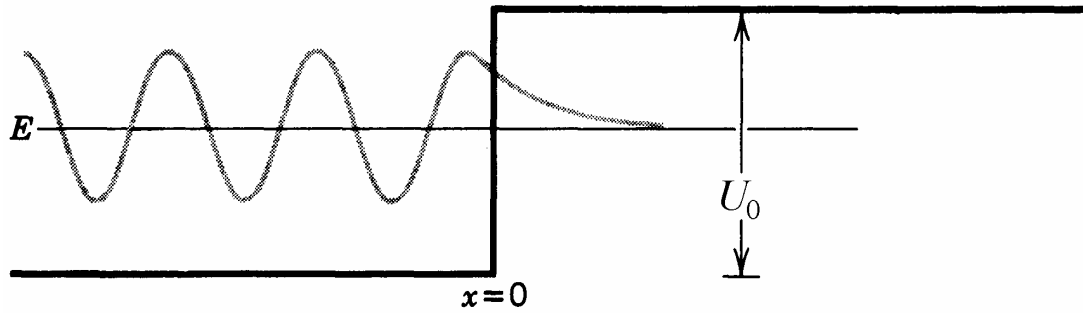
Matome, kad šiuo atveju banginė funkcija II srityje yra eksponentinio pavidalo. Anksčiau išnagrinėtu atveju (kai $E > U_0$) gavome osciliuojančią funkciją (2.2.14). Šie rezultatai yra bendro pobūdžio: erdvės srityse, kuriose dalelės energija E yra mažesnė už potencinę energiją $U(x)$, banginės funkcijos priklausomybė nuo koordinatės yra eksponentinė, o erdvės srityse, kuriose $E > U$ – osciliuojanti (nors nebūtinai periodinė).

Kadangi banginė funkcija turi būti baigtinė, kai $x \rightarrow \infty$, tai (2.2.24) reiškinio koeficientas C turi būti lygus nuliui:

$$\psi_2(x) = D \exp(-k_2x). \quad (2.2.25)$$

Šis rezultatas iliustruoja svarbų klasikinės ir kvantinės fizikos skirtumą: dalelė gali įsiskverbti į erdvės sritį, kurioje jos pilnutinė energija E yra mažesnė už potencinę energiją. Klasikinės mechanikos požiūriu tai yra neįmanoma, nes tai reikštų, kad dalelės kinetinė energija yra neigiama (pilnutinė energija – tai potencinės ir kinetinės energijų suma). Todėl visos klasikinės dalelės atsispindi nuo skiriamojo paviršiaus (kuriame yra potencinės energijos šuolis), o kvantinė dalelė gali pro tą paviršių pereiti.

Banginė funkcija pavaizduota 2.2 pav.



2.2 pav. Dalelės banginė funkcija, kai egzistuoja potencialo šuolis, kurio aukštis U_0 yra didesnis už dalelės energiją E (šis paveikslas iš [18])

2.2.4. Potencialo barjeras, $E > U_0$

Jeigu potencinės energijos priklausomybė nuo koordinatės turi baigtinio aukščio maksimumą, tada tokia priklausomybė vadinama **potencialo barjeru**. Pvz., stačiakampis potencialo barjeras:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 & \text{(I sritis);} \\ U_0, & 0 \leq x \leq w & \text{(II sritis);} \\ 0, & x > w & \text{(III sritis);} \end{cases} \quad (2.2.26)$$

čia $U_0 > 0$ (žr. 2.3 pav.).

Tarkime, kad dalelės energija yra didesnė už barjero aukštį U_0 . Siekdami sutrumpinti lygčių užrašymą, vartosime tokius žymenis:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}. \quad (2.2.27)$$

Dalelės banginę funkciją kiekvienoje iš šių sričių žymėsime ψ_1 , ψ_2 ir ψ_3 . Tada Šrėdingerio lygtis (2.2.1) yra tokio pavidalo:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 &= 0 & \text{(I sritis),} \\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 &= 0 & \text{(II sritis),} \\ \frac{d^2\psi_3}{dx^2} + k_1^2\psi_3 &= 0 & \text{(III sritis).} \end{aligned} \quad (2.2.28)$$

Šių lygčių bendrieji sprendiniai yra

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x) & \text{(I sritis),} \\ \psi_2 &= C \exp(ik_2x) + D \exp(-ik_2x) & \text{(II sritis),} \\ \psi_3 &= F \exp(ik_1x) + G \exp(-ik_1x) & \text{(III sritis).} \end{aligned} \quad (2.2.29)$$

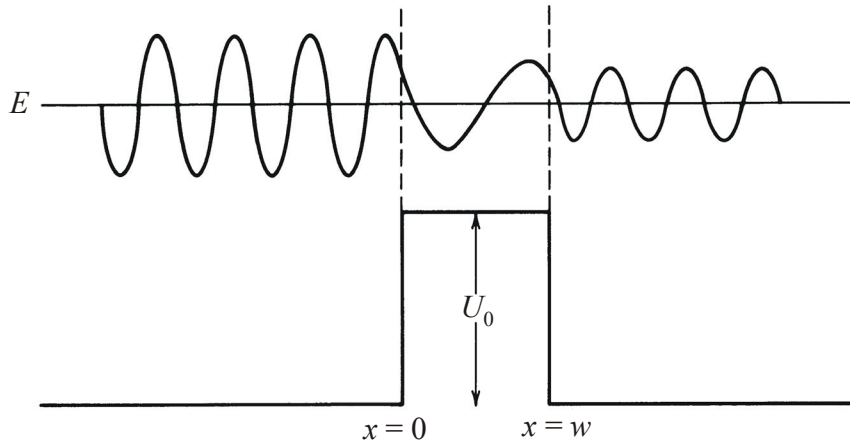
Tarkime, kad dalelių šaltinis yra taške $x = -\infty$. Tada nėra fizikinių priežasčių, dėl kurių III srityje galėtų atsirasti dalelių, kurios juda neigiamąja x kryptimi. Todėl $G = 0$. Koeficientus B , C , D ir F galime išreikšti koeficientu A pasinaudoję keturiomis tolydumo sąlygomis taškuose $x = 0$ ir $x = w$:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0}, \quad (2.2.30a)$$

$$\psi_2(w) = \psi_3(w), \quad \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=w} = \left. \frac{d\psi_3}{dx} \right|_{x=w}. \quad (2.2.30b)$$

Irašę funkcijų $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ ir $\psi_3(x)$ išraiškas (2.2.29) į (2.2.30a,b) sąlygas, išvedame keturių lygčių sistemą:

$$\begin{cases} A + B = C + D, \\ A - B = n(C - D), \\ C \exp(ik_2w) + D \exp(-ik_2w) = F \exp(ik_1w), \\ n[C \exp(ik_2w) - D \exp(-ik_2w)] = F \exp(ik_1w); \end{cases} \quad (2.2.31)$$



2.3 pav. Dalelės banginė funkcija, kai egzistuoja potencialo barjeras, kurio aukštis U_0 yra mažesnis už dalelės energiją E (iš [18])

čia

$$n = \frac{k_2}{k_1} = \sqrt{\frac{E - U_0}{E}}. \quad (2.2.32)$$

Pirmąją lygčių sistemos (2.2.31) lygtį panariui sudėjus su antrąja, o trečiąją panariui atėmus iš ketvirtosios, gaunamos dvi lygtys atžvilgiu dviejų koeficientų C ir D :

$$\begin{cases} C(n+1) - D(n-1) = 2A, \\ C \exp(ik_2 w)(n-1) - D \exp(-ik_2 w)(n+1) = 0. \end{cases} \quad (2.2.33)$$

Šios lygčių sistemos sprendinys:

$$C = A \frac{2(n+1) \exp(-ik_2 w)}{(n+1)^2 \exp(-ik_2 w) - (n-1)^2 \exp(ik_2 w)}, \quad (2.2.34a)$$

$$D = A \frac{2(n-1) \exp(ik_2 w)}{(n+1)^2 \exp(-ik_2 w) - (n-1)^2 \exp(ik_2 w)}. \quad (2.2.34b)$$

Įrašę šiuos reiškinius į lygčių sistemos (2.2.31) trečiąją lygtį, turime:

$$F = A \frac{4n}{(n+1)^2 \exp(-ik_2 w) - (n-1)^2 \exp(ik_2 w)} \exp(-ik_1 w). \quad (2.2.35)$$

Potencialo barjero skaidris $T = |F|^2 / |A|^2$ yra lygus

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{U_0^2}{E(E - U_0)} \sin^2 k_2 w}. \quad (2.2.36)$$

Banginė funkcija pavaizduota 2.3 pav.

2.2.5. Potencialo barjeras, $E < U_0$. Tunelinis reiškiny

Kai dalelės energija E yra mažesnė už potencialo barjero aukštį U_0 , Šrėdingerio lygties ir jos bendrųjų sprendinių pavidalas I ir III srityse lieka toks pats kaip anksčiau išnagrinėtu atveju (žr. (2.2.28) ir (2.2.29)), tačiau Šrėdingerio lygtis II srityje pasikeičia:

$$\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} - k_2^2 \psi_2 = 0 \quad (\text{II sritis}); \quad (2.2.37)$$

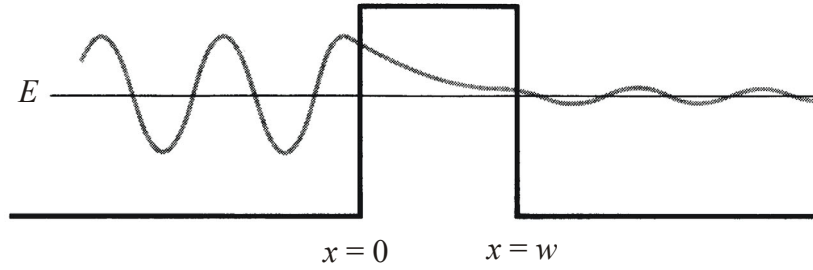
čia

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}. \quad (2.2.38)$$

(2.2.37) lygties bendrasis sprendinys yra

$$\psi_2 = C \exp(k_2 x) + D \exp(-k_2 x) \quad (\text{II sritis}). \quad (2.2.39)$$

Įrašę bendrųjų sprendinių $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ ir $\psi_3(x)$ išraiškas (2.2.29) ir (2.2.39) į tolydumo sąlygas (2.2.30a,b), gauname lygčių sistemą



2.4 pav. Dalelės banginė funkcija, kai egzistuoja potencialo barjeras, kurio aukštis yra didesnis už dalelės energiją E (iš [18])

$$\begin{cases} A + B = C + D, \\ i(A - B) = n(C - D), \\ C \exp(k_2 w) + D \exp(-k_2 w) = F \exp(ik_1 w), \\ n[C \exp(k_2 w) - D \exp(-k_2 w)] = iF \exp(ik_1 w); \end{cases} \quad (2.2.40)$$

čia

$$n = \frac{k_2}{k_1} = \sqrt{\frac{U_0 - E}{E}}. \quad (2.2.41)$$

Pirmąją lygčių sistemos (2.2.40) lygtį padauginus iš i ir panariui sudėjus su antrąja, o trečiąją padauginus iš i ir panariui atėmus iš ketvirtosios, gaunamos dvi lygtys atžvilgiu koeficientų C ir D :

$$\begin{cases} C(n + i) - D(n - i) = 2iA, \\ C \exp(k_2 w)(n - i) - D \exp(-k_2 w)(n + i) = 0. \end{cases} \quad (2.2.42)$$

Šios lygčių sistemos sprendinys:

$$C = A \frac{2i(n + i) \exp(-k_2 w)}{(n + i)^2 \exp(-k_2 w) - (n - i)^2 \exp(k_2 w)}, \quad (2.2.43a)$$

$$D = A \frac{2i(n - i) \exp(k_2 w)}{(n + i)^2 \exp(-k_2 w) - (n - i)^2 \exp(k_2 w)}. \quad (2.2.43b)$$

Irašę šiuos reiškinius į lygčių sistemos (2.2.40) trečiąją lygtį, išvedame:

$$F = A \frac{4in}{(n + i)^2 \exp(-k_2 w) - (n - i)^2 \exp(k_2 w)} \exp(-ik_1 w). \quad (2.2.44)$$

Potencialo barjero skaidris $T = |F|^2 / |A|^2$ yra lygus

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{U_0^2}{E(U_0 - E)} \operatorname{sh}^2 k_2 w}; \quad (2.2.45)$$

čia $\operatorname{sh} k_2 w$ yra hiperbolinis sinusas: $\operatorname{sh} k_2 w \equiv \frac{\exp(k_2 w) - \exp(-k_2 w)}{2}$.

Klasikinės fizikos požiūriu, kai $E < U_0$, potencialo barjero skaidris T turėtų būti lygus nuliui, nes klasikinė mechanika draudžia dalelei būti erdvės srityse, kuriose jos pilnutinė energija mažesnė už potencialinę energiją. Kvantinės mechanikos požiūriu dalelė gali prasiskverbti pro potencialo barjerą (yra nenulinė tikimybė aptikti dalelę už barjero). Šis reiškinys vadinamas **tuneliniu reiškiniu** arba **tuneline pereiga**. Banginė funkcija pavaizduota 2.4 pav.

Atskirai aptarsime aukšto arba plataus potencialo barjero atvejį, kai

$$k_2 w \gg 1. \quad (2.2.46)$$

Tada $\exp(-k_2 w) \ll \exp(k_2 w)$, todėl $\operatorname{sh}^2 k_2 w \approx \exp(2k_2 w) / 4 \gg 1$. Šiuo atveju trupmenos (2.2.45) vardiklio pirmojo dėmens (vieneto) galima nepaisyti, nes jis yra daug mažesnis už antrąjį. Todėl aukšto arba plataus stačiakampio potencialo barjero skaidris yra lygus

$$T \approx \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp(-2k_2 w) = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot w\right]. \quad (2.2.47)$$

Daugiklis prieš eksponentinę funkciją šiame reiškinyje dažniausiai yra vienetų eilės. Todėl galima tvirtinti, kad potencialo barjero skaidrį lemia eksponentinė funkcija:

$$T \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \cdot w \right]. \quad (2.2.48)$$

Iki šiol nagrinėjome tik stačiakampį potencialo barjerą. Bet kokios formos potencialo barjero, kurio plotis daug kartų viršija dalelės de Broilio bangos ilgį, skaidrio eilę galima įvertinti suskaidžius tą barjerą į didelį skaičių N plonų stačiakampių barjerų. Tokio barjero skaidris lygus visų jį sudarančių stačiakampių barjerų skaidrių sandaugai. Perėję prie ribos $N \rightarrow \infty$, matome:

$$T \approx \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N T_n \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right]; \quad (2.2.49)$$

čia x_1 ir x_2 yra lygties $U(x) = E$ sprendiniai (potencialo barjero kraštų koordinatės dalelės energijos E lygyje).

2.3. Dalelė potencialo duobėje

2.3.1. Potencialo duobės Šrėdingerio lygties sprendinio bendrosios savybės

Kaip ir potencialo barjero atveju, nagrinėsime vienmatį dalelės judėjimo modelį. Taigi, sprendžiamoji lygtis vėl yra

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E) \psi. \quad (2.3.1)$$

Jeigu potencialinės energijos U priklausomybė nuo koordinatės x turi minimumą, tada tokia priklausomybė vadinama **potencialo duobe**. Pvz., atomo fizikoje dažnai pasitaiko potencialinės energijos priklausomybė nuo koordinatės, kurios bendrasis pavidalas pavaizduotas 2.5a pav. Šios funkcijos pagrindinės savybės yra tokios:

- 1) potencialinė energija turi neigiamą minimumą tam tikrame taške $x_{\min} > 0$;
- 2) kai $x \rightarrow \infty$, potencialinė energija didėja artėdama prie nulio;
- 3) kai $x \rightarrow 0$, potencialinė energija artėja į $+\infty$.

Pvz., tokio pavidalo potencialinė energija nusako sąveiką tarp molekulinės atomo. Energijos minimumo taškas $x_{\min}$ atitinka dviejų atomų sistemos pusiausvyros būseną. Nutolus nuo šio taško bet kuria kryptimi, atsiranda jėga

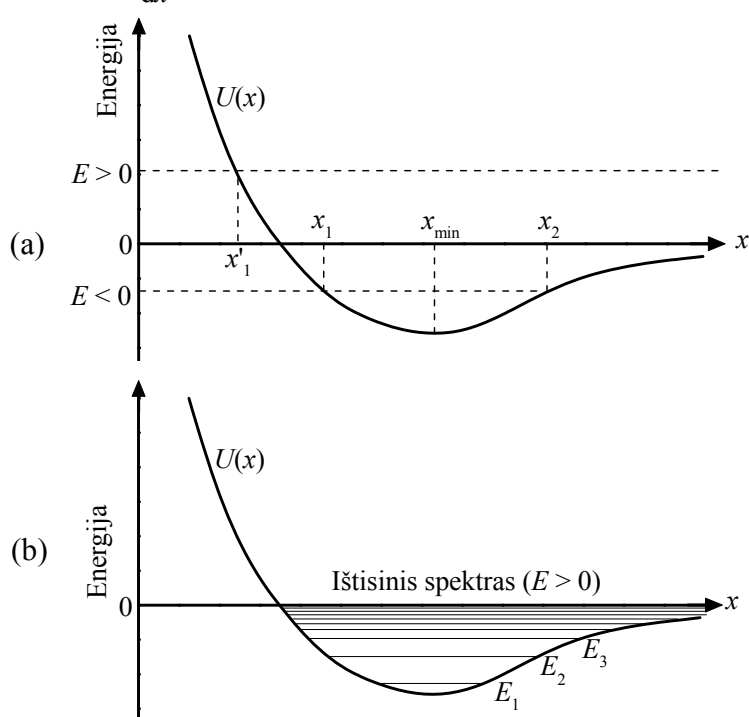
$$F = -\frac{dU}{dx}, \quad (2.3.2)$$

kuri stengiasi grąžinti pusiausvyrą tarp traukos ir stūmos jėgų. Todėl atomai virpa apie pusiausvyros padėtis. Šių virpesių energijos vertės – tai Šrėdingerio lygties (2.3.1) tikrinės vertės E . Prieš sprendžiant potencialo duobės Šrėdingerio lygtį, naudinga prisiminti klasikinės mechanikos išvadas tokiai sistemai.

Klasikinės mechanikos požiūriu dalelės pilnutinė energija E yra lygi dalelės kinetinės energijos W ir potencialinės energijos U sumai:

$$E = W + U. \quad (2.3.3)$$

Kadangi kinetinė energija W negali būti neigiama, tai dalelės pilnutinė energija E negali būti mažesnė už potencialinę energiją U . Vadinasi, klasikinės mechanikos požiūriu potencialo duobėje esanti dalelė, kurios pilnutinė energija E yra neigiama, negali išeiti iš intervalo $[x_1, x_2]$ (žr. 2.5a pav.), o jeigu $E > 0$, tada dalelė gali būti bet kuriame taške, kurio koordinatė atitinka sąlygą $x > x'_1$ (žr. 2.5a pav.). To-



2.5 pav. (a) Potencialo duobės pavyzdys – dviejų atomų sąveikos energija; (b) potencialo duobėje esančios dalelės energijos lygmenys

dėl, jeigu $E < 0$, sakoma, kad dalelė yra **surištos būsenos**, o jeigu $E > 0$, dalelė yra **laisvos būsenos**. Klasikinė mechanika teigia, kad dalelės kinetinė energija gali būti lygi bet kokiai teigiamai vertei. Taigi, pagal klasikinę teoriją dalelės pilnutinė energija gali būti lygi bet kokiai vertei, kuri didesnė už potencinės energijos mažiausią vertę $U(x_{\min})$.

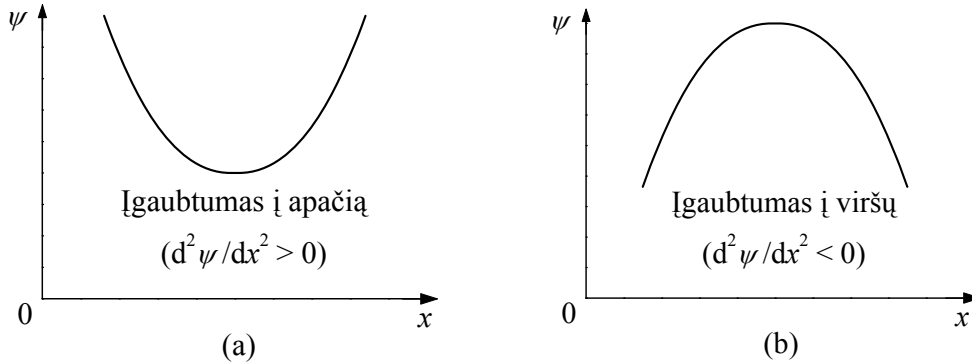
Dalelės energijos lygmenys E_n ir atitinkamos banginės funkcijos ψ_n priklauso nuo potencinės energijos $U(x)$ pavidalo. Tačiau kai kurias bendrąsias nuostoviosios Šrėdingerio lygties (2.3.1) sprendinių savybes galima nustatyti nekonkretizuojant potencinės energijos $U(x)$ pavidalo. (2.3.1) lygties analizė rodo, kad dalelės energijos spektro ir banginės funkcijos pavidalas priklauso nuo to, ar kalbama apie laisvąją dalelę ($E > 0$), ar apie surištąją dalelę ($E < 0$). [Šiame poskyryje „dalelės energijos spektru“ vadinysime visumą galimų tos dalelės energijų¹.] Tarkime, kad $E < 0$ (apatinė horizontalioji brūkšninė linija 2.5a pav.). Tada banginės funkcijos apibrėžimo intervalą ($x > 0$) galima suskaidyti į tris sritis:

I. $0 < x < x_1$ (šiam intervale $E < U(x)$).

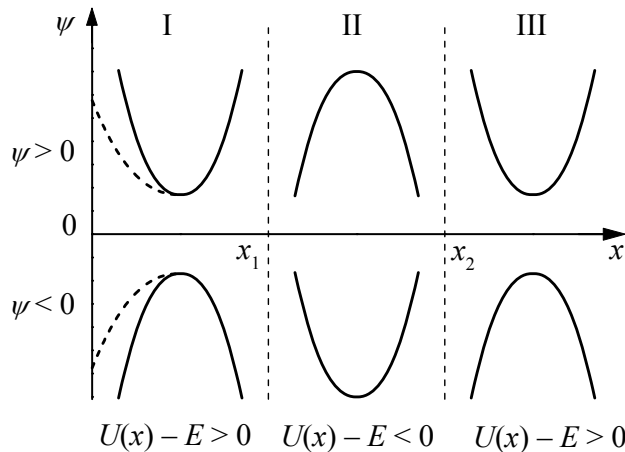
II. $x_1 \leq x \leq x_2$ (šiam intervale $E \geq U(x)$).

III. $x > x_2$ (šiam intervale $E < U(x)$).

Iš (2.3.1) lygties išplaukia, kad banginės funkcijos $\psi(x)$ ir dydžio $U(x) - E$ ženklai lemia banginės funkcijos antrosios išvestinės ženklą. Funkcijos antrosios išvestinės ženklas nusako funkcijos grafiko įgaubtumą: jeigu $d^2\psi/dx^2 > 0$, tada kreivė įgaubta į apačią (žr. 2.6a pav.), o jeigu $d^2\psi/dx^2 < 0$, tada kreivė įgaubta į viršų (žr. 2.6b pav.). Nelygybė $d^2\psi/dx^2 > 0$ galioja, kai $\psi(x)$ ir $U(x) - E$ yra vienodo ženklo, o nelygybė $d^2\psi/dx^2 < 0$ galioja, kai $\psi(x)$ ir $U(x) - E$ yra priešingų ženklų. Vadinasi, priklausomai nuo funkcijos $\psi(x)$ ženklo, jos įgaubumas kiekvienoje iš anksčiau apibrėžtų sričių yra toks kaip 2.7 pav.



2.6 pav. Vienmatės banginės funkcijos $\psi(x)$ įgaubtumas, kai jos antroji išvestinė yra teigiama (a) ir neigiama (b)



2.7 pav. Šrėdingerio lygties vienmatei potencialo duobei sprendinio $\psi(x)$ įgaubtumas trijose potencialo duobės srityse, kai $E < 0$. Kai $x \rightarrow 0$, $|\psi| \rightarrow \infty$ arba $\psi \rightarrow 0$, t. y. brūkšninės kreivės negali aprašyti ψ kitimo I srityje

¹ Jeigu kalbama apie dalelę, kurios energija nėra tiksliai apibrėžta, ir siekiama nusakyti ne tik galimųjų dalelės energijos verčių rinkinį, bet ir skirtingų energijos verčių tikimybes, tada vartojama šiek tiek bendresnė „dalelės energijos spektro“ apibrėžtis: tai yra energijos funkcija, kuri yra proporcinga dalelės energijos tikimybės tankiui (plg. su spinduliuotės spektro apibrėžtimi 1.8 poskyryje).

Nors 2.7 pav. pavaizduotų kreivių įgaubtumas I ir III srityse yra teisingas, tačiau kitu požiūriu tokia šių kreivių eiga yra nepriimtina: judant į kairę nuo taško x_1 arba į dešinę nuo taško x_2 , tam tikrame taške jos pradeda tolti nuo x ašies. Tai reiškia, kad funkcijos $\psi(x)$ modulis $|\psi(x)|$ neribotai didėja, kai $x \rightarrow \infty$. Kai $x \rightarrow 0$, 2.7 pav. ištisinėmis linijomis pavaizduotos funkcijos taip pat artėja į $\pm\infty$, nes pagal prielaidą $U(x) \rightarrow \infty$ (todėl, kai $\psi \neq 0$, iš (2.3.1) išplaukia, kad $|d^2\psi/d^2x|$ taip pat turi artėti į ∞ , o tai galima tik tada, kai $\psi \rightarrow \infty$). T. y. šios kreivės negali kirsti ψ ašies baigtiniu atstumu nuo taško $\psi = 0$ (tokia eiga, kurią vaizduoja brūkšninės kreivės, yra negalima). Taigi, I ir III srityse 2.7 pav. pavaizduotos funkcijos neatitinka banginės funkcijos baigtinumo reikalavimo. I ir III srityse funkcijos $\psi(x)$ grafiko eiga, kuri atitinka baigtinumo reikalavimą ir kartu yra teisingai išgaubta, yra tokia kaip 2.8 pav. Matome, kad ψ turi artėti į nulį, kai $x \rightarrow 0$ ir kai $x \rightarrow \infty$.

Dalelės būsenos, kai jos energija yra mažesnė už potencinės energijos minimumą $U(x_{\min})$, yra uždraustos: kai dalelė yra tų būsenų, reiškinio $U(x) - E$ ženklas yra vienodas visame apibrėžimo intervale $x > 0$, t. y. kreivė $\psi(x)$ yra įgaubta į vieną pusę. Taigi, tada ψ būtinai artėja į $\pm\infty$, kai $x \rightarrow 0$ arba kai $x \rightarrow \infty$.

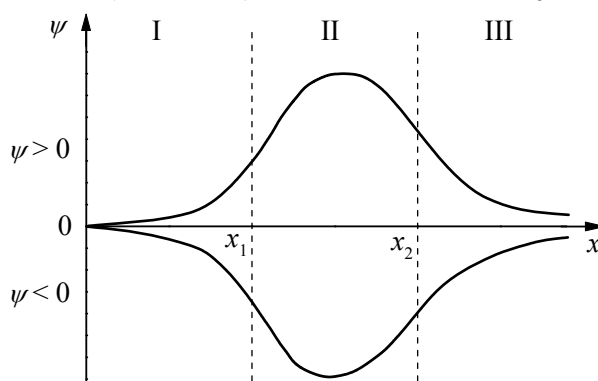
Kadangi (2.3.1) lygtis yra antrosios eilės paprastoji diferencialinė lygtis, jos sprendinį vienareikšmiškai nusako dvi pradinės sąlygos: funkcijos $\psi(x)$ vertė ir jos pirmoji išvestinė $d\psi/dx$ bet kuriame taške $x_0 > 0$. Išvestinės prasmė – tai liestinės krypties koeficientas („statumas“) taške x_0 . Uždavę funkcijos vertę $\psi(x_0)$ ir bandydami įvairius liestinės statumus $d\psi/dx|_{x=x_0}$, anksčiau ar vėliau gausime teisingą funkcijos $\psi(x)$ pavidalą kurioje nors vienoje iš dviejų sričių I ir III. Pvz., 2.9 pav. 1 kreivės statumas taške x_0 yra per mažas, todėl, kai $x \rightarrow 0$, ψ artėja į $+\infty$. 2 kreivės statumas taške x_0 yra per didelis, todėl I srityje 2 kreivė kerta x ašį ir artėja į $-\infty$, kai $x \rightarrow 0$. Visada galima surasti tokį tarpinį statumą taške x_0 , kad ψ artėtų į nulį, kai $x \rightarrow 0$, t. y. būtų tinkamo pavidalo I srityje. Tačiau, uždavę $\psi(x_0)$ ir $d\psi/dx|_{x=x_0}$, mes kartu vienareikšmiškai apibrėžiame visą kreivę $\psi(x)$, taigi ir jos eigą III srityje. Jeigu kreivės eiga III srityje yra netinkama (t. y. jeigu $\psi \rightarrow \pm\infty$, kai $x \rightarrow \infty$), tada mes vėl galime bandyti pakoreguoti šią eigą keisdami kreivės statumą taške x_0 , tačiau tokiu atveju pasikeis kreivės eiga I srityje, ir ši eiga vėl taps netinkama. Vadinas, esant tokio pavidalo potencinei energijai kaip 2.5a pav. ir laisvai pasirinkus dalelės energiją $E < 0$, Šrėdingerio lygtis neturi sprendinio, kuris atitiktų banginei funkcijai keliamus reikalavimus. Tačiau gali egzistuoti tam tikros E vertės, kai anksčiau aprašytu būdu rasta funkcija $\psi(x)$ yra tinkamo pavidalo esant visoms x vertėms (kaip 2.8 pav.). Taigi, jeigu $E < 0$, tada (2.3.1) lygtis gali turėti sprendinius tik esant diskrečioms pilnutinės energijos E vertėms.

Analogišką analizę galima atlikti ir tuo atveju, kai $E > 0$ (viršutinė horizontalioji brūkšninė linija 2.5a pav.). Tada egzistuoja tik dvi sritys:

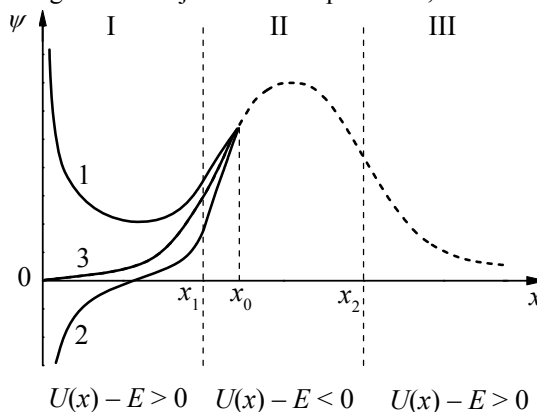
I. $0 < x \leq x'_1$ (šią intervalą $E \leq U(x)$).

II. $x > x'_1$ (šią intervalą $E > U(x)$).

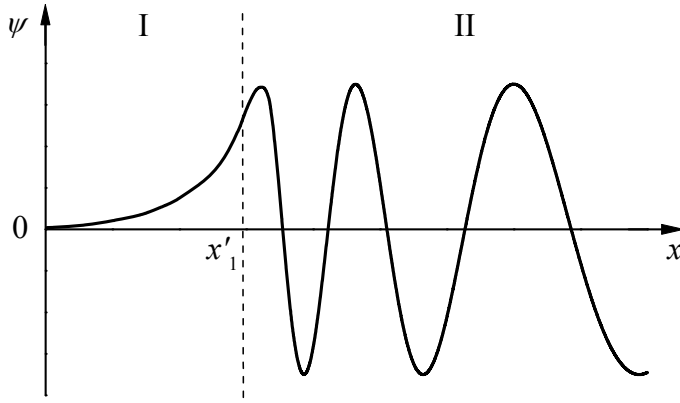
Kaip anksčiau minėta, esant bet kokiai dalelės energijai E , galima rasti funkciją ψ , kuri artėja į nulį, kai $x \rightarrow 0$, ir atitinka Šrėdingerio lygtį I srityje. II srityje kreivė $\psi(x)$ yra įgaubta aukštyn, kai $\psi(x) > 0$, ir žemyn, kai $\psi(x) < 0$ (žr. 2.7 pav.). Tai reiškia, kad šioje srityje kreivės eiga yra osciliuojanti: kreivė $\psi(x)$ niekada nenutolsta nuo x ašies, o periodiškai ją kerta (žr. 2.10 pav.). Tokia kreivės eiga yra leistina, nes ji nepažeidžia nė vieno iš trijų 2.1.2 poskyryje minėtų banginės funkcijos reikalavimų. Toks banginės funkcijos pavidalas primena de Broilio bangas, kurios minėtos 1.13 poskyryje. Tai ir suprantama, nes kai



2.8 pav. Vienmatėje potencialo duobėje esančios dalelės banginės funkcijos bendrasis pavidalas, kai $E < 0$



2.9 pav. Vienmatės potencialo duobės Šrėdingerio lygties sprendinio pavidalo I srityje priklausomybė nuo funkcijos statumo taške x_0

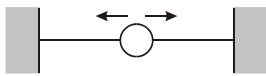
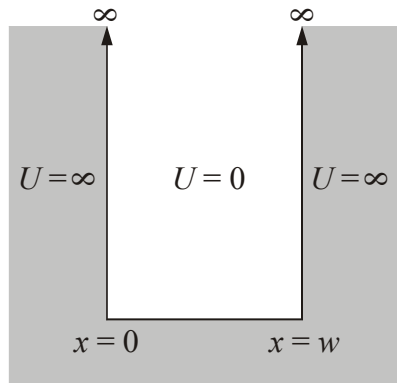


2.10 pav. Banginės funkcijos bendrasis pavidalas vienmatės potencialo duobės atveju, kai $E > 0$

energijos lygmenys, kurie artėja vienas prie kito didėjant dalelės energijai, o kai dalelės energija yra teigiama, turime ištisinį energijos spektrą. Atstumas tarp energijos lygmenų, kurie atitinka surištąją dalelės būseną, didėja mažėjant erdvės sričiai, kurioje lokalizuota dalelė (t. y. stiprėjant traukos jėgai, kuri ją veikia). Tuo įsitikinsime, išsprendę paprasčiausios potencialo duobės Šrėdingerio lygtį.

2.3.2. Dalelė be galo gilioje vienmatėje stačiakampėje potencialo duobėje

Tarkime, kad dalelės potencinės energijos U priklausomybė nuo koordinatės x yra tokio pavidalo, kaip pavaizduota 2.11 pav. T. y. potencinė energija lygi nuliui, kai koordinatė x yra tarp 0 ir w , ir lygi begalybei, kai koordinatė x yra neigiama arba didesnė už w :



2.11 pav. Begalinio gylio stačiakampė potencialo duobė. Dalelė gali laisvai judėti erdvės srityje $0 \leq x \leq w$, tačiau negali būti erdvės srityse $x < 0$ ir $x > w$. Apačioje pavaizduotas tokios sistemos klasikinis analogas: rutuliukas, kuris slysta be trinties išilgai vielos ir tampriai atšoka nuo kietų sienų taškuose $x = 0$ ir $x = w$

ir $x = w$ (tai yra viena iš trijų standartinių sąlygų, kurios minėtos 2.1.2 poskyryje), kraštinės sąlygos šiuo atveju yra

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(w) = 0. \quad (2.3.10)$$

Šiuo atveju nėra reikalaujama, kad banginės funkcijos išvestinė būtų tolydi taškuose $x = 0$ ir $x = w$, nes tuose taškuose yra *begalinio aukščio* potencinės energijos šuolis (tai yra vienintelis atvejis, kai banginės

$x \rightarrow \infty$ dalelę veikianti jėga artėja į nulį, o tada dalelę galima aprašyti de Broilio banga (trimačio judėjimo atveju jos lygtis yra (3.1.14a)) arba skirtingų krypčių de Broilio bangų suma (vienmačio judėjimo atveju – dviejų priešingomis kryptimis sklindančių de Broilio bangų suma (2.2.6a)). Taigi, kai $E > 0$, o potencinės energijos $U(x)$ bendrasis pavidalas yra toks kaip 2.5a pav., Šrėdingerio lygtis (2.3.1) turi sprendinį esant bet kokiai energijos E vertei, t. y. energijos spektras yra ištisinis (kaip ir klasikinėje mechanikoje).

Pilnasis dalelės energijos spektras pavaizduotas 2.5b pav. Kaip matome, neigiamųjų energijų srityje ($E < 0$) yra atskiri

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq w; \\ \infty, & x < 0 \text{ ir } x > w. \end{cases} \quad (2.3.4)$$

T. y. intervale $[0, w]$ dalelės neveikia jokia jėga (žr. (2.3.2)), tačiau taškuose $x = 0$ ir $x = w$ jos judėjimą riboja be galo aukštos duobės sienelės. Kadangi dalelės pilnutinė energija E negali būti be galo didelė, tai dalelė negali egzistuoti srityse $x < 0$ ir $x > w$. Prisiminus banginės funkcijos ψ statistinį aiškinimą (žr. 1.15 poskyrį), tai reiškia, kad

$$\psi(x) \equiv 0, \quad \text{kai } x < 0 \text{ arba } x > w. \quad (2.3.5)$$

Intervale $[0, w]$ Šrėdingerio lygtis (2.3.1) yra tokio pavidalo:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (0 \leq x \leq w). \quad (2.3.6)$$

Pažymėjus

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} = k, \quad (2.3.7)$$

(2.3.6) lygtį galima užrašyti trumpesniu pavidalu:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2 \cdot \psi = 0 \quad (0 \leq x \leq w). \quad (2.3.8)$$

Šios lygties bendrasis sprendinys yra tokio pavidalo:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx. \quad (2.3.9)$$

Konstantos A ir B randamos iš lygties kraštinių sąlygų, t. y. iš komosios funkcijos ψ verčių taškuose $x = 0$ ir $x = w$. Remiantis (2.3.5) ir tuo, kad funkcija ψ negali turėti trūkio taškuose $x = 0$

funkcijos išvestinė gali turėti trūkį). Dabar konstantas A ir B galima išreikšti, paeiliui įrašius $x = 0$ ir $x = w$ į (2.3.9) reiškinį ir prilyginus jį nuliui. Taip gauname:

$$1) \quad A \cdot \sin(0) + B \cdot \cos(0) = B = 0,$$

$$2) \quad A \cdot \sin kw + B \cdot \cos kw = A \cdot \sin kw + 0 \cdot \cos kw = A \cdot \sin kw = 0.$$

Iš pirmosios sąlygos išplaukia, kad dalelės banginė funkcija yra lygi

$$\psi(x) = A \sin kx. \quad (2.3.11)$$

Iš antrosios sąlygos išplaukia, kad $A = 0$ arba $\sin kw = 0$. Tačiau daugiklis A negali būti lygus nuliui, nes tada banginė funkcija ψ bus tapačiai lygi nuliui (nes $B = 0$). Vadinasi, turi galioti lygybė $\sin kw = 0$. Ši lygybė galioja, kai $kw = n\pi$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Tačiau vertę $n = 0$ reikia atmesti, nes tada $k = 0$ ir pagal (2.3.11) $\psi(x) \equiv 0$. Įrašę gautąsias k vertes į (2.3.7) ir išreiškę E , išvedame:

$$E = E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mw^2} = n^2 \frac{h^2}{8mw^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.3.12)$$

Vienintelis likęs nežinomas – tai (2.3.11) formulės daugiklis A . Šis daugiklis skaičiuojamas remiantis normavimo sąlyga (1.15.3), kuri šiuo atveju yra tokio pavidalo:

$$\int_0^w \psi^2(x) dx = 1. \quad (2.3.13)$$

Čia integruojama ne tūrio atžvilgiu, o ilgio atžvilgiu, nes sprendžiamasis uždavinys yra vienmatis ($|\psi|^2$ nusako tikimybę ilgio vienetui, o ne tūrio vienetui). Įrašę ψ išraišką (2.3.11) į (2.3.13), pasinaudoję tapatybe $\sin^2 kx = (1 - \cos 2kx) / 2$ ir integravę, gauname $A^2 \cdot w/2 = 1$ arba

$$A = \sqrt{\frac{2}{w}}. \quad (2.3.14)$$

Taigi, galutinė banginių funkcijų išraiška yra šitokia:

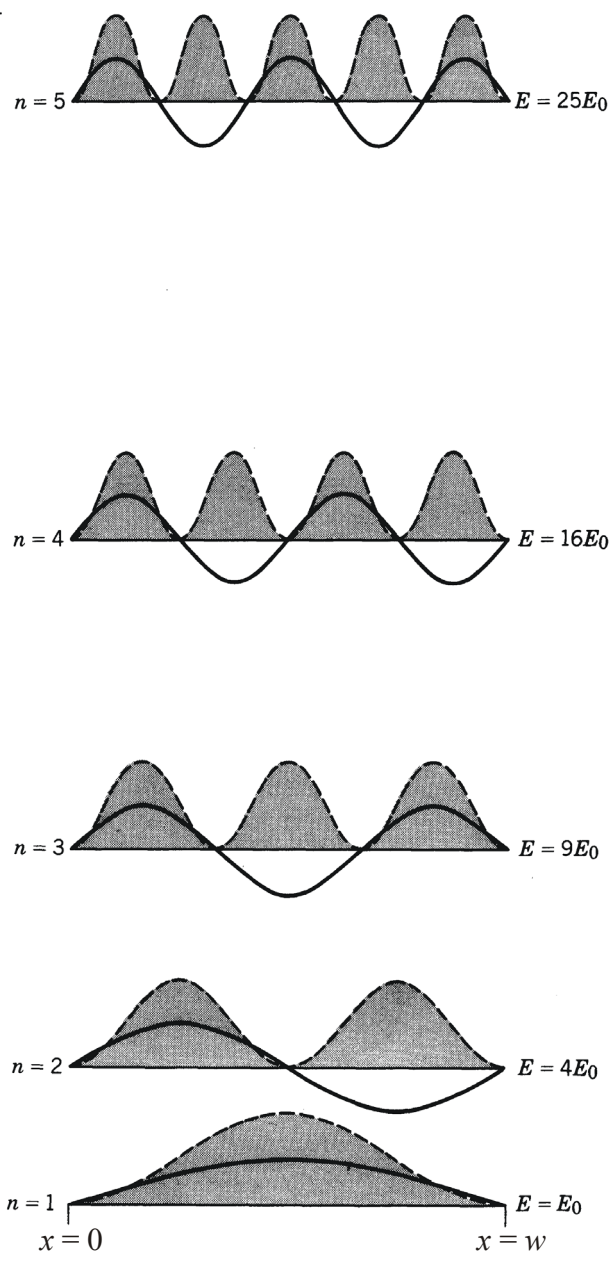
$$\psi(x) = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{w}} \sin \frac{n\pi}{w} x \quad (2.3.15)$$

($n = 1, 2, 3, \dots$).

(2.3.12) formulė nusako be galo gilioje potencialo duobėje esančios dalelės energijos lygmenis, o (2.3.15) formulė nusako atitinkamas bangines funkcijas. Dar kartą įsitikiname, kad potencialo duobėje esančios dalelės energija gali būti lygi ne bet kokiai vertei, o tik diskrečioms vėrtėms (ta pati išvada buvo gauta 2.3.1 poskyryje nagrinėjant bendresnio pavidalo potencialo duobę). Be to, matome, kad gretimų energijos lygmenų skirtumas yra tuo didesnis, kuo mažesnis potencialo duobės plotis w . Jeigu w yra makroskopinis (t. y. labai didelis), tada, apskaičiavę energijos lygmenis pagal (2.3.12) formulę, gautume, kad atstumai tarp energijos lygmenų yra labai maži. Pvz., kai $w = 10$ cm, o dalelė yra elektronas ($m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg), tada gretimų lygmenų skirtumas yra tik

Sužadintosios
būsenos

Pagrindinė
būsena



2.12 pav. Be galo gilios vienmatės stačiakampės potencialo duobės energijos lygmenys, banginės funkcijos (ištininės kreivės) ir tikimybės tankiai (brūkšninės kreivės). Energija E_0 lygi $h^2/(8mw^2)$. Šis paveikslas iš [18]

10^{-17} eV eilės, todėl galima tvirtinti, kad visos teigiamos E vertės yra galimos kaip teigia klasikinė mechanika.

Banginės funkcijos, kurios atitinka skirtingus energijos lygmenis, ir atitinkami tikimybės tankiai (banginių funkcijų kvadratai) pavaizduoti 2.12 pav. Matome, kad skaičius $n - 1$ nusako banginės funkcijos mazgų (t. y. perėjimų per nulį) skaičių intervale $[0, w]$. Pagal banginės funkcijos statistinį aiškinimą tikimybė aptikti dalelę banginės funkcijos mazge lygi nuliui. Kaip matyti 2.12 pav., didžiausia tikimybė aptikti dalelę yra pusiaukelėje tarp dviejų gretimų mazgų. Tai yra dar vienas klasikinės mechanikos ir kvantinės mechanikos skirtumas: pagal klasikinę mechaniką dalelės buvimo visuose taškuose tarp 0 ir w tikimybės yra vienodos.

2.3.3. Dalelė be galo gilioje trimatėje stačiakampėje potencialo duobėje

Vienmatės begalinio gylio potencialo duobės analizę nesunku apibendrinti nagrinėjant trimatę stačiakampę potencialo duobę. Tarkime, kad dalelė „uždaryta“ kubinėje dėžėje, kurios briaunos ilgis yra w . Šiuo atveju vietoj vienmatės Šrėdingerio lygties (2.3.6) reikia spręsti trimatę lygtį

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0, \quad (2.3.16)$$

o vietoj dviejų kraštinių sąlygų (2.3.10) turime šešias kraštines sąlygas – po vieną kiekvienai kubo sienai:

$$\begin{cases} \psi(0, y, z) = 0, & \psi(w, y, z) = 0; \\ \psi(x, 0, z) = 0, & \psi(x, w, z) = 0; \\ \psi(x, y, 0) = 0, & \psi(x, y, w) = 0. \end{cases} \quad (2.3.17)$$

(2.3.16) lygtį spręsimė kintamųjų atskyrimo metodu. T. y. šios lygties sprendinius (tikrines funkcijas) išreikšime trijų vieno kintamojo funkcijų sandaugos pavidalu:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z). \quad (2.3.18)$$

Irašę (2.3.18) į (2.3.16) ir padaliję abi puses iš $\psi(x, y, z)$, gauname tokią lygtį:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} \right) = E. \quad (2.3.19)$$

Kiekvienas iš trijų dėmenų, kurie yra šios lygties kairiojoje pusėje, priklauso tik nuo vieno kintamojo x , y arba z . Kadangi x , y ir z kinta nepriklausomai vienas nuo kito, šie trys dėmenys taip pat kinta nepriklausomai vienas nuo kito. Todėl (2.3.19) lygybė gali būti tiksli esant visoms x , y ir z vėrtėms tik tuo atveju, kai kiekvienas iš šių trijų dėmenų yra lygus konstantai:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} \right) = \text{const} = E_x, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} \right) = \text{const} = E_y, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} \right) = \text{const} = E_z, \quad (2.3.20)$$

ir kai visų šių konstantų suma yra lygi E :

$$E_x + E_y + E_z = E. \quad (2.3.21)$$

Kiekviena iš trijų lygčių (2.3.20) yra tokio paties pavidalo kaip vienmatė Šrėdingerio lygtis (2.3.6). Todėl šių lygčių sprendiniai išreiškiami (2.3.12) ir (2.3.15) formulėmis. Taigi, kiekvieną nuostoviąją dalelės būseną kubinėje „dėžėje“ vienareikšmiškai nusako trys sveikieji skaičiai n_x , n_y ir n_z . Tų būsenų energijos lygios

$$E = E_n = \frac{\hbar^2}{8mw^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots), \quad (2.3.22)$$

o atitinkamos banginės funkcijos yra

$$\psi(x, y, z) = \psi_{n_x, n_y, n_z}(x) = \left(\frac{2}{w} \right)^{\frac{3}{2}} \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z; \quad (2.3.23)$$

čia

$$k_x = \frac{n_x \pi}{w}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{w}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{w}. \quad (2.3.24)$$

2.3.4. Dalelė baigtinio gylio vienmatėje stačiakampėje potencialo duobėje

Tarkime, kad stačiakampės potencialo duobės gylis yra baigtinis ir lygus U_0 :

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < -w/2 \quad (\text{I sritis}); \\ 0, & -w/2 \leq x \leq w/2 \quad (\text{II sritis}); \\ U_0, & x > w/2 \quad (\text{III sritis}). \end{cases} \quad (2.3.25)$$

Siekdami sutrumpinti lygčių užrašymą, vartosime tokius žymenis:

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (2.3.26)$$

Dalelės banginę funkciją kiekvienoje iš šių sričių žymėsime ψ_1 , ψ_2 ir ψ_3 . Tada Šrėdingerio lygtis (2.3.1) yra tokio pavidalo:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} - k_1^2\psi_1 &= 0 \quad (\text{I sritis}), \\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 &= 0 \quad (\text{II sritis}), \\ \frac{d^2\psi_3}{dx^2} - k_1^2\psi_3 &= 0 \quad (\text{III sritis}). \end{aligned} \quad (2.3.27)$$

Šių lygčių bendrieji sprendiniai yra

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A \exp(k_1 x) + B \exp(-k_1 x) \quad (\text{I sritis}), \\ \psi_2 &= C \exp(ik_2 x) + D \exp(-ik_2 x) \equiv C' \cos(k_2 x) + D' \sin(k_2 x) \quad (\text{II sritis}), \\ \psi_3 &= F \exp(k_1 x) + G \exp(-k_1 x) \quad (\text{III sritis}); \end{aligned} \quad (2.3.28)$$

čia $C' = C + D$, o $D' = i(C - D)$. Banginė funkcija turi likti baigtinė, kai $x \rightarrow \pm\infty$. Todėl $B = 0$ ir $F = 0$. Kitus tris koeficientus galima apskaičiuoti pasinaudojus kraštinėmis sąlygomis, kurios išreiškia banginės funkcijos ir jos pirmosios išvestinės tolydumo taškuose $x = \pm w/2$ reikalavimą:

$$\psi_1(-w/2) = \psi_2(-w/2), \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=-w/2} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=-w/2}, \quad (2.3.29a)$$

$$\psi_2(w/2) = \psi_3(w/2), \quad \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=w/2} = \left. \frac{d\psi_3}{dx} \right|_{x=w/2}. \quad (2.3.29b)$$

Paskutinis koeficientas apskaičiuojamas remiantis normavimo sąlyga

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2(x) dx = 1. \quad (2.3.30)$$

Irašę (2.3.28) į (2.3.29a,b), gauname tiesinių homogeninių algebrinių lygčių sistemą atžvilgiu keturių nežinomųjų koeficientų A , C' , D' ir G , kuri turi nenulinius sprendinius tik tada, kai galioja viena iš šių dviejų lygybių:

$$k_2 \operatorname{tg} \frac{k_2 w}{2} = k_1 \quad (2.3.31a)$$

arba

$$-k_2 \operatorname{ctg} \frac{k_2 w}{2} = k_1. \quad (2.3.31b)$$

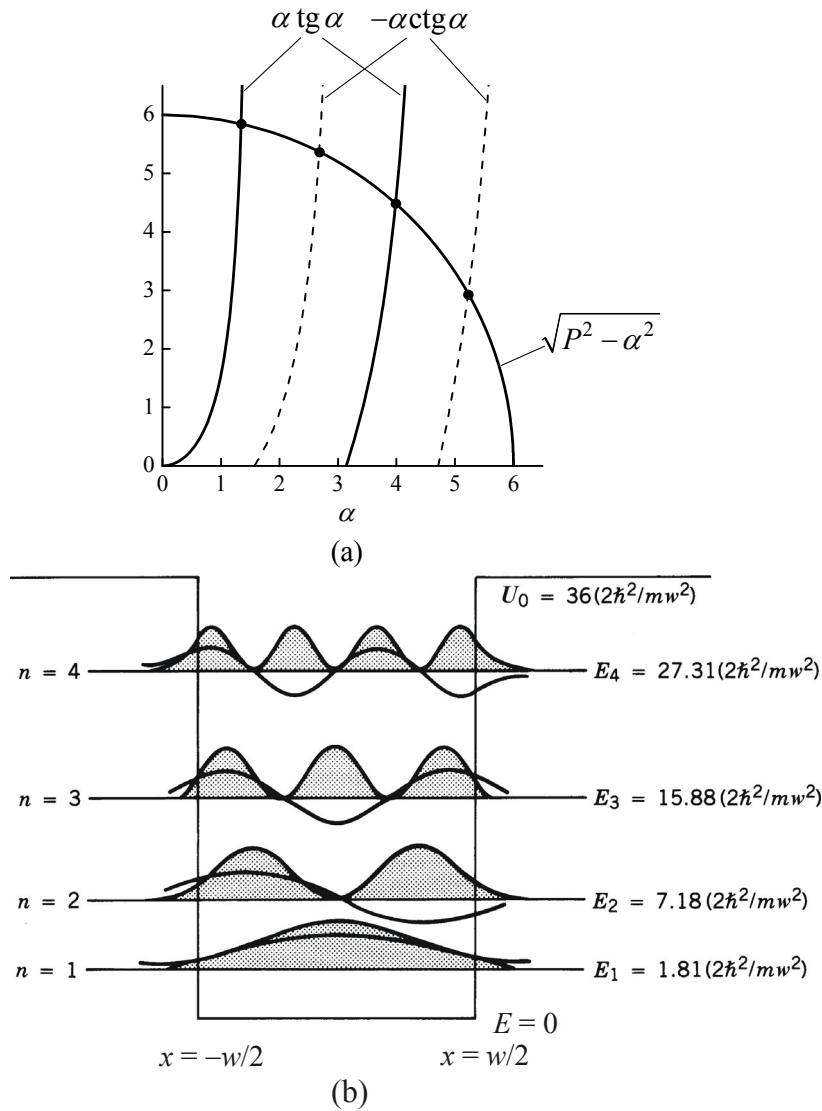
Kadangi dydžiai k_1 ir k_2 yra vienareikšmiškai susiję su dalelės energija E (žr. (2.3.26)), tai (2.3.31a,b) yra lygtys dalelės energijos E atžvilgiu. Šių lygčių sprendinių neįmanoma išreikšti elementariomis funkcijomis, t. y. šias lygtis reikia spręsti skaitmeniniu būdu (kompiuteriu) arba grafiškai. Sprendžiant grafiškai, patogu apibrėžti naują kintamąjį: $\alpha = k_2 w/2$. Padauginę (2.3.31a,b) lygtis iš $w/2$ ir pasinaudoję tuo, kad $k_1^2 = 2mU_0/\hbar^2 - k_2^2$ (žr. (2.3.26)), matome:

$$\alpha \operatorname{tg} \alpha = \sqrt{P^2 - \alpha^2}, \quad (2.3.32a)$$

$$-\alpha \operatorname{ctg} \alpha = \sqrt{P^2 - \alpha^2}, \quad (2.3.32b)$$

$$P \equiv \sqrt{mU_0 w^2 / (2\hbar^2)}. \quad (2.3.32c)$$

(2.3.32a,b) lygčių dešinioji pusė – tai apskritimo, kurio spindulys P , lygtis. Kairioji pusė sudaryta iš atskirų šakų. Sprendiniai atitinka tų šakų sankirtos su minėtuoju apskritimu taškus (žr. 2.13a pav.). Vadinasi, sprendinių skaičių lemia apskritimo spindulys P , kuris priklauso nuo potencialo duobės gylio U_0 .



2.13 pav. (a) (2.3.32a) ir (2.3.32b) lygčių grafinis sprendimas. Kai $P = 6$, egzistuoja keturi sprendiniai, kurie atitinka $\alpha = 1,345, 2,679, 3,985$ ir $5,226$. (b) Banginės funkcijos ir tikimybės tankiai baigtinio gylio stačiakampėje duobėje, kurioje egzistuoja keturios surištosios būsenos (plg. su 2.12 pav.). 2.13b pav. yra iš [18]

Taigi, *baigtinio gylio potencialo duobėje esančios dalelės surištųjų būsenų skaičius yra baigtinis ir priklauso nuo duobės gylio* (palyginame – begalinio gylio potencialo duobėje esančios dalelės surištųjų būsenų skaičius yra begalinis). Pvz., jeigu $P < \pi/2$, egzistuoja tik viena surištoji būsena. Jeigu $\pi/2 < P < \pi$, egzistuoja dvi surištosios būsenos. Todėl pagal surištųjų būsenų skaičių galima apskaičiuoti potencialo duobės gylį. Pvz., šitaip galima apytiksliai apskaičiuoti didžiausią galimą potencialo duobės gylį surištųjų protono ir neutrono sistemoje (deutone), nes deutonas turi tik vieną surištąją būseną.

2.3.5. Vienmatis harmoninis osciliatorius

Bet kokią glodžią potencinės energijos priklausomybę nuo koordinatės x galima išskleisti Teiloro eilute bet kurio taško x_0 aplinkoje:

$$U(x) = U(x_0) + \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2U}{dx^2} \right)_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \dots \quad (2.3.33)$$

Jeigu x_0 yra potencinės energijos minimumo taškas, tada antrasis dėmuo šioje eilutėje lygus nuliui (nes minimumo taške pirmoji išvestinė lygi nuliui), todėl pagrindinis dėmuo, kuris lemia funkcijos $U(x)$ pavidalą arti taško x_0 , yra trečiasis (kvadratinis) dėmuo. Taigi, arti minimumo taško bet kokios vienmatės sistemos potencinę energiją galima aproksimuoti reiškiniu

$$U(x) = \frac{1}{2} kx^2; \quad (2.3.34)$$

čia k yra konstanta. Kadangi dalelę veikianti jėga yra lygi $F = -dU/dx$, tai dalelės judėjimo klasikinė lygtis (II Niutono dėsnis) šiuo atveju yra

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x = 0; \quad (2.3.35)$$

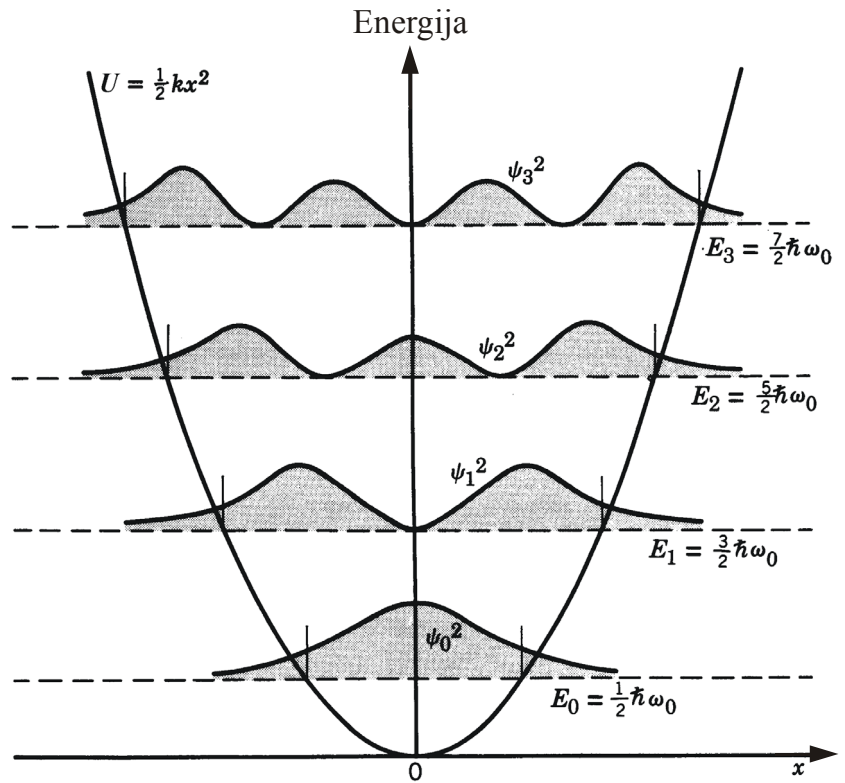
čia $\omega_0 = \sqrt{k/m}$. (2.3.35) yra harmoninio osciliatoriaus lygtis, kurios bendrasis sprendinys yra harmoninė funkcija $x(t) = a \cos(\omega_0 t + \theta)$.

Vienmatės Šrėdingerio lygties (2.3.1) sprendimas, kai $U(x)$ yra (2.3.34) pavidalo, yra pateiktas, pvz., [4] knygoje. Išsprendus tą lygį, gaunamos tokio pavidalo normuotosios banginės funkcijos: $\psi_n(x) = h_n(x)e^{-\alpha^2 x^2/2}$; čia $\alpha^2 = \sqrt{km}/\hbar$, $h_n(x)$ yra tam tikras n -tojo laipsnio daugianaris. Šio daugianario laipsnis n kartu yra ir atitinkamo energijos lygmens numeris. Energijos lygmenys (Šrėdingerio lygties tikrinės vertės) šiuo atveju yra tokie:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right); \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.3.36)$$

Čia ω_0 yra osciliatoriaus kampinis dažnis. 2.14 pav. parodyti keli žemiausieji kvantinio harmoninio osciliatoriaus energijos lygmenys ir atitinkami tikimybės tankiai. 2.1 lentelėje pateiktos kelių vienmačio harmoninio osciliatoriaus banginių funkcijų (2.3.36) išraiškos ir bendroji $\psi_n(x)$ išraiška.

Vadinasi, kvantinio harmoninio osciliatoriaus energija negali būti bet kokia, o gali įgyti tik diskrečias vertes (2.3.36), kurios nutolusios viena nuo kitos vienodu atstumu $\hbar\omega_0$. Mažiausia osciliatoriaus energija nėra lygi nuliui, o yra lygi $E_0 = \hbar\omega_0/2$. Be to, 2.14 pav. matome, kad tikimybės tankio priklausomybė nuo koordinatės yra panaši į tą, kuri gaunama stačiakampės potencialo duobės atveju (žr. 2.13b pav.): ji yra osciliuojanti, o srityse, kur $E < U$, eksponentiškai mažėja.



2.14 pav. Keli žemiausieji vienmačio harmoninio osciliatoriaus energijos lygmenys ir atitinkami tikimybės tankiai (iš [18])

2.1 lentelė. Vienmačio harmoninio osciliatoriaus banginės funkcijos

n	E_n	$\psi_n(x)$
0	$\frac{1}{2}\hbar\omega_0$	$\pi^{-1/4}e^{-\alpha^2 x^2/2}$
1	$\frac{3}{2}\hbar\omega_0$	$2^{-1/2}\pi^{-1/4}(2\alpha x)e^{-\alpha^2 x^2/2}$
2	$\frac{5}{2}\hbar\omega_0$	$2^{-3/2}\pi^{-1/4}(4\alpha^2 x^2 - 2)e^{-\alpha^2 x^2/2}$
3	$\frac{7}{2}\hbar\omega_0$	$(1/(4\sqrt{3}\pi^{1/4}))(8\alpha^3 x^3 - 12\alpha x)e^{-\alpha^2 x^2/2}$
4	$\frac{9}{2}\hbar\omega_0$	$(1/(8\sqrt{6}\pi^{1/4}))(16\alpha^4 x^4 - 48\alpha^2 x^2 + 12)e^{-\alpha^2 x^2/2}$
n	$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$	$\psi_n(x) \equiv (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2};$ čia $H_n(x)$ yra n -tojo laipsnio Ermito daugianaris (angl. <i>Hermite polynomial</i>): $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$

2.3.6. Elektronas branduolio elektriniame lauke

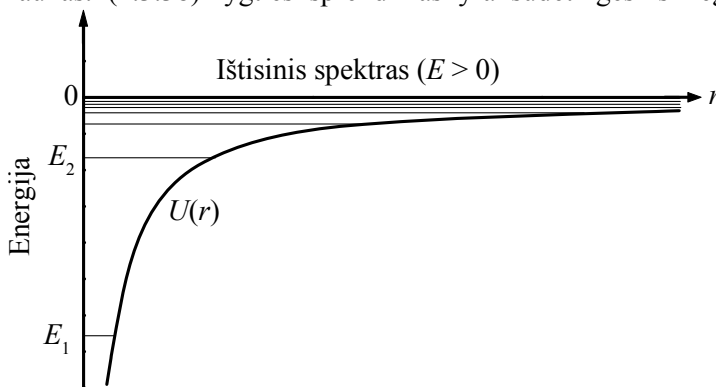
Kitas trimatės potencialo duobės pavyzdys yra elektrono ir atomo branduolio sistema (vandeniliškasis atomas). Tolstant nuo branduolio bet kuria kryptimi, vandeniliškojo atomo potencinė energija kinta pagal formulę

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}; \quad (2.3.37)$$

čia r yra atstumas tarp branduolio ir elektrono. Ši priklausomybė pavaizduota 2.15 pav. Ji skiriasi nuo 2.5 pav. pavaizduotos funkcijos $U(x)$ tuo, kad potencialo duobės gylis yra begalinis (kai $r \rightarrow 0$, U artėja į $-\infty$), ir tuo, kad potencinė energija niekur nėra teigiama. Įrašę (2.3.37) į (2.1.3), išvedame vandeniliškojo atomo nuostoviąją Šrėdingerio lygtį:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (2.3.38)$$

Šiuo atveju taip pat turime elektrono judėjimą potencialo duobėje, kurią sukuria branduolio elektrinis laukas. (2.3.38) lygties sprendimas yra sudėtingesnis negu (2.3.1) lygties, nes dabar uždavinys yra



2.15 pav. Vandenilio atomo potencinė energija ir energijos lygmenys

trimatis. Tačiau pagrindinė išvada lieka ta pati: kai $E < 0$, sistemos energija E gali būti lygi tik tam tikroms diskrečioms vertėms (lygties tikrinėms vertėms). Išsprendus šią lygtį, gaunamos tiksliai tos pačios energijos lygmenų vertės, kurias numatė Boro teorija (žr. (1.10.26)). Energijos lygmenys pavaizduoti 2.15 pav. Boro šį rezultatą gavo remdamasis dirbtinai įvestais postulatais (žr. 1.9 poskyrį), o kvantinėje mechanikoje diskrečios energijų vertės išplaukia iš Šrėdingerio lygties.

Vandeniliškojo atomo energijos lygmenų išraiškoje (1.10.26) vėl galima išvengti dėsningumą, kuris buvo gautas nagrinėjant vienmatę ir trimatę stačiakampes potencialo duobes: intervalai tarp žemiausių energijos lygmenų yra atvirkščiai proporcingi potencialo duobės matmenų kvadratui (vandeniliškojo atomo atveju potencialo duobės matmenys yra tos pačios didumo eilės kaip r_1).

(2.3.38) lygties tikrinių funkcijų išraiškos yra gana sudėtingos. Paprasčiausia yra mažiausios energijos tikrinės funkcijos ψ_1 išraiška:

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right); \quad (2.3.39)$$

čia r yra atstumas iki branduolio, o r_1 yra pirmasis Boro spindulys, padalytas iš branduolio krūvio skaičiaus Z (žr. (1.10.25) formulę). Vandenilio atomo matmenys yra apytiksliai lygūs dvigubam pirmajam Boro spinduliui, t. y. maždaug 1 Å. Tokios pačios eilės yra ir visų kitų atomų matmenys.

Iš (2.3.39) išplaukia, kad elektronas atome yra tolydžiai pasiskirstęs aplink branduolį. Sakoma, kad atomo elektronai (H atomo – vienas elektronas) sudaro „elektronų debesį“. Taigi, Boro teorijos įvaizdis apie elektroną, kuris juda apibrėžtu greičiu apskrita orbita apie branduolį, yra neteisingas.

Banginė funkcija (2.3.39) sparčiai mažėja didėjant atstumui iki branduolio. Pvz., atstumu $r = 10r_1 = 5,3 \cdot 10^{-10}$ m banginės funkcijos vertė yra $e^{-10} \approx 22000$ kartų mažesnė už jos didžiausią vertę. Taigi, šio „elektronų debesies“ matmenys atitinka kelis pirmosios Boro orbitos spindulius.

Smulkesnė vandenilio atomo analizė bus pateikta 3.2 poskyryje.

Apibendrinant šių paprastų kvantinės mechanikos uždavinių sprendimo rezultatus, reikėtų dar kartą pabrėžti šias dalelių bangines savybes:

1. Dalelė gali pereiti pro potencialo barjerą turėdama mažesnę energiją už barjero aukštį (tunelinis reiškinys).
2. Dalelės banginė funkcija osciliuoja, kai $E > U(x)$, ir eksponentiškai mažėja, kai $E < U(x)$.
3. Surištosios būsenos dalelės energija gali būti lygi tik diskrečioms vertėms. Šių leidžiamųjų energijos verčių skaičių lemia potencialo duobės gylis.

Uždaviniai

- 2.1. 1 eV energijos elektronų pluoštas krinta į stačiakampį potencialo barjerą, kurio aukštis 8 eV, o plotis 5 Å. Kokia santykinė dalis elektronų pereis šį potencialo barjerą? Pakartokite sprendimą, kai potencialo barjero plotis yra 3 Å.
- 2.2. 1 eV energijos elektronų pluoštas krinta į stačiakampį potencialo šuolį (t. y. begalinio pločio potencialo barjerą), kurio aukštis 10 eV. Kokiu atstumu nuo barjero krašto elektronų srauto tankis sumažės e kartų, palyginti su srauto tankiu ant barjero krašto?
- 2.3. Išspręskite vienmatę Šrėdingerio lygtį, kai potencinės energijos priklausomybė nuo koordinatės x yra tokia:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ -U_0, & 0 \leq x \leq w; \\ 0, & x > w. \end{cases}$$

Čia U_0 yra teigiamas dydis, o sprendinius reikia išreikšti, kai energija yra teigiama ($E > 0$). Išreikškite visus nežinomuosius koeficientus vienu koeficientu. Yra žinoma, kad dalelės atlekia iš $x = -\infty$.

- 2.4. Remdamiesi prielaida, kad teigiamasis krūvis Ze yra tolygiai pasiskirstęs $5 \cdot 10^{-15}$ m spindulio branduolio tūryje, ir Heizenbergo nelygybe (1.13.3), raskite branduolio centre esančio elektrono pilnutinės energijos apatinę ribą. Ar gali elektronas egzistuoti branduolyje? [Remkitės prielaida, kad elektronas yra visiškai reliatyvistinis, t. y. jo pilnutinė reliatyvistinė masė yra daug didesnė už rimties masę.]
- 2.5. Raskite surišųjų būsenų skaičių ir jų energijas baigtinio gylio vienmatėje stačiakampėje potencialo duobėje, kai parametras P , kuris apibrėžiamas (2.3.32c) formule, yra lygus 10.
- 2.6. Apskaičiuokite tikimybę, kad dalelė, kurios judėjimą nusako vienmačio harmoninio osciliatoriaus Šrėdingerio lygtis, yra erdvės srityje, kurioje dalelės energija E yra mažesnė už potencinę energiją U , kai dalelė yra pagrindiniame energijos lygmenyje ir kai ji yra pirmuosiuose dviejuose sužadintuose lygmenyse.
- 2.7. Elektronas yra be galo gilioje vienmatėje stačiakampėje potencialo duobėje. Potencialo duobės plotis w yra toks, kad intervalai tarp energijos lygmenų yra labai maži, todėl galima teigti, kad energijos spektras yra tolydus. Raskite sąryšį tarp lygmenų energinio tankio dN/dE (t. y. lygmenų skaičiaus vienetinei energijai) ir energijos E . Apskaičiuokite dN/dE , kai $w = 1$ cm, o $E = 1$ eV.
- 2.8. Dalelė, kurios masė m , yra be galo gilioje dvimatėje stačiakampėje potencialo duobėje, kurios kraštinių ilgių yra w_1 ir w_2 . Išreikškite dalelės energijos lygmenis ir apskaičiuokite tikimybę, kad dalelė bus erdvės srityje $0 < x < w_1/3$, kai dalelė yra mažiausios energijos lygmenyje.
- 2.9. Dalelės, kurios masė m , o potencinė energija $U(x) = kx^2/2$, mažiausios energijos būsenos banginė funkcija yra tokio pavidalo: $\psi(x) = A \exp(-\alpha x^2)$; čia A ir α yra tam tikros konstantos. Remdamiesi Šrėdingerio lygtimi, išreikškite konstantą α ir dalelės mažiausią energiją E .
- 2.10. Naudodamiesi Šrėdingerio lygtimi, išreikškite atomo elektrono būsenos, kurios banginė funkcija yra $\psi(r) = A(1 + ar)e^{-ar}$, energiją; čia A , a ir α yra tam tikros konstantos.

3. Dalelės būseną apibūdinantys fizikiniai dydžiai ir jų operatoriai

3.1. Operatoriai kvantinėje mechanikoje. Kvantinės mechanikos postulatai

3.1.1. Pagrindinės apibrėžtys

Nuosekli matematinė kvantinės mechanikos formuluotė remiasi fizikinių dydžių operatorių sąvoka. Matematinio požiūriu **operatorius** – tai atitinkamybė tarp funkcijų. T. y., paveikę operatoriumi funkciją, gauname kitą funkciją. Kitaip sakant, operatorius *atvaizduoja* vieną funkciją į kitą. Pvz., diferencialinis operatorius d/dx atvaizduoja bet kurią funkciją $f(x)$ į jos išvestinę df/dx . Tam tikra prasme operatoriai yra analogiški funkcijoms: funkcija – tai atitinkamybė tarp skaičių, t. y. funkcija $f(x)$ atvaizduoja skaičių x į kitą skaičių $y = f(x)$. Operatoriai žymimi didžiosiomis raidėmis su „stogeliu“, pvz., $\hat{A}$. Operatorius veikia po jo žymens užrašytą funkciją. Operatorius $\hat{A}$ vadinamas **tiesiniu operatoriumi**, jeigu, apibrėžus bet kokias dvi funkcijas u ir v ir bet kokias dvi konstantas α ir β , galioja lygybė

$$\hat{A}(\alpha u + \beta v) = \alpha \hat{A}u + \beta \hat{A}v \quad (3.1.1)$$

(reiškinys, kuris užrašytas tarp skliaustų, yra vadinamas funkcijų u ir v **tiesiniu dariniu**). Kvantinėje mechanikoje vartojami tik tiesiniai operatoriai, kad banginės funkcijos atitiktų superpozicijos principą (žr. 1.15 poskyrį). Tiesinis operatorius $\hat{A}$ vadinamas **Ermito operatoriumi** (angl. *Hermitian operator*), jeigu bet kurioms dviem kompleksinėms funkcijoms u ir v galioja lygybė

$$\int v^* \hat{A}u \, dV = \int (\hat{A}v)^* u \, dV. \quad (3.1.2)$$

Skaičiuojant integralus, kurie įeina į (3.1.2), integruojama visoje funkcijų apibrėžimo srityje. Jeigu u ir v yra diskretaus kintamojo funkcijos, tada integravimą reikia pakeisti sumavimu. Šios dvi pastabos galioja ir toliau užrašytiems integralams.

Funkcijų rinkinys vadinamas **tiesiškai nepriklausomų** funkcijų rinkiniu, jeigu nė vienos to rinkinio funkcijos neįmanoma išreikšti kitų to rinkinio funkcijų tiesiniu dariniu. Tiesiškai nepriklausomų funkcijų atskirasis atvejis yra ortogonalios funkcijos. Funkcijos u ir v vadinamos **ortonormaliomis**, jeigu

$$\int u^* v \, dV = 0. \quad (3.1.3)$$

Funkcija u vadinama **normuotąja funkcija**, jeigu

$$\int |u|^2 \, dV = 1. \quad (3.1.4)$$

Normuotosios funkcijos, kurios yra ortogonalios viena kitai, yra vadinamos **ortonormuotosiomis funkcijomis**.

Jeigu operatoriaus $\hat{A}$ poveikis funkcijai φ pasireiškia tik daugyba iš skaičiaus λ , t. y. jeigu

$$\hat{A}\varphi = \lambda\varphi, \quad (3.1.5)$$

tada funkcija φ vadinama operatoriaus $\hat{A}$ **tikrine funkcija**, o skaičius λ vadinamas operatoriaus $\hat{A}$ **tikrine verte**, kuri atitinka tikrinę funkciją φ . (3.1.5) lygtis vadinama operatoriaus $\hat{A}$ **tikrinių verčių lygtimi**. Pvz., nuostoviąją Šrėdingerio lygtį (2.1.3) galima užrašyti kaip Ermito operatoriaus

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z) \quad (3.1.6)$$

tikrinių verčių lygtį:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (3.1.7)$$

Operatorius (3.1.6) vadinamas **hamiltonianu**. Daugelio dalelių sistemos hamiltonianas yra (2.1.11).

Ermito operatorių savybės:

- 1) Ermito operatorių tikrinės vertės yra realios;
- 2) Ermito operatorių tikrinės funkcijos, atitinkančios skirtingas tikrines vertes, yra ortogonalios.

Iš tikrinių verčių lygties (3.1.5) išplaukia, kad bet kuri funkcija, kuri gauta padauginus operatoriaus $\hat{A}$ tikrinę funkciją iš konstantos (arba iš funkcijos, kurios argumentai yra kitokie negu operatoriaus $\hat{A}$ tikrinių funkcijų), taip pat yra operatoriaus $\hat{A}$ tikrinė funkcija. Todėl operatoriaus tikrinę funkciją visada galima normuoti į vienetą, t. y. padauginti iš tokios konstantos, kad tos funkcijos modulio kvadrato integralas būtų lygus vienetui (žr. (3.1.4)). Taigi, galima teigti, kad Ermito operatoriaus tikrinės funkcijos sudaro ortonormuotųjų funkcijų rinkinį.

Operatoriaus $\hat{A}$ tikrinių verčių λ_i ($i = 1, 2, 3, \dots$) rinkinys vadinamas to **operatoriaus spektru**. Jeigu vieną tikrinę vertę atitinka dvi arba daugiau tiesiškai nepriklausomų tikrinių funkcijų, tada ta vertė vadinama **išsigimusia tikrine verte**, o didžiausias ją atitinkančių tiesiškai nepriklausomų funkcijų skaičius vadinamas **tikrinės vertės išsigimimo laipsniu**.

Matematiškai galima įrodyti, kad bet kurio Ermito operatoriaus tikrinės funkcijos sudaro **pilnąją funkcijų sistemą**, t. y. bet kurią funkciją Ψ galima išreikšti („išskleisti“) Ermito operatoriaus tikrinių funkcijų tiesiniu dariniu:

$$\Psi = \sum_n C_n \psi_n; \quad (3.1.8)$$

čia ψ_n yra operatoriaus tikrinės funkcijos. Pasinaudojus Ermito operatoriaus tikrinių funkcijų ortonormuotumu, iš (3.1.8) gaunama tokia koeficientų išraiška:

$$C_n = \int \psi_n^* \Psi dV; \quad (3.1.9)$$

čia integruojama visoje funkcijos ψ_n apibrėžimo srityje. Tikrinių funkcijų ψ_n argumentai gali būti tik dalis funkcijos Ψ argumentų rinkinio. Tada skleidinio koeficientai C_n yra likusiųjų argumentų funkcijos.

3.1.2. Kvantinės mechanikos postulatai

Vartojant anksčiau apibrėžtas sąvokas, galima suformuluoti keturis **kvantinės mechanikos postulatus**:

- I. Sistemos būseną nusako banginė funkcija $\Psi(\mathbf{r}, t)$; čia $\mathbf{r}$ yra sistemos koordinačių rinkinys, o t yra laikas (nors čia koordinačių rinkinys žymimas taip pat kaip trimatis spindulys vektorius, tačiau bendruoju atveju koordinačių prasmė gali būti kitokia, o jų skaičius gali būti nelygus trimis).
- II. Kiekvieną fizikinį dydį, kuris apibūdina sistemos būseną, atitinka apibrėžtas Ermito operatorius. Bendruoju atveju, apibrėžus sistemos būseną, duotojo fizikinio dydžio vertė yra neapibrėžta, tačiau tą dydį atitinkantis operatorius visada yra tiksliai apibrėžtas.
- III. Fizikinio dydžio A , kuris apibūdina sistemos būseną, išmatuotoji vertė yra lygi vienai iš tų dydžių atitinkančio operatoriaus $\hat{A}$ tikrinių verčių λ_n (čia n yra tikrinės vertės numeris: $n = 1, 2, \dots$). Tikimybę $P_n(t)$, kad dydžio A matavimo rezultatas laiko momentu t bus lygus λ_n , galima apskaičiuoti šitaip. Sistemos banginę funkciją Ψ reikia išreikšti operatoriaus $\hat{A}$ ortonormuotų tikrinių funkcijų ψ_n tiesiniu dariniu (3.1.8). Jeigu to darinio koeficientai $C_n(t)$ priklauso tik nuo laiko, tada $P_n(t) = |C_n(t)|^2$. Jeigu koeficientai C_n priklauso dar ir nuo kai kurių koordinačių, tada tikimybė $P_n(t)$ yra lygi koeficiento C_n modulio kvadrato integralui minėtųjų koordinačių atžvilgiu¹.
- IV. Banginė funkcija $\Psi(\mathbf{r}, t)$ atitinka Šrėdingerio lygtį (2.1.1) arba (2.1.10).

Operatorių $\hat{A}$ ir $\hat{B}$ sandauga $\hat{A}\hat{B}$ – tai operatorius, kuris atvaizduoja bet kurią funkciją u į funkciją $\hat{A}(\hat{B}u)$. Bendruoju atveju $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, t. y. $\hat{A}(\hat{B}u) \neq \hat{B}(\hat{A}u)$. Operatorius

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (3.1.10)$$

vadinamas operatorių $\hat{A}$ ir $\hat{B}$ **komutatoriumi**. Jeigu dviejų operatorių komutatorius yra lygus nuliui, tada sakoma, kad operatoriai **komutuoja**. Tokie operatoriai vadinami **komutatyviaisiais** arba **perstatomaisiais**.

Iš III postulato išplaukia, kad fizikinio dydžio A vertė yra apibrėžta (t. y. jos gavimo matavimų metu tikimybė lygi 1) tada ir tik tada, kai sistemos banginė funkcija yra to dydžio operatoriaus $\hat{A}$ tikrinė funkcija. Vadinasi, vienu metu matuojant du skirtingus dydžius, abu jie įgyja apibrėžtas vertes tik tada,

¹ Jeigu operatoriaus $\hat{A}$ spektras yra tolydus (pvz., dalelės koordinatė), tada banginės funkcijos Ψ skleidinyje (3.1.8) vietoj sumos reikia vartoti integralą visų galimų dydžio A verčių atžvilgiu: $\Psi = \int C(\lambda) \psi_\lambda d\lambda$. Čia ψ_λ yra operatoriaus $\hat{A}$ tikrinė funkcija, kuri atitinka tikrinę vertę λ . Funkcija $C(\lambda)$ apibrėžiama taip pat kaip diskretaus spektro atveju: $C(\lambda) = \int \psi_\lambda^* \Psi dV$ (plg. su (3.1.9)). Tačiau šiuo atveju funkcija $|C(\lambda)|^2$ (arba šios funkcijos integralas koordinačių atžvilgiu) reiškia ne tikimybę, o **tikimybės tankį** (tolydžiojo atsitiktinio dydžio tikimybės tankio sąvoka apibrėžta G priedo G.4.3 skyrelyje). Jeigu dydžio A vertė yra tiksliai apibrėžta ir lygi λ_0 , šis tikimybės tankis yra lygus Dirako delta funkcijai $\delta(\lambda - \lambda_0)$ (žr. E priedą). Tolydžiojo dydžio operatoriaus tikrinė funkcija normuojama kitaip negu diskrečiojo: funkcija ψ_λ normuojama ne į vienetą, o į delta funkciją, t. y. $\int \psi_{\lambda_1}^* \psi_{\lambda_2} dV = \delta(\lambda_1 - \lambda_2)$. Toliau, užrašant bendrąsias kvantinės mechanikos lygtis, kurių pavidalas priklauso nuo operatoriaus spektro rūšies (diskretus ar tolydus), bus laikoma, kad operatoriaus spektras yra diskretus.

kai sistemos banginė funkcija yra abiejų tų dydžių operatorių tikrinė funkcija. Pasinaudojus operatoriaus tikrinių verčių lygtimi (3.1.5), galima įrodyti, kad dviejų operatorių tikrinių funkcijų sistemos sutampa tada ir tik tada, kai tie operatoriai komutuoja. Taigi, vienu metu matuojant du dydžius, jie abu gali įgyti apibrėžtas vertes tada ir tik tada, kai jų operatoriai komutuoja.

Be to, iš III postulato išplaukia, kad fizikinio dydžio, kurio operatorius yra $\hat{A}$, vidurkis laiko momentu t , kai sistemos būseną nusako banginė funkcija Ψ , yra lygus

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dV; \quad (3.1.11)$$

čia integruojama visų koordinačių atžvilgiu, o apatinis indeksas „ t “ parodo, kad turimas omenyje statistinis vidurkis laiko momentu t (t. y. visų išmatuotų dydžio A verčių, kurios būtų gautos, tuo pačiu laiko momentu t ištyrus be galo daug vienodų duotosios sistemos kopijų, vidurkis).

III postulatą reikia papildyti šiuo teiginiu. Jeigu dydžio A išmatuotoji vertė yra lygi λ_n , tada sistemos banginė funkcija iš karto po to matavimo yra dydžio A operatoriaus $\hat{A}$ tikrinė funkcija, kuri atitinka tikrinę vertę λ_n . T. y. po matavimo banginės funkcijos skleidinio operatoriaus $\hat{A}$ tikrinėmis funkcijomis (3.1.8) koeficientai, išskyrus koeficientą C_n , tampa lygūs nuliui, o pastarojo koeficiento modulis (arba to modulio kvadrato integralas koordinačių atžvilgiu) tampa lygus vienetui. Taigi, fizikinio dydžio matavimas pakeičia kvantinės sistemos būseną. Tai yra dar viena esminė kvantinės mechanikos ypatybė: klasikinė fizika teigia, kad teoriškai yra galimas „idealus“ matavimas, kuris neturi jokios įtakos tiriamosios sistemos būsenai (tam reikia turėti tobulą matavimo įrangą), o kvantinė mechanika teigia, kad sistemos būsena po matavimo būtinai turi priklausyti nuo to matavimo rezultato.

Norint vienareikšmiškai nusakyti apibrėžtos energijos sistemos būseną (t. y. banginę funkciją), reikia nurodyti visų operatorių, kurie komutuoja su tos sistemos hamiltonianu ir vienas su kitu, tikrines vertes, kai sistema yra tos būsenos. Taigi, *išsamiam sistemos aprašymui reikia turėti pilnąjį komutatyviųjų operatorių rinkinį, į kurį įeina hamiltonianas*. Fizikiniai dydžiai, kurių operatoriai komutuoja su hamiltonianu, vadinami **judėjimo integralais**. Šie dydžiai yra tvarūs, t. y., užfiksavus kurio nors judėjimo integralo vertę, ta vertė išliks pastovi, kol nebus jokių išorinių poveikių. Sistemos būsena, kai visi tokie dydžiai yra tiksliai apibrėžti, vadinama **kvantine būsena**. Kvantinę būseną įprasta apibūdinti **kvantiniais skaičiais**, kurių kiekvienas nusako atitinkamo tvariojo fizikinio dydžio vertę, kai sistema yra tos kvantinės būsenos. Kvantinių skaičių visuma vienareikšmiškai nusako sistemos energiją. Atvirkščias teiginys ne visada yra teisingas, t. y., esant tiksliai apibrėžtai sistemos energijai, kai kurie kvantiniai skaičiai gali neturėti tiksliai apibrėžtų verčių. Kvantinių skaičių prasmė ir jų kiekis priklauso nuo konkrečios sistemos. Pvz., vienmačio harmoninio osciliatoriaus kvantinę būseną nusako energijos lygmens numeris n (žr. energijos išraišką (2.3.36)). Be galo gilioje kubinėje potencialo duobėje esančios dalelės kvantinę būseną nusako trys kvantiniai skaičiai n_x , n_y ir n_z (žr. bangos vektoriaus komponentių išraiškas (2.3.24) ir energijos išraišką (2.3.22)). Vandenilio atomo kvantinės būsenos aprašymui reikalingi 4 kvantiniai skaičiai (apie tai bus kalbama 3.2–3.3 poskyriuose).

3.1.3. Pagrindinių fizikinių dydžių operatoriai

Kadangi banginės funkcijos modulio kvadratas turi tikimybės tankio prasmę (žr. 1.15 poskyrį), tai spindulio vektoriaus vidurkis yra lygus

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\Psi|^2 dV = \int \Psi^* \mathbf{r} \Psi dV. \quad (3.1.12)$$

Palyginus (3.1.11) ir (3.1.12), galima teigti, kad

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}, \quad (3.1.13)$$

t. y. spindulio vektoriaus operatorius yra lygus pačiam spinduliui vektoriui, o jo tikrinės vertės – tai visos galimos $\mathbf{r}$ vertės (jos užpildo visą trimatę koordinačių erdvę).

Dabar gausime dalelės judesio kiekio (impulso) operatoriaus išraišką. Pagal de Broilio hipotezę (žr. 1.13 poskyrį) laisvosios dalelės banginė funkcija yra plokščioji banga, kurios dažnis lygus E/h , o bangos ilgis lygus h/p ; čia E yra dalelės energija, o p yra dalelės judesio kiekis. Vadinasi, laisvosios dalelės banginė funkcija lygi

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = C \cdot \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \right]; \quad (3.1.14a)$$

čia $i = \sqrt{-1}$ yra menamasis vienetas, o C yra normavimo daugiklis. Kad normuoti šią funkciją (1.15.3) sąryšiu, reikia apriboti erdvės sritį, kurioje yra dalelė, nes kitu atveju (1.15.3) integralas artėtų į begalybę. Jeigu šios srities tūris yra V , tada $C = 1/\sqrt{V}$, t. y. laisvosios dalelės normuotoji banginė funkcija yra

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \right]. \quad (3.1.14b)$$

Funkcija (3.1.14a) arba (3.1.14b) atitinka tokį diferencialinį sąryšį:

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi = \mathbf{p} \Psi; \quad (3.1.15)$$

čia ∇ yra diferencialinis operatorius „nabla“ (žr. B priedą). Palyginus (3.1.15) su (3.1.5) ir atsižvelgus į III postulatą, galima teigti, kad (3.1.15) yra judesio kiekio operatoriaus tikrinių verčių lygtis. Taigi, dalelės judesio kiekio operatorius yra lygus

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla; \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (3.1.16)$$

(3.1.13) ir (3.1.16) lygybių išvedimas nėra matematiškai griežtas, todėl jas taip pat galima laikyti kvantinės mechanikos postulatais.

Bet kurios spindulio vektoriaus ir judesio kiekio Dekarto komponentių funkcijos $F(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ operatorius gaunamas funkcijos išraiškoje pakeitus kintamuosius x, y, z, p_x, p_y, p_z atitinkamais operatoriais $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ (jeigu į funkcijos F išraišką įeina vektorių $\mathbf{r}$ ir $\mathbf{p}$ vienaarūšių Dekarto komponentių sandaugos xp_x, yp_y arba zp_z , tada gali prireikti dar ir kitų operatoriaus išraiškos pertvarkymų, nes operatorių $\hat{\mathbf{r}}$ ir $\hat{\mathbf{p}}$ vienaarūšės Dekarto komponentės nekomutuoja). Pvz., operatorius $\hat{H}$ (3.1.6) gaunamas atlikus minėtus pakeitimus nuostoviajame potencialiniame lauke judančios dalelės Hamiltono funkcijos išraiškoje. Dalelės **Hamiltono funkcija**¹ – tai dalelės pilnutinės mechaninės energijos išraiška spinduliu vektoriumi ir judesio kiekiu:

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + U(x, y, z) \quad (3.1.17)$$

(čia m yra dalelės masė). Todėl aišku, kad hamiltoniano operatoriaus (3.1.6) tikrinės vertės turi nusakyti dalelės energijos lygmenis. Tai ir teigia nuostovioji Šrėdingerio lygtis (2.1.3). Taip pat gaunamas ir dalelės judesio kiekio momento operatorius. Dalelės judesio kiekio momentas $\mathbf{L}$ atžvilgiu koordinačių atskaitos taško – tai jos spindulio vektoriaus $\mathbf{r}$ ir judesio kiekio $\mathbf{p}$ vektorinė sandauga: $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Šios vektorinės sandaugos komponentės Dekarto koordinačių sistemoje yra $L_x = yp_z - zp_y$, $L_y = zp_x - xp_z$ ir $L_z = xp_y - yp_x$. Pakeitę $\mathbf{p}$ komponentes atitinkamais operatoriais (3.1.16), išvedame judesio kiekio momento operatoriaus $\hat{\mathbf{L}}$ komponentių išraiškas:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

Šie trys operatoriai nekomutuoja tarpusavyje:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y. \quad (3.1.19)$$

Todėl, tiksliai apibrėžus kurią nors judesio kiekio momento komponentę (pvz., L_z), kitos dvi komponentės (L_x ir L_y) tampa neapibrėžtos, išskyrus tą atvejį, kai judesio kiekio momentas lygus nuliui.

Nesunku įsitikinti, kad tuo atveju, kai $U(\mathbf{r})$ priklauso tik nuo vektoriaus $\mathbf{r}$ modulio r (t. y. kai dalelė juda centriniame jėgų lauke), kiekvienas iš trijų operatorių $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ ir $\hat{L}_z$ (taigi, ir judesio kiekio momento operatorius $\hat{\mathbf{L}}$) komutuoja su hamiltoniano operatoriumi (3.1.6). Vadinasi, kai dalelė juda centriniame jėgų lauke, judesio kiekio momento operatorius ir bet kuri viena jo projekcija yra judėjimo integralas (žr. 3.1.2 poskyrį). Šių operatorių tikrinės funkcijos – tai sferinės harmonikos, kurios bus apibrėžtos 3.2.1 poskyryje.

Nuostoviajame potencialiniame lauke judančios dalelės energijos operatorių galima gauti pasinaudojus tos dalelės pilnosios banginės funkcijos bendrąja išraiška (2.1.2) (atskiruoju atveju, kai potencialinė energija lygi nuliui, galioja (3.1.14a)). Diferencijuojant šią išraišką laiko atžvilgiu, matome:

¹ Klasikinėje mechanikoje Hamiltono funkcija taip pat dažnai vadinama hamiltonianu.

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi. \quad (3.1.20)$$

Akivaizdu, kad tai yra operatoriaus $-(\hbar/i) \cdot \partial/\partial t$ tikrinių verčių lygtis. Kadangi šio operatoriaus tikrinės vertės sutampa su energijos vertėmis, tai galima teigti, kad tai yra energijos operatorius:

$$\hat{E} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}. \quad (3.1.21)$$

Ši energijos operatoriaus išraiška galioja ne vien nuostoviajame potencialiniame lauke judančiai dalelei, bet ir daugelio dalelių sistemoms.

3.1.4. Lyginumas. Lyginumo tvermės dėsnis

Izoliuotos sistemos hamiltonianas (2.1.11) nepasikeičia pakeitus visų dalelių koordinačių ženklus. Tokia koordinačių transformacija vadinama **koordinačių inversija**:

$$x_i \rightarrow -x_i; \quad y_i \rightarrow -y_i; \quad z_i \rightarrow -z_i$$

(Dekarto koordinačių sistemoje) arba

$$r_i \rightarrow r_i; \quad \theta_i \rightarrow \pi - \theta_i; \quad \phi_i \rightarrow \phi_i + \pi$$

(sferinėje koordinačių sistemoje); čia (x_i, y_i, z_i) arba (r_i, θ_i, ϕ_i) yra i -tosios dalelės koordinačių rinkinys. Minėtoji hamiltoniano savybė vadinama **simetrija inversijos atžvilgiu** arba **invariantiškumu inversijos atžvilgiu**. Pirmasis hamiltoniano dėmuo (kinetinės energijos operatorius) nepasikeičia todėl, kad jis priklauso tik nuo antrųjų išvestinių koordinačių atžvilgiu, o antrasis dėmuo (potencinė energija) nepasikeičia todėl, kad jis priklauso tik nuo atstumų tarp dalelių, kurie nekinta inversijos atveju.

Bet kurio operatoriaus, kuriam būdinga simetrija inversijos atžvilgiu, tikrines funkcijas galima apibrėžti taip, kad kiekviena tikrinė funkcija būtų lyginė arba nelyginė inversijos atžvilgiu (**lyginė funkcija** nesikeičia inversijos atveju, o **nelyginės funkcijos** realiosios ir menamosios dalių ženklai pasikeičia, tačiau jų moduliai nepasikeičia). Kalbant apie sistemos kvantinių būsenų bangines funkcijas, tą patį teiginį galima suformuluoti taip: jeigu sistemos hamiltonianui būdinga simetrija inversijos atžvilgiu, tada kiekvieną kvantinę būseną atitinkanti banginė funkcija yra lyginė arba nelyginė (t. y. turi apibrėžtą lyginumą). Toliau pateiktas šio teiginio įrodymas.

Jeigu sistemos hamiltonianas yra simetriškas inversijos atžvilgiu, tada kiekvienos kvantinės būsenos sistemos savybės taip pat turi būti simetriškos inversijos atžvilgiu. Tai reiškia, kad tikimybės tankis turi būti simetriškas inversijos atžvilgiu. Vienos dalelės atveju šis teiginys užrašomas taip:

$$|\psi(x, y, z)|^2 = |\psi(-x, -y, -z)|^2, \quad (3.1.22a)$$

o jeigu naudojama sferinė koordinačių sistema,

$$|\psi(r, \pi - \theta, \pi + \phi)|^2 = |\psi(r, \theta, \phi)|^2. \quad (3.1.22b)$$

Iš (3.1.22a) išplaukia:

$$|\psi(x, y, z)| = |\psi(-x, -y, -z)|.$$

Tačiau dvi kompleksinės funkcijos ψ_1 ir ψ_2 , kurių moduliai tapačiai sutampa, gali skirtis tik pastoviu kompleksiniu daugikliu $e^{i\alpha}$:

$$\psi_1 = e^{i\alpha} \psi_2.$$

Todėl $\psi(-x, -y, -z) = e^{i\alpha} \psi(x, y, z)$. Šiuo atveju daugiklis $e^{i\alpha}$ nusako inversijos operaciją. Du kartus atlikus inversijos operaciją, sistema grįžta į pradinę padėtį. Kadangi po inversijos sistemos būseną yra visiškai neatskiriama nuo jos būsenos prieš inversiją, tai antrosios inversijos operacijos poveikis banginei funkcijai turi būti toks pat kaip ir pirmosios, t. y. turi pasireikšti tokiu pačiu daugikliu $e^{i\alpha}$. Vadinasi,

$$e^{i\alpha} \psi(-x, -y, -z) = e^{2i\alpha} \psi(x, y, z) = \psi(x, y, z).$$

Tai reiškia, kad $e^{2i\alpha} = 1$, t. y. $e^{i\alpha} = \pm 1$ ir $e^{i\alpha} \psi(x, y, z) = \pm \psi(x, y, z)$. Taigi,

$$\psi(-x, -y, -z) = \pm \psi(x, y, z); \quad (3.1.23)$$

tai ir reikėjo įrodyti.

Izoliuotų kvantinių sistemų banginių funkcijų lyginumas nepriklauso nuo laiko. Siekdami įrodyti šią savybę, tarkime, kad sistemos banginė funkcija $\Psi(x, y, z, t)$ yra nenuostoviosios Šrėdingerio lygties (2.1.1) sprendinys ir kad laiko momentu t ta funkcija yra lyginė. Nustatysime šios funkcijos lyginumą kitu laiko momentu $t + \tau$. Išreiškiame funkciją $\Psi(x, y, z, t + \tau)$ Teiloro eilute:

$$\Psi(t + \tau) = \Psi(t) + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \tau + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \tau^2 + \dots$$

Nagrinėkime pirmuosius du šio skleidinio dėmenis:

$$\Psi(t + \tau) \approx \Psi(t) + \frac{\partial \Psi}{\partial t} \tau.$$

Funkcija $\Psi(t)$ yra lyginė pagal prielaidą. Funkcija $\partial \Psi / \partial t$ gaunama paveikus funkciją $\Psi(t)$ hamiltoniano operatoriumi (nenuostovioji Šrėdingerio lygtis):

$$\hat{H}\Psi(t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (3.1.24)$$

Paveikus simetrišku inversijos atžvilgiu (t. y. „lyginiu“) operatoriumi lyginę funkciją, gaunama lyginė funkcija, o paveikus tokiu operatoriumi nelyginę funkciją, gaunama nelyginė funkcija. Kadangi funkcija $\Psi(t)$ ir hamiltonianas $\hat{H}$ yra lyginiai, tai iš (3.1.24) išplaukia, kad funkcija $\partial \Psi / \partial t$ taip pat yra lyginė. Kadangi dviejų lyginių funkcijų suma yra lyginė funkcija, tai funkcija $\Psi(t) + \partial(\Psi / \partial t) \tau$ taip pat yra lyginė. Vadinasi, jeigu izoliuotos sistemos banginė funkcija yra lyginė laiko momentu t , tai ji lieka lyginė ir bet kuriuo vėlesniu laiko momentu $t + \tau$. Analogiškai įrodoma, kad, jeigu banginė funkcija tam tikru laiko momentu yra nelyginė, tai ji ir lieka nelyginė.

Taigi, banginės funkcijos lyginumas yra judėjimo integralas (tvarus dydis). Kaip ir kitus judėjimo integralus (žr. 3.1.2 poskyrį), lyginumą atitinka operatorius, kuris komutuoja su hamiltonianu. Šis operatorius – tai inversijos operatorius, kuris apibrėžiamas šitaip:

$$\hat{\Pi}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}). \quad (3.1.25)$$

Iš (3.1.23) išplaukia, kad sistemos, kurios hamiltonianas yra lyginis, banginės funkcijos atitinka šią lygtį:

$$\hat{\Pi}\psi(\mathbf{r}) = \pm \psi(\mathbf{r}). \quad (3.1.26)$$

Akivaizdu, kad tai yra operatoriaus $\hat{\Pi}$ tikrinių verčių lygtis. Vadinasi, inversijos operatorius $\hat{\Pi}$ turi dvi tikrines vertes: tikrinę vertę $+1$ atitinka lyginės banginės funkcijos, o tikrinę vertę -1 atitinka nelyginės tikrinės funkcijos. Šios dvi vertės yra būsenos **lyginumo** kiekybinės išraiškos.

3.1.5. Neapibrėžtumų sąryšiai

Koordinatės ir judesio kiekio operatoriai (3.1.13) ir (3.1.16) nekomutuoja:

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \quad (3.1.27)$$

(tokie patys sąryšiai gaunami ir kitoms dviem Dekarto koordinatėms). Todėl, vienu metu matuojant šiuos dydžius, gaunamos vertės, išsibarsčiusios apie vidurkius. Apskaičiavę vidutinius kvadratinus nuokrypius $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ ir $\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle$ pagal bendrąją vidurkio išraišką (3.1.11), gautume standartinių nuokrypių sąryšį (1.13.3). Taigi, Heizenbergo nelygybė išplaukia iš kvantinės mechanikos postulatų. Apskritai bet kuriems dviem dydžiams L ir M , kurių operatorių komutatorius yra $\hat{K}$, galioja neapibrėžtumų sąryšis

$$\Delta L \cdot \Delta M \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{K} \rangle|; \quad (3.1.28)$$

čia ΔL ir ΔM yra dydžių L ir M neapibrėžtumai (standartiniai nuokrypiai), o $\langle \hat{K} \rangle$ yra $\hat{K}$ vidurkis.

Pasinaudojus (3.1.28), galima išvesti ir energijos bei laiko neapibrėžtumų sąryšį. Energijos operatoriaus (3.1.21) ir laiko t komutatorius yra lygus

$$[\hat{E}, t] = -\frac{\hbar}{i}. \quad (3.1.29)$$

Vadinasi, atitinkamas neapibrėžtumų sąryšis yra

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Nors šio sąryšio matematinis pavidalas yra toks pat kaip koordinatės ir judesio kiekio neapibrėžtumų sąryšio (1.13.3), tačiau jo prasmė yra visiškai kitokia. Tiesiogiai matuojama ne pilnutinė būsenos energija, o energijos pokytis dėl kvantinio šuolio iš vieno energijos lygmens E į kitą energijos lygmenį E' . Be to, laikas t neturi pastovaus vidurkio, kurio atžvilgiu būtų galima apskaičiuoti standartinį nuokrypį Δt . Todėl, norint suteikti šiam sąryšiui fizikinę prasmę, energijos lygmens neapibrėžtumą ΔE reikia pakeisti dviejų lygmenų E ir E' , kurie dalyvauja duotajame kvantiniame šuolyje, skirtumo neapibrėžtumu $\Delta(E - E')$, o laiko neapibrėžtumą Δt reikia laikyti laiko momento, kai sistema buvo „užfiksuota“ lygmenyje E , ir laiko momento, kai sistema atsidūrė lygmenyje E' , skirtumo neapibrėžtumu. Bendruoju atveju dviejų energijos lygmenų skirtumo neapibrėžtumas yra didesnis už kiekvieno iš jų neapibrėžtumą. Šis faktas apytiksliai

įskaitomas padauginus pastarosios nelygybės dešiniąją pusę iš 2. Taigi, energijos ir laiko neapibrėžtumų sąryšio galutinis pavidalas yra toks:

$$\Delta(E - E')\Delta t \geq \hbar. \quad (3.1.30)$$

Laiko neapibrėžtumas Δt vadinamas **vidutine gyvavimo trukme** atžvilgiu duotojo kvantinio šuolio, o jo prasmė – vidutinis laikas iki to šuolio. Jeigu $E > E'$, tada dydis $\Delta(E - E')$ nusako energijos, kuri išsiskiria šuolio iš lygmens E į lygmenį E' metu, verčių išsibarstymo didumą. Dėl šio išsibarstymo šuolio metu išspinduliuojamo fotono energija nėra tiksliai apibrėžta, o jos vertės yra pasiskirsčiusios aplink tam tikrą vidutinę vertę. Todėl atomų spinduliuotės spektro linijos turi tam tikrą **natūralųjį plotį** (spinduliuotės spektro linijos forma bus aptariama 5.2.3 poskyryje).

Iš (3.1.30) išplaukia: kuo trumpiau sistema išbūna duotajame energijos lygmenyje, tuo didesnis to lygmens neapibrėžtumas. Vaizdžiai kalbant, nestabilios būsenos energijos lygmuo yra „išplitęs“, ir šis išplitimas yra tuo didesnis, kuo nestabilesnė ta būsena. Pagrindiniame (žemiausiame) lygmenyje sistema gali būti neribotai ilgai, todėl pagrindinis lygmuo nėra išplitęs: jo energija apibrėžta absoliučiai tiksliai.

3.1.6*. Operatorių ir banginių funkcijų matricinės išraiškos

Kai kurių dydžių operatorių neįmanoma išreikšti erdvinėmis koordinatėmis ir laiku arba diferencialiniais operatoriais, kurie veikia erdvines koordinates ir laiką, nes jie neturi klasikinio atitikmens, kuris būtų išreiškiamas erdvinėmis koordinatėmis, judesio kiekio komponentėmis ir laiku. Tokio dydžio pavyzdys – elektrono, protono, neutrono, fotono ir kitų dalelių sukiny (sukiny – tai dalelės vidinis judesio kiekio momentas, kuris nėra susijęs su dalelių mechaniniu sukimusi). Sukinio operatoriaus neįmanoma išreikšti erdvinėmis koordinatėmis arba jų išvestinėmis. Matematinio pavidalu užrašant tokius operatorius ir jų tikrines funkcijas, naudojamos operatorių ir funkcijų matricinės išraiškos. Operatoriaus $\hat{A}$ **matricos elementu** vadinamas dydis

$$A_{kn} = \int \psi_k^* \hat{A} \psi_n dV; \quad (3.1.31)$$

čia ψ_k ($k = 1, 2, \dots$) ir ψ_n ($n = 1, 2, \dots$) yra tam tikro Hermito operatoriaus $\hat{B}$ (pvz., hamiltoniano) tikrinės funkcijos. Dydžių (3.1.31) visuma sudaro vadinamąją **operatoriaus $\hat{A}$ matricą operatoriaus $\hat{B}$ tikrinių funkcijų bazėje** arba trumpiau – **operatoriaus $\hat{A}$ $\hat{B}$ -atvaizdą**. Pvz., elektrono, neutrono arba protono sukinio x ir y komponentių operatorių matricos sukinio z komponentės tikrinių funkcijų bazėje – tai Paulio matricos (3.3.35), padaugintos iš $\hbar/2$. Palyginus operatoriaus matricos elemento apibrėžtį (3.1.31) su operatoriaus vidurkio išraiška (3.1.11), akivaizdu, kad operatoriaus $\hat{A}$ vidurkis, kai sistemos būseną nusako tikrinė funkcija Ψ_n , yra lygus matricos elementui A_{nn} :

$$\langle \hat{A} \rangle_n \equiv A_{nn}. \quad (3.1.32)$$

3.1.1 poskyryje buvo minėta, kad dydžiai, kurie apibrėžiami lygybe

$$C_k = \int \psi_k^* \Psi dV, \quad (3.1.33)$$

yra banginės funkcijos Ψ skleidinio operatoriaus $\hat{B}$ tikrinėmis funkcijomis ψ_k koeficientai. Tų koeficientų visuma (skaičių stulpelis, „vektorius“) – tai **banginės funkcijos išraiška operatoriaus $\hat{B}$ tikrinių funkcijų bazėje** (arba **banginės funkcijos $\hat{B}$ -atvaizdas**). Taip išreikštos banginės funkcijos argumento vaidmenį atlieka operatoriaus $\hat{B}$ tikrinės vertės, o funkcijos verčių vaidmenį atlieka atitinkami koeficientai C_k . Pvz., 2 skyriuje buvo naudojamas **koordinatinis atvaizdas**: banginės funkcijos argumentai buvo dalelės Dekarto koordinatės x, y ir z , t. y. spindulys vektorius $\mathbf{r}$, kuris, kaip minėta 3.1.3 poskyryje, kartu yra ir spindulio vektoriaus operatoriaus tikrinė vertė.

Apskaičiuojant (3.1.31) ir (3.1.33) integralus, integruojama visoje bazinių funkcijų apibrėžimo srityje. Integravimo kintamųjų prasmė gali būti įvairi, priklausomai nuo tiriamosios sistemos ir nuo bazinio operatoriaus $\hat{B}$ prasmės. Kartais bazinio operatoriaus tikrinės vertės yra diskrečios (pvz., elektrono sukinio projekcija į bet kurią kryptį gali būti lygi tik dviem vertėms). Tada „integravimas“ reiškia sumavimą visų galimų bazinio operatoriaus tikrinių verčių atžvilgiu (pvz., žr. 3.3.6 ir 4.1 poskyrius, kur operuojama sukininėmis koordinatėmis).

Operatoriaus matrica to paties operatoriaus tikrinių funkcijų bazėje yra diagonalioji, o tos matricos diagonaliniai elementai yra lygūs to operatoriaus tikrinėms vertėms. Todėl operatoriaus tikrinių verčių ir tikrinių funkcijų radimo uždavinį galima suformuluoti kaip matricos diagonalizavimo uždavinį. Visas kvantinės mechanikos lygtis galima užrašyti taip, kad jose vietoj operatorių būtų naudojamos jų matricos tam tikro operatoriaus tikrinių funkcijų bazėje, o vietoj banginių funkcijų – jų skleidinių tomis tikrinėmis funkcijomis koeficientų stulpeliai. Tai yra vadinamoji matricinė kvantinės mechanikos formuluotė.

3.2. Centriname jėgų lauke judančios dalelės banginė funkcija ir kvantiniai skaičiai

3.2.1. Judesio kiekio momento ir jo projekcijos tikrinės vertės. Sferinės harmonikos

Dalelės, kuri juda centriname jėgų lauke (pvz., vandenilio atomo elektrono) nuostovioji Šrėdingerio lygtis yra šitokia:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi = 0; \quad (3.2.1)$$

čia r yra atstumas iki jėgos centro (pvz., iki atomo branduolio), $U(r)$ yra dalelės potencinė energija (pvz., (2.3.37)), o m yra dalelės masė (pvz., elektrono ir branduolio sistemos redukuotoji masė (1.10.9), kuri yra labai artima elektrono masei). Šią lygtį patogiau spręsti naudojant sferines koordinates (žr. 3.1 pav.), nes tada kintamieji r , ϕ ir θ atsiskiria. T. y. trijų argumentų funkciją $\psi(r, \theta, \phi)$ galima išreikšti radialiosios funkcijos $X(r)$ ir kampinės funkcijos $Y(\theta, \phi)$ sandauga:

$$\psi(r, \theta, \phi) = X(r)Y(\theta, \phi). \quad (3.2.2)$$

Išrašę funkcijos ψ išraišką (3.2.2) ir laplasiano ∇^2 išraišką (žr. B priedas, B.2 lentelė) į (3.2.1) lygtį, matome, kad funkcijos $X(r)$ ir $Y(\theta, \phi)$ yra šių diferencialinių lygčių tikrinės funkcijos:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dX}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] - \frac{\lambda}{r^2} \right\} X = 0, \quad (3.2.3a)$$

$$\hat{L}^2 Y = \lambda \hbar^2 Y; \quad (3.2.3b)$$

čia $\hat{L}^2$ yra dalelės judesio kiekio momento kvadrato operatorius:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (3.2.4)$$

(3.2.3a) ir (3.2.3b) lygtyse λ yra atskyrimo konstanta (ši konstanta taip vadinama todėl, kad ji naudojama radialiosios koordinatės r atskyrimui nuo kampinių koordinačių θ ir ϕ). (3.2.3b) lygtyje galima dar kartą atskirti kintamuosius. T. y. dviejų argumentų funkciją $Y(\theta, \phi)$ galima išreikšti dviejų vieno argumento funkcijų $P(\theta)$ ir $\Phi(\phi)$ sandauga:

$$Y(\theta, \phi) = P(\theta)\Phi(\phi). \quad (3.2.5)$$

Funkcijos $\Phi(\phi)$ ir $P(\theta)$ yra šių dviejų diferencialinių lygčių tikrinės funkcijos:

$$\hat{L}_z \Phi = \eta \hbar \Phi; \quad (3.2.6a)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{\eta^2}{\sin^2 \theta} \right) P = 0; \quad (3.2.6b)$$

čia $\hat{L}_z$ yra judesio kiekio momento projekcijos į z ašį operatorius:

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (3.2.7)$$

(3.2.6a) ir (3.2.6b) lygtyse η yra atskyrimo konstanta (ji naudojama kampinių koordinačių θ ir ϕ vienos nuo kitos atskyrimui).

Akivaizdu, kad (3.2.3b) ir (3.2.6a) yra operatorių $\hat{L}^2$ ir $\hat{L}_z$ tikrinių verčių lygtys (plg. su (3.1.5)), o šių operatorių tikrinės vertės yra atitinkamai $\lambda \hbar^2$ ir $\eta \hbar$. (3.2.6a,b) lygtys turi baigtinius, vienareikšmius ir tolydžius sprendinius tik tada, kai atskyrimo konstantos λ ir η atitinka šias sąlygas:

$$\lambda = l(l+1) \quad (l = 0, 1, 2, \dots), \quad (3.2.8)$$

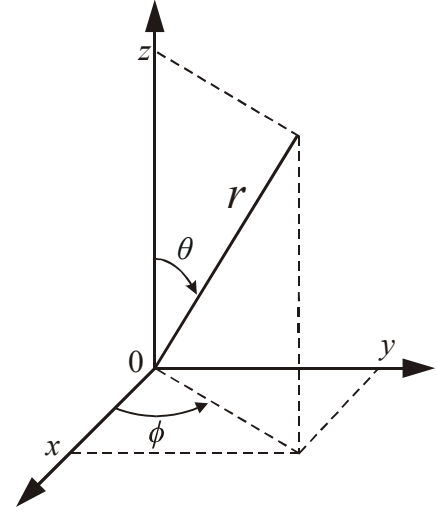
$$\eta = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (3.2.9)$$

Vadinasi, operatorių $\hat{L}^2$ ir $\hat{L}_z$ tikrinės vertės yra

$$|L|^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad (l = 0, 1, 2, \dots), \quad (3.2.10a)$$

$$L_z = m_l \hbar \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l), \quad (3.2.10b)$$

o atitinkamos tikrinės funkcijos yra šių lygčių sprendiniai:



3.1 pav. Sferinės koordinatės r , θ ir ϕ ir jų ryšys su Dekarto koordinatėmis x , y , z

$$\hat{L}^2 Y = l(l+1)\hbar^2 Y, \quad (3.2.11a)$$

$$\hat{L}_z \Phi = m_l \hbar \Phi. \quad (3.2.11b)$$

Aišku, kad pilnoji banginė funkcija (3.2.2) taip pat atitinka (3.2.11a) ir (3.2.11b) lygtis, nes operatorius $\hat{L}^2$ veikia tik daugiklį $Y(\theta, \phi)$, o operatorius $\hat{L}_z$ veikia tik daugiklį $\Phi(\phi)$ (žr. (3.2.5)). Taigi, dalelės, kuri juda centriniame jėgų lauke, hamiltoniano, judesio kiekio momento kvadrato ir judesio kiekio momento projekcijos operatoriai turi bendrą tikrinių funkcijų sistemą. Kaip minėta 3.1.2 poskyryje, tai reiškia, kad šie trys operatoriai komutuoja, o atitinkami trys dydžiai gali vienu metu turėti apibrėžtas vertes (tuo, kad šie operatoriai komutuoja, galima įsitikinti tiesiog apskaičiavus jų komutatorius (3.1.10)). Šie trys dydžiai visapusiškai nusako centriniame jėgų lauke judančios dalelės orbitinio judėjimo būseną.

Norint išvesti kampinių funkcijų $\Phi(\phi)$ ir $P(\theta)$ išraiškas, reikia išspręsti lygtis, kurios gaunamos įrašius atskyrimo konstantų vertes (3.2.8) ir (3.2.9) į (3.2.6a) ir (3.2.6b) lygtis:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \phi} = i m_l \Phi; \quad (3.2.12a)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \right] \cdot P = 0. \quad (3.2.12b)$$

(3.2.12a) lygties normuotieji sprendiniai yra

$$\Phi_{m_l}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m_l \phi} \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l). \quad (3.2.13)$$

(3.2.12b) lygties normuotieji sprendiniai yra

$$P_{l m_l}(\theta) = \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \frac{(l - m_l)!}{(l + m_l)!} \right]^{1/2} (-1)^{m_l} P_l^{m_l}(\cos \theta); \quad (3.2.14)$$

čia $P_l^{m_l}(\cos \theta)$ yra vadinamieji jungtiniai Ležandro daugianariai (angl. *associated Legendre polynomials*). (3.2.13) ir (3.2.14) funkcijų sandauga – tai kampinė banginė funkcija $Y_{l m_l}(\theta, \phi)$ (žr. (3.2.5)). Ši funkcija vadinama **sferine harmonika** arba **sferine funkcija**. Sferinės harmonikos lyginumas (kartu – ir pilnosios banginės funkcijos lyginumas) yra $(-1)^l$. Kelias mažiausias l vertes atitinkančių sferinių harmonikų išraiškos pateiktos 3.1 lentelėje. Kai kurios sferinių harmonikų savybės yra suformuluotos C priedo C.2 skyrelyje.

3.1 lentelė. Sferinės harmonikos

l	m_l	$Y_{l m_l}(\theta, \phi)$
0	0	$(1/4\pi)^{1/2}$
1	0	$(3/4\pi)^{1/2} \cos \theta$
1	± 1	$\mp (3/8\pi)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i \phi}$
2	0	$(5/16\pi)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1)$
2	± 1	$\mp (15/8\pi)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i \phi}$
2	± 2	$(15/32\pi)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i \phi}$
l	m_l	$Y_{l m_l}(\theta, \phi) = \left[\frac{(2l+1)(l-m_l)!}{4\pi(l+m_l)!} \right]^{1/2} (-1)^{m_l} P_l^{m_l}(\cos \theta) e^{i m_l \phi};$

čia $P_l^m(x)$ yra jungtinis Ležandro daugianaris^a:

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l$$

^a Kartais daugiklis $(-1)^{m_l}$ priskiriamas jungtiniam Ležandro daugianariui (pvz., žr. [11]).

Iš (3.2.10b) išplaukia, kad judesio kiekio momento projekcija į duotąją kryptį z gali įgyti tik kelias vertes, t. y. galimi tik keli kampai tarp judesio kiekio momento vektoriaus $\mathbf{L}$ ir išskirtosios krypties z . Pvz., kai $l=2$, kampas tarp $\mathbf{L}$ ir z ašies gali būti lygus penkioms vertėms. Šie penki kampai tarp vektoriaus $\mathbf{L}$ ir z ašies parodyti 3.2 pav. Be to, judesio kiekio momento vektoriaus projekcijos modulis visada yra mažesnis už to vektoriaus modulį, kuris lygus

$$|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)} \quad (l = 0, 1, 2, \dots), \quad (3.2.15)$$

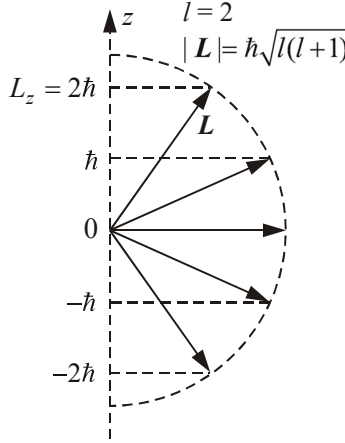
išskyrus tą atvejį, kai $|\mathbf{L}| = 0$ (t. y. $l = 0$). Taigi, judesio kiekio momento vektorius visada sudaro tam tikrą nenulinį kampą su išskirtąja kryptimi. Taip yra todėl, kad, apibrėžus judesio kiekio momento projekciją į z ašį L_z , kitos dvi Dekarto komponentės L_x ir L_y tampa neapibrėžtos (žr. 3.1.3 poskyrį). Tai galima išsivaizduoti šitaip. Jeigu L_z ir $|\mathbf{L}|$ vertės yra tiksliai apibrėžtos, tada judesio kiekio momento vektorius $\mathbf{L}$ precesuoja apie z ašį (žr. 3.3 pav.). Todėl komponentės L_x ir L_y nuolat kinta (yra neapibrėžtos). Reikia turėti omenyje, kad šiuo atveju „precesija“ tėra tik būdas vaizdiškai paaiškinti judesio kiekio momento komponentių L_x ir L_y neapibrėžtumą, vartojant klasikinės mechanikos sąvokas. Bet koks kvantinės mechanikos teiginis aiškinimas, kuris remiasi klasikinės fizikos sąvokomis (t. y. arba grynai dalelinėmis, arba grynai banginėmis), yra netikslus ir neišsamus.

Irašę L_z ir $|\mathbf{L}|$ vertes (3.2.10b) ir (3.2.15) į orbitinių magnetinio ir judesio kiekio momentų sąryšį (1.11.3), gauname, kad elektrono orbitinio magnetinio momento projekcija į bet kurią laisvai pasirinktą kryptį gali būti lygi tik šioms vertėms:

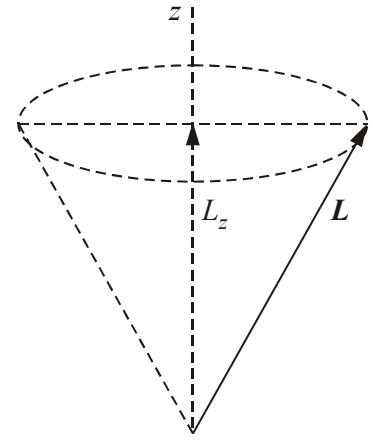
$$\mu_z = -m_l \mu_B \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l), \quad (3.2.16a)$$

o orbitinio magnetinio momento modulis – tik šioms vertėms:

$$\mu = \mu_B \sqrt{l(l+1)}. \quad (3.2.16b)$$



3.2 pav. Galimi kampai tarp judesio kiekio momento ir išskirtosios krypties



3.3 pav. Judesio kiekio momento vektoriaus precesija aplink išskirtąją kryptį

3.2.2. Radialiosios lygties pakeitimas vienmačio judėjimo potencialiniame lauke lygtimi

Radialiąją lygtį (3.2.3a) užrašysime vienmatės nuostoviosios Šrėdingerio lygties (2.3.1) pavidalu. Tam apibrėžiame naują radialiąją funkciją $\xi(r)$:

$$X(r) \equiv \frac{\xi(r)}{r}. \quad (3.2.17)$$

Irašę (3.2.17) reiškinių pirmosios ir antrosios išvestinių išraiškas bei atskyrimo konstantos λ išraišką (3.2.8) į radialiąją lygtį (3.2.3a), išvedame lygtį funkcijos $\xi(r)$ atžvilgiu:

$$\frac{d^2 \xi}{dr^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left[U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \right] \xi. \quad (3.2.18)$$

Ši lygtis savo pavidalu sutampa su vienmačio judėjimo potencialiniame jėgų lauke Šrėdingerio lygtimi (2.3.1), kurioje potencinės energijos vaidmenį atlieka funkcija

$$U_l(r) \equiv U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} = U(r) + \frac{|\mathbf{L}_l|^2}{2mr^2} \quad (l = 0, 1, 2, \dots); \quad (3.2.19)$$

čia $|\mathbf{L}_l|^2$ yra judesio kiekio momento kvadrato vertė (3.2.10a), kuri atitinka duotąją skaičiaus l vertę. Funkcija (3.2.19) vadinama dalelės **efektine potencine energija**. Antrasis dėmuo efektinės potencinės energijos išraiškoje (3.2.19) – tai klasikinė apskrita orbita judančios dalelės kinetinės energijos išraiška: $W = L^2/(2mr^2)$, kur L yra dalelės judesio kiekio momentas (šią išraišką galima gauti pasinaudojus klasikinėmis judesio kiekio momento ir kinetinės energijos išraiškomis (1.10.3b) ir (1.10.5)). Šis dėmuo atspindi išcentrinę jėgą, kuri „stumia“ dalelę su nenuliniu judesio kiekio momentu ($l \neq 0$) tolyn nuo koordinatų pradžios taško $r = 0$.

Taigi, centriniam jėgų lauke judančios dalelės banginė funkcija gaunama sudauginus 3.2.1 poskyryje apibrėžtą sferinę harmoniką ir radialiąją funkciją (3.2.17), kur $\xi(r)$ yra vienmatės Šrėdingerio lygties (3.2.18) sprendinys. Šis teiginys galioja esant *bet kokio pavidalo* potencinei energijai $U(r)$ ¹.

¹ Apskritai bet kokio skaliarinio diferencialinio operatoriaus, kuriam yra būdinga simetrija posūkio atžvilgiu, pilnąją tikrinių funkcijų sistemą galima apibrėžti taip, kad kiekviena tikrinė funkcija būtų judesio kiekio momento kvadrato ir jo projekcijos operatorių tikrinė funkcija, t. y. kad jos kampinė dalis būtų sferinė harmonika.

Funkcijos $U(r)$ pavidalas lemia tik banginės funkcijos radialiosios dalies $X(r)$ pavidalą ir energijos lygmenis. Kadangi banginė funkcija turi neartėti į begalybę taške $r = 0$, tai iš radialiosios dalies išraiškos (3.2.17) išplaukia, kad funkcija $\xi(r)$ turi būti lygi nuliui taške $r = 0$:

$$\xi(0) = 0. \quad (3.2.20)$$

Tai yra viena iš dviejų kraštinių sąlygų, kurias turi atitikti (3.2.18) lygties sprendinys. Antroji kraštinė sąlyga priklauso nuo $U(r)$ pavidalo. Įvairių kvantinių sistemų modeliuose yra tokio pavidalo potencinės energijos priklausomybių nuo koordinatės:

- Begalinio gylio sferinė potencinio duobė:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{kai } r < R; \\ \infty, & \text{kai } r > R; \end{cases} \quad (3.2.21)$$

čia R yra potencinio duobės spindulys. Pvz., tokio pavidalo funkciją galima naudoti skaičiuojant branduolio protono arba neutrono žemiausius energijos lygmenis, kai yra taikomas sluoksninis branduolio modelis (šis modelis bus aptariamas 7.4.3 poskyryje).

- Sferinis harmoninis osciliatorius:

$$U(r) = \frac{1}{2}kr^2; \quad (3.2.22)$$

čia r yra dalelės nuokrypis nuo pusiausvyros padėties. Tokią funkciją galima naudoti skaičiuojant molekulės arba kristalo atomų virpėjimo energijos lygmenis, kai atomų nuokrypiai nuo pusiausvyros taškų yra maži.

- Taškinio krūvio $+Ze$ elektriniame lauke judantis elektronas (t. y. vandeniliškasis atomas):

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}. \quad (3.2.23)$$

Šrėdingerio lygties sprendimas pirmaisiais dviem atvejais (funkcijos (3.2.21) ir (3.2.22)) yra aprašytas, pvz., [7] knygoje. Smulkiau aptarsime tik trečiąjį atvejį, kurį atitinka funkcija (3.2.23).

3.2.3*. Vandeniliškojo atomo radialioji banginė funkcija ir energijos lygmenys

Kai tiriamoji sistema yra elektronas, kuris juda taškinio krūvio $+Ze$ elektriniame lauke (3.2.23), efektinė potencinė energija (3.2.19) yra lygi

$$U_l(r) \equiv -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} + \frac{|L_l|^2}{2mr^2} \quad (l = 0, 1, 2, \dots). \quad (3.2.24)$$

Funkcija $U_l(r)$ yra pavaizduota 3.4 pav. esant trimis skaičiaus l vertėms ($l = 0, 1, 2$). Kai $l > 0$, ši funkcija savo pavidalu yra panaši į 2.5a pav. pavaizduotą vienmatės potencinio duobės potencinę energiją, kuri buvo aptarta 2.3.1 poskyryje. Pagrindinė išvada yra ta pati kaip ir vienmatės potencinio duobės atveju: kai $E < 0$, elektrono energija E gali įgyti tik diskrečias vertes. Taip yra dėl to, kad, kai $E < 0$, egzistuoja dvi sąlygos, kurias turi atitikti funkcija $\xi(r)$: ji turi artėti į nulį, kai $r \rightarrow 0$ (kraštinė sąlyga (3.2.20)), ir kartu ji turi artėti į nulį, kai $r \rightarrow \infty$ (nes tikimybės tankio integralas visa erdve turi būti lygus 1). Kaip minėta 2.3 poskyryje, banginė funkcija gali atitikti abi šias sąlygas vienu metu, tik esant tam tikroms diskrečioms energijos E vertėms. Kai $E > 0$, funkcija $\xi(r)$ turi atitikti tik vieną sąlygą (3.2.20). Tokia funkcija $\xi(r)$ egzistuoja esant bet kokiai teigiamai E vertei. Taigi, kai $E > 0$, elektrono energija gali būti bet kokia (elektronas yra laisvas).

Atlikus radialiosios lygties (3.2.18) analizę, kai $U(r)$ yra elektrono potencinė energija taškinio elektros krūvio $+Ze$ lauke (3.2.23), gaunamos tokios vandeniliškojo atomo energijos lygmenų vertės:

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \approx -\frac{Z^2}{n^2} \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13,6 \text{ eV} \quad (n = 1, 2, 3, \dots); \quad (3.2.25)$$

čia a_0 yra **pirmasis Boro spindulys**:

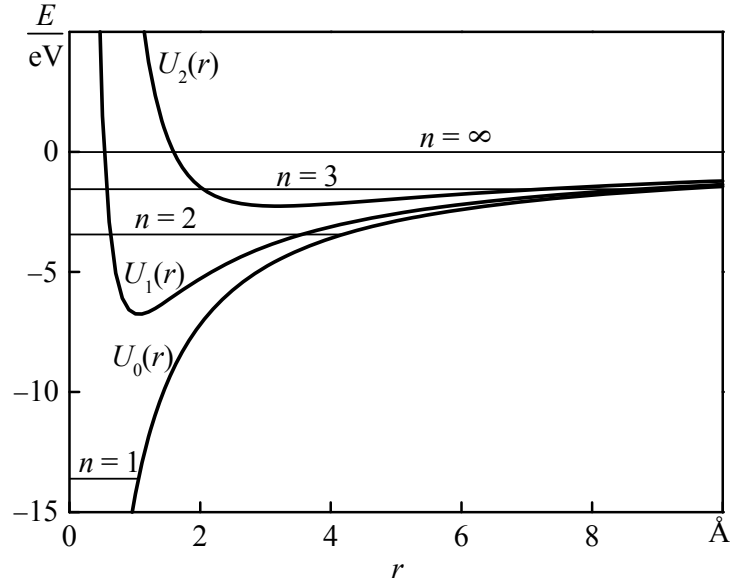
$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (3.2.26)$$

((3.2.25) antroji lygybė yra apytikslė, nes redukuotoji masė m nėra tiksliai lygi elektrono masei m_e). Taigi, nors į radialiąją lygtį (3.2.18) įeina skaičius l , tačiau jos tikrinės vertės nepriklauso nuo l . Be to, gaunama, kad skaičius l turi būti mažesnis už n :

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (3.2.27)$$

Trys žemiausieji energijos lygmenys ($n = 1, 2, 3$) yra pavaizduoti 3.4 pav. Iš šio grafiko tampa aišku, kodėl $n > l$. Didėjant l , efektinės potencialo duobės gylis mažėja, todėl dalis žemiausių energijos lygmenų (3.2.25) atsiduria žemiau negu efektinės potencinės energijos minimumas. Kai $l > 0$, funkcijos $U_l(r)$ mažiausioji vertė yra tarp energijos lygmenų E_l ir E_{l+1} (žr. 3.4 pav.). Vadinasi, elektrono būsenos, kai $n = 1, 2, \dots, l$, yra uždraustos (t. p. žr. 2.7 pav. aptarimą 2.3 poskyryje).

Taškinio elektros krūvio $+Ze$ lauke judančio elektrono banginės funkcijos radialioji dalis (radialiosios lygties (3.2.3a) normuota tikrinė funkcija, kuri atitinka tikrinę vertę (3.2.25)) yra (pagal [11])



3.4 pav. Vandenilio atomo efektinė potencinė energija, kai $l = 0, 1, 2$, ir trys žemiausieji vandenilio atomo energijos lygmenys

$$X(r) \equiv X_{nl}(r) = \left\{ \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) \cdot \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l Q_{n-l-1}^{(2l+1)}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right); \quad (3.2.28)$$

čia $Q_s^{(q)}$ yra vadinamieji apibendrintieji (arba jungtiniai) Lagero daugianariai (angl. *associated Laguerre polynomials*), kurie apibrėžiami šitaip:

$$Q_s^{(q)}(x) \equiv (-1)^q \frac{d^q}{dx^q} \left[e^x \frac{d^{q+s}}{dx^{q+s}} (e^{-x} x^{q+s}) \right]$$

(reiškinys laužtiniuose skliaustuose yra $q+s$ eilės Lagero daugianaris).

3.2.4. Vandeniliškojo atomo būsenų klasifikacija ir banginių funkcijų bendrasis pavidalas

Sveikieji skaičiai

$$n, l, m_l, \quad (3.2.29)$$

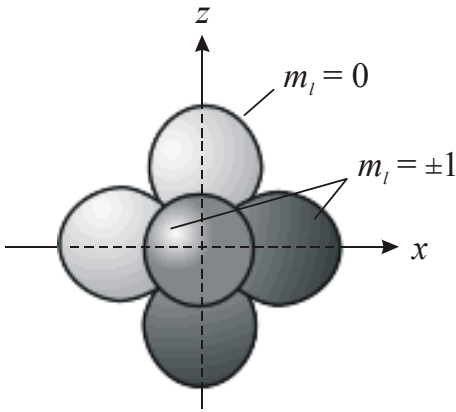
kurie nusako centriniam jėgų lauke judančios dalelės būseną, vadinami tos dalelės **kvantiniais skaičiais**. Skaičius n , kuris nusako energijos lygmenį (3.2.25), vadinamas **pagrindiniu kvantiniu skaičiumi**. Skaičius l , kuris nusako judesio kiekio momento modulį (3.2.15), vadinamas **šalutiniu kvantiniu skaičiumi** arba **orbitiniu kvantiniu skaičiumi**, o skaičius m_l , kuris nusako orbitinio judesio kiekio momento ir orbitinio magnetinio momento projekcijas (3.2.10b) ir (3.2.16a), vadinamas **magnetiniu kvantiniu skaičiumi**¹.

Apibūdinant elektrono orbitinio judėjimo būseną atome, vietoj l verčių 0, 1, 2, 3, 4, ... vartojamos raidės s, p, d, f, g, ... Pvz., elektronas, kurio pagrindinis kvantinis skaičius yra $n = 2$, o šalutinis $l = 1$, vadinamas 2p elektronu.

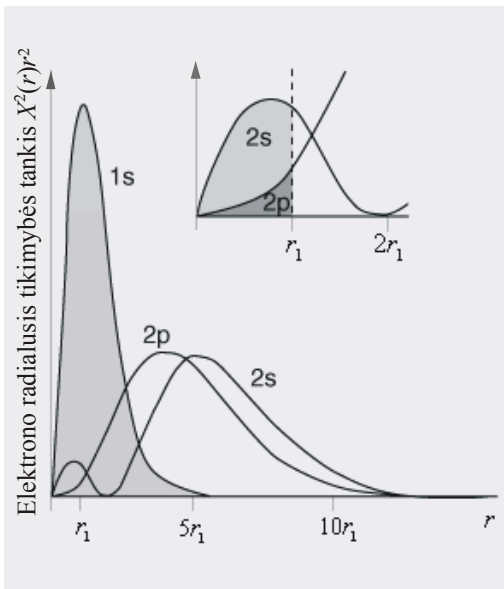
Ryškiausias skirtumas tarp kvantinio ir klasikinio požiūrio į elektrono orbitinį judesio kiekio momentą yra tas, kad kvantinė mechanika teigia, jog elektrono orbitinis judesio kiekio momentas gali būti lygus nuliui ($l = 0$). Pagal klasikinę judesio kiekio momento apibrėžtį (1.10.3a) tai turėtų reikšti, kad $r = 0$, t. y. kad s būsenos elektronas visą laiką juda išilgai tiesės, kuri eina per branduolį.

Kvantinių skaičių trejetą n, l, m_l atitinkanti banginė funkcija – tai sferinės harmonikos $Y_{lm_l}(\theta, \phi) = P_{lm_l}(\theta) \Phi_{m_l}(\phi)$ ir radialiosios funkcijos $X_{nl}(r)$ sandauga. Kaip matome šių funkcijų išraiškose (žr. 3.1 lentelę ir (3.2.28) formulę), bendruoju atveju jos yra gana sudėtingo pavidalo. Paprasčiausios yra s elektronų banginės funkcijos, nes jų kampinė funkcija $Y(\theta, \phi)$ yra lygi konstantai $1/(2\sqrt{\pi})$, t. y. šios banginės funkcijos yra sferiškai simetrinės ir lygios $X(r)/(2\sqrt{\pi})$. Pvz., 1s elektrono banginė funkcija yra

¹ Magnetinis kvantinis skaičius m_l dažniau rašomas be indekso „l“. Čia tas indeksas rašomas todėl, kad „m“ žymi elektrono masę.



3.5 pav. p elektronų erdvinio tikimybės tankio kampinė dalis $|Y(\theta, \phi)|^2$, atitinkanti tris kvantinio skaičiaus m_l vertes. $|Y(\theta, \phi)|^2$ vertę įvairiomis kryptimis nusako atstumai nuo koordinatų centro iki pavaizduotų paviršių



3.6 pav. 1s, 2s ir 2p elektronų radialieji tikimybės tankiai (r_1 yra pirmasis Boro spindulys). Viršuje parodyta 2s ir 2p elektronų erdvinių pasiskirstymų dalis, kuri yra viduje sferos su spinduliu r_1

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi r_1^3}} \exp\left(-\frac{r}{r_1}\right); \quad (3.2.30)$$

čia r_1 yra pirmasis Boro spindulys, padalytas iš branduolio krūvio skaičiaus Z ($r_1 = a_0 / Z$). Banginės funkcijos, kurios atitinka būsenas $l > 0$, nėra sferiškai simetrinės. Pvz., p elektronų ($l = 1$) kampinės funkcijos $Y(\theta, \phi)$, kurios atitinka tris galimas magnetinio kvantinio skaičiaus m_l vertes, yra trijų tarpusavyje statmenų „erdvinių aštuonetukų“ pavidalo (3.5 pav.). Taigi, šiuo atveju radialusis tikimybės tankis priklauso nuo krypties, t. y. nuo kampų θ ir ϕ (žr. 3.1 pav.).

Pagal banginės funkcijos statistinį aiškinimą (žr. 1.15 poskyrį) tikimybė dP aptikti 1s elektroną spindulio r nykstamojo storio dr sferiniame sluoksnyje yra lygi funkcijos (3.2.30) kvadrato ir to sluoksnio tūrio $4\pi r^2 dr$ sandaugai. Vadinasi, 1s elektrono radialusis tikimybės tankis lygus

$$\begin{aligned} \left(\frac{dP}{dr}\right)_{1s} &= \psi_{1s}^2(r) \cdot 4\pi r^2 = X_{1s}^2(r) \cdot r^2 = \\ &= \frac{4r^2}{r_1^3} \exp\left(-\frac{2r}{r_1}\right). \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

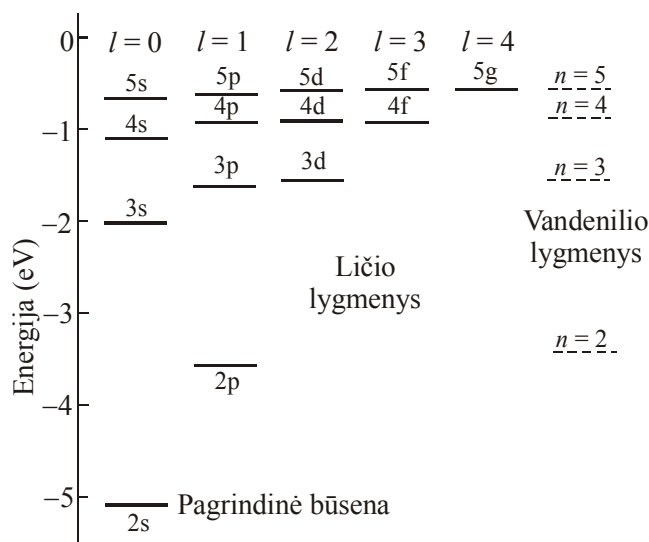
Funkcija $X^2(r)r^2$ nusako radialiojo tikimybės tankio vidurkį kampų θ ir ϕ atžvilgiu. Šios funkcijos pavidalas 1s, 2s ir 2p elektronams pavaizduotas 3.6 pav. Kaip matome, 1s elektrono radialusis tikimybės tankis yra didžiausias ties r_1 . Kitaip sakant, pirmasis Boro spindulys r_1 nusako tikimiausią atstumą tarp 1s elektrono ir vandenilio atomo branduolio. Be to, iš (3.2.31) išplaukia, kad vidutinis atstumas tarp 1s elektrono ir H atomo branduolio (t. y. vidutinė radialioji koordinatė $\langle r \rangle$) yra lygus $3r_1/2$.

3.2.5. Šarminių metalų atomų energijos lygmenys

Anksčiau pateiktą vandeniliškojo atomo analizę galima nesunkiai apibendrinti taikant ją šarminių metalų atomams. Mat šarminio metalo atomai turi vieną palyginti silpnai susijusį su branduoliu elektroną ir $Z - 1$ arčiau branduolio esančių elektronų, kurie susiję su branduoliu stipriau (daugiaelektroniai atomai bus smulkiau aptarti 4 skyriuje). Pastarieji elektronai pasireiškia kaip sferiškai simetris neigiamo erdvinio krūvio pasiskirstymas, kuris iš dalies ekranuoja teigiamąjį branduolio krūvį $+Ze$. Taigi, šie vidiniai elektronai modifikuoja išorinio elektrono potencinės energijos priklausomybę nuo radialiosios koordinatės $U(r)$. Todėl šarminio metalo atomo išorinio elektrono judėjimą nusako to paties pavidalo Šrėdingerio lygtis (3.2.1) kaip ir vandeniliškojo atomo atveju, tačiau su šiek tiek kitokia potencine energija $U(r)$. Šarminių metalų išorinio elektrono energijos lygmenys skiriasi nuo vandeniliškojo atomo energijos lygmenų (3.2.25) ir priklauso ne vien nuo pagrindinio kvantinio skaičiaus n , bet ir nuo šalutinio kvantinio skaičiaus l . Šią priklausomybę nuo l galima paaiškinti pasinaudojus 3.4 pav. ir 3.6 pav. 3.4 pav. matome, kad, esant pastoviam n ir didėjant l , didėja vidutinis atstumas tarp elektrono ir atomo branduolio. Taip yra todėl, kad elektronas daugiausia laiko praleidžia erdvės srityje, kurioje $E > U(r)$, o ši sritis tolsta nuo branduolio didėjant šalutiniam kvantiniam skaičiui l . Tą patį reiškinį iliustruoja ir 3.6 pav. Čia matome, kad 2s būsenos elektronas ilgiau laiko praleidžia arti branduolio (kur vidinių elektronų ekranuojamas poveikis yra mažesnis) negu 2p būsenos elektronas. Vadinasi, 2s būsenos elektroną veikia didesnis teigia-

mas krūvis negu 2p būsenos, todėl 2s būsenos energija yra mažesnė negu 2p būsenos energija. Taip pat galima įrodyti, kad 3s elektronų energija mažesnė už 3p elektronų energiją, o pastaroji mažesnė už 3d elektronų energiją ir t. t. Taigi, dėl išorinio elektrono skirtingas būsenas atitinkančių banginių funkcijų skirtingo erdvinio persiklojimo su vidinių elektronų banginėmis funkcijomis kiekvienas išorinio elektrono energijos lygmuo skyla į n lygmenų, kurie atitinka skirtingas šalutinio kvantinio skaičiaus vertes (3.2.27). 3.7 pav. pavaizduota ličio atomo energijos lygmenų diagrama. 3.7 pav. dešinėje parodyti vandenilio atomo energijos lygmenys, kurie apskaičiuoti pagal (3.2.25) su $Z = 1$. Kaip matome, ličio atomo 2s ir 2p lygmenys yra žemiau už vandenilio atomo lygmenį $n = 2$. Lygmenys 3s, 3p ir 3d taip pat yra žemiau už vandenilio lygmenį $n = 3$, tačiau skirtumas yra mažesnis negu lygmenų su $n = 2$. Ličio išorinio elektrono energijos lygmenys, kurie atitinka $n > 4$, beveik sutampa su atitinkamais vandenilio atomo lygmenimis. Taip yra dėl to, kad, esant didelėms n vertėms, išorinis elektronas yra palyginti toli nuo branduolio ir kitų elektronų, todėl branduolio ir vidinių elektronų poveikis išoriniam elektronui yra beveik toks pat, kaip teigiamo taškinio krūvio $+e$.

Čia aprašytas ekranavimo reiškiny yra svarbus, aiškinant periodinę elementų sistemą (ji bus aptarta 4.5 poskyryje).



3.7 pav. Ličio (Li) atomo valentinio elektrono energijos lygmenų diagrama

3.3. Sukinys. Elektronų sukinio ir orbitos sąveika. Momentų sudėtis

3.3.1. Sukinio kvantiniai skaičiai

Anksčiau apibrėžti kvantiniai skaičiai n , l ir m_l nėra pakankami nusakant elektrono būseną atome, nes elektronas turi ir vidinį judesio kiekio momentą (**sukinį**). Taip pat kaip elektrono orbitinio judesio kiekio momento modulis, kuris apibūdinamas orbitiniu kvantiniu skaičiumi l , elektrono sukinio modulis apibūdinamas **sukinio kvantiniu skaičiumi** s . Elektrono sukinio kvantinis skaičius visada lygus $1/2$:

$$s = \frac{1}{2}. \quad (3.3.1)$$

Sukinio modulis $|\mathbf{L}_s|$ susijęs su sukinio kvantiniu skaičiumi s taip pat kaip orbitinio judesio kiekio momento modulis $|\mathbf{L}|$ susijęs su orbitiniu kvantiniu skaičiumi l (žr. (3.2.15)):

$$|\mathbf{L}_s| = \hbar \sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar, \quad (3.3.2)$$

o sukinio projekcija į laisvai pasirinktą koordinačių z ašį išreiškiama sąryšiu, kuris analogiškas (3.2.10b):

$$L_{sz} = m_s \hbar \quad (m_s = \pm s = \pm 1/2). \quad (3.3.3)$$

Skaičius m_s vadinamas **sukinio magnetiniu kvantiniu skaičiumi**.

Atomo ir branduolio fizikoje sukinio kvantinis skaičius dažniausiai vadinamas tiesiog sukinium, o sukinio magnetinis kvantinis skaičius – tiesiog sukinio projekcija. Pvz., sakoma „elektrono sukinys lygus $1/2$ “ (nors tikroji vertė yra $\hbar\sqrt{3}/2$), „elektrono sukinio projekcija lygi $\pm 1/2$ “ ir kt.

Su elektrono sukinium yra susijęs elektrono vidinis (sukininis) magnetinis momentas $\boldsymbol{\mu}_s$. Sukininių magnetinio ir judesio kiekio momentų santykis yra dukart didesnis negu orbitinių:

$$\boldsymbol{\mu}_s = -2\mu_B \frac{\mathbf{L}_s}{\hbar} \quad (3.3.4)$$

(plg. su (1.11.3)). Magnetinio momento ir atitinkamo judesio kiekio momento projekcijų į duotąją kryptį santykis yra vadinamas **giromagnetiniu santykiu**. Dydis, kuris yra priešingas elektrono giromagnetinio santykio vertei, išreikštai $\mu_B/\hbar$ vienetais, yra vadinamas elektrono **g faktoriumi**. Pagal (1.11.3) ir (3.3.4) elektrono orbitinis g faktorius lygus 1, o sukininis g faktorius lygus 2. Nereliatyvistinės kvantinės mechanikos požiūriu elektrono sukininis g faktorius turėtų būti tiksliai lygus 2, tačiau kvantinė elektrodinamika įrodo, kad laisvo elektrono sukininis g faktorius yra šiek tiek didesnis už 2 ir lygus 2,0023.

Sukininio magnetinio momento projekcijai ir moduliui galioja sąryšiai, kurie analogiški (3.2.16a) ir (3.2.16b), tačiau vietoj orbitinių kvantinių skaičių m_l ir l reikia vartoti atitinkamus sukinio kvantinius skaičius m_s ir s , o vietoj μ_B reikia vartoti $2\mu_B$:

$$\mu_{sz} = -2m_s\mu_B = \mp\mu_B \quad (m_s = \pm 1/2), \quad (3.3.5a)$$

$$|\mu_s| = 2\mu_B\sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3} \cdot \mu_B. \quad (3.3.5b)$$

Kaip ir kiti kvantiniai skaičiai, skaičius m_s nusako tam tikro operatoriaus – sukinio projekcijos operatoriaus – tikrinę vertę (ji lygi (3.3.3) reiškiniui). Tačiau pagrindinių dėsningumų, kurie susiję su elektrono sukiniu, supratimui pakanka anksčiau minėtų elektrono sukinio savybių, kurias išreiškia (3.3.1)–(3.3.5a,b) lygybės. Todėl sukinio operatoriaus ir jo banginių funkcijų aptarimą atidėsime iki 3.3.6 poskyrio.

Neatsižvelgiant į palyginti silpnas sąveikas, kurias lemia elektrono sukiny, komutatyviųjų operatorių rinkinį sudaro keturi minėti operatoriai: hamiltoniano operatorius (3.1.6), orbitinio judesio kiekio momento kvadrato operatorius (3.2.4), orbitinio judesio kiekio momento projekcijos operatorius (3.2.7) ir elektrono sukinio projekcijos operatorius. T. y. elektrono būseną atome visiškai nusako kvantiniai skaičiai

$$n, l, m_l, m_s. \quad (3.3.6)$$

Dvi būsenos, kurios skiriasi tik m_s vertėmis ($m_s = \pm 1/2$), aprašomos vienoda orbitine bangine funkcija (3.2.2).

Kvantinis skaičius m_l nusako kampą tarp orbitinio judesio kiekio momento vektoriaus $\mathbf{L}$ ir laisvai pasirinktos krypties, o kvantinis skaičius m_s nusako kampą tarp sukininio judesio kiekio momento vektoriaus $\mathbf{L}_s$ ir laisvai pasirinktos krypties, tačiau tie du kvantiniai skaičiai nieko nesako apie kampą tarp vektorių $\mathbf{L}$ ir $\mathbf{L}_s$. Atsižvelgus į sąveikas, kurias lemia elektrono sukiny, kampas tarp $\mathbf{L}$ ir $\mathbf{L}_s$ gali turėti įtakos elektrono energijai. Tokiu atveju kvantiniai skaičiai m_l ir m_s netinka apibrėžtos energijos elektrono būsenų klasifikavimui (tiksliau, orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų projekcijų operatoriai $\hat{L}_z$ ir $\hat{L}_{sz}$ nekomutuoja su hamiltonianu). Viena iš tokių sąveikų – tai vadinamoji sukinio ir orbitos sąveika.

3.3.2. Sukinio ir orbitos sąveikos potencinė energija

Sukinio ir orbitos sąveiką galima paaiškinti dviem būdais:

I būdas. Pereikime prie koordinačių sistemos, kuri susieta su judančiu elektronu. Šioje koordinačių sistemoje branduolys sukasi aplink elektroną. Kaip žinome iš elektrodinamikos, judantis krūvis sukuria magnetinį lauką. Šio „efektinio“ magnetinio lauko indukciją taške, kuriame yra elektronas, žymėsime $\mathbf{B}_{ef}$. Pagal Bio ir Savaro dėsnį r spindulio apskrita orbita greičiu $\mathbf{v}_{br}$ judantis taškinis elektros krūvis $+Ze$ orbitos centre sukuria magnetinį lauką, kurio magnetinė indukcija lygi

$$\mathbf{B}_{ef} = \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3} \mathbf{v}_{br} \times \mathbf{r} = -\frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3} \mathbf{v} \times \mathbf{r} \equiv \frac{\mu_0 Ze}{4\pi r^3} \mathbf{r} \times \mathbf{v}; \quad (3.3.7)$$

čia μ_0 yra magnetinė konstanta, vektorius $\mathbf{r}$ nukreiptas nuo branduolio link elektrono, $\mathbf{v}_{br}$ yra branduolio greičio vektorius atžvilgiu elektrono, o $\mathbf{v} = -\mathbf{v}_{br}$ yra elektrono greičio vektorius atžvilgiu branduolio (be to, užrašant trečiąją lygybę, pasinaudota tuo, kad dviejų vektorių vektorinė sandauga keičia ženklą sukeitus dauginamuosius vietomis). Šiame magnetiniame lauke elektrono sukininis magnetinis momentas $\boldsymbol{\mu}_s$ turi potencinę energiją

$$\Delta U = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{ef}. \quad (3.3.8)$$

Tai yra **sukinio ir orbitos sąveikos potencinė energija** (elektrono pilnutinės potencinės energijos $U(r)$ dalis). Įrašę (3.3.7) į (3.3.8), matome:

$$\Delta U = -\frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{Ze}{r^3} \boldsymbol{\mu}_s \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{v}). \quad (3.3.9)$$

II būdas. Yra žinoma, kad greičiu $\mathbf{v}$ judanti dalelė, kurios magnetinis momentas $\boldsymbol{\mu}_s$, turi dipolinį momentą

$$\mathbf{p}_e = \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \boldsymbol{\mu}_s; \quad (3.3.10)$$

čia c yra šviesos greitis, o $\mathbf{v} \times \boldsymbol{\mu}_s$ yra vektorių $\mathbf{v}$ ir $\boldsymbol{\mu}_s$ vektorinė sandauga, kurios modulis lygus $v \mu_s \sin(\mathbf{v}, \boldsymbol{\mu}_s)$, o kryptis statmena $\mathbf{v}$ ir $\boldsymbol{\mu}_s$. Branduolio elektriniame lauke dipolinis momentas $\mathbf{p}_e$ turi potencinę energiją

$$\Delta U = -\mathbf{p}_e \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}; \quad (3.3.11)$$

čia $\mathcal{E}$ yra branduolio elektrinio lauko stiprio vektorius, o $\mathbf{p}_e \cdot \mathcal{E}$ yra vektorių $\mathbf{p}_e$ ir $\mathcal{E}$ skaliarinė sandauga. Tai yra kita sukinio ir orbitos sąveikos energijos išraiška (plg. su (3.3.8)). Įrašę (3.3.10) į (3.3.11), gauname mišriąją (vektorinę-skaliarinę) trijų vektorių sandaugą:

$$\Delta U = -\frac{1}{c^2} \mathcal{E} \cdot (\mathbf{v} \times \boldsymbol{\mu}_s). \quad (3.3.12)$$

Iš vektorinės algebros žinoma, kad mišrioji sandauga nepasikeičia po vektorių ciklinio pertvarkymo, t. y.

$$\Delta U = -\frac{1}{c^2} \boldsymbol{\mu}_s \cdot (\mathcal{E} \times \mathbf{v}). \quad (3.3.13)$$

Pagal Kulono dėsnį elektrinio lauko stipris vandeniliškajame atome yra lygus

$$\mathcal{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze}{r^3} \mathbf{r}; \quad (3.3.14)$$

čia $\mathbf{r}$ yra elektrono spindulys vektorius atžvilgiu branduolio, o $r = |\mathbf{r}|$. Įrašę (3.3.14) į (3.3.13), išvedame:

$$\Delta U = -\frac{1}{c^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze}{r^3} \boldsymbol{\mu}_s \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{v}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{Ze}{r^3} \boldsymbol{\mu}_s \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{v});$$

čia pasinaudota tuo, kad šviesos greitis lygus $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$. Taigi, vėl gavome (3.3.9) formulę.

Kadangi $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$, kur $\mathbf{p}$ yra elektrono judesio kiekis, o m yra elektrono masė, tai (3.3.9) reiškinių galima užrašyti šitaip:

$$\Delta U = -\frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{Ze}{mr^3} \boldsymbol{\mu}_s \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}). \quad (3.3.15)$$

Įrašę (3.3.4) į (3.3.15) ir pasinaudoję tuo, kad $\mathbf{r} \times \mathbf{p} \equiv \mathbf{L}$, kur $\mathbf{L}$ yra orbitinis judesio kiekio momentas, matome:

$$\Delta U = \frac{\mu_0\mu_B}{h} \cdot \frac{Ze}{mr^3} \mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L}. \quad (3.3.16)$$

Šį reiškinių galima užrašyti šitaip:

$$\Delta U = U_{so}(r) \mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L} \equiv U_{so}(r) |\mathbf{L}_s| |\mathbf{L}| \cos(\mathbf{L}_s, \mathbf{L}); \quad (3.3.17)$$

čia U_{so} yra funkcija, kuri nusako sukinio ir orbitos sąveikos potencinės energijos priklausomybę nuo radialiosios koordinatės r . Atsižvelgus į reliatyvistinius efektus (Tomo precesija; angl. *Thomas precession*), jos išraiškoje atsiranda papildomas daugiklis $1/2$:

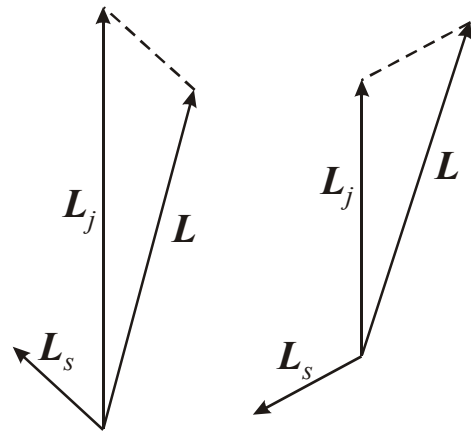
$$U_{so}(r) = \frac{\mu_0\mu_B}{2h} \cdot \frac{Ze}{mr^3}. \quad (3.3.18)$$

Iš (3.3.17) išplaukia, kad sukinio ir orbitos sąveikos potencinė energija ΔU yra proporcinga elektrono sukininio ir orbitinio judesio kiekio momentų modulių sandaugai ir kampo tarp jų kosinusui. Todėl ir pilnutinė elektrono energija (t. y. energijos lygmenys) priklauso nuo kampo tarp $\mathbf{L}_s$ ir $\mathbf{L}$.

Orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų vektorių suma

$$\mathbf{L}_j = \mathbf{L} + \mathbf{L}_s \quad (3.3.19)$$

nusako elektrono pilnutinį judesio kiekio momentą. Kadangi vektoriaus $\mathbf{L}_s$ modulis yra pastovus (žr. (3.3.2)), tai, uždavus vektoriaus $\mathbf{L}$ modulį, kampas tarp $\mathbf{L}$ ir $\mathbf{L}_s$ yra vienareikšmiškai susijęs su pilnutinio judesio kiekio momento $\mathbf{L}_j$ moduliu (žr. 3.8 pav.). Todėl teiginį apie elektrono energijos priklausomybę nuo minėtojo kampo galima suformuluoti šitaip: *esant duotiems pagrindiniam ir šalutiniam kvantiniams skaičiams, elektrono energija priklauso nuo pilnutinio judesio kiekio momento modulio.*



3.8 pav. Du galimi kampai tarp elektrono sukinio vektoriaus $\mathbf{L}_s$ ir elektrono orbitinio judesio kiekio momento vektoriaus $\mathbf{L}$ bei atitinkami elektrono pilnutinio judesio kiekio momento vektoriai $\mathbf{L}_j$

3.3.3. Elektronų pilnutinis judesio kiekio momentas

Pilnutinio judesio kiekio momento $\mathbf{L}_j$ modulį galima apskaičiuoti pasinaudojus šia bendrąja momentų sudėties taisykle: sudėjus du judesio kiekio momentus $\mathbf{L}_1$ ir $\mathbf{L}_2$, kurių moduliai lygūs

$$L_1 = \hbar\sqrt{l_1(l_1+1)} \quad \text{ir} \quad L_2 = \hbar\sqrt{l_2(l_2+1)},$$

suminio momento $\mathbf{L}_\Sigma = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$ modulio galimosios vertės yra

$$L_\Sigma = \hbar\sqrt{l_\Sigma(l_\Sigma+1)} \quad (l_\Sigma = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, l_1 + l_2). \quad (3.3.20)$$

Jeigu abu sudedamieji momentai turi apibrėžtas projekcijas į z ašį, tada suminio momento projekcija į z ašį yra lygi jų sumai:

$$L_{\Sigma z} = L_{1z} + L_{2z} = m_\Sigma \hbar \quad (m_\Sigma = m_1 + m_2); \quad (3.3.21)$$

čia kvantiniai skaičiai m_1 ir m_2 nusako momentų $\mathbf{L}_1$ ir $\mathbf{L}_2$ projekcijas ($L_{1z} = m_1 \hbar$, $L_{2z} = m_2 \hbar$). Sudedant elektrono orbitinį ir sukininį judesio kiekio momentus pagal šias taisykles, kvantinį skaičių l_1 reikia pakeisti šalutiniu kvantiniu skaičiumi l , o kvantinį skaičių l_2 – sukinio kvantiniu skaičiumi $s = 1/2$. Šitaip gauname, kad pilnutinio momento $\mathbf{L}_j$ modulio galimosios vertės yra

$$|\mathbf{L}_j| = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \quad (3.3.22)$$

kur kvantinis skaičius j gali būti lygus tik šioms vėrtėms:

$$\text{a) jeigu } l > 0, j = l \pm \frac{1}{2}; \quad (3.3.23a)$$

$$\text{b) jeigu } l = 0, j = \frac{1}{2} \quad (3.3.23b)$$

(žr. 3.8 pav.). Pilnutinio judesio kiekio momento projekcija į laisvai pasirinktą z ašį atitinka tą pačią sąlygą kaip ir bet kurios kitos prigimties judesio kiekio momento projekcija:

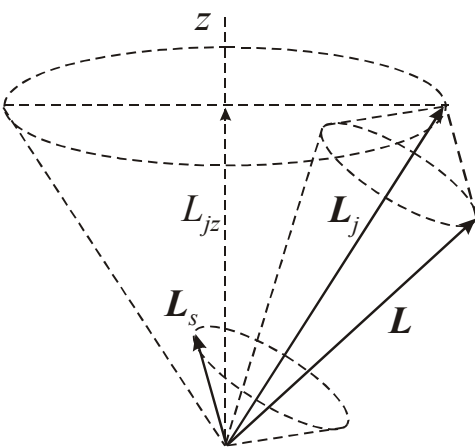
$$L_{jz} = m_j \hbar \quad (m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j). \quad (3.3.24)$$

Gali kilti klausimas, kaip galima kalbėti apie apibrėžtą kampą tarp vektorių $\mathbf{L}$ ir $\mathbf{L}_s$, jeigu šių vektorių kryptys yra neapibrėžtos (jie precesuoja apie išskirtąją kryptį). Atsakymą į šį klausimą iliustruoja 3.9 pav. Kai elektronas yra būsenos, kurios l ir j yra apibrėžti, abu vektoriai $\mathbf{L}$ ir $\mathbf{L}_s$ precesuoja apie pilnutinio judesio kiekio momento vektorių $\mathbf{L}_j$ taip, kad kampas tarp jų išlieka pastovus.

Vektorius $\mathbf{L}_j$, kaip ir bet kuris kitas judesio kiekio momentas, precesuoja aplink išskirtąją kryptį z . Kaip matome 3.9 pav., vektorių $\mathbf{L}$ ir $\mathbf{L}_s$ projekcijos į tą kryptį yra neapibrėžtos. Taip yra todėl, kad operatoriai $\hat{L}_z$ ir $\hat{L}_{sz}$ nekomutuoja su operatoriumi $\hat{L}_j^2$. Taigi, aprašant būseną su apibrėžtu j , kvantiniai skaičiai m_l ir m_s neturi apibrėžtų verčių. Todėl, apibūdinant elektrono būseną atome, dažniausiai vartojami kvantiniai skaičiai

$$n, l, j, m_j. \quad (3.3.25)$$

Šie skaičiai nusako komutatyviųjų operatorių $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{L}_j^2$ ir $\hat{L}_{jz}$ tikrines vėrtes. T. y. vietoj orbitinio ir sukininio momentų projekcijų vartojami pilnutinio momento modulis ir jo projekcija (plg. su (3.3.6)).



3.9 pav. Elektronų sukininio judesio kiekio momento vektorių $\mathbf{L}_s$ ir orbitinio judesio kiekio momento vektorių $\mathbf{L}$ precesija aplink pilnutinio judesio kiekio momento vektorių $\mathbf{L}_j$ ir pastarojo vektorių precesija aplink išskirtąją kryptį z

Elektrono būsenas, kai elektrono energija, orbitinio judesio kiekio momento modulis, pilnutinio judesio kiekio momento modulis ir šio momento projekcija vienu metu turi tiksliai apibrėžtas vėrtes, vadinsime elektrono **kvantinėmis būsenomis**.

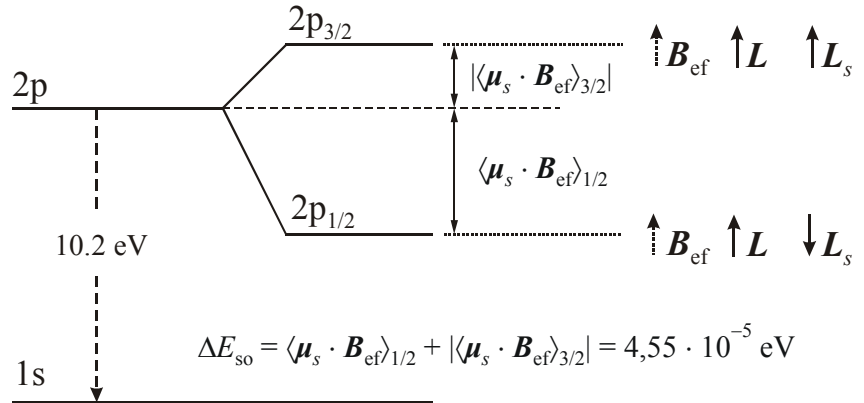
Bendruoju atveju energijos lygmens negalima tapatinti su kvantine būseną, nes dažnai energija nepriklauso nuo kai kurių kvantinių skaičių. Pvz., jeigu nėra išorinio magnetinio lauko, tada elektrono energija nepriklauso nuo kvantinio skaičiaus m_j . T. y. energijos lygmenį su apibrėžtu kvantiniu skaičiumi j atitinka $2j+1$ kvantinių būsenų, kurios skiriasi tik kvantiniu skaičiumi m_j (žr. (3.3.24)), o to lygmens elektrono banginė funkcija lygi atitinkamų operatorių $\hat{L}_{jz}$ tikrinių funkcijų tiesiniam dariniiui (pagal kvantinės mechanikos III postulatą: žr. 3.1.2 poskyrį). Kitaip sakant, šio energijos lygmens išsigimimo laipsnis yra lygus $2j+1$ (lygmens „išsigimimo“ sąvoka apibrėžta 3.1.1 poskyryje). Todėl, norint apibūdinti elektrono energijos lygmenį, kai išorinis magnetinis laukas lygus nuliui, pakanka nurodyti tik kvantinius skaičius n , l ir j . Kvantinis skaičius j nurodomas

apatinio indekso pavidalu. Pvz., elektrono energijos lygmuo, kuris atitinka kvantinių skaičių vertes $n = 2$, $l = 1$ ir $j = 3/2$, žymimas taip: $2p_{3/2}$.

3.3.4. Elektrono energijos lygmenų skilimas dėl sukinio ir orbitos sąveikos

Kadangi sukinio ir orbitos sąveikos potencinė energija priklauso nuo j , tai iš (3.3.23a,b) išplaukia, kad dėl sukinio ir orbitos sąveikos kiekvienas energijos lygmuo, išskyrus s lygmenis, skyla į du lygmenis (žr. 3.10 pav.). Pagal (3.3.17) sukinio ir orbitos sąveikos potencinė energija yra teigiama, kai kampas tarp $\mathbf{L}_s$ ir $\mathbf{L}$ yra mažesnis už 90° (t. y. kai $j = l + 1/2$), ir neigiama, kai šis kampas didesnis už 90° (t. y. kai $j = l - 1/2$). Pirmasis atvejis atitinka 3.8 pav. kairiąją diagramą, o antrasis – 3.8 pav. dešiniąją diagramą.

Šio energijos lygmenų skilimo dydį galima apskaičiuoti pasinaudojus nuostoviąja trikdymų teorija, kuri išdėstyta A priedo A.2 skyrelyje (šių skaičiavimų rezultatai bus pateikti 3.3.5 poskyryje). Tačiau vandeniliškojo atomo lygmenų skilimo didumo eilę galima įvertinti ir be griežtos kvantinės analizės: pakanka apskaičiuoti sukinio ir orbitos sąveikos potencinę energiją (3.3.17) atsižvelgiant į tai, kad kampo tarp vektorių $\mathbf{L}_s$ ir $\mathbf{L}$ kosinusas yra dešimtųjų vieneto dalių eilės, ir dydį r pakeitus vidutiniu atstumu tarp elektrono ir branduolio. Pvz., norint įvertinti vandenilio atomo 2p lygmens skilimą dėl sukinio ir orbitos sąveikos, reikėtų laikyti, kad $r \approx 4r_1$, kur r_1



3.10 pav. Vandenilio 2p būsenos energijos lygmens skilimas dėl sukinio ir orbitos sąveikos. Lygmuo $2p_{3/2}$ atitinka orbitinio judesio kiekio momento ir sukinio „vienodas“ kryptis (kaip 3.8 pav. kairiojoje diagramoje), o lygmuo $2p_{1/2}$ atitinka šių momentų „priešingas“ kryptis (kaip 3.8 pav. dešiniojoje diagramoje)

yra pirmasis Boro spindulys (žr. (1.10.15) formulę ir 3.6 pav. 3.2 poskyryje). Tada gaunama 10^{-5} eV eilės vertė (tikslusis lygmens skilimo dydis parodytas 3.10 pav.). Taigi, atomo elektrono energijos lygmenų skilimas dėl sukinio ir orbitos sąveikos yra daug mažesnis už vidutinį intervalą tarp „pradinių“ (neskilusių) energijos lygmenų.

Didėjant kvantiniams skaičiams n ir l , didėja vidutinis atstumas tarp elektrono ir branduolio, todėl pagal (3.3.18) formulę mažėja sukinio ir orbitos sąveikos energija. Atitinkamai mažėja ir energijos lygmenų skilimas.

3.3.5*. Sukinio ir orbitos sąveikos analizė kvantinės mechanikos metodais

Šiuo atveju reikia taikyti nuostoviosios trikdymų teorijos formules, kurios atitinka išsigimusį energijos lygmenį, nes pradinis lygmuo yra išsigimęs kampo tarp vektorių $\mathbf{L}_s$ ir $\mathbf{L}$ atžvilgiu. Trikdžio vaidmenį atlieka sukinio ir orbitos sąveikos potencinė energija (3.3.17). Šis trikdys pašalina minėtąjį išsigimimą. Taip gaunama, kad dviejų polygmenų poslinkis atžvilgiu „nesutrikdytojo“ energijos lygmens yra lygus

$$\Delta E_j = \langle \Delta U \rangle_j = \langle U_{so} \rangle \langle \mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L} \rangle_j; \quad (3.3.26)$$

čia indeksas j nusako vieną iš dviejų galimų pilnutinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus verčių (žr. (3.3.23a) formulę), o skliaustai „ $\langle \dots \rangle_j$ “, žymi fizikinio dydžio kvantmechaninį vidurkį, kai sistema yra būsenos su duotuoju j . Kadangi U_{so} priklauso tik nuo r , o $\mathbf{L}_s$ ir $\mathbf{L}$ nepriklauso nuo r , tai dydžių U_{so} ir $\mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L}$ sandaugos vidurkis yra lygus tų dydžių vidurkių sandaugai. Dėl tos pačios priežasties vidurkio $\langle U_{so} \rangle$ vertė yra vienoda, kai sistema yra abiejų minėtų būsenų. Vidurkį $\langle \mathbf{L}_s \cdot \mathbf{L} \rangle$ galima išreikšti vektorių $\mathbf{L}$, $\mathbf{L}_s$ ir $\mathbf{L}_j \equiv \mathbf{L} + \mathbf{L}_s$ kvadratų vidurkais, kurie yra žinomi (jie išsireiskia atitinkamais kvantiniais skaičiais l , s ir j pagal (3.2.10a) formulę). Tam reikia pakelti kvadratu lygybę $\mathbf{L}_j = \mathbf{L} + \mathbf{L}_s$:

$$|\mathbf{L}_j|^2 = |\mathbf{L}|^2 + |\mathbf{L}_s|^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{L}_s. \quad (3.3.27)$$

Iš čia

$$\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{L}_s \rangle = \frac{1}{2} (\langle |\mathbf{L}_j|^2 \rangle - \langle |\mathbf{L}|^2 \rangle - \langle |\mathbf{L}_s|^2 \rangle) = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]. \quad (3.3.28)$$

Atsižvelgus į tai, kad $s = 1/2$, ir į sąryšį tarp j ir l (žr. (3.3.23a,b)), gaunama, kad

$$\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{L}_s \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} l \hbar^2, & \text{kai } j = l + \frac{1}{2}; \\ -\frac{1}{2} (l+1) \hbar^2, & \text{kai } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.3.29)$$

Irašę (3.3.29) į (3.3.26), matome:

$$\Delta E_j = \langle \Delta U \rangle_j = \langle U_{so} \rangle \frac{\hbar^2}{2} \cdot \begin{cases} l, & \text{kai } j = l + \frac{1}{2}; \\ -l-1, & \text{kai } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (3.3.30)$$

Vadinasi, intervalas tarp dviejų polygmenių, į kuriuos skyla kiekvienas lygmuo su nenuliniu l dėl sukinio ir orbitos sąveikos, yra lygus

$$\Delta E_{so} = \langle U_{so} \rangle \hbar^2 (l + \frac{1}{2}). \quad (3.3.31)$$

Pagal (3.3.18) formulę vandeniliškajam atomui

$$\langle U_{so} \rangle = \frac{\mu_0 \mu_B Z e}{2 \hbar m} \cdot \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle. \quad (3.3.32)$$

Vandeniliškojo atomo elektrono radialiosios koordinatės atvirkštinio kubo vidurkis yra lygus

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2}{r_1^3 n^3 l(l+1)(2l+1)}; \quad (3.3.33)$$

čia r_1 yra pirmasis Boro spindulys, padalytas iš branduolio krūvio skaičiaus Z , o n yra pagrindinis kvantinis skaičius (ši rezultatą galima gauti pagal vidurkio apibrėžtį (3.1.11) pasinaudojus vandeniliškojo atomo radialiųjų banginių funkcijų išraiškomis (3.2.28)).

Didėjant n ir l , vidurkis $\langle 1/r^3 \rangle$ mažėja (žr. (3.3.33) formulę), todėl pagal (3.3.30) ir (3.3.32) lygmenų skilimas mažėja.

3.3.6*. Sukinio operatorius ir sukininė banginė funkcija

Pasinaudojus sukinio operatoriaus komponentų komutavimo sąryšiais (3.1.19) ir remiantis eksperimentiškai nustatytu faktu, kad elektrono sukinio projekcija gali įgyti tik dvi vertes (3.3.3), galima įrodyti, kad elektrono sukinio Dekarto komponentų operatoriai $\hat{L}_{sx}$, $\hat{L}_{sy}$ ir $\hat{L}_{sz}$ yra

$$\hat{L}_{sx} = \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_x, \quad \hat{L}_{sy} = \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_y, \quad \hat{L}_{sz} = \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_z; \quad (3.3.34)$$

čia $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ ir $\hat{\sigma}_z$ yra vadinamosios **Paulio matricos**:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.3.35)$$

Paulio matricos (3.3.35) yra išreikštos operatoriaus $\hat{\sigma}_z$ tikrinių funkcijų bazėje (žr. 3.1.6 poskyrį), todėl matrica $\hat{\sigma}_z$ yra diagonalioji¹.

Žinome, kad *orbitinio* judesio kiekio momento projekcijų operatoriai (3.1.18) veikia dalelės „orbitinę“ banginę funkciją $\psi(x, y, z)$, kuri nusako dalelės orbitinio judėjimo būseną. Dalelės sukinio projekcija L_{sz} – tai dar vienas „laisvės laipsnis“, kurį turi atspindėti papildomas argumentas banginės funkcijos išraiškoje. T. y. dalelės banginės funkcijos argumentų sąrašą reikėtų rašyti šitaip: $\psi = \psi(x, y, z, L_{sz})$. Kadangi yra galimos tik dvi L_{sz} vertės, tai „pilnąją“ funkciją $\psi(x, y, z, L_{sz})$ galima užrašyti dviejų „orbitinių“ funkcijų stulpelio pavidalu:

$$\psi(x, y, z, L_{sz}) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \end{pmatrix}; \quad (3.3.36)$$

čia funkcija $\psi_1(x, y, z)$ nusako elektrono orbitinio judėjimo būseną, kai $L_{sz} = +\hbar/2$, o funkcija $\psi_2(x, y, z)$ nusako elektrono orbitinio judėjimo būseną, kai $L_{sz} = -\hbar/2$. Toks dviejų funkcijų stulpelis – tai vadinamasis **spinorius**. Spinoriaus bendroji išraiška (3.3.36) yra tapati tokiam reiškiniui:

¹ Paulio matricos kartu su vienetine antrosios eilės matrica yra keturios tiesiškai nepriklausomos matricos, kurios sudaro dvimačių kompleksinių matricų erdvės bazę. Tos matricos tinka aprašant ir kitus fizikinius dydžius, kurie gali būti lygūs tik dviem vėrtėms. Pvz., Paulio matricos taikomos matematiškai formuluojant nukleono „izotopinio sukinio“ savybes (izotopinis sukinys bus minimas 8.3 poskyryje).

$$\psi(x, y, z, L_{sz}) = \psi_1(x, y, z)\chi^+ + \psi_2(x, y, z)\chi^- = \psi_1(x, y, z)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(x, y, z)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad (3.3.37)$$

čia χ^+ ir χ^- yra „vienetiniai spinoriai“:

$$\chi^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.3.38)$$

Kiekvienas spinorius yra funkcija, kurios vienas argumentas gali būti lygus tik dviem vertėms. Tas argumentas – tai elektrono sukinio projekcija į duotąją (z) ašį. Ši projekcija – tai yra vadinamoji **sukininė koordinatė**. Pasinaudojus matricių daugybos taisyklėmis, nesunku įsitikinti, kad funkcijos χ^+ ir χ^- yra operatoriaus $\hat{\sigma}_z$, kurį nusako trečioji Paulio matrica (3.3.35), tikrinės funkcijos¹, o atitinkamos tikrinės vertės yra $+1$ ir -1 . Vadinas, χ^+ ir χ^- yra operatoriaus $\hat{L}_{sz}$ tikrinių funkcijų $\hat{L}_{sz}$ -atvaizdai (ši terminologija paaiškinta 3.1.6 poskyryje). χ^+ nusako elektrono sukininę būseną, kurioje $L_{sz} = +\hbar/2$, o χ^- nusako elektrono sukininę būseną, kurioje $L_{sz} = -\hbar/2$.

Taigi, (3.3.37) lygybė yra pilnutinės banginės funkcijos skleidinys operatoriaus $\hat{L}_{sz}$ tikrinėmis funkcijomis. Pagal kvantinės mechanikos trečiąjį postulatą (žr. 3.1.2 poskyrį) funkcijos $\psi_1(x, y, z)$ modulio kvadrato integralas visoje erdvėje yra lygus tikimybei, kad $L_{sz} = +\hbar/2$, o funkcijos $\psi_2(x, y, z)$ modulio kvadrato integralas yra lygus tikimybei, kad $L_{sz} = -\hbar/2$.

Elektrono sukinys turi palyginti silpną įtaką jo orbitiniam judėjimui. Todėl galima laikyti, kad elektrono banginės funkcijos „orbitinė“ dalis nepriklauso nuo elektrono sukinio krypties, o elektrono „pilnutinė“ banginę funkciją galima užrašyti „orbitinės“ ir „sukininės“ funkcijų sandaugos pavidalu:

$$\psi(x, y, z, L_{sz}) \approx \psi(x, y, z)\chi(L_{sz}) = \psi(x, y, z)\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}; \quad (3.3.39)$$

čia $\psi(x, y, z)$ yra orbitinė banginė funkcija, o $\chi(L_{sz})$ yra spinorius, kuris vadinamas **sukinine bangine funkcija**:

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \equiv \alpha\chi^+ + \beta\chi^-. \quad (3.3.40)$$

Čia $|\alpha|^2$ yra lygus tikimybei, kad $L_{sz} = +\hbar/2$, o $|\beta|^2$ yra lygus tikimybei, kad $L_{sz} = -\hbar/2$ (taigi, spinorius (3.3.40) yra sukininės funkcijos $\hat{L}_{sz}$ -atvaizdas).

Iki šiol buvo kalbama tik apie elektroną. Nenulinį sukinį turi ir daugelis kitų dalelių. Pvz., fotono sukinio kvantinis skaičius yra lygus 1. Todėl fotono sukinio projekcija gali būti lygi trimis vertėms 0 ir $\pm\hbar$ (t. y. $m_s = 0, \pm 1$). Tai yra fotono sukinio projekcijos į z ašį operatoriaus $\hat{S}_z$ tikrinės vertės. Todėl kiekviena operatoriaus $\hat{S}_z$ tikrinė funkcija yra trijų skaičių stulpelis. Tas tikrinės funkcijas galima vaizduoti trimačiais kompleksiniais vektoriais χ_1 , χ_{-1} ir χ_0 , kurių realioji ir menamoji dalys yra apibrėžtos įprastinėje trimatėje erdvėje (apatinis indeksas nusako m_s vertę). Tie tikriniai vektoriai yra pateikti D priedo D.1 skyrelyje (žr. (D.1.4) formules). Lygiai taip pat kaip iš orbitinių banginių funkcijų ir spinorių buvo sudaryta apibrėžtos energijos elektrono „pilnoji“ banginė funkcija (3.3.37), galima būtų sudaryti koordinatinių ir fotono sukinio projekcijos į z ašį funkciją, kuri pilnai nusako apibrėžtos energijos fotono būseną (taip pat ir fotono poliarizaciją):

$$\psi(x, y, z, S_z) = \psi_{-1}(x, y, z)\chi_{-1} + \psi_0(x, y, z)\chi_0 + \psi_1(x, y, z)\chi_1 \quad (3.3.41)$$

(plg. su (3.3.37)). Tačiau ši funkcija skiriasi nuo elektrono ir kitų masyviųjų dalelių banginės funkcijos tuo, kad jos komponentių modulių kvadratai $|\psi_{\pm 1,0}(x, y, z)|^2$ neturi koordinatinio tikimybės tankio prasmės, t. y. funkcijų $\psi_{\pm 1,0}(x, y, z)$ negalima vadinti „fotono orbitinėmis banginėmis funkcijomis“. Taip yra todėl, kad fotono spindulio vektoriaus operatorius $\mathbf{r}$ neegzistuoja (ši savybė yra būdinga visoms dalelėms, kurių rimties masė lygi nuliui, o sukinys nelygus nuliui). Dėl šios priežasties fotono koordinatinio vaizdavimo banginė funkcija (3.3.41) praktiškai nėra naudojama. Tačiau kitais atžvilgiais funkcija (3.3.41) yra analogiška elektrono banginei funkcijai (3.3.37). Pvz., ta funkcija visiškai nusako fotono būseną, o jos

¹ Funkcijos χ^+ ir χ^- yra ortogonalios (kaip ir bet kurio kito Ermito operatoriaus tikrinės funkcijos). Tačiau ortogonalumo sąlygos užrašymas (3.1.3) pavidalu šiuo atveju nėra tinkamas, nes tos funkcijos yra *diskretaus* kintamojo L_{sz} funkcijos. Šiuo atveju integravimą reikia pakeisti sumavimu to kintamojo galimųjų verčių atžvilgiu. Šitaip lengva įsitikinti, kad funkcijos (3.3.38) yra ortonormuotos.

komponenčių modulių kvadratų $|\psi_{\pm 1,0}(x, y, z)|^2$ integralai visa erdve nusako tikimybes, kad fotono sukinio projekcijos į z ašį matavimo rezultatas bus lygus atitinkamai vertei ($\pm\hbar$ arba 0). Todėl toliau funkciją (3.3.41) vadinsime „fotono bangine funkcija“¹. Taigi, fotono banginė funkcija yra trimatis kompleksinis vektorius (kitai sakant, šešių skaičių stulpelis: trys vektoriaus komponentės, kurių kiekviena sudaryta iš realiosios ir menamosios dalių). To vektoriaus kryptis nusako fotono (elektromagnetinės bangos) poliarizaciją. Jeigu banga sklinda z kryptimi, tada tikrinis vektorius χ_1 atitinka dešininę apskritiminę poliarizaciją, tikrinis vektorius χ_{-1} atitinka kairinę apskritiminę poliarizaciją, o tikrinis vektorius χ_0 atitinka išilginę poliarizaciją (t. y. tokią poliarizaciją, kai elektrinio lauko vektorius lygiagretus su sklidimo kryptimi). Vektoriai χ_1 ir χ_{-1} yra statmeni z ašiai, o vektorius χ_0 yra lygiagretus su z ašimi. Jeigu elektromagnetinė banga yra plokščioji, tada į fotono banginės funkcijos išraišką (3.3.41) gali įeiti tik vektoriai, kurie statmeni z ašiai, nes plokščioji elektromagnetinė banga yra skersinė. Tai reiškia, kad fotono, kuris atitinka plokščiąją elektromagnetinę bangą, sukinio projekcija į sklidimo kryptį gali būti lygi tik dviem vertėms $\pm\hbar$ (nes banginės funkcijos komponentė $\psi_0(x, y, z)$ yra lygi nuliui). Čia reikia atkreipti dėmesį į tai, kad poliarizaciją nusako fotono *banginė funkcija* (kuri yra trimatis kompleksinis vektorius), bet ne paties sukinio kryptis.

3.4*. Dirako lygtis ir elektrono sukinys

3.3.6 poskyryje elektrono sukinio operatoriaus išraiška buvo gauta remiantis eksperimentiškai nustatyta elektrono sukinio verte. Tačiau elektrono sukinio egzistavimą bei sukinio operatoriaus išraišką galima pagrįsti teoriškai remiantis reliatyvistine elektrono judėjimo lygtimi, kurią 1928 m. išvedė anglų fizikas Polisas Dirakas (*Dirac*). **Reliatyvistinė judėjimo lygtis** – tai judėjimo lygtis, kuri yra invariantiška Lorencio (*Lorentz*) transformacijų atžvilgiu. **Lorencio transformacijos** susieja Dekarto koordinatas ir laiką dviejose inercinėse atskaitos sistemose:

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = \frac{t - (v/c^2)x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}; \quad (3.4.1)$$

čia koordinatės x', y', z' ir laikas t' – tai koordinatės ir laikas sistemoje, kuri juda „nebrūkšninės“ sistemos atžvilgiu x ašies kryptimi pastoviu greičiu v (laikoma, kad abiejų sistemų atitinkamų ašių kryptys sutampa). Sąvoka „lygties invariantiškumas Lorencio transformacijų atžvilgiu“ reiškia, kad, išreiškus koordinatas x, y, z ir laiką t brūkšniniais dydžiais x', y', z' ir t' , lygties pavidalas nepasikeičia. Šrėdingerio lygtis (2.1.1) neatitinka šios sąlygos, todėl ji netinka, kai dalelės greitis yra artimas šviesos greičiui. Reliatyvistinė judėjimo lygtis tinka aprašant bet kokio greičio dalelę. Dirako lygties išvedimas yra panašus į Šrėdingerio lygties išvedimą: jeigu Šrėdingerio lygtis (2.1.3) gaunama iš elektrono nereliatyvistinės pilnutinės energijos išraiškos (3.1.17) pakeitus judesio kiekį p atitinkamu operatoriumi (3.1.16), tai Dirako lygtis gaunama remiantis reliatyvistinės pilnutinės laisvojo elektrono energijos kvadrato išraiška:

$$E^2 = c^2(m_0^2c^2 + p^2); \quad (3.4.2)$$

čia m_0 yra elektrono rimties masė, c yra šviesos greitis, o p yra elektrono judesio kiekis. Be to, išvedant Dirako lygtį, remiamasi dar viena papildoma sąlyga: judėjimo lygtis turi būti pirmosios eilės tiesinė diferencialinė lygtis. T. y. į tą lygtį turi įeiti tik *pirmosios* išvestinės laiko ir koordinatinių atžvilgiu (palyginimas: į Šrėdingerio lygtį (2.1.1) įeina antrosios išvestinės koordinatinių atžvilgiu ir pirmoji išvestinė laiko atžvilgiu). Laisvojo elektrono Dirako lygtis užrašoma šitaip:

$$[\hat{E} - c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z)]\Psi = 0; \quad (3.4.3a)$$

čia $\hat{E}$ yra energijos operatorius (3.1.21), $\hat{p}_x, \hat{p}_y$ ir $\hat{p}_z$ yra judesio kiekio operatoriaus komponentės (3.1.16), c yra šviesos greitis, m_0 yra elektrono rimties masė, o dydžiai $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ ir α_3 apibrėžiami taip, kad galiotų lygybė

$$E = c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z). \quad (3.4.3b)$$

Pakėlę abi (3.4.3b) lygybės puses kvadratu, turime gauti reliatyvistinę energijos ir judesio kiekio sąryšį (3.4.2). Todėl aišku, kad $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ ir α_3 negali būti skaliariai, nes priešingu atveju keliant kvadratu dešiniojoje lygybės pusėje atsirastų dydžio $m_0 c$ ir judesio kiekio vektoriaus komponentių p_x, p_y ir p_z tarpusavio sandaugos, kurių nėra (3.4.2) reiškinyje. Kad nebūtų šių sandaugų, dydžiai $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ ir α_3 turi atitikti sąlygą

¹ Pagal Bialynicki-Birula I. *Photon wave function* // *Progress in Optics*, vol. 36, 1996, p. 245–294; <<http://www.cft.edu.pl/~birula/publ.html>>

$$\alpha_j \alpha_k = -\alpha_k \alpha_j \quad (j \neq k), \quad (3.4.4)$$

t. y. jie turi antikomutuoti. Be to, šių keturių dydžių kvadratai turi būti lygūs vienetui:

$$\alpha_j^2 = 1 \quad (j = 0, 1, 2, 3). \quad (3.4.5)$$

(3.4.4) ir (3.4.5) sąryšiai galioja tada, kai $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ ir α_3 yra tokios ketvirtosios eilės kvadratinės matricos:

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (3.4.6)$$

čia α_0 yra menamasis vienetas. Pasinaudojus matricų daugybos taisykle, nesunku įsitikinti, kad (3.4.6) matricos atitinka (3.4.4) ir (3.4.5) sąryšius ((3.4.5) sąryšio dešiniąją pusę reikia laikyti ketvirtosios eilės vienetine matrica). Kadangi α_j yra ketvirtosios eilės matricos, tai Dirako lygties (3.4.3a) kairiojoje pusėje laužtiniuose skliaustuose esantis reiškinyš taip pat yra ketvirtosios eilės matrica (šios matricos elementai skaičiuojami pagal bendrąsias matricų algebros taisykles). Todėl banginė funkcija Ψ , kuri įeina į Dirako lygtį (3.4.3a), turi keturias komponentes, kurias patogiau užrašyti stulpelio pavidalu:

$$\Psi(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(x, y, z, t) \\ \Psi_2(x, y, z, t) \\ \Psi_3(x, y, z, t) \\ \Psi_4(x, y, z, t) \end{pmatrix}. \quad (3.4.7)$$

Taigi, Dirako lygties (3.4.3a) kairioji pusė – tai ketvirtosios eilės kvadratinės matricos ir keturių funkcijų stulpelio sandauga. Todėl Dirako lygtį galima pakeisti keturių tiesinių pirmosios eilės diferencialinių lygčių sistema atžvilgiu keturių banginės funkcijos komponentių.

Jeigu elektronas juda potencialiniame lauke, kurio potencinė energija $U(x, y, z, t)$, tada Dirako lygties (3.4.3a) kairiojoje pusėje, laužtiniuose skliaustuose, atsiranda dėmuo $-U$:

$$[\hat{E} - c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z) - U(x, y, z, t)]\Psi = 0. \quad (3.4.8)$$

Jeigu U nepriklauso nuo laiko (t. y. potencialinis laukas yra nuostovus), tada kaip ir Šrėdingerio lygties atveju pilnutinę banginę funkciją $\Psi(x, y, z, t)$ galima išreikšti erdvinio koordinatų funkcijos $\psi(x, y, z)$ ir kompleksinės eksponentinės laiko funkcijos sandauga (2.1.2), tačiau dabar $\psi(x, y, z)$ yra keturių funkcijų stulpelis:

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \\ \psi_3(x, y, z) \\ \psi_4(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (3.4.9)$$

$\psi(x, y, z)$ ir elektrono energija E atitinka šią tikrinių verčių lygtį:

$$[c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z) + U(x, y, z)]\psi = E\psi. \quad (3.4.10)$$

Tai yra hamiltoniano operatoriaus tikrinių verčių lygtis. Hamiltoniano operatorius šiuo atveju lygus

$$\hat{H} = c(\alpha_0 m_0 c + \alpha_1 \hat{p}_x + \alpha_2 \hat{p}_y + \alpha_3 \hat{p}_z) + U(x, y, z). \quad (3.4.11)$$

Kadangi dydžiai α_j yra matricos, tai hamiltoniano operatorius šiuo atveju taip pat yra ketvirtos eilės kvadratinė matrica.

Kaip minėta 3.1.2 poskyryje, išsamiam apibrėžtos energijos sistemos būsenos aprašymui reikia turėti visą komutatyviųjų operatorių rinkinį, į kurį įeina hamiltoniano operatorius. 3.2 poskyryje minėta, kad centriniame jėgų lauke judančios dalelės (pvz., atomo elektrono) būsenai nusakyti pakanka trijų operatorių: hamiltoniano, orbitinio judesio kiekio momento kvadrato ir orbitinio judesio kiekio momento projekcijos $\hat{L}_z$, kurią nusako (3.1.18) trečioji formulė. Tačiau pastarasis operatorius nekomutuoja su reliatyvistiniu elektrono hamiltonianu (3.4.11). Taigi, apibrėžtos energijos elektrono orbitinio judesio kiekio momentas yra neapibrėžtas. Kitaip sakant, elektrono orbitinis momentas nėra tvarus (nėra judėjimo integralas). Vadinas, pagal judesio kiekio momento tvermės dėsnį turi egzistuoti dar viena pilnutinio judesio kiekio momento komponentė, kurią sudėjus su orbitiniu momentu gaunamas tvarus dydis. Ši komponentė – tai elektrono sukiny. Su hamiltonianu (3.4.11) komutuoja toks operatorius:

$$\hat{\mathbf{L}}_j = \hat{\mathbf{L}} + \frac{\hbar}{2}(\hat{s}_x \mathbf{e}_x + \hat{s}_y \mathbf{e}_y + \hat{s}_z \mathbf{e}_z); \quad (3.4.12)$$

čia $\hat{\mathbf{L}}$ yra orbitinio judesio kiekio momento vektoriaus operatorius, $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$ ir $\mathbf{e}_z$ yra x , y ir z ašių vienetiniai vektoriai, o $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ ir $\hat{s}_z$ yra tokios ketvirtosios eilės matricos:

$$\hat{s}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.4.13)$$

(3.4.12) reiškianio antrasis dėmuo – tai elektrono sukinio vektoriaus operatorius $\hat{\mathbf{L}}_s$. T. y. (3.4.13) matricų ir dydžio $\hbar/2$ sandaugos – tai elektrono sukinio operatoriaus Dekarto komponentės:

$$\hat{L}_{sx} = \frac{\hbar}{2} \hat{s}_x, \quad \hat{L}_{sy} = \frac{\hbar}{2} \hat{s}_y, \quad \hat{L}_{sz} = \frac{\hbar}{2} \hat{s}_z. \quad (3.4.14)$$

Apskaičiuosime elektrono sukinio operatoriaus komponentės $\hat{L}_{sz}$ tikrines vertes ir kartu nustatysime banginės funkcijos komponentių prasmę. Paveikiame operatoriumi $\hat{L}_{sz}$ elektrono banginę funkciją (3.4.9):

$$\hat{L}_{sz} \psi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \\ \psi_3 \\ -\psi_4 \end{pmatrix}. \quad (3.4.15)$$

Jeigu komponentės ψ_2 ir ψ_4 lygios nuliui, tada (3.4.15) lygybė virsta lygybe

$$\hat{L}_{sz} \psi = \frac{\hbar}{2} \psi,$$

t. y. tokiu atveju ψ yra elektrono sukinio projekcijos operatoriaus tikrinė funkcija, o atitinkama tikrinė vertė lygi $\hbar/2$. Jeigu komponentės ψ_1 ir ψ_3 lygios nuliui, tada galioja lygybė

$$\hat{L}_{sz} \psi = -\frac{\hbar}{2} \psi,$$

t. y. tokiu atveju ψ taip pat yra elektrono sukinio projekcijos operatoriaus tikrinė funkcija, o atitinkama tikrinė vertė lygi $-\hbar/2$. Kitų tikrinių verčių operatorius $\hat{L}_{sz}$ neturi. Žinoma, tokios pačios yra ir kitų dviejų Dekarto komponentių tikrinės vertės, nes visos kryptys erdvėje yra lygiavertės¹. Vadinasi, elektrono sukinio projekcija į bet kurią kryptį gali būti lygi tik dviem vertėms: $\hbar/2$ arba $-\hbar/2$. Pilnutinio sukinio kvadratas lygus

$$\hat{L}_s^2 = \hat{L}_{sx}^2 + \hat{L}_{sy}^2 + \hat{L}_{sz}^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad (3.4.16)$$

(čia pasinaudota tuo, kad (3.4.13) matricų kvadratai yra vienetinės matricos). Užrašę šį reiškinių (3.3.2) pavidalą, gauname, kad elektrono sukinio kvantinis skaičius (arba tiesiog sukinys) lygus $s = 1/2$. Šis rezultatas yra pasekmė to fakto, kad Dirako lygtis yra pirmosios eilės diferencialinė lygtis (ir laiko, ir koordinatų atžvilgiu). Dirako lygtis tinka visoms sukinio $1/2$ taškinėms (t. y. elementariosioms) dalelėms².

Taigi, nustatėme, kad kiekvieną iš dviejų galimų sukinio verčių atitinka dvi banginės funkcijos komponentės: ψ_1 ir ψ_3 atitinka sukinio orientaciją z ašies kryptimi, o ψ_2 ir ψ_4 atitinka sukinio orientaciją

¹ Sukinio Dekarto komponentių operatorių išraiškos priklauso nuo pasirinkto vaizdavimo (žr. 3.1.6 poskyrį). Šiuo atveju naudojamas $\hat{L}_{sz}$ atvaizdas, t. y. operatoriai (3.4.13) yra išreikšti operatoriaus $\hat{L}_{sz}$ tikrinių funkcijų bazėje.

² Atsisakius minėtojo papildomo reikalavimo, kad judėjimo lygtis būtų pirmosios eilės, iš reliatyvistinio energijos ir judesio kiekio sąryšio (3.4.2) galima nesunkiai gauti antrosios eilės reliatyvistinę lygtį. Pakanka tame sąryšyje energiją E pakeisti energijos operatoriumi (3.1.21), o judesio kiekį $\mathbf{p}$ pakeisti judesio kiekio operatoriumi (3.1.16). Taip gaunama vadinamoji **Kleino ir Gordono lygtis**, kuri tinka aprašant daleles su nuliniu sukinio. Kadangi tokios dalelės neturi vidinių laisvės laipsnių, jų banginės funkcijos yra skaliarinės kaip ir Šrėdingerio lygties sprendiniai (t. y. nusakomos vienu kompleksiniu skaičiumi, o ne keturių skaičių stulpeliu).

priešinga kryptimi. Norint išsiaiškinti, kuo skiriasi būsenos ψ_1 ir ψ_3 (arba ψ_2 ir ψ_4), galima pasinaudoti laisvojo elektrono judėjimo lygtimi, kuri gaunama, kai (3.4.10) lygtyje $U \equiv 0$. Kaip ir Šrėdingerio lygties atveju, laisvojo elektrono banginė funkcija yra plokščioji banga (žr. (3.1.14a)), tačiau prieš kompleksinę eksponentę yra keturių koeficientų stulpelis:

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_z z\right]; \quad (3.4.17)$$

čia laikoma, kad elektronas sklinda z ašies kryptimi (todėl $p_x = p_y = 0$). Pareikalavus, kad funkcija (3.4.17) atitiktų nuostovią Dirako lygtį (3.4.10), gaunamos dvi galimos elektrono pilnutinės energijos vertės (t. y. dvi hamiltoniano tikrinės vertės):

$$E = \pm c \sqrt{p_z^2 + m_0^2 c^2}. \quad (3.4.18)$$

Teigiamą energiją $E = c \sqrt{p_z^2 + m_0^2 c^2}$ atitinka šie du koeficientų a_j ketvertai:

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{m_0 c^2}{E}}, \quad a_2 = 0, \quad a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{m_0 c^2}{E}}, \quad a_4 = 0; \quad (3.4.19a)$$

$$a_1 = 0, \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{m_0 c^2}{E}}, \quad a_3 = 0, \quad a_4 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{m_0 c^2}{E}}. \quad (3.4.19b)$$

Neigiamą energiją $E = -c \sqrt{p_z^2 + m_0^2 c^2}$ atitinka šie du koeficientų a_j ketvertai:

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{m_0 c^2}{|E|}}, \quad a_2 = 0, \quad a_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{m_0 c^2}{|E|}}, \quad a_4 = 0; \quad (3.4.20a)$$

$$a_1 = 0, \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{m_0 c^2}{|E|}}, \quad a_3 = 0, \quad a_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{m_0 c^2}{|E|}}. \quad (3.4.20b)$$

Turint omenyje, kad ψ_1 ir ψ_3 atitinka sukinio orientaciją z ašies kryptimi, o ψ_2 ir ψ_4 atitinka sukinio orientaciją priešinga kryptimi, galima teigti, kad koeficientų rinkiniai (3.4.19a) ir (3.4.20a) atitinka elektrono sukinio orientaciją z ašies kryptimi, o rinkiniai (3.4.19b) ir (3.4.20b) atitinka sukinio orientaciją priešinga kryptimi. Taigi, keturi koeficientų rinkiniai (3.4.19a), (3.4.19b), (3.4.20a), (3.4.20b) atitinka keturis galimus sukinio projekcijos ir pilnutinės reliatyvistinės energijos ženklo derinius. Tuo atveju, kai elektrono greitis yra daug mažesnis už šviesos greitį ($v/c \ll 1$), šias koeficientų išraiškas galima pakeisti paprastesnėmis apytikslėmis lygybėmis:

$$a_1 \approx 1, \quad a_2 = 0, \quad a_3 \approx v/(2c), \quad a_4 = 0; \quad (3.4.21a)$$

$$a_1 = 0, \quad a_2 \approx 1, \quad a_3 = 0, \quad a_4 \approx -v/(2c); \quad (3.4.21b)$$

$$a_1 \approx v/(2c), \quad a_2 = 0, \quad a_3 = -1, \quad a_4 = 0; \quad (3.4.22a)$$

$$a_1 = 0, \quad a_2 \approx v/(2c), \quad a_3 = 0, \quad a_4 \approx 1. \quad (3.4.22b)$$

Kadangi dydis $v/(2c)$ šiuo atveju yra artimas nuliui, tai galima teigti, kad nereliatyvistinio elektrono banginės funkcijos komponentės ψ_1 ir ψ_2 atitinka teigiamas energijos vertes, o komponentės ψ_3 ir ψ_4 atitinka neigiamas energijos vertes.

Iš pirmo žvilgsnio neigiama pilnutinė laisvojo elektrono energija neturi fizikinės prasmės. Tačiau gilesnė šio rezultato analizė rodo, kad elektrono būsenos su neigiama energija atitinka elektrono antidalelę – **pozitroną**. Pozitrono masė ir sukinys yra tokie patys kaip elektrono, tačiau elektros krūvis yra priešingas. Taigi, Dirako lygtis ne tik teisingai aprašo elektrono sukinį, bet ir numato pozitrono egzistavimą. Pozitronas buvo eksperimentiškai atrastas 1932 m.

Iš to, kas anksčiau pasakyta, išplaukia, kad nereliatyvistinio elektrono būsenos aprašymui pakanka vartoti tik komponentes ψ_1 ir ψ_2 (nes, kaip išplaukia iš (3.4.21a,b), komponentės ψ_3 ir ψ_4 yra artimos nuliui). Vadinasi, tokiu atveju galima teigti, kad elektrono banginė funkcija turi ne keturias, o tik dvi komponentes:

$$\psi(x, y, z) = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (3.4.23)$$

Todėl nereliatyvistinio elektrono sukinio operatorių galima išreikšti Paulio matricomis (3.3.35), kurios sudarytos iš ketvirtosios eilės matricų (3.4.13) pirmosiose dviejose eilutėse ir pirmuosiuose dviejuose stulpeliuose esančių elementų. Šitaip apibrėžus sukinio operatorių, banginės funkcijos komponentė $\psi_1(x,y,z)$ nusako būseną, kai sukinio z komponentė lygi $\hbar/2$, o komponentė $\psi_2(x,y,z)$ nusako būseną, kai sukinio z komponentė lygi $-\hbar/2$.

Sprendžiant vandeniliškojo atomo Dirako lygtį (3.4.10), vietoj U reikia vartoti funkciją (3.2.23). Tada gaunamos tokios energijos lygmenų vertės:

$$E_{nj} = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{m_0 e^4}{8\varepsilon_0^2 \hbar^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]; \quad (3.4.24)$$

čia j yra elektrono pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius, kurį nusako (3.3.23a,b) formulės, o α yra bedimensė **smulkiosios sandaros konstanta**, kuri apibrėžiama sąryšiu

$$\alpha = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 \hbar c} \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}. \quad (3.4.25)$$

Smulkiosios sandaros konstantos vertė apytiksliai lygi $1/137$. Antrasis dėmuo (3.4.24) reiškio laužtiniuose skliaustuose nusako vandeniliškojo atomo lygmenų skilimą, kurį sąlygoja sukinio ir orbitos sąveika. Be to, palyginus (3.4.24) reiškinį su Šrėdingerio lygties numatomomis energijos vertėmis (3.2.25), akivaizdu, kad Dirako lygties numatomi energijos lygmenys yra ne tik suskilę, bet ir šiek tiek pasislinkę atžvilgiu tų, kurie išplaukia iš Šrėdingerio lygties.

Uždaviniai

- 3.1. Apskaičiuokite operatorių $\hat{x}(d/dx)$ ir $\hat{x}$ komutatorių.
- 3.2. $\hat{A}$ ir $\hat{B}$ yra nekomutuojantys Ermito operatoriai. Nustatykite, kurie iš šių operatorių yra Ermito: (a) $\hat{A}\hat{B}$, (b) $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, (c) $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$, (d) $\hat{A}\hat{B}\hat{A}$, (e) $\hat{A}^n$ (čia n yra sveikasis teigiamasis skaičius).
- 3.3. Duotas vienmatis harmoninis osciliatorius. Apskaičiuokite:
 - (a) pagrindinės būsenos koordinatės vidurkį $\langle x \rangle$ ir koordinatės kvadrato vidurkį $\langle x^2 \rangle$;
 - (b) koordinatės standartinę nuokrypį (neapibrėžtumą) $\Delta x = [\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2]^{1/2}$;
 - (c) dalelės judesio kiekio vidurkį $\langle p_x \rangle$ ir jo kvadrato vidurkį $\langle p_x^2 \rangle$ naudodamiesi „a“ ir „b“ punktų rezultatais, tačiau nesinaudodami judesio kiekio operatoriaus išraiška (patarimas: apskaičiuokite $\langle p_x^2 / (2m) \rangle$);
 - (d) judesio kiekio neapibrėžtumą Δp_x ir neapibrėžtumų sandaugą $\Delta x \cdot \Delta p_x$.
- 3.4. Apskaičiuokite visus galimus kampus tarp judesio kiekio momento vektoriaus $\mathbf{L}$ ir z ašies, kai judesio kiekio momento kvantinis skaičius $l = 3$.
- 3.5. (a) Kokios yra galimos pilnutinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus j vertės f būsenoms? (b) Kokios yra atitinkamos pilnutinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus m_j vertės? (c) Kiek iš viso yra skirtingų f būsenų (t. y. f būsenų, kurios skiriasi tik kvantinių skaičių j arba m_j vertėmis)? (d) Kiek skirtingų f būsenų gautume, jeigu vietoj kvantinių skaičių j ir m_j vartotume m_l ir m_s ?
- 3.6. Kokia tikimybė aptikti vandenilio atomo 2s elektroną erdvės srityje, kurią draudžia klasikiniai judėjimo dėsniai (t. y. erdvės srityje, kurioje elektrono pilnutinė mechaninė energija yra mažesnė už potencinę energiją)?
- 3.7. Apskaičiuokite tikimiausiąjį atstumą tarp vandenilio atomo 2s elektrono ir branduolio.
- 3.8. Kokia tikimybė aptikti pagrindinės būsenos vandenilio atomo elektroną branduolio viduje? Laikykitė, kad vandenilio atomo branduolio spindulys lygus 10^{-15} m.
- 3.9. Įrodykite, kad dalelės, kurios sukinio kvantinis skaičius lygus $1/2$, sukinio projekcijų operatoriai (3.3.34) atitinka komutavimo sąryšį $[\hat{L}_{sx}, \hat{L}_{sy}] = i\hbar \hat{L}_{sz}$.
- 3.10. Dalelės, kurios sukinio kvantinis skaičius lygus $1/2$, sukininės funkcijos $\hat{L}_{sz}$ -atvaizdas yra spinorius (3.3.40). Išreikškite tos dalelės sukinio komponentių vidurkius $\langle L_{sx} \rangle$, $\langle L_{sy} \rangle$ ir $\langle L_{sz} \rangle$ bei jų kvadratų vidurkius $\langle L_{sx}^2 \rangle$, $\langle L_{sy}^2 \rangle$ ir $\langle L_{sz}^2 \rangle$. Patikrinkite, ar $\langle L_{sx}^2 \rangle + \langle L_{sy}^2 \rangle + \langle L_{sz}^2 \rangle = \langle L_s^2 \rangle$.

4. Daugielektroniai atomai

Tiriant daugielektronius atomus, būtina atsižvelgti į du reiškinius, kurie neparodo vieno elektrono sistemose: elektronų tapatingumas ir elektronų tarpusavio sąveika. Šiame skyriuje išsiaiškinsime elektronų tapatingumo ir jų sąveikos įtaką daugielektroninių atomų savybėms.

4.1. Vienodų dalelių sistemos banginė funkcija. Paulio draudimo principas

4.1.1. Vienodų dalelių sistemos banginės funkcijos simetrija dalelių transpozicijos atžvilgiu

Klasikinių dalelių judėjimo lygtys vienareikšmiškai nusako dalelių judėjimo trajektorijas, jeigu yra duoti dalelių koordinatės ir greičiai tam tikru laiko momentu. Taigi, klasikinėje mechanikoje net ir vienodos dalelės yra atskiriamos viena nuo kitos: klasikinėje sistemoje visas vienodas daleles galima sunumeruoti ir sekti kiekvienos iš jų judėjimą. Tačiau kvantinėje sistemoje dviejų vienodų dalelių (pvz., dviejų elektronų) sukeitimas vietomis (**transpozicija**) nėra susijęs su jokiais pastebimais sistemos būsenos pokyčiais: vienodos dalelės yra visiškai neatskiriamos viena nuo kitos. Taip yra dėl to, kad kvantinės sistemos hamiltonianas nepasikeičia sukeitus vietomis dviejų vienodų dalelių koordinatės. Išsiaiškinsime, kokią įtaką ši kvantinių sistemų savybė turi sistemos banginei funkcijai.

Tarkime, kad sistemą sudaro N vienodų dalelių (pvz., elektronų). Tada sistemos nuostovioji banginė funkcija yra $4N$ kintamųjų funkcija:

$$\psi = \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_N s_N); \quad (4.1.1)$$

čia $\mathbf{r}_i$ yra i -tojo elektrono spindulys vektorius, o s_i yra jo „sukininė koordinatė“ (t. y. jo sukinio projekcija į z ašį). Dalelių tapatingumas pasireiškia tuo, kad, sukeitus bet kurias dvi daleles (pvz., i -tąją ir j -tąją) vietomis, naujoji sistemos būsena yra neatskiriama nuo senosios. Tai reiškia, kad tikimybės tankis (banginės funkcijos modulio kvadratas) nepasikeičia:

$$|\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_N s_N)|^2 = |\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_N s_N)|^2. \quad (4.1.2)$$

Vadinasi, dviejų vienodų dalelių transpozicija turi arba nepakeisti banginės funkcijos arba pakeisti tik jos ženklą (tai įrodoma lygiai taip pat 3.1.4 poskyryje buvo įrodyta, kad koordinatinių inversija arba nepakeičia izoliuotos sistemos banginės funkcijos arba pakeičia tik jos ženklą):

$$\psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_N s_N) = \pm \psi(\mathbf{r}_1 s_1, \mathbf{r}_2 s_2, \dots, \mathbf{r}_j s_j, \dots, \mathbf{r}_i s_i, \dots, \mathbf{r}_N s_N). \quad (4.1.3)$$

Banginės funkcijos, kurios nesikeičia sukeitus vienodas daleles vietomis, yra vadinamos **simetrinėmis funkcijomis**, o funkcijos, kurios keičia ženklą, vadinamos **antisimetrinėmis funkcijomis**.

Taigi, iš dalelių tapatingumo sąlygos išplaukia, kad dalelių sistemos banginė funkcija turi būti simetrinė arba antisimetrinė. Jeigu duotuoju laiko momentu sistemos banginė funkcija buvo simetrinė, tada ji liks simetrine ir visais vėlesniais laiko momentais¹ (analogiškas teiginys galioja ir antisimetrinėms funkcijoms). Ši banginių funkcijų savybė – tai anksčiau minėtos hamiltoniano simetrijos pasekmė. Ta simetrija išlieka esant bet kokiems išoriniams laukams. Vadinasi, *daugelio vienodų dalelių sistemos banginės funkcijos simetrija priklauso tik nuo tų dalelių prigimties*: vienos rūšies dalelių sistemos aprašomos simetrinėmis funkcijomis, o kitos rūšies dalelių sistemos aprašomos antisimetrinėmis funkcijomis. Pirmosios rūšies dalelės vadinamos **bozonais**, o antrosios rūšies dalelės – **fermionais**. Bozonai pavadinti indų fiziko S. N. Bozė (*Bose*) garbei, o fermionai – italų fiziko Enriko Fermio (*Fermi*) garbei. Bozono pavyzdys yra fotonas. Fermionų pavyzdžiai yra elektronas, protonas ir neutronas (kiti elementarieji bozonai ir fermionai bus išvardyti 8.2 poskyryje). Pagrindinis požymis, pagal kurį galima atskirti bozonus nuo fermionų, yra jų sukinys: bozonų sukinio kvantinis skaičius yra sveikasis (iš jų ir nulis), o fermionų sukinio kvantinis skaičius yra pusinis² ($1/2$, $3/2$, $5/2$ ir t. t.).

4.1.2. Nesąveikaujančių vienodų dalelių sistemos banginė funkcija

Išreikšime *nesąveikaujančių* vienodų dalelių sistemos simetrinę ir antisimetrinę bangines funkcijas. Tokios sistemos Šrėdingerio lygtis yra

¹ Šis teiginys įrodomas lygiai taip pat kaip 3.1.4 poskyryje buvo įrodytas lyginumo tvermės dėsnis (taip įrodant pakanka pakeisti žodžius „lyginė“ ir „nelyginė“ žodžiais „simetrinė“ ir „antisimetrinė“).

² Ši sąryšį tarp dalelės sukinio ir dalelių sistemos banginės funkcijos simetrijos įrodo reliatyvistinė kvantinė mechanika; nereliatyvistinė teorija šį teiginį postuluoja.

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots \hat{H}_N)\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = E\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N); \quad (4.1.4)$$

čia $\hat{H}_i$ yra i -tosios dalelės hamiltonianas. Kadangi dalelės yra vienodos, tai vienintelis operatorių $\hat{H}_i$ ir $\hat{H}_j$ skirtumas yra tas, kad jie veikia skirtingų dalelių (i -tosios ir j -tosios) koordinates; jų matematinis pavidalas yra vienodas. Atitinkamai visų viendalelių hamiltonianų tikrinių verčių ir tikrinių funkcijų sistemos yra vienodos. Šias tikrines vertes ir atitinkamas tikrines funkcijas žymėsime indeksu k . Taigi, i -tosios dalelės banginė funkcija $\psi_k(\mathbf{r}_i, s_i)$, kuri atitinka dalelės energiją E_k , yra šios lygties sprendinys:

$$\hat{H}_i\psi_k(\mathbf{r}_i, s_i) = E_k\psi_k(\mathbf{r}_i, s_i). \quad (4.1.5)$$

Kintamųjų atskyrimo metodu gauname, kad nesąveikaujančių dalelių sistemos Šrėdingerio lygties (4.1.4) sprendinys yra viendalelės Šrėdingerio lygties (4.1.5) sprendinių sandauga:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, s_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2, s_2) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, s_N); \quad (4.1.6)$$

čia k_i nusako i -tosios dalelės būseną. Atitinkama sistemos energija ((4.1.4) lygties tikrinė vertė) yra lygi atskirų dalelių energijų sumai:

$$E = \sum_{i=1}^N E_{k_i} = \sum_{k=1}^{\infty} n_k E_k. \quad (4.1.7)$$

Čia pirmajame reiškinyje sumuojama *dalelių* atžvilgiu, o antrajame – viendalelių *būsenų* atžvilgiu; n_k yra k -tosios būsenos dalelių skaičius (t. y. būsenos „ k “ pasikartojimų skaičius būsenų sekoje „ $k_1, k_2, \dots, k_N$ “). Kadangi dalelės yra neatskiriamos viena nuo kitos, tai mes negalime pasakyti, kuri dalelė yra kurios būsenos. Matematiškai ši savybė pasireiškia tuo, kad, bet kaip pertvarkius daleles tarp viendalelių būsenų, kurios įeina į (4.1.6) sandaugą, visada gausime funkciją, kuri yra (4.1.4) lygties tikrinė funkcija, atitinkanti tą pačią tikrinę vertę (4.1.7). Pertvarkymų, kuriuos atlikę gauname kitokią funkciją, skaičius yra $N!/(n_1!n_2!n_3!\dots)$, kur „ $n_k!$ “ yra k -tosios būsenos dalelių skaičiaus faktorialas: $n_k! = 1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n_k$ (nulinio faktorialas yra lygus 1). Kadangi viendalelės funkcijos yra ortonormuotos, tai bet kurios dvi daugiadalelės funkcijos, kurios gaunamos sukeitus dvi daleles vietomis (4.1.6) reiškinyje, yra ortogonalios. Vadinasi, (4.1.4) lygties tikrinės vertės (4.1.7) išsigimimo laipsnis yra lygus $N!/(n_1!n_2!n_3!\dots)$. Tai yra vadinamasis **pakaitinis išsigimimas**. Tačiau iš visų galimų (4.1.6) pavidalo funkcijų tiesinių darinių tik vienas yra simetrinė funkcija ir tik vienas – antisimetrinė funkcija. Taigi, banginės funkcijos simetriškumo arba antisimetriškumo reikalavimas pašalina minėtą pakaitinį išsigimimą. Simetrinė banginė funkcija sudaroma sudedant visų viendalelių banginių funkcijų sandaugas atžvilgiu visų galimų dalelių pertvarkymų tarp kvantinių būsenų:

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\dots}} [\psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, s_1)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_2, s_2) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, s_N) + \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2, s_2)\psi_{k_2}(\mathbf{r}_1, s_1) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, s_N) + \dots]. \quad (4.1.8a)$$

(daugiklis prieš laužtinius skliaustus yra normavimo daugiklis). Antisimetrinė N vienodų nesąveikaujančių dalelių banginė funkcija gaunama sudarius tokį determinantą:

$$\psi^{(-)}(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\mathbf{r}_1, s_1) & \psi_{k_2}(\mathbf{r}_1, s_1) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{r}_1, s_1) \\ \psi_{k_1}(\mathbf{r}_2, s_2) & \psi_{k_2}(\mathbf{r}_2, s_2) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{r}_2, s_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{k_1}(\mathbf{r}_N, s_N) & \psi_{k_2}(\mathbf{r}_N, s_N) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{r}_N, s_N) \end{vmatrix}. \quad (4.1.8b)$$

Bet kurių dviejų dalelių transpozicija yra tapati dviejų šio determinanto eilučių sukeitimui vietomis. Kaip žinome, sukeitus vietomis bet kurias dvi determinanto eilutes arba bet kuriuos du jo stulpelius, determinantas keičia ženklą. Vadinasi, (4.1.8b) funkcija iš tikrųjų yra antisimetrinė bet kurių dviejų dalelių transpozicijos atžvilgiu.

Iš reikalavimo, kad fermionų sistemos banginė funkcija turi būti antisimetrinė, išplaukia, kad nesąveikaujančių fermionų sistemoje negali būti dviejų vienodos būsenos fermionų¹. Šį teiginį 1925 m.

¹ Prielaida, kad dalelės nesąveikauja, reikalinga tam, kad visos sistemos būseną būtų galima laikyti viendalelių būsenų rinkiniu. Jeigu dalelės sąveikauja, tada atskirų dalelių kvantinės būsenos tampa neapibrėžtos – galima kalbėti tik apie visos sistemos būseną. Tačiau, kaip vėliau pamatysime, daugelio sąveikaujančių dalelių sistemų savybės dažnai pavyksta apytiksliai aprašyti taikant nesąveikaujančių dalelių modelį. Tam kiekvieną dalelę veikianti jėga (kuri priklauso nuo visų dalelių koordinačių) yra pakeičiama tam tikra efektine jėga, kuri priklauso tik nuo tos vienos dalelės koordinačių.

suformulavo austrų fizikas Wolfgangas Paulis (*Pauli*), todėl šis principas vadinamas **Paulio draudimo principu** (angl. *Pauli exclusion principle*). Paulio draudimo principas tiesiogiai išplaukia iš antisimetrinės funkcijos išraiškos (4.1.8b): jeigu viendalelių būsenų rinkinyje „ $k_1, k_2, \dots, k_N$ “ kurios nors dvi būsenos pasikartoja du kartus, tada (4.1.8b) determinanto du stulpeliai yra vienodi, o tokiu atveju determinantas yra tapačiai lygus nuliui, t. y. atitinkama būsena yra negalima.

4.1.3. Banginė funkcija, kai viendalelis hamiltonianas nepriklauso nuo sukininės koordinatės

Jeigu viendalelis hamiltonianas $\hat{H}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$) nepriklauso nuo dalelės sukininės koordinatės s_i , tada kiekvieną viendalelę banginę funkciją $\psi_k(\mathbf{r}_i, s_i)$ galima išreikšti sandauga viendalelės erdvinės banginės funkcijos $\varphi_k(\mathbf{r}_i)$ ir viendalelės sukininės banginės funkcijos $\chi_j(s_i)$. Vadinasi, šiuo atveju (4.1.8a) ir (4.1.8b) formulės tampa tokio pavidalo:

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\dots}} [\varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\chi_{j_1}(s_1)\varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2)\chi_{j_2}(s_2)\dots\varphi_{k_N}(\mathbf{r}_N)\chi_{j_N}(s_N) + \dots] \quad (4.1.9a)$$

$$\psi^{(-)}(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1)\chi_{j_1}(s_1) & \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_1)\chi_{j_2}(s_1) & \dots & \varphi_{k_N}(\mathbf{r}_1)\chi_{j_N}(s_1) \\ \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_2)\chi_{j_1}(s_2) & \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2)\chi_{j_2}(s_2) & \dots & \varphi_{k_N}(\mathbf{r}_2)\chi_{j_N}(s_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_N)\chi_{j_1}(s_N) & \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_N)\chi_{j_2}(s_N) & \dots & \varphi_{k_N}(\mathbf{r}_N)\chi_{j_N}(s_N) \end{vmatrix}. \quad (4.1.9b)$$

Jeigu fermiono sukinio kvantinis skaičius yra $1/2$ (pvz., elektrono), tada viendalelės sukininės funkcijos yra vienetiniai spinoriai $\chi^+(s_i)$ ir $\chi^-(s_i)$, kuriuos apibrėžia (3.3.38) lygybės. T. y. (4.1.9b) reiškinyje indeksas prie „ χ “ gali būti lygus tik 1 arba 2 ($\chi_1 \equiv \chi^+$; $\chi_2 \equiv \chi^-$). Paulio draudimo principas šiuo atveju teigia, kad viendalelių *erdvinių* būsenų rinkinyje „ $k_1, k_2, \dots, k_N$ “ jokia erdvinė būsena negali pasikartoti daugiau negu du kartus ir, jeigu kuri nors erdvinė būsena pasikartoja du kartus, tai atitinkamų dviejų dalelių sukininės būsenos turi būti skirtingos (t. y. vienos dalelės sukininę būseną nusako vienetinis spinorius χ^+ , o kitos – vienetinis spinorius χ^-).

Žinome, kad dalelių sistemos sukininę būseną apibūdina du kvantiniai skaičiai – pilnutinio sukinio kvantinis skaičius S ir pilnutinio sukinio projekcijos (magnetinis) kvantinis skaičius m_S , kurio galimos vertės yra $-S, -S+1, \dots, S-1, S$. Pilnutinio sukinio projekcijos operatorius $\hat{S}_z$ yra lygus atskirų dalelių sukininių projekcijų operatorių sumai. Kadangi viendalelės sukininės funkcijos χ_j yra vienos dalelės sukinio projekcijos operatoriaus tikrinės funkcijos, tai iš daugiadalelės sistemos banginių funkcijų išraiškų (4.1.9a,b) išplaukia, kad pastarosios funkcijos yra ir operatoriaus $\hat{S}_z$ tikrinės funkcijos, o atitinkama m_S vertė yra lygi atskirų dalelių sukininių projekcijų kvantinių skaičių sumai. Tačiau bendruoju atveju tos funkcijos nėra pilnutinio sukinio kvadrato operatoriaus $\hat{S}^2$ tikrinės funkcijos, t. y. nenusako būsenos su tiksliai apibrėžta kvantinio skaičiaus S verte. Banginės funkcijos, kurios vienu metu yra operatorių $\hat{S}^2$ ir $\hat{S}_z$ tikrinės funkcijos, bendruoju atveju išreiškiamos (4.1.9a,b) pavidalo ortonormuotų funkcijų, kurių kiekviena atitinka tą patį erdvinį būsenų rinkinį ir tą pačią m_S vertę, tiesiniu dariniu.

Pvz., tarkime, kad dalelių, kurių sukinio kvantinis skaičius yra $1/2$, sistemos „užpildytųjų“ viendalelių erdvinį būsenų rinkinyje yra dvi arba daugiau būsenų, kurių dalelių skaičius yra lygus vienetui (t. y. pusei didžiausio skaičiaus). Jeigu kiekvienos tokios erdvinės būsenos dalelės sukinio projekcijos ženklas yra tiksliai (t. y. vienareikšmiškai) apibrėžtas, tada sistemos banginę funkciją galima užrašyti (4.1.9b) pavidalu. Tačiau, jeigu viendalelis hamiltonianas $\hat{H}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$) nepriklauso nuo dalelės sukininės koordinatės s_i , tada iš dalies užpildytų viendalelių erdvinį būsenų dalelių sukininių projekcijos gali ir nebūti tiksliai apibrėžtos. Taip atsitinka tada, kai tarp iš dalies užpildytų viendalelių erdvinį būsenų yra bent dvi būsenos, kurias užpildo dalelės su priešingomis sukinio projekcijomis. Tų dviejų dalelių sukininių būsenų sukeitimas vietomis (t. y. jų sukininių „apvertimas“) neturi įtakos sistemos energijai (nes pagal prielaidą sistemos hamiltonianas nepriklauso nuo sukininių koordinatės) ir pilnutinio sukinio projekcijai. Tačiau toks pakeitimas pakeičia banginę funkciją, nes jos išraiškoje vienas vienetinis spinorius χ^+ pakeičiamas vienetiniu spinoriumi χ^- ir vienas vienetinis spinorius χ^- pakeičiamas vienetiniu spinoriumi χ^+ . T. y., atlikus tokį pakeitimą determinanto išraiškoje (4.1.9b), gaunamas kitoks determinantas, kuris yra ortogonalus pradiniam determinantui. Iš banginių funkcijų superpozicijos

principo (žr. 1.15 poskyrį) išplaukia, kad tada pilnutinė banginė funkcija yra lygi skirtingų determinantų, kurie gaunami po dalelių sukininių būsenų sukeitimo vietomis, tiesiniam dariniui. To darinio koeficientai priklauso nuo papildomų reikalavimų banginei funkcijai. Jeigu siekiama išreikšti banginę funkciją, kuri yra pilnutinio sukinio kvadrato operatoriaus $\hat{S}^2$ tikrinė funkcija, tada minėtojo determinantų tiesinio darinio koeficientai turi būti tokie, kad banginę funkciją būtų galima išreikšti šitaip:

$$\psi^{(-)}(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \dots, \mathbf{r}_N, s_N) = \sum_{n=1}^K \varphi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \chi_{S, m_S, n}(s_1, s_2, \dots, s_N); \quad (4.1.10)$$

čia $\chi_{S, m_S, n}(s_1, s_2, \dots, s_N)$ yra n -tasis vienetinių spinorių sandaugų tiesinis darinys, kuris yra duotąsias S ir m_S vertes atitinkanti operatorių $\hat{S}^2$ ir $\hat{S}_z$ tikrinė funkcija, o K yra tokių ortonormuotų sukininių funkcijų skaičius. Dviejų dalelių sistemos atveju kiekvieną S ir m_S verčių porą atitinka tik viena dvidalėlė sukininė funkcija $\chi_{S, m_S}(s_1, s_2)$, t. y. (4.1.10) sumą sudaro tik vienas dėmuo ($K = 1$). Šiuo atveju $\chi_{S, m_S}(s_1, s_2)$ yra dviejų vienetinių spinorių sandaugų $\chi^+(s_1)\chi^+(s_2)$ tiesinis darinys, kurio koeficientai – tai Klebšo ir Gordano koeficientai (žr. C priedas, C.4 skyrelis ir C.2 lentelė). Dvidalėlė sukininė funkcija $\chi_{S, m_S}(s_1, s_2)$ yra simetrinė arba antisimetrinė; jos simetrija yra priešinga atitinkamos dvidalėlės erdvinės funkcijos $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ simetrijai (žr. 4.1.4 poskyrį). Didesnio vienodų dalelių skaičiaus sistemoje vieną S ir m_S verčių porą bendruoju atveju atitinka kelios ortonormuotos sukininės funkcijos, kurios nėra nei simetrinės, nei antisimetrinės. Tačiau jų tiesinis darinys (4.1.10) yra antisimetrinė funkcija.

4.1.4. Dviejų vienodų dalelių, kurių sukinys yra 1/2, sistemos banginė funkcija

Nagrinėsime dviejų vienodų dalelių, kurių sukinio kvantinis skaičius yra 1/2, sistemą. Kaip ir 4.1.3 poskyryje, teigiame, kad viendalelis hamiltonianas $\hat{H}_i$ ($i = 1, 2$) nepriklauso nuo dalelės sukininės koordinatės. Jeigu tų dalelių erdvinės būsenos yra skirtingos, o sukininių projekcijų ženklai priešingi, tada, remiantis tuo, kas pasakyta 4.1.3 poskyrio pabaigoje, sistemos banginę funkciją nusako vienas iš šių dviejų reiškinių:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{2} \left[\begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^+(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^-(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^+(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^-(s_2) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^-(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^+(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^-(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^+(s_2) \end{vmatrix} \right], \quad (4.1.11a)$$

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{2} \left[\begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^+(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^-(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^+(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^-(s_2) \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi^-(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi^+(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi^-(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi^+(s_2) \end{vmatrix} \right]; \quad (4.1.11b)$$

čia „a“ ir „b“ žymi du kvantinių skaičių rinkinius, kurie vienareikšmiškai nusako dalelės erdvinio judėjimo būseną, o φ_a ir φ_b yra atitinkamos viendalelės erdvinės banginės funkcijos; daugiklis prieš laužtinius skliaustus yra normavimo daugiklis. Nesunku įsitikinti, kad (4.1.11a) reiškinių galima išreikšti antisimetrinės dvidalėlės erdvinės funkcijos ir simetrinės dvidalėlės sukininės funkcijos sandauga:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^+(s_1)\chi^-(s_2) + \chi^+(s_2)\chi^-(s_1)], \quad (4.1.12a)$$

o (4.1.11b) reiškinių galima išreikšti simetrinės dvidalėlės erdvinės funkcijos ir antisimetrinės dvidalėlės sukininės funkcijos sandauga:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^+(s_1)\chi^-(s_2) - \chi^+(s_2)\chi^-(s_1)]. \quad (4.1.12b)$$

Jeigu abiejų dalelių sukininės būsenos yra vienodos ir nusakomos vienetiniu spinoriumi χ^+ , tada dalelių sistemos banginė funkcija nusakoma vienu determinantu (4.1.9b), tačiau daugikliai $\chi^+(s_1)$ ir $\chi^+(s_1)$ iškeliami prieš determinanto ženklą, todėl pilnutinę banginę funkciją galima išreikšti šitaip:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \chi^+(s_1)\chi^+(s_2). \quad (4.1.13a)$$

Analogiškai, jeigu abiejų dalelių sukininės būsenas nusako vienetinis spinorius χ^- , tada

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \chi^-(s_1)\chi^-(s_2). \quad (4.1.13b)$$

Jeigu abiejų dalelių erdvinės būsenos yra vienodos ($a = b$), tada iš Paulio draudimo principo išplaukia, kad jų sukininės būsenos turi būti skirtingos, t. y. vienos dalelės sukininę būseną nusako vienetinis

spinorius χ^+ , o kitos dalelės – vienetinis spinorius χ^- . Tada iš banginės funkcijos bendrosios išraiškos (4.1.9b) išplaukia, kad dviejų vienodos erdvinės būsenos dalelių sistemos banginė funkcija lygi

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^+(s_1) \chi^-(s_2) - \chi^+(s_2) \chi^-(s_1)]; \quad (4.1.14)$$

čia φ_a yra viendalelė erdvinė banginė funkcija, kuri nusako dalelių erdvinio judėjimo būseną.

Iš (4.1.12)–(4.1.14) lygybių akivaizdu, kad dviejų vienodų nesąveikaujančių dalelių, kurių sukinio kvantinis skaičius lygus $1/2$, sistemos banginės funkcijas galima išreikšti dvidalelės erdvinės funkcijos ir dvidalelės sukininės funkcijos sandauga:

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(s_1, s_2); \quad (4.1.15)$$

čia abi funkcijos φ ir χ yra normuotos į vienetą (toms funkcijoms priskiriamas ir daugiklis $1/\sqrt{2}$, kuris užrašytas prieš laužtinius skliaustus (4.1.12)–(4.1.14) lygybėse). (4.1.12b) ir (4.1.14) reiškiniuose sukininė dvidalelė funkcija yra antisimetrinė, o erdvinė funkcija yra simetrinė funkcija

$$\varphi^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} [\varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_a(\mathbf{r}_2) \varphi_b(\mathbf{r}_1)] / \sqrt{2}, & \text{jeigu } a \neq b, \\ \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2), & \text{jeigu } a = b. \end{cases} \quad (4.1.16a)$$

(4.1.12a), (4.1.13a) ir (4.1.13b) reiškiniuose sukininė funkcija yra simetrinė, o erdvinė funkcija yra antisimetrinė funkcija

$$\varphi^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [\varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2) \varphi_b(\mathbf{r}_1)] / \sqrt{2}. \quad (4.1.16b)$$

Kadangi vienetiniai spinoriai χ^+ ir χ^- yra vienos dalelės sukinio projekcijos operatoriaus tikrinės funkcijos, kurios atitinka tikrines vertes $+1/2$ ir $-1/2$, tai iš dvidalelės sistemos banginių funkcijų išraiškų (4.1.12)–(4.1.14) išplaukia, kad tos funkcijos yra ir pilnutinio dviejų dalelių sistemos sukinio projekcijos operatoriaus $\hat{S}_z$ tikrinės funkcijos. Banginės funkcijos (4.1.12a), (4.1.12b) ir (4.1.14) atitinka $m_S = 1/2 - 1/2 = 0$, banginė funkcija (4.1.13a) atitinka $m_S = 1/2 + 1/2 = 1$, o banginė funkcija (4.1.13b) atitinka $m_S = -1/2 - 1/2 = -1$. Tos funkcijos yra ir pilnutinio sukinio kvadrato operatoriaus $\hat{S}^2$ tikrinės funkcijos. Norint tuo įsitikinti, pakanka palyginti koeficientus prieš viendalelių sukininių funkcijų sandaugas funkcijos $\chi(s_1, s_2)$ išraiškoje su Klebšo ir Gordano koeficientais, kurių išraiškos pateiktos C priedo pabaigoje, C.2 lentelėje (naudojantis ta lentele, reikia atlikti pakeitimus „ $J \rightarrow S$ “, „ $M \rightarrow m_S$ “, „ $j \rightarrow 1/2$ “). Šitai gauname, kad simetrinės dvidalelės sukininės funkcijos, kurios įeina į (4.1.12a), (4.1.13a) ir (4.1.13b) reiškinius, atitinka pilnutinio sukinio kvantinį skaičių $S = 1$, o antisimetrinės dvidalelės sukininės funkcijos, kurios įeina į (4.1.12b) ir (4.1.14) reiškinius, atitinka $S = 0$. Toliau pateiktos tų funkcijų išraiškos (pirmasis indeksas dvidalelės sukininės funkcijos žymenyje nusako skaičių S , o antrasis – skaičių m_S):

a) antisimetrinė sukininė funkcija

$$\chi_{0,0}(s_1, s_2) = [\chi^+(s_1) \chi^-(s_2) - \chi^+(s_2) \chi^-(s_1)] / \sqrt{2}, \quad (4.1.17a)$$

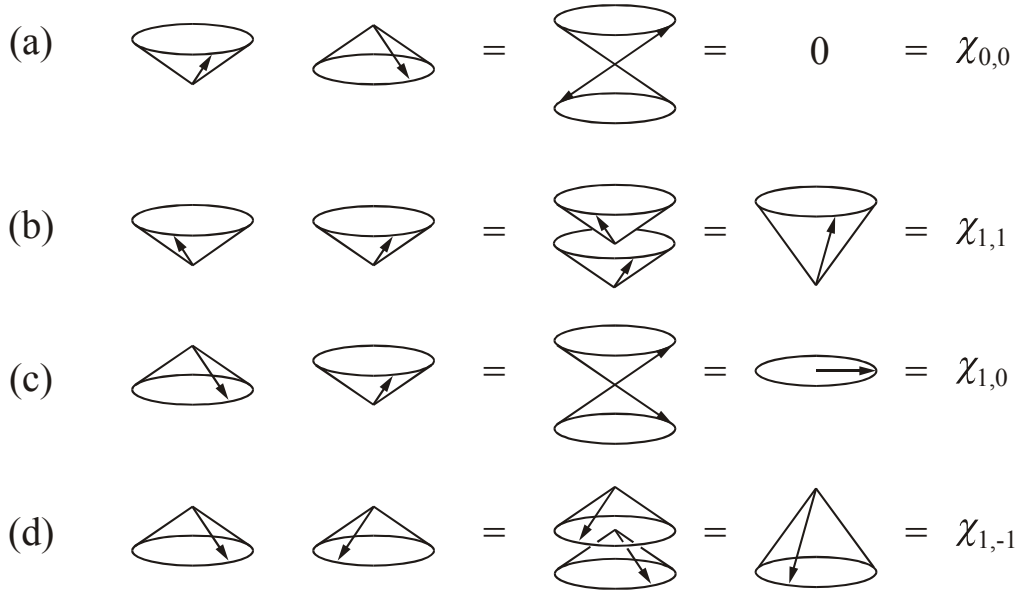
b) simetrinės sukininės funkcijos

$$\chi_{1,1}(s_1, s_2) = \chi^+(s_1) \chi^+(s_2), \quad (4.1.17b)$$

$$\chi_{1,0}(s_1, s_2) = [\chi^+(s_1) \chi^-(s_2) + \chi^+(s_2) \chi^-(s_1)] / \sqrt{2}, \quad (4.1.17c)$$

$$\chi_{1,-1}(s_1, s_2) = \chi^-(s_1) \chi^-(s_2). \quad (4.1.17d)$$

Antisimetrinė sukininė funkcija (4.1.17a) atitinka priešingas elektronų sukinių kryptis (t. y. $S = 0$), o simetrinės sukininės funkcijos (4.1.17b–d) atitinka vienodas abiejų elektronų sukinių kryptis (t. y. $S = 1$). Kai sakoma, kad sukinių kryptys yra „vienodos“ arba „priešingos“, turima omenyje, kad tų sukinių vektorių projekcijos į pilnutinio sukinio kryptį yra vienodo ženklo arba priešingų ženklų. Iš bendrųjų judesio kiekio momento savybių išplaukia, kad, apibrėžus sukinio projekciją į fiksuotą (laisvai pasirinktą) kryptį erdvėje, paties sukinio vektoriaus kryptis lieka neapibrėžta. Tai išreiškiama žodžiais „sukinio vektorius precesuoja aplink pasirinktąją kryptį“. Jeigu sukinio vektorius yra gautas sudėjus kitus du sukinio vektorius, tada abu sudedamieji vektoriai „sinchroniškai“ precesuoja aplink pasirinktąją kryptį taip, kad pilnutinio sukinio modulis lieka pastovus. Taigi, kampas tarp sudedamųjų vektorių lieka tiksliai apibrėžtas. Tačiau tas kampas niekada nėra lygus nuliui. T. y. du sukinio vektoriai negali būti „vienodų krypčių“ tikraja to žodžio prasme. Tačiau, kaip parodyta 4.1a pav., dviejų elektronų sukiniai gali būti tiksliai *priešingų* krypčių. Ši atvejį atitinka dviejų elektronų sistemos būseną, kai $S = 0$ (sukininė funkcija



4.1 pav. Du sukiniai, kuriuos atitinka sukinio kvantinis skaičius $s = 1/2$, gali būti sudėti keturiais skirtingais būdais: (a) – būseną, kai abu sukiniai yra priešingų krypčių ($S = 0$); (b), (c) ir (d) – trys būsenos, kai abu sukiniai yra „vienodų“ krypčių ($S = 1$)

(4.1.17a)). Be to, 4.1c pav. parodyta, kad, sudedant du sukinius, kurių projekcijos į pasirinktą kryptį (4.1 pav. atveju – į vertikaliąją kryptį) yra priešingos, galima gauti ir nenulinį pilnutinį sukinį. Ši atveji atitinka dviejų elektronų sistemos būseną, kai $S = 1$, o $m_S = 0$ (sukininė funkcija (4.1.17c)).

(4.1.12a,b), (4.1.13a,b) ir (4.1.14) formulės nusako visas galimas dviejų vienodų nesąveikaujančių dalelių, kurių sukinio kvantinis skaičius $1/2$, sistemos banginės funkcijas, kurios vienu metu yra pilnutinio sukinio kvadrato ir pilnutinio sukinio projekcijos operatorių tikrinės funkcijos, kai viendalelis hamiltonianas nepriklauso nuo dalelės sukininės koordinatės. Taigi, dviejų vienodų nesąveikaujančių dalelių, kurių sukinio kvantinis skaičius yra $1/2$, sistemos banginės funkcijos $\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2)$ pavidalas priklauso nuo sistemos sukinio kvantinių skaičių S ir m_S ir nuo to, ar dalelių erdvinės būsenos yra vienodos. Jeigu viendalelės erdvinės būsenos, kurias nusako kvantinių skaičių rinkiniai a ir b , yra vienodos (t. y. $a = b$), tada sistemos erdvinė banginė funkcija yra simetrinė funkcija $\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)$, o sukininė – antisimetrinė funkcija (4.1.17a):

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) \cdot \chi_{0,0}(s_1, s_2), \quad (4.1.18)$$

o jeigu viendalelės erdvinės būsenos yra skirtingos (t. y. $a \neq b$), tada būsenų, kurios aprašomos simetrinėmis sukininėmis funkcijomis (4.1.17b–d), orbitinė banginė funkcija yra antisimetrinė funkcija $[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)]/\sqrt{2}$, o būsenų, kurios aprašomos antisimetrine sukinine funkcija (4.1.17a), orbitinė banginė funkcija yra simetrinė funkcija $[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)]/\sqrt{2}$:

$$S = 0: \quad \psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \cdot \chi_{0,0}(s_1, s_2), \quad (4.1.19a)$$

$$S = 1: \quad \psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)] \cdot \begin{cases} \chi_{1,1}(s_1, s_2), & (4.1.19b) \\ \chi_{1,0}(s_1, s_2), & (4.1.19c) \\ \chi_{1,-1}(s_1, s_2). & (4.1.19d) \end{cases}$$

Iki šiol buvo teigiama, kad užimtų erdvinių viendalelių būsenų rinkinys „ $k_1, k_2, \dots, k_N$ “ yra tiksliai (t. y. vienareikšmiškai) apibrėžtas, t. y. kad kiekvienos erdvinės viendalelės būsenos dalelių skaičius yra tiksliai apibrėžtas ir lygus 1 arba 2. Tikrovėje dažnai taip nėra. Pvz., jeigu dalelės yra centriniame jėgų lauke, tada viendalelė erdvinio judėjimo būseną apibūdinama pagrindiniu kvantiniu skaičiumi n , orbitiniu kvantiniu skaičiumi l ir magnetiniu kvantiniu skaičiumi m_l (žr. 3.2.4 poskyrį), o visos dalelių sistemos erdvinio judėjimo būseną apibūdinama pilnutine energija, pilnutiniu orbitiniu kvantiniu skaičiumi L ir pilnutiniu magnetiniu kvantiniu skaičiumi m_L , kurio galimos vertės yra $m_L = -L, -L + 1, \dots, L - 1, L$. Kvantinis skaičius m_L yra lygus atskirų dalelių magnetinių kvantinių skaičių sumai. Jeigu kiekvienos užimtų viendalelės erdvinės būsenos orbitinio judesio kiekio momento modulis (t. y. tos viendalelės

būsenos orbitinis kvantinis skaičius l) yra tiksliai apibrėžtas, tada tos viendalelės būsenos magnetinio kvantinio skaičiaus galimos vertės yra $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$. Vadinasi, jeigu visų užimtų viendalelių erdvinų būsenų *orbitiniai* kvantiniai skaičiai yra tiksliai apibrėžti, tai jų *magnetiniai* kvantiniai skaičiai gali ir nebūti tiksliai apibrėžti, nes duotąją m_L vertę bendruoju atveju galima gauti vartojant įvairius viendalelių erdvinų būsenų magnetinių kvantinių skaičių derinius. Pvz., jeigu duota dviejų dalelių sistema ir vienos dalelės orbitinis kvantinis skaičius lygus 2, o kitos dalelės orbitinis kvantinis skaičius lygus 1, tada vertė $m_L = 2$ gaunama, kai viena dalelė yra erdvinės būsenos, kurią atitinka magnetinis kvantinis skaičius $m_1 = 2$, o kita dalelė yra erdvinės būsenos, kurią atitinka magnetinis kvantinis skaičius $m_2 = 0$, arba kai $m_1 = 1$ ir $m_2 = 1$. Vadinasi, šiuo atveju yra galimos dvi užimtų viendalelių erdvinų būsenų poros (t. y. būsenų skaičius didesnis už dalelių skaičių). Todėl šiame pavyzdyje dvidalelė erdvinė banginė funkcija $\varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, kuri yra pilnutinį orbitinį kvantinį skaičių L ir pilnutinį magnetinį kvantinį skaičių $m_L = 2$ atitinkanti pilnutinio orbitinio judesio kiekio momento kvadrato ir jo projekcijos operatorių tikrinė funkcija, turi būti viendalelių erdvinų funkcijų sandaugų: $\varphi_{2,2}(\mathbf{r}_1)\varphi_{1,0}(\mathbf{r}_2)$ ir $\varphi_{2,1}(\mathbf{r}_1)\varphi_{1,1}(\mathbf{r}_2)$ tiesinis darinys; čia viendalelės erdvinės funkcijos žymens pirmasis apatinis indeksas nusako tos būsenos orbitinį kvantinį skaičių, o antrasis indeksas nusako tos būsenos magnetinį kvantinį skaičių (kad būtų trumpiau, viendalelių erdvinų būsenų pagrindiniai kvantiniai skaičiai čia nenurodyti). Minėtojo tiesinio darinio koeficientai – tai Klebšo ir Gordano koeficientai, kurių išraiškos pateiktos C priedo pabaigoje, C.3 lentelėje (naudojantis ta lentele, reikia atlikti pakeitimus „ J “ $\rightarrow$ „ L “, „ M “ $\rightarrow$ „ m_L “, o vietoj j ir j' reikia įrašyti kiekvienos dalelės orbitinį kvantinį skaičių). Kaip matome pastarajame pavyzdyje, funkcija $\varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ bendruoju atveju neturi apibrėžtos simetrijos (nėra nei simetrinė, nei antisimetrinė). Tada simetrinė dvidalelė erdvinė funkcija, kuri atitinka duotąsias kvantinių skaičių L ir m_L vertes, sudaroma taip pat kaip anksčiau, t. y. sukeičiant funkcijos argumentus ir taip gautąją funkciją pridėdant prie pradinės funkcijos:

$$\varphi_{L,m_L}^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)], \quad (4.1.20a)$$

o antisimetrinė dvidalelė erdvinė funkcija sudaroma pakeitus ženklą „+“ pastarajame reiškinyje ženklu „-“:

$$\varphi_{L,m_L}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)]. \quad (4.1.20b)$$

Tačiau kartais viendalelių erdvinų funkcijų sandaugų tiesinis darinys $\varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, kuris sudarytas pagal C priedo C.4 skyrelyje suformuluotas taisykles (vartojant Klebšo ir Gordano koeficientus), turi apibrėžtą simetriją. Pvz., jeigu abi viendalelės erdvinės būsenos apibūdinamos vienodais pagrindiniais kvantiniais skaičiais ir vienodais orbitiniais kvantiniais skaičiais, tada visos funkcijos $\varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, kurios atitinka duotąją L vertę, yra vienodos simetrijos (tik simetrinės arba tik antisimetrinės). Jeigu abiejų viendalelių erdvinų būsenų pagrindiniai kvantiniai skaičiai yra vienodi, tada visos funkcijos $\varphi_{L,0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ taip pat turi apibrėžtą simetriją (nepriklausomai nuo viendalelių erdvinų būsenų orbitinių kvantinių skaičių). Tokiais atvejais papildomas simetrizavimas tampa nereikalingas ir tą funkciją galima iš karto rašyti į dvidalelės sistemos banginės funkcijos bendrąją išraišką (4.1.15). Tada dvidalelės sukininės funkcijos $\chi(s_1, s_2)$ simetrija taip pat tampa tiksliai apibrėžta: ji turi būti priešinga dvidalelės erdvinės funkcijos simetrijai (kad pilnutinė funkcija būtų antisimetrinė). Funkcijos $\chi(s_1, s_2)$ simetriją lemia pilnutinis sukinys: kai $S = 0$, ta funkcija yra antisimetrinė, o kai $S = 1$, ji yra simetrinė (žr. (4.1.17a–d)). Vadinasi, jeigu dviejų dalelių, kurių sukinio kvantinis skaičius $1/2$, sistemos pilnutinis sukinys yra duotas iš anksto, o abiejų dalelių pagrindiniai ir orbitiniai kvantiniai skaičiai yra vienodi, tada pilnutinės funkcijos antisimetriškumo reikalavimas uždraudžia kai kurias pilnutinio orbitinio kvantinio skaičiaus L vertes. Pvz., jeigu abiejų dalelių orbitinis kvantinis skaičius yra lygus 1, tada erdvinės dvidalelės funkcijos $\varphi_{L,m_L}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, kurios atitinka $L = 0$ ir $L = 2$, yra simetrinės, o erdvinės dvidalelės funkcijos, kurios atitinka $L = 1$, yra antisimetrinės (žr. Klebšo ir Gordano koeficientų vertes, kurios pateiktos C.3 lentelėje). Vadinasi, jeigu $S = 0$, tokios sistemos pilnutinis orbitinis kvantinis skaičius L gali būti lygus tik 0 arba 2, o jeigu $S = 1$, kvantinis skaičius L gali būti lygus tik 1.

4.2. Daugiaelektronio atomo judesio kiekio momentas ir magnetinis momentas

Atomo elektronų sistemos pilnutinis judesio kiekio momentas – tai atomo elektronų orbitinių ir sukininių judesio kiekio momentų vektorinė suma (šiam skyriuje šį momentą vadinsime „atomo“ momentu, nors iš tikro į atomo pilnutinį momentą įeina ir atomo branduolio momentas). Ši suma gaunama nuosekliai sudedant po du momentus ir taikant bendrąją momentų sudėties taisyklę (3.3.20). Tačiau atomo būseną priklauso nuo atskirų dėmenų sudėties tvarkos. Galima įsivaizduoti du būdus:

I būdas. Kiekvieno elektrono orbitinis judesio kiekio momentas $\mathbf{L}$ vektoriškai sudedamas su jo sukininiu $\mathbf{L}_s$ ir sudaro elektrono pilnutinį momentą $\mathbf{L}_j$:

$$\mathbf{L}_j = \mathbf{L} + \mathbf{L}_s.$$

Paskui skirtingų elektronų pilnutiniai momentai $\mathbf{L}_{jk}$ (čia k yra elektrono numeris) vektoriškai sudedami ir kartu sudaro atomo pilnutinį judesio kiekio momentą $\mathbf{L}_J$:

$$\mathbf{L}_J = \sum_k \mathbf{L}_{jk}.$$

Toks atomo elektronų momentų ryšys vadinamas ***jj ryšiu***.

II būdas. Visų elektronų orbitinių judesio kiekio momentų vektoriai sudedami ir kartu sudaro atomo orbitinį judesio kiekio momentą $\mathbf{L}_L$:

$$\mathbf{L}_L = \sum_k \mathbf{L}_k; \quad |\mathbf{L}_L| = \hbar \sqrt{L(L+1)}. \quad (4.2.1)$$

Visų elektronų sukininių judesio kiekio momentų vektoriai sudedami ir sudaro atomo sukininį judesio kiekio momentą $\mathbf{L}_S$:

$$\mathbf{L}_S = \sum_k \mathbf{L}_{sk}; \quad |\mathbf{L}_S| = \hbar \sqrt{S(S+1)}. \quad (4.2.2)$$

Paskui atomo orbitinis judesio kiekio momentas $\mathbf{L}_L$ vektoriškai sudedamas su atomo sukininiu judesio kiekio momentu $\mathbf{L}_S$ ir sudaro atomo pilnutinį judesio kiekio momentą:

$$\mathbf{L}_J = \mathbf{L}_L + \mathbf{L}_S; \quad |\mathbf{L}_J| = \hbar \sqrt{J(J+1)}. \quad (4.2.3)$$

Toks atomo elektronų momentų ryšys vadinamas ***LS ryšiu*** arba ***Raselo ir Saunderso ryšiu*** (angl. *Russell-Saunders coupling*).

Teisingąją elektronų orbitinių ir sukininių judesio kiekio momentų sudėties tvarką lemia įvairių liekamųjų sąveikų (t. y. sąveikų, į kurias neatsižvelgiama centrinio jėgų lauko modelyje) santykinis stiprumas. Tokių sąveikų pavyzdžiai yra elektronų Kulono stūma ir vieno elektrono sukinio ir orbitos sąveika (pastaroji sąveika buvo išnagrinėta 3.3 poskyryje). Momentų sudėties tvarka turi būti tokia, kad visų pirma būtų atsižvelgiama į stipriausias liekamasias sąveikas. Lengvųjų atomų ($Z < 40$) elektronų Kulono stūma yra svarbiausia liekamoji sąveika. Šiuo atveju labiausiai tinka *LS* ryšys. Sunkiųjų atomų elektronų greičiai yra reliatyvistiniai, o elektrono sukinio ir orbitos sąveikos energija yra daug didesnė už elektronų Kulono stūmos energiją. Šiuo atveju labiausiai tinka *jj* ryšys. Yra galimas ir „mišrusis“ ryšys, kuris turi ir *LS* ryšio, ir *jj* ryšio savybių (vadinamasis ***tarpinis ryšys***). Toliau nagrinėsime tik *LS* ryšio atvejį.

Kaip matome (4.2.1–3) formulėse, kvantiniai skaičiai, kurie nusako atomo orbitinį, sukininį ir pilnutinį judesio kiekio momentus, žymimi didžiosiomis raidėmis L , S ir J (atitinkami elektrono kvantiniai skaičiai žymimi mažosiomis raidėmis l , s ir j). Kvantinių skaičių L , S ir J vertės gaunamos pagal bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę (3.3.20). Kadangi visų elektronų sukinio kvantiniai skaičiai yra vienodi ir lygūs $1/2$, tai lengviausia apskaičiuoti atomo sukinio kvantinį skaičių S . Jeigu atomas turi N elektronų, galimos skaičiaus S vertės yra

$$S = \sum_{k=1}^N \left(\pm \frac{1}{2} \right) = \begin{cases} 0, 1, \dots, \frac{1}{2}N-1, \frac{1}{2}N, & \text{jeigu } N \text{ lyginis;} \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{1}{2}N-1, \frac{1}{2}N, & \text{jeigu } N \text{ nelyginis.} \end{cases} \quad (4.2.4)$$

Didžiausia S vertė gaunama tada, kai visų elektronų sukininių kryptys yra vienodos (tiksliau, kai visų elektronų sukininių projekcijos į pilnutinio sukinio kryptį yra vienodo ženklo), o vertė $S = 0$ gaunama tada, kai elektronų sukininių kryptys yra poromis priešingos.

Pagal momentų sudėties taisyklę (3.3.20) būsenos su apibrėžtais kvantiniais skaičiais L ir S atomo pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius J gali įgyti tik šias vertes:

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S. \quad (4.2.5)$$

Kiekviena iš šių verčių atitinka apibrėžtą kampą tarp vektorių $\mathbf{L}_L$ ir $\mathbf{L}_S$, taip pat kaip vieno elektrono atveju (žr. 3.8 pav.). Tačiau daugiaelektronų atomų sukinio kvantinis skaičius S gali būti didesnis už $1/2$,

todėl kampo tarp vektorių L_L ir L_S galimų verčių skaičius gali būti didesnis už 2. Jeigu $S \leq L$, tada pagal (4.2.5) galimų J verčių skaičius yra $2S + 1$, o jeigu $S > L$, tada galimų J verčių skaičius yra $2L + 1$.

Sukinio ir orbitos sąveika (žr. 3.3 poskyrį) daugiaelektronuose atomuose pasireiškia tuo, kad būsenos su apibrėžtais L ir S energija priklauso nuo kampo tarp atomo orbitinio judesio kiekio momento L_L ir atomo sukininio judesio kiekio momento L_S . Todėl atomo energijos lygmuo, kuris atitinka duotąsias L ir S vertes, skyla į $2S + 1$ artimų lygmenų (jeigu $S \leq L$) arba į $2L + 1$ artimų lygmenų (jeigu $S > L$). Kaip ir vieno elektrono, esant duotiems kvantiniams skaičiams n , L ir S , atomo energija didėja didėjant J .

Iš (4.2.5) išplaukia, kad bendruoju atveju, fiksavus L , duotąją J vertę galima gauti esant įvairioms S vertėms. Pvz., dviejų elektronų sistemoje (helio atomas) $S = 1/2 \pm 1/2$, t. y. 0 arba 1. Jeigu $L = 1$, tada, pvz., vertė $J = 1$ gali būti gauta ir kai $S = 0$, ir kai $S = 1$. Abu šie atvejai atitinka skirtingus energijos lygmenis. Todėl, nusakant atomo energijos lygmenį, kartu su kvantiniais skaičiais L ir J reikia nurodyti ir atomo sukinio kvantinį skaičių S . Akivaizdu, kad skaičiai L , J ir S nėra pakankami išsamiai nusakant daugiaelektronio atomo kvantinę būseną, nes tie skaičiai nieko nesako apie elektronų pasiskirstymą tarp vienelektronų būsenų (šis pasiskirstymas bus aptartas 4.4 poskyryje). Tačiau, nagrinėjant atomo kvantinius šuolius tarp energijos lygmenų, dažniausiai galima teigti, kad šuolyje dalyvauja tik vienas elektronas, o visų kitų elektronų būsenos nesikeičia ir yra žinomos. Tada, nusakant duotojo kvantinio šuolio pradinį ir galutinį energijos lygmenį, šalia anksčiau minėtų trijų kvantinių skaičių L , J ir S pakanka nurodyti tik to elektrono pagrindinio kvantinio skaičiaus n pradinę ir galutinę vertes. Be to, vietoj skaičiaus S įprasta nurodyti **multiplietiskumą** $2S + 1$, kuris nusako, kiek yra galimų kampų tarp vektoriaus L_S ir laisvai pasirinktos krypties erdvėje (jeigu $S \leq L$, skaičius $2S + 1$ yra lygus skaičiui lygmenų su skirtingais J , tačiau su vienodais L ir S). Būsena su $S = 0$ vadinama **singuletine būsena** ($2S + 1 = 1$), būsena su $S = 1/2$ – **dubletine būsena** ($2S + 1 = 2$), būsena su $S = 1$ – **tripletine būsena** ($2S + 1 = 3$) ir t. t. Taigi, pilnasis atomo energijos lygmens žymuo yra tokio pavidalo: $n^{2S+1}L_J$, čia vietoj L verčių 0, 1, 2, ... vartojamos didžiosios raidės S, P, D ir t. t. Pvz., žymuo $3^2P_{3/2}$ reiškia lygmenį, kuris atitinka $n = 3$, $S = 1/2$, $L = 1$ ir $J = 3/2$.

Atomai turi magnetinį momentą, kuris susijęs su atomo judesio kiekio momentu. Atomo pilnutinis magnetinis momentas μ_{piln} lygus atomo orbitinio magnetinio momento μ_L ir sukininio magnetinio momento μ_S vektorinei sumai:

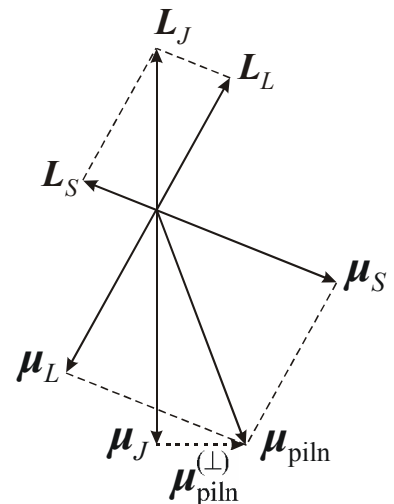
$$\mu_{\text{piln}} = \mu_L + \mu_S. \quad (4.2.6)$$

Kadangi orbitinis ir sukininis magnetiniai momentai susideda iš atskirų elektronų orbitinių ir sukininių magnetinių momentų, o šie susiję su atitinkamais judesio kiekio momentais pagal (1.11.3) ir (3.3.4) formules, tai vektorius μ_L yra susijęs su vektoriumi L_L pagal (1.11.3) formulę, o μ_S susijęs su L_S pagal (3.3.4). Tačiau pilnutinio magnetinio momento (4.2.6) kryptis nėra priešinga pilnutinio judesio kiekio momento L_J kryptčiai, nes orbitinis ir sukininis g faktoriai yra skirtingi (orbitinis lygus 1, o sukininis lygus 2). Tai parodyta 4.2 pav. Kaip minėta 3.3 poskyryje, L_L ir L_S precesuoja apie L_J . Vadinasi, μ_{piln} taip pat precesuoja apie L_J . Reiškiniuose, kurie priklauso nuo atomo pilnutinio judesio kiekio momento, pasireiškia tik vektoriaus μ_{piln} vidurkis, kurio kryptis priešinga L_J kryptčiai, o modulis lygus vektoriaus μ_{piln} projekcijos į L_J kryptį moduliui. Todėl toliau, kalbant apie atomo magnetinį momentą, bus turimas omenyje būtent šis vidurkis, o ne tikrasis pilnutinio magnetinio momento vektorius (4.2.6). Taigi, atomo magnetinis momentas μ_J gaunamas atėmus iš pilnutinio magnetinio momento vektoriaus μ_{piln} vektorių $\mu_{\text{piln}}^{(\perp)}$, kuris nusako vektoriaus μ_{piln} statmenąją komponentę (žr. 4.2 pav.). Taip apibrėžus atomo magnetinį momentą, jo modulis lygus

$$|\mu_J| = |\mu_L| \cos(L_L, L_J) + |\mu_S| \cos(L_S, L_J). \quad (4.2.7)$$

Kampų tarp L_L ir L_J bei tarp L_S ir L_J kosinusus galima išreikšti pakėlus kvadratu sąryšius $L_S = L_J - L_L$ ir $L_L = L_J - L_S$. Tada, atsižvelgę į modulius $|L_L|$, $|L_S|$ ir $|L_J|$ išraiškas (4.2.1–3), matome:

$$|\mu_J| = \mu_B g_J \sqrt{J(J+1)}; \quad g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (4.2.8)$$



4.2 pav. Atomo orbitinio ir sukininio mechaninio ir magnetinio momentų vektorinė sudėtis

Čia g_J yra atomo elektronų sistemos g faktorius – atomo elektronų pilnutinių magnetinio momento ir judesio kiekio momento projekcijų į duotąją kryptį santykis, išreikštas $-\mu_B/\hbar$ vienetais. g faktoriaus išraišką (4.2.8) 1921 m. išvedė vokiečių kilmės amerikiečių fizikas Alfredas Landė (*Landé*), todėl atomo elektronų g faktorius taip pat vadinamas **Landė g faktoriumi**.

Jeigu atomas turi pastovų magnetinį momentą (t. y. jeigu $J > 0$), tada, esant išoriniam magnetiniam laukui, atomo magnetinio momento μ_J skirtingos kryptys nėra lygiavertės. Taip yra dėl to, kad atomas, kurio magnetinis momentas yra μ_J , išoriniame magnetiniame lauke, kurio indukcija yra $\mathbf{B}$, įgyja papildomą potencinę energiją

$$E_M = -\mu_J \cdot \mathbf{B} = -\mu_J B \cos(\mu_J, \mathbf{B}); \quad (4.2.9)$$

čia $\mu_J \equiv |\mu_J|$, $B \equiv |\mathbf{B}|$. Kadangi ši energija priklauso nuo kampo tarp μ_J ir $\mathbf{B}$, tai kiekvienas energijos lygmuo skyla į tiek polygmenių, kiek yra galimų kampų tarp vektorių μ_J ir $\mathbf{B}$. Kaip žinome, atomo pilnutinio judesio kiekio momento ir atomo magnetinio momento projekcijas į laisvai pasirinktą z ašį nusako kvantiniai skaičiai m_J :

$$L_{Jz} = m_J \hbar, \quad (4.2.10)$$

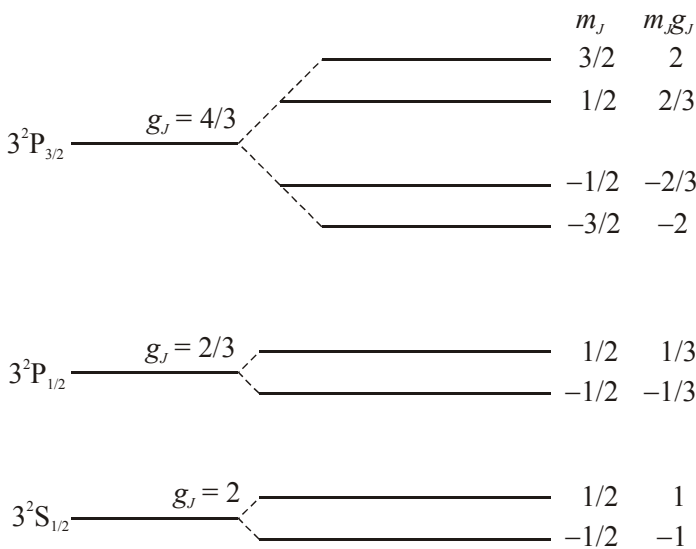
$$\mu_{Jz} = -m_J g_J \mu_B, \quad (4.2.11)$$

$$m_J = -J, -J+1, \dots, J-1, J. \quad (4.2.12)$$

T. y. kiekvienos kvantinės būsenos atomo pilnutinio judesio kiekio momento vektorius precesuoja aplink z ašies kryptį taip, kad projekcija L_{Jz} lieka pastovi. Šiuo atveju z kryptį patogiausia pasirinkti taip, kad ji sutaptų su $\mathbf{B}$ kryptimi, nes tada kiekvieną energijos lygmenį atitinka apibrėžta m_J vertė¹. Tokiu atveju atomo sąveikos su išoriniu magnetiniu lauku energija (4.2.9) lygi

$$E_M = \mu_{Jz} B = -m_J g_J \mu_B B \quad (m_J = -J, \dots, J). \quad (4.2.13)$$

Taigi, išoriniame magnetiniame lauke kiekvienas atomo energijos lygmuo skyla į $2J+1$ artimų lygmenų (žr. 4.3 pav.). Atitinkamai skyla ir atomo spektro linijos (apie šį spektro linijų skilimą bus kalbama 5.4 poskyryje). Atomo spektro linijų skilimą esant nuostoviam magnetiniam laukui 1896 m. pirmasis pastebėjo olandų fizikas Peteris Zėmanas (*Zeeman*), todėl šis reiškinys vadinamas **Zėmano efektu**. Tokio pobūdžio skilimas, kurį nusako (4.2.13) formulė, būna tik palyginti silpnuose magnetiniuose laukuose, t. y. tik tada, kai atomo orbitinio ir sukininio magnetinių momentų sąveikos su išoriniu lauku energija yra



4.3 pav. Natrio atomo energijos lygmenų skilimas magnetiniame lauke (skilimo didumo ir intervalų tarp neskilusių lygmenų santykis tikrovėje yra daug mažesnis už tą, kuris parodytas šioje energijos lygmenų diagramoje)

mažesnė už sukinio ir orbitos sąveikos energiją. Stipresniuose laukuose sukinio ir orbitos ryšys yra nutraukiamas, ir vektoriai $\mathbf{L}_L$ bei $\mathbf{L}_S$ pradeda nepriklausomai vienas nuo kito precesuoti aplink išorinio lauko kryptį. Tada, apibūdinant atomo kvantinę būseną, vietoj kvantinių skaičių J ir m_J reikia vartoti kvantinius skaičius m_L ir m_S , kurie nusako atitinkamai atomo orbitinio ir sukininio momento projekcijas į išorinio lauko kryptį (atitinkamas energijos lygmenų ir spindulių spektro linijų skilimas vadinamas Pašeno ir Bako reiškiniu). Esant dar stipresniems magnetiniams laukams, ryšys tarp skirtingų elektronų orbitinių ir sukininių momentų taip pat nutraukiamas, todėl *kiekvieno* elektrono orbitinis ir sukininis momentai nepriklausomai vienas nuo kito precesuoja aplink išorinio lauko kryptį. Tokiu atveju, nusakant atomo kvantinę būseną, reikia nurodyti visų elektronų orbitinius ir sukininius magnetinius kvantinius skaičius m_l ir m_s .

¹ Jeigu z ašis ir vektorius $\mathbf{B}$ nebūtų lygiagretūs, tada, matuojant L_{Jz} , kai atomas yra apibrėžtos energijos, įvairiuose matavimuose būtų gaunamos visos galimos m_J vertės (4.2.12), o skirtingų m_J verčių pasikartojimo dažniai priklausytų nuo kampo tarp z ašies ir magnetinio lauko krypties.

4.3. Helio atomas. Elektronų pakaitinė sąveika

4.1 poskyryje buvo gauta nesąveikaujančių fermionų (pvz., elektronų) sistemos banginės funkcijos bendroji išraiška (4.1.9b). Ši išraiška yra svarbi apytiksliai sprendžiant daugiaelektronio atomo Šrėdingerio lygtį. Neatsižvelgiant į sąveikas, kurias lemia elektronų sukiniai, ta lygtis yra

$$\sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \sum_{i=1}^N U(r_i) - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \psi = 0; \quad (4.3.1)$$

čia N yra elektronų skaičius, $\mathbf{r}_i$ yra i -tojo elektrono spindulys vektorius, r_i yra to spindulio vektoriaus modulis (t. y. atstumas tarp i -tojo elektrono ir branduolio), ∇_i^2 yra Laplaso operatorius, kuris veikia tik i -tojo elektrono koordinatės, $U(r_i)$ yra i -tojo elektrono ir atomo branduolio sąveikos potencinė energija, o $U_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ yra i -tojo ir j -tojo elektronų tarpusavio sąveikos potencinė energija:

$$U_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{ij}}; \quad (4.3.2)$$

čia r_{ij} yra atstumas tarp elektronų: $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$.

Šrėdingerio lygtį (4.3.1) neįmanoma išspręsti tiksliai. Šio uždavinio sprendimą komplikuoja elektronų tarpusavio sąveika. Tačiau apytiksliai galima teigti, kad ta sąveika neturi įtakos banginių funkcijų pavidalui¹ ir kad elektronai daugiaelektroniame atome yra pasiskirstę tarp vienelektroninių būsenų, kurios nusakomos tais pačiais keturiais kvantiniais skaičiais (3.3.25) kaip ir vandeniliškojo atomo būsenos. Laikantis šios prielaidos, daugiaelektronio atomo banginės funkcijos apytiksliai skaičiuojamos taip lyg elektronai nesąveikautų tarpusavyje. Tokiu atveju bangines funkcijas atitinka visos 4.1 poskyryje suformuluotos išvados.

Išnagrinėsime elektronų tarpusavio sąveikos įtaką dviejų elektronų sistemos – helio atomo – energijos lygmenims. Įsitikinsime, kad, įskaičius minėtąją sąveiką, orbitinės banginės funkcijos simetrizavimas arba antisimetrizavimas (išreiškiant ją vienelektroninių orbitinių funkcijų sandaugų tiesiniais dariniais, kurie įeina į (4.1.19a–d)) sąlygoja papildomą energijos dėmenį – „mainų energiją“.

4.3.1*. Helio atomo analizė, pagrįsta trikdymų teorija. Pakaitinė sąveika

Helio atomo Šrėdingerio lygtis (neatsižvelgiant į sąveikas, kurias lemia elektronų sukiniai) yra tokio pavidalo:

$$\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r_1) - U(r_2) - U_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)) \psi = 0. \quad (4.3.3)$$

Ši lygtis nepriklauso nuo elektronų sukininių koordinačių. Todėl, jeigu elektronų Kulono sąveika neturi žymios įtakos banginėms funkcijoms, (4.3.3) lygties tikrines funkcijas galima apytiksliai išreikšti (4.1.18)–(4.1.19a–d) pavidalu. Tose išraiškose apatiniai indeksai „a“ ir „b“ reiškia du kvantinių skaičių trejetus (3.2.29)), o φ_a ir φ_b yra atitinkamos vienelektroninės orbitinės funkcijos (tai yra vienelektroninės Šrėdingerio lygties (3.2.1) tikrinės funkcijos). Nepaisant elektronų sąveikos, dviejų elektronų sistemos energija yra

$$E = E_a + E_b. \quad (4.3.4)$$

Elektronų tarpusavio sąveika, kurią nusako potencinės energijos dėmuo

$$U_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (4.3.5)$$

pakeičia sistemos energijos lygmenis ir bangines funkcijas. Sąveikaujančių tarpusavyje elektronų sistemos energijos lygmenis ir bangines funkcijas galima apskaičiuoti tik apytiksliai, taikant įvairius artutinius metodus. Vienas iš tokių metodų – tai trikdymų teorija, kuri remiasi prielaida, kad elektronų tarpusavio sąveikos energija (4.3.5) yra maža, palyginti su „nesutrikdytos“ sistemos potencine energija $U(r_1) + U(r_2)$. Sudarius nesutrikdytos sistemos bangines funkcijas (4.1.18), (4.1.19a–d) ir žinant jos energiją (4.3.4) bei hamiltoniano trikdžio matematinę išraišką (4.3.5), pagal nuostoviąją trikdymų teoriją, kuri išdėstyta A priedo A.2 skyrelyje, galima apytiksliai įvertinti sistemos energijos lygmenis ir atitinkamas bangines funkcijas esant trikdžiui.

¹ T. y. galima teigti, kad ta sąveika turi įtakos tik hamiltoniano tikrinėms vertėms, bet ne atitinkamoms tikrinėms funkcijoms. Ši išvada gaunama nuostoviosios trikdymų teorijos pirmajame artinyje išsigimusiam energijos lygmeniui (žr. A priedas, A.2.4 skyrelis).

Visų pirma išsiaiškinsime, kaip, esant trikdžiui (4.3.5), pasikeičia sistemos energijos lygmenys, kurie atitinka vienodas abiejų elektronų orbitinio judėjimo būsenas ($a = b$). Kai nėra trikdžio, šią būseną nusako viena banginė funkcija (4.1.18). Taigi, atitinkama energijos vertė ($2E_a$) nėra išsigimusi. Nuostoviosios trikdymų teorijos pirmojo artinio rezultatas šiuo atveju yra toks: energijos lygmens pirmosios mažumo eilės pataisa $E^{(1)}$ yra lygi trikdžio vidurkiui¹ (žr. A priedas, (A.2.19) ir (A.2.11) formulės):

$$E^{(1)} = \int \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) dV_1 dV_2 \quad (a = b). \quad (4.3.6)$$

Kai $a \neq b$, energijos lygmuo (4.3.4) yra išsigimęs sukinio kvantinio skaičiaus S atžvilgiu ir sukinio projekcijos m_S atžvilgiu. Šio energijos lygmens išsigimimo laipsnis lygus keturiems, nes jį atitinka keturios ortogonalios tikrinės funkcijos (4.1.19a–d). Pagal trikdymų teoriją trikdžio poveikis išsigimusiam energijos lygmeniui pasireiškia tuo, kad jis skyla į kelis polygmenius (jų skaičius neviršija to lygmens išsigimimo laipsnio). Pvz., lygmuo (4.3.4) skyla į kelis lygmenis, kurių kiekvieną atitinka keturių funkcijų (4.1.19a–d) tiesinis darinys. To tiesinio darinio koeficientai apskaičiuojami išsprendus (A.2.22) pavidalo tiesinių lygčių sistemą. Iš sukininių funkcijų (4.1.17a–d) ortonormuotumo išplaukia, kad visi trikdžio matricos elementai V_{kn} (žr. (A.2.11)) su $k \neq n$ yra lygūs nuliui (čia k arba n nusako vieną iš keturių minėtų sukininių būsenų). Įrašę tai į (A.2.22), gauname, kad keturi matricos elementai su $k = n$ nusako energijos lygmens pirmosios mažumo eilės pataisas $E^{(1)}$, kurios atitinka kiekvieną iš keturių banginių funkcijų (4.1.19a–d). Matricos elementas, kuris atitinka būseną su simetrine orbitine funkcija (4.1.19a), yra lygus

$$U^{++} = \int \varphi^{(+)*} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \varphi^{(+)} dV_1 dV_2, \quad (4.3.7a)$$

o kiti trys matricos elementai, kurie atitinka tris būsenas su antisimetrine orbitine funkcija (4.1.19b–d), yra

$$U^{--} = \int \varphi^{(-)*} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \varphi^{(-)} dV_1 dV_2; \quad (4.3.7b)$$

čia funkcijos $\varphi^{(+)}$ ir $\varphi^{(-)}$ išreiškiamos (4.1.16a) ir (4.1.16b) lygybėmis. Įrašę (4.1.16a) ir (4.1.16b) išraiškas į (4.3.7a,b), matome:

$$U^{++} = C + A, \quad (4.3.8a)$$

$$U^{--} = C - A; \quad (4.3.8b)$$

$$C \equiv \int |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2, \quad (4.3.9)$$

$$A \equiv \frac{1}{2} \int \left[\varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \varphi_b(\mathbf{r}_1) + \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \right] \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} dV_1 dV_2. \quad (4.3.10)$$

Apskaičiuojant (4.3.9) ir (4.3.10) integralus, integruojama kiekvieno elektrono koordinačių atžvilgiu visoje erdvėje.

Toliau helio atomo energijos lygmenų pokytį, kurį sukelia elektronų Kulono sąveika (4.3.5), žymėsime ΔE . Iš to, kas anksčiau pasakyta, išplaukia, kad šį energijos pokytį galima išreikšti šitaip:

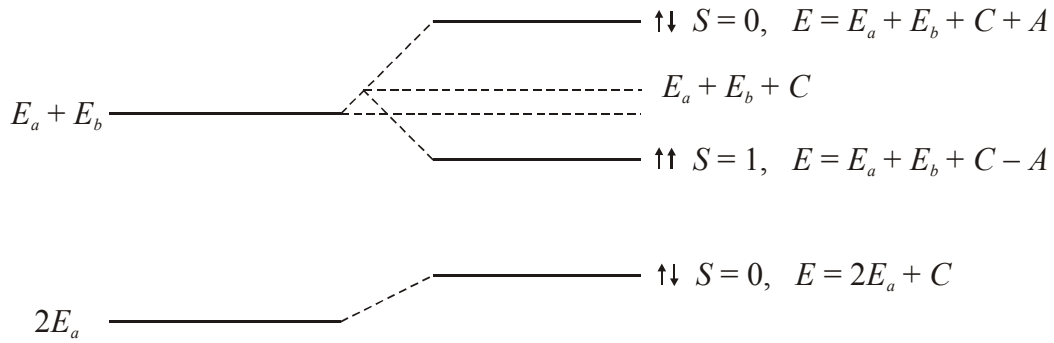
$$a) \text{ jeigu } a = b, \quad \Delta E = C; \quad (4.3.11a)$$

$$b) \text{ jeigu } a \neq b, \quad \Delta E = C \pm A \quad (4.3.11b)$$

(žr. 4.4 pav.). (4.3.11b) formulėje ženklas „+“ atitinka simetrinę orbitinę banginę funkciją, t. y. priešingas sukinų kryptis (singuletinė būsena; $S = 0$), o ženklas „–“ atitinka antisimetrinę orbitinę banginę funkciją, t. y. vienodas sukinų kryptis (tripletinė būsena; $S = 1$). Kaip matome, pirmajame trikdymų teorijos artinyje trikdys pašalina energijos lygmens išsigimimą kvantinio skaičiaus S atžvilgiu, tačiau palieka išsigimimą sukinio projekcijos atžvilgiu.

Aptarsime integralų C ir A fizikinę prasmę. Integralas C (4.3.9) yra dviejų erdvinų krūvių, kurių tankiai lygūs $-e|\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2$ ir $-e|\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2$, Kulono sąveikos energija. Ši energija yra teigiama, nes elektronai

¹ Kadangi trikdžio operatorius (4.3.5) nepriklauso nuo sukininių koordinačių, tai, skaičiuojant jo matricos elementus, integravimas $\mathbf{r}_1$ ir $\mathbf{r}_2$ atžvilgiu atsiskiria nuo sumavimo sukininių koordinačių atžvilgiu. Kadangi sukininės funkcijos (4.1.17a–d) yra ortonormuotos, tai pastaroji suma pasireiškia tik kaip pastovus daugiklis, kuris lygus 0 arba 1. Atitinkamai energijos pataisa $E^{(1)}$ lygi nuliui arba (4.3.6) integralui.



4.4 pav. Helio atomo energijos lygmenų poslinkis ir skilimas, kuriuos sukelia elektronų tarpusavio sąveika. Šalia lygmenų parodyta elektronų sukinių tarpusavio orientacija

stumia vienas kitą. Taigi, dėl elektronų sąveikos atomo energija padidėja dydžiu C . Dėmuo $\pm A$ nusako energijos lygmens skilimą į du lygmenis. Energijos pataisa $\pm A$ atsirado dėl to, kad orbitinės banginės funkcijos buvo išreikštos vienelektroninių funkcijų sandaugų tiesiniais dariniais (4.1.16a) ir (4.1.16b). Jeigu orbitinė funkcija būtų lygi vienai sandaugai $\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2)$ arba $\varphi_a(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)$, tada lygmuo tik pasislinktų dydžiu C , tačiau neskiltų. Banginės funkcijos išraiška simetriniu arba antisimetriniu pavidalu (4.1.16a) arba (4.1.16b) atspindi elektronų tapatingumą. Taigi, atomo lygmenų skilimas, kurį nusako (4.3.11b) formulės dėmuo $\pm A$, yra elektronų tapatingumo pasekmė. Integralas A (4.3.10) vadinamas **pakaitiniu integralu**, o dėmuo $\pm A$ energijos pataisoje (4.3.11b) vadinamas **mainų energija**. Jeigu pakaitinio integralo (4.3.10) pointegralinės funkcijos abiejuose dėmenyse sukeistume bet kuriuos du indeksus a ir b vietomis, gautume C (4.3.9). Todėl mainų energijos fizikinė prasmė kartais vaizdžiai aiškinama šitaip: dėl galimybės keistis elektronais tarp būsenų a ir b kiekvienas elektronas tartum iš dalies yra būsenos a ir iš dalies būsenos b . Tos „skirtingos elektrono dalys“ sąveikauja pagal Kulono dėsnį. Šios sąveikos energija ir yra mainų energija. Tokia sąveika vadinama **pakaitine sąveika**. Reikia turėti omenyje, kad pakaitinė sąveika nėra susijusi su naujos prigimties jėga (pvz., aptariamuoju atveju ji yra grynai elektrostatinės prigimties), o yra pasekmė kvantinės mechanikos taisyklių, pagal kurias skaičiuojamas sąveikos energijos vidurkis kelių vienodų dalelių sistemoje (pvz., (4.3.7a) arba (4.3.7b)). Todėl pakaitinė sąveika pasireiškia ir neelektrinių jėgų atveju (pvz., sąveikaujant nukleonams atomo branduolyje).

Priklausomai nuo pakaitinio integralo A ženklo ir kampo tarp elektronų sukinių, mainų energija gali būti teigiama arba neigiama. Šiuo atveju pakaitinis integralas (4.3.10) yra teigiamas. Vadinasi, kai elektronų sukinių kryptys yra vienodos ($S = 1$), mainų energija yra neigiama, o kai sukinių kryptys yra priešingos ($S = 0$), mainų energija yra teigiama. Todėl, esant duotoms (skirtingoms) abiejų elektronų orbitinio judėjimo būsenoms, tripletinės būsenos helio atomo energija yra mažesnė negu singuletinės būsenos. T. y. *skirtingų orbitinio judėjimo būsenų elektronams energiškai naudingiau turėti vienodos krypties sukinius*.

Pakaitinio integralo A išraiškoje (4.3.10) akivaizdu, kad jis priklauso nuo vienelektroninių orbitinių banginių funkcijų φ_a ir φ_b persiklojimo erdvėje: kuo tas persiklojimas yra mažesnis, tuo mažesnis A . Ribiniu atveju, kai $\varphi_a = 0$ erdvės srityse, kuriose $\varphi_b \neq 0$ (pvz., kai sąveikaujantys elektronai priklauso toli vienas nuo kito esantiems atomams), pakaitinė sąveika nepasireiškia.

4.3.2. Kiti reiškiniai, kuriuose pasireiškia elektronų pakaitinė sąveika

Elektronų pakaitinė sąveika turi didelę įtaką ne tik atomo energijai, bet ir kovalentinio cheminio ryšio tarp atomų stiprumui. Atlikus tokią pačią analizę, kuri anksčiau buvo atlikta nagrinėjant helio atomą, galima apskaičiuoti pakaitinio integralo A ir kuloninės energijos C priklausomybę nuo atstumo R tarp H atomų vandenilio molekulėje H_2 (šiuo atveju energijai C priskiriama ir H branduolių Kulono stūmos energija). Bendrasis abiejų šių funkcijų pavidalas yra toks kaip 2.5a pav., t. y. jos turi minimumą, artėja į $+\infty$, kai $R \rightarrow 0$, ir artėja prie nulio, kai $R \rightarrow \infty$. Minimumo aplinkoje $A < 0$, $C < 0$, o $|A|$ yra kelis kartus didesnis už $|C|$ (pvz., žr. [10] knygą). Todėl, kai abiejų elektronų sukinių kryptys yra priešingos (t. y. kai orbitinė banginė funkcija yra simetrinė, o mainų energija lygi $+A < 0$), pakaitinė sąveika mažina sistemos energiją (t. y. stiprina cheminį ryšį tarp atomų). Kai sukinių kryptys yra vienodos (t. y. kai orbitinė banginė funkcija yra antisimetrinė, o mainų energija lygi $-A > 0$), pakaitinė sąveika didina sistemos energiją. Pastaruoju atveju pilnutinės energijos priklausomybė nuo atstumo tarp atomų neturi minimumo, t. y. H_2 molekulė negali egzistuoti. Taigi, kovalentiniame cheminiame ryšyje dalyvaujančių elektronų sukinių kryptys yra priešingos.

Dar vienas gerai žinomas reiškinys, kurį lemia elektronų pakaitinė sąveika – tai **feromagnetizmas**. Jo esmė yra ta, kad kai kuriose kietose medžiagose (kurių atomai turi iš dalies užpildytą elektronų sluoksnį) *skirtingų atomų* elektronų sukiniai savaime orientuojasi viena kryptimi. Tokios medžiagos pavyzdys yra geležis. Feromagnetinė medžiaga yra sudaryta iš vadinamųjų **magnetinių domenų** – sričių, kurios turi pastovų įmagnetėjimą dėl viena kryptimi orientuotų elektronų sukinų. Normaliomis sąlygomis gretimų domenų magnetinių momentų kryptys yra priešingos. Taip yra todėl, kad kiekvieno domeno magnetinis momentas sukuria magnetinį lauką, kuris „stengiasi“ nukreipti kaimyninių domenų magnetinius momentus to lauko kryptimi, o to lauko magnetinės indukcijos vektoriaus vidurkio kryptis yra priešinga jį sukėlusio domeno magnetinio momento kryptiai. Todėl įprastomis sąlygomis skirtingų domenų magnetiniai momentai kompensuoja vienas kitą ir feromagnetikas neturi pastovaus magnetinio momento. Tačiau, kai feromagnetiką veikia pakankamai stiprus magnetinis laukas, domenų magnetiniai momentai pasisuka to lauko kryptimi ir lieka tos krypties netgi išjungus lauką. Taigi, šitaip feromagnetikas virsta „pastoviu“ magnetu. Giminingas feromagnetizmui reiškinys yra **antiferomagnetizmas**. Antiferomagnetikų gretimų vienaarūšių atomų sukiniai savaime pasisuka *priešingomis* kryptimis, todėl jų sukininiai magnetiniai momentai tiksliai kompensuoja vienas kitą. Šį reiškinį taip pat sąlygoja elektronų pakaitinė sąveika (kaip minėta, „energiškai naudingiausia“ elektronų sukinų tarpusavio kampą lemia pakaitinio integralo ženklas). Antiferomagnetiko pavyzdys yra mangano oksidas (MnO). **Feromagnetizmo** fizikinis mechanizmas yra analogiškas antiferomagnetizmui, tačiau feromagnetikų gretimų atomų sukininiai magnetiniai momentai nėra vienodo absoliučiojo didumo, todėl jie tiksliai nekompensuoja vienas kito (nors jų kryptys yra priešingos). Taip gali atsitikti tada, kai gretimi atomai yra skirtingų elementų atomai arba to paties elemento skirtingi jonai (pvz., Fe^{2+} ir Fe^{3+}). Feromagnetikai (kaip ir anksčiau minėti feromagnetikai) gali įgyti pastovų magnetinį momentą. Seniausiai žinomas feromagnetikas yra magnetitas – divalentės ir trivalentės geležies oksidas (cheminė formulė Fe_3O_4), kur Fe^{2+} ir Fe^{3+} jonai sudaro dvi vienodas gardeles, „įdėtas viena į kitą“.

4.4. Elektronų sluoksniai

Daugiaelektronų atomų savybes galima apytiksliai aprašyti teigiant, kad atomo elektronai yra pasiskirstę tarp vienelektronų kvantinių būsenų, kurios apibūdinamos tais pačiais kvantiniais skaičiais kaip ir vandeniliškojo atomo (pvz., toks artinys buvo panaudotas nagrinėjant helio atomą 4.3 poskyryje). Jeigu nepaisoma elektronų tarpusavio sąveikos bei sukinio ir orbitos sąveikos, tada kiekvieno elektrono kvantinę būseną galima apibūdinti kvantinių skaičių ketvertu (3.3.6). Vieno elektrono orbitinio judėjimo Kulono lauke būsena, kuri apibūdinama kvantinių skaičių trejetu n, l, m_l , yra vadinama atomo **orbitale**. Pagrindiniai principai, kurie nusako daugiaelektronio atomo vienelektronų būsenų užpildymą, yra Paulio draudimo principas (žr. 4.1 poskyrį) ir energijos minimumo principas. Paulio draudimo principas teigia, kad atomas negali turėti dviejų elektronų, kurių visi atitinkami kvantiniai skaičiai sutampa, t. y. vieną orbitale gali užimti ne daugiau kaip du elektronai su priešingų kryptų sukiniais. **Energijos minimumo principas** teigia, kad, esant duotam elektronų skaičiui atome, elektronų pasiskirstymas tarp vienelektronų kvantinių būsenų yra toks, kad atomo energija būtų mažiausia. Nustatysime elektronų pasiskirstymą tarp orbitalių, kuris išplaukia iš minėtų dviejų principų.

Didėjant pagrindiniam kvantiniam skaičiui n , didėja vidutinis atstumas tarp branduolio ir elektrono (pvz., žr. (1.10.15)). Šio atstumo priklausomybė nuo l yra daug silpnesnė negu nuo n (žr. 3.6 pav.). Todėl visos orbitalės, kurių pagrindinis kvantinis skaičius n sutampa, sudaro **elektronų sluoksnį**. Visos orbitalės, kurių pagrindinis ir šalutinis kvantiniai skaičiai n ir l sutampa, sudaro **elektronų posluoksnį**; jis taip pat vadinamas **pograpiu**. Elektronų sluoksniai žymimi raidėmis K, L, M ir t. t. Pvz., pirmasis elektronų sluoksnis ($n = 1$), kuris yra arčiausiai branduolio, vadinamas **K sluoksniu**. Antrasis sluoksnis atitinka $n = 2$ ir vadinamas **L sluoksniu** ir t. t. (žr. 4.1 lentelę). Elektronų posluoksniai žymimi raidėmis s, p, d, f, g, ... (žr. 4.2 lentelę).

4.1 lentelė. Elektronų sluoksnių žymenys

Pagrindinis kvantinis skaičius n	1	2	3	4	5
Elektronų sluoksnis	K	L	M	N	O

4.2 lentelė. Elektronų posluoksnių žymenys

Šalutinis kvantinis skaičius l	0	1	2	3	4
Elektronų posluoksnis	s	p	d	f	g

Kadangi kiekvieną l vertę atitinka $2l + 1$ galimų skaičiaus m_l verčių (žr. (3.2.10b)), tai viename posluoksnyje gali būti ne daugiau kaip $2(2l+1)$ elektronų. Pvz., $1s$, $2s$ ir kituose s posluoksniuose gali būti ne daugiau kaip 2 elektronai, kiekviename p posluoksnyje – ne daugiau kaip 6 elektronai ir t. t. Kadangi kiekvieną n vertę atitinka n galimų skaičiaus l verčių (žr. (3.2.27)), tai didžiausias galimas elektronų skaičius n -tajame sluoksnyje yra lygus

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2. \quad (4.4.1)$$

Pagal (4.4.1) pirmajame elektronų sluoksnyje ($n = 1$) gali būti ne daugiau kaip 2 elektronai, antrajame – ne daugiau kaip 8 elektronai (du s elektronai ir šeši p elektronai), trečiajame – ne daugiau kaip 18 elektronų (du s elektronai, šeši p elektronai ir dešimt d elektronų) ir t. t. (žr. 4.3 lentelę).

4.3 lentelė. Didžiausi elektronų skaičiai sluoksniuose ir posluoksniuose

Sluoksnis	n	Didžiausias elektronų skaičius posluoksnyje					Iš viso sluoksnyje
		s	p	d	f	g	
K	1	2					2
L	2	2	6				8
M	3	2	6	10			18
N	4	2	6	10	14		32
O	5	2	6	10	14	18	50

Jeigu elektronai nesąveikautų tarpusavyje, tada, didėjant elektronų skaičiui atome, visų pirma būtų užpildomi sluoksniai su mažiausiu n . Tai išplaukia iš energijos minimumo principo ir iš elektrono energijos išraiškos (3.2.25). Norint nustatyti, kuria tvarka užpildomi elektronų posluoksniai kiekviename sluoksnyje, (3.2.25) formulė netinka, nes į ją neįeina šalutinis kvantinis skaičius l . Kaip minėta 3.2.5 poskyryje, didėjant l , didėja vidutinis atstumas tarp branduolio ir elektrono, todėl mažėja efektyvus teigiamas krūvis, kuris veikia elektroną (dėl branduolio elektros krūvio dalinio ekranavimo vidinių sluoksnių elektronais). Todėl, didėjant l , elektrono energija didėja. Vadinasi, didėjant atomo elektronų skaičiui, visų pirma užpildomi kiekvieno sluoksnio posluoksniai su mažiausiu l . Taigi, **idealiąjį sluoksnių užpildymo tvarką** yra tokia: kiekvienas prisijungęs elektronas užima orbitalę su mažiausiais n ir l , kuriuos leidžia Paulio draudimo principas.

Kai elektronų sluoksnis yra pilnai užpildytas, susidaro stabili elektronų konfigūracija, kuri atitinka inertinių dujų elektronų konfigūraciją. Paskui prasideda kito sluoksnio užpildymas (pradedant nuo šarminio metalo).

Vidiniai elektronų sluoksniai normaliomis sąlygomis yra pilnai užpildyti. Iš šių sluoksnių elektroną išlaisvinti sunkiau negu iš išorinio sluoksnio. Be to, pilnai užpildytų elektronų sluoksnių pilnutiniai orbitinis ir sukininis judesio kiekio momentai yra lygūs nuliui. Norint tuo įsitikinti, pakanka pastebėti, kad pagal (3.2.10b) ir (3.3.3) kiekvienam pilnai užpildyto posluoksnio elektronui su duotais kvantiniais skaičiais m_l ir m_s galima surasti kitą elektroną, kurio atitinkami kvantiniai skaičiai yra priešingi, t. y. tiksliai kompensuoja pirmojo elektrono kvantinius skaičius m_l ir m_s . Taigi, pilnai užpildytame sluoksnyje visus elektronus galima „suporuoti“ taip, kad kiekvienos tokios poros orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų projekcijos į z ašį būtų lygios nuliui. Kadangi šis rezultatas gautas laisvai pasirinkus z ašies kryptį, tai jis reiškia, kad pilnai užpildyto sluoksnio pilnutiniai orbitinis ir sukininis judesio kiekio momentai lygūs nuliui.

Dėl anksčiau išvardytų priežasčių normaliomis sąlygomis (t. y. kai vidiniai sluoksniai visą laiką lieka pilnai užpildyti) atomo fizikinės ir cheminės savybės lemia išorinių (iš dalies užpildytų) sluoksnių elektronai. Pvz., šie elektronai sąveikauja susidarant cheminiams ryšiams tarp atomų, jie lemia atomo judesio kiekio ir magnetinį momentą, spinduliuotės spektrą ir t. t. Išorinis sluoksnis vadinamas **valentiniu sluoksniu**, o jo elektronai vadinami **valentiniais elektronais**. Jeigu ir išoriniame sluoksnyje visi elektronai yra „suporuoti“, tada cheminis elementas nesudaro cheminių junginių su jokiais kitais elementais, o jo molekulės yra vienas atomas. Tokie cheminiai elementai gamtoje aptinkami inertinių dujų pavidalu (pvz., helis, argonas ir kt.).

Lengvųjų atomų ($Z < 40$), kuriuose galioja LS ryšys, pagrindinės būsenos sukininio, orbitinio ir pilnutinio judesio kiekio momentų kvantinius skaičius S , L ir J galima apskaičiuoti remiantis taisyklėmis,

kurias suformulavo vokiečių fizikas Fridrichas Hundas (*Hund*). **Pirmoji Hundo taisyklė** nusako pagrindinės būsenos multipletiskumą: mažiausia energija yra būsenos, kurią atitinka didžiausias pilnutinio sukinio kvantinis skaičius S . Pirmoji Hundo taisyklė yra elektronų pakaitinės sąveikos pasekmė (žr. 4.3.1 poskyrį). Pagal šią taisyklę visų pirma užpildomos būsenos su skirtingais orbitiniais magnetiniais kvantiniais skaičiais m_l ir vienodu sukinio magnetiniu kvantiniu skaičiumi m_s (pvz., su $m_s = 1/2$); paskui užpildomos būsenos su priešinga sukinio kryptimi ($m_s = -1/2$). **Antroji Hundo taisyklė** teigia, kad iš visų būsenų su vienodu S mažiausia energija yra tos būsenos, kurios pilnutinio orbitinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius L yra didžiausias¹. Antrosios Hundo taisyklės klasikinis aiškinimas yra toks. Kelių elektronų sistemos orbitinis judesio kiekio momentas yra didžiausias tada, kai visi elektronai sukasi aplink branduolį viena kryptimi. Tokiu atveju jie susitinka vienas su kitu rečiau negu tuo atveju, jeigu suktųsi priešingomis kryptimis. Vadinasi, vidutinis atstumas tarp elektronų yra didesnis, todėl ir vidutinė jų Kulono stūmos energija yra mažesnė. **Trečioji Hundo taisyklė** nusako atomo pilnutinio sukinio kvantinio skaičiaus vertę J , kuri atitinka mažiausią atomo energiją: jeigu posluoksnis (n, l) yra užpildytas mažiau negu pusiau, tada mažiausios energijos būsenos $J = |L - S|$, o kitais atvejais mažiausios energijos būsenos $J = L + S$. Taip yra dėl sukinio ir orbitos sąveikos.

1869 m. rusų chemikas Dmitrijus Mendelejevas nustatė, kad, išdėsčius visus tuo metu žinomus elementus atominės masės didėjimo tvarka, elementų savybės kinta periodiškai. Šio periodiško prigimtis buvo nustatyta tik XX a. antrajame dešimtmetyje. Tada paaiškėjo, kad kiekvieno elemento vietą periodinėje sistemoje nusako to elemento atomo elektronų skaičius Z , o ne atomo masė. Kadangi, užpildant kiekvieną elektronų sluoksnį, pasikartoja ankstesniojo sluoksnio užpildymo tvarka, tai elementų cheminės savybės kinta periodiškai: kiekvieno sluoksnio užpildymas prasideda šarminiu metalu ir baigiasi inertinėmis dujomis. Taigi, elementai, kurie gaunami užpildant vieną elektronų sluoksnį, sudaro vieną periodinės elementų sistemos periodą. Iš (4.4.1) formulės išplaukia, kad idealiosios sluoksnių užpildymo tvarkos atveju elementų skaičiai sistemos I–VI perioduose turėtų būti 2, 8, 18, 32, 50, 72. Tačiau tikrovėje šie skaičiai yra 2, 8, 8, 18, 18, 32. Tai reiškia, kad atomų elektronų sluoksnių užpildymo tvarka stipriai skiriasi nuo idealiosios užpildymo tvarkos. Šio skirtumo priežastis – elektronų tarpusavio sąveika.

4.5. Periodinė elementų sistema

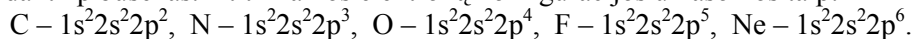
Atsižvelgus į elektronų tarpusavio sąveiką, galima išsamiai paaiškinti periodinę elementų sistemą. Pagrindiniai principai buvo suformuluoti 4.4 poskyryje: energijos minimumo principas ir Paulio draudimo principas. Kiekvieno elektrono būsena apibūdinama keturiais kvantiniais skaičiais – pagrindiniu kvantiniu skaičiumi n , šalutiniu (orbitiniu) kvantiniu skaičiumi l , magnetiniu kvantiniu skaičiumi m_l ir sukinio magnetiniu kvantiniu skaičiumi m_s . Atomo **elektronų konfigūracija** apibūdinama nurodant visas užpildytas vienelektrones būsenas ir kiekvienos būsenos elektronų skaičių. Elektronų konfigūracija simboliškai užrašoma taip. Visų pirma nurodomas pagrindinis kvantinis skaičius, paskui – šalutinio kvantinio skaičiaus simbolis (s, p, d, f ir t. t.), o paskui viršutinio indekso pavidalu nurodomas tos būsenos elektronų skaičius. Pvz., užrašymas $1s^2$ reiškia du s elektronus ($l = 0$), kurių būsena atitinka $n = 1$; $3p^5$ reiškia penkis elektronus, kurių būsena yra $l = 1, n = 3$ ir t. t. Bet kuri elektronų konfigūracija gali būti užrašyta taikant šią taisyklę. Pvz., užrašymas $1s^2 2s^2 2p^4$ reiškia, kad yra du elektronai, kurių būsena yra $n = 1, l = 0$; du elektronai, kurių būsena yra $n = 2, l = 0$; keturi elektronai, kurių būsena yra $n = 2, l = 1$. Tai yra pagrindinės būsenos deguonies atomo elektronų konfigūracija. Analogiškai užrašomos ir kitų atomų elektronų konfigūracijos.

Visų atomų su numeriais nuo 1 iki 104 pagrindinės būsenos elektronų konfigūracijos yra pateiktos J priede.

Išsiaiškinsime periodinės elementų sistemos sandarą. Sistemos pradžioje, kai elektronų skaičius atome yra mažas, elektronų sąveikos vaidmuo yra nežymus, todėl elektroninės būsenos užpildomos pagal idealiąją užpildymo tvarką (žr. 4.4 poskyrį). Vandenilis (^1H) turi vieną elektroną, kurio mažiausios energijos būsena yra $n = 1, l = 0$, todėl šio atomo elektronų konfigūracija yra $1s$ (jeigu duotajame posluoksnyje yra tik vienas elektronas, tada jis nėra nurodomas viršutinio indekso pavidalu). Helio (^2He) atome prisideda dar vienas $1s$ elektronas (tačiau su priešingos krypties sukinio), todėl helio pagrindinės būsenos elektronų konfigūracija yra $1s^2$. Helio pirmasis elektronų sluoksnis yra pilnai užpildytas. Taigi, helis užbaigia elementų sistemos pirmąjį periodą. Antrojo elementų sistemos periodo sudarymas atitinka

¹ Visas galimas L vertes galima apskaičiuoti nuosekliai taikant bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę (3.3.20). Tačiau, esant duotam S , kai kurias iš tų L verčių gali uždrausti banginės funkcijos antisimetriškumo reikalavimas (žr. 4.1.4 poskyrį).

antrojo elektronų sluoksnio užpildymą. Litis (${}_3\text{Li}$) gaunamas papildžius helio elektronų konfigūraciją vienu 2s elektronu, nes pagal Paulio draudimo principą atomas negali turėti trijų 1s elektronų. Ličio elektronų konfigūracija yra $1s^2 2s$. Paskui yra berilis (${}_4\text{Be}$), kurio elektronų konfigūracija yra $1s^2 2s^2$, ir boras (${}_5\text{B}$), kurio elektronų konfigūracija yra $1s^2 2s^2 2p$. Didžiausias galimas p elektronų ($l = 1$) skaičius sluoksnyje yra šeši (nes, kai $l = 1$, $2(2l+1) = 6$). Šeši elementai nuo boro iki neono (${}_{10}\text{Ne}$) imtinai gaunami užpildant 2p būsenas. Atitinkamos elektronų konfigūracijos užrašomos taip:



Neonu (inertinėmis dujomis) baigiasi antrojo elektronų sluoksnio užpildymas ir baigiasi antrojo periodo sudarymas. Taigi, antrąjį periodą sudaro aštuoni elementai. Trečiasis periodas prasideda šarminiu metalu natriu (${}_{11}\text{Na}$), kurio elektronų konfigūraciją galima užrašyti šitaip: $(\text{Na}) = (\text{Ne}) 3s$. Tai reiškia, kad Na elektronų konfigūracija gaunama iš neono konfigūracijos papildžius ją vienu 3s elektronu. Aštuoni elementai nuo Na iki argono (${}_{18}\text{Ar}$) gaunami užpildant būsenas 3s ir 3p. Argono konfigūracija yra $(\text{Ar}) = (\text{Ne}) 3s^2 3p^6$.

Iki šiol atomų elektroninių būsenų užpildymo tvarka atitiko idealiąją būsenų užpildymo tvarką. Tačiau kalio (${}_{19}\text{K}$), kuris eina po argono, elektronų konfigūracija skiriasi nuo tos, kurią numato idealioji užpildymo tvarka. Pagal idealiąją užpildymo tvarką šio elemento elektronų konfigūracija turėtų būti $(\text{Ar}) 3d$. Tačiau kalio atomo mažiausią energiją atitinka konfigūracija $(\text{Ar}) 4s$. T. y. energiškai naudingiau, kai prisijungęs elektronas yra ne būsenos 3d, o būsenos 4s. Taip yra dėl 3.2.5 poskyryje aprašyto ekranavimo reiškinio. Kadangi, didėjant pagrindiniam kvantiniam skaičiui n , mažėja intervalai tarp energijos lygmenų (pvz., 3.7 pav.), tai lygmenų poslinkiai, kuriuos sukelia minėtas ekranavimas, turi vis didesnę įtaką jų išsidėstymo tvarkai. Todėl, esant pakankamai dideliui atominiam numeriui, išorinio elektronų sluoksnio s būsenų energija gali tapti mažesnė už priešpaskutinio sluoksnio d būsenų energiją. Pvz., kalio 4s būsenos elektrono energija yra mažesnė už 3d būsenos elektrono energiją. Todėl trečiajame periode yra tik aštuoni elementai, o kalis pradeda ketvirtąjį periodą, kuris atitinka ketvirtąjo elektronų sluoksnio užpildymą. Po kalio eina kalcis (${}_{20}\text{Ca}$), kurio elektronų konfigūracija yra $(\text{Ar}) 4s^2$. Paskui energiškai naudingiausias tampa laisvųjų 3d būsenų užpildymas, o ne 4p būsenų, kurios eina po 4s būsenų, užpildymas. Todėl kiti 10 elementų (nuo skandžio ${}_{21}\text{Sc}$ iki cinko ${}_{30}\text{Zn}$) gaunami užpildant dešimt 3d būsenų. Šie elementai vadinami *pereinamaisiais elementais*. Šioje dešimties elementų sekoje yra du nukrypimai nuo nuoseklaus 3d būsenų užpildymo. Mat kartais yra energiškai naudingiau, kai vienas iš dviejų 4s elektronų peršoka į 3d posluksnį. Todėl chromo (${}_{24}\text{Cr}$) elektronų konfigūracija yra $(\text{Ar}) 3d^5 4s$ (o ne $(\text{Ar}) 3d^4 4s^2$), o vario (${}_{29}\text{Cu}$) konfigūracija yra $(\text{Ar}) 3d^{10} 4s$ (o ne $(\text{Ar}) 3d^9 4s^2$). Šešių elementų, kurie yra po cinko (nuo galio ${}_{31}\text{Ga}$ iki kriptono ${}_{36}\text{Kr}$), elektronų konfigūracijos gaunamos užpildant 4p posluksnį. Kriptono visos 4s ir 4p būsenos yra užpildytos, todėl kriptonas yra inertinės dujos. Kriptonas užbaigia ketvirtąjį elementų sistemos periodą, kurį sudaro $8 + 10 = 18$ elementų.

Penktajame periode atomų elektronų sluoksniai užpildomi ta pačia tvarka kaip ketvirtajame periode. Rubidžio (${}_{37}\text{Rb}$), kuris eina po kriptono, elektronų konfigūracija yra $(\text{Kr}) 5s$, nes tokia konfigūracija yra energiškai naudingesnė už $(\text{Kr}) 4d$ (dėl anksčiau minėto ekranavimo reiškinio). Po rubidžio eina stroncis (${}_{38}\text{Sr}$), kurio elektronų konfigūracija yra $(\text{Kr}) 5s^2$. Paskui, kaip ir ketvirtajame periode, eina 10 pereinamųjų elementų (nuo itrio ${}_{39}\text{Y}$ iki kadmio ${}_{48}\text{Cd}$), kurie šiuo atveju atitinka 4d būsenų užpildymą. Keliems iš šių 10 elementų yra energiškai naudingiau, kai vienas arba abu 5s elektronai pereina į 4d būsenas. Šešių elementų, kurie eina po kadmio (nuo indžio ${}_{49}\text{In}$ iki ksenono ${}_{54}\text{Xe}$), elektronų konfigūracijos gaunamos užpildant 5p posluksnį. Ksenonas (inertinės dujos) užbaigia penktąjį elementų sistemos periodą, kurį sudaro 18 elementų.

Cezio (${}_{55}\text{Cs}$) ir bario (${}_{56}\text{Ba}$) elektronų konfigūracijos gaunamos užpildant 6s būsenas, nes šios konfigūracijos atitinka mažesnę energiją negu konfigūracijos, kurios gaunamos užpildant 4f, 5d, 5f arba 5g būsenas. Lantano (${}_{57}\text{La}$) papildomasis elektronas užima ne 6p, o 5d būseną, o po lantano esančių keturiolikos elementų (nuo cerio ${}_{58}\text{Ce}$ iki lutecio ${}_{71}\text{Lu}$) elektronų konfigūracijos gaunamos užpildant 4f būsenas. Kadangi šeštojo periodo elementų cheminės savybės lemia šeštojo elektronų sluoksnio elektronai, tai 4f būsenų užpildymas neturi didelės įtakos cheminėms savybėms. Todėl penkiolikos elementų nuo lantano iki lutecio cheminės savybės yra labai panašios, ir šie elementai vadinami *lantanoidais*. Daugeliui lantanoidų yra energiškai naudingiau, kai 5d elektronas yra peršokęs į 4f būseną (žr. J priedą). Po lantanoidų esantys devyni elementai (nuo hafnio ${}_{72}\text{Hf}$ iki gyvsidabrio ${}_{80}\text{Hg}$) yra pereinamieji elementai, nes jų elektronų konfigūracijos gaunamos užpildant 5d būsenas. Analogiška situacija pasikartoja septintajame periode po aktinio (${}_{89}\text{Ac}$), kai užpildomos 5f būsenos. Penkiolika elementų nuo aktinio iki lourensio (${}_{103}\text{Lr}$) vadinami *aktinoidais*, o devyni elementai nuo 104 iki 112 numerių yra pereinamieji elementai.

Naudojama ir šiek tiek kitokia lantanoidų bei aktinoidų grupavimo schema, kurioje paskutinis elementas ($_{71}\text{Lu}$ lantanoidų ir $_{103}\text{Lr}$ aktinoidų) yra priskiriamas prie pereinamųjų elementų, t. y. lantanoidais vadinami elementai nuo lantano $_{57}\text{La}$ iki iterbio $_{70}\text{Yb}$, o aktinoidais – elementai nuo aktinio $_{89}\text{Ac}$ iki nobelio $_{102}\text{No}$. Tada lantanoidų bei aktinoidų skaičius yra vienetu mažesnis (14), o šeštojo ir septintojo periodų pereinamųjų elementų skaičius yra vienetu didesnis ir lygus 10 (kaip ir 4-ojo bei 5-ojo periodų).

Uždaviniai

- 4.1. Atomo magnetinio momento modulis lygus dviem Boro magnetonams, išorinio magnetinio lauko indukcija lygi 3 T, o kampas tarp magnetinio momento vektoriaus ir magnetinės indukcijos vektoriaus lygus 30° . Apskaičiuokite magnetinio momento ir magnetinio lauko sąveikos energiją.
- 4.2. Apskaičiuokite didžiausią ir mažiausią kampą tarp dviejų elektronų orbitinių judesio kiekio momentų, jeigu tų elektronų šalutiniai kvantiniai skaičiai lygūs $l_1 = 2$ ir $l_2 = 3$.
- 4.3. Apskaičiuokite atomo su vienu valentiniu elektronu Landė g faktoriaus vertes, kai: (a) $L = 0$; (b) $L = 1$; (c) $L = 2$.
- 4.4. Apskaičiuokite atomo, kurio $L = 2$, $J = 3/2$ ir $S = 1/2$, magnetinį momentą.
- 4.5. Apskaičiuokite visas galimas pilnutinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus J vertes, kai atomas yra būsenos, kurią atitinka šios sukinio kvantinio skaičiaus S ir orbitinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus L vertės:
(a) $S = 2$, $L = 3$;
(b) $S = 3$, $L = 3$;
(c) $S = 5/2$, $L = 2$.
- 4.6. Atomo būsenos multiptetiškumas lygus 3, o pilnutinis judesio kiekio momentas lygus $\hbar\sqrt{20}$. Kokios yra galimos orbitinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus L vertės?
- 4.7. Taikydami Hundo taisykles, apskaičiuokite atomo pagrindinės būsenos pilnutinio judesio kiekio momento kvantinį skaičių J , jeigu: (a) iš dalies užpildytame posluoksnyje yra 3 d elektronai; (b) iš dalies užpildytame posluoksnyje yra 7 d elektronai.
- 4.8. Remdamiesi bendrąja judesio kiekio momentų sudėties taisykle, Hundo taisyklėmis ir banginės funkcijos antisimetriškumo reikalavimu, apskaičiuokite šių atomų pagrindinių būsenų kvantinius skaičius S , L ir J : (a) $_5\text{B}$ (boras), (b) $_6\text{C}$ (anglis), (c) $_7\text{N}$ (azotas), (d) $_8\text{O}$ (deguonis).

5. Atomų kvantiniai šuoliai ir elektromagnetinė spinduliuotė

5.1. Elementarioji kvantinė spinduliavimo teorija

Kvantiniu požiūriu duotojo dažnio ω spinduliuotės intensyvumą lemia fotonų, kurių energija $\hbar\omega$, srauto tankis. Kadangi tie fotonai atsiranda ir išnyksta dėl atomų kvantinių šuolių tarp energijos lygmenų, tai fotonų srauto tankį lemia tų kvantinių šuolių skaičius per laiko vienetą. Taigi, kvantiniu požiūriu atomų spinduliuotės intensyvumą lemia atomų spinduliuojamųjų kvantinių šuolių tikimybės („spinduliuojamasis šuolis“ – tai šuolis, kurio metu atsiranda arba išnyksta fotonas). Šių tikimybių išraiškos gaunamos iš elementariosios kvantinės spinduliavimo teorijos, kurią 1916 m. sukūrė Einšteinas. Ta teorija yra trumpai išdėstyta toliau.

Kad būtų paprasčiau, tarkime, kad atomas gali būti tik dviejuose energijos lygmenyse E_n ir E_m (be to, $E_m < E_n$). Spinduliuotei sąveikaujant su atomų sistema, yra galimi trijų rūšių spinduliuojamieji kvantiniai šuoliai:

1. Savaiminiai šuoliai, kurių metu atomas pereina iš lygmens E_n į lygmenį E_m be jokio išorinio poveikio (savaime) ir išspinduliuoja fotoną, kurio energija

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m \quad (5.1.1)$$

(žr. 5.1a pav.). Toks spinduliavimas vadinamas **savaiminiu spinduliavimu**. Tokio šuolio tikimybė per nykstantįjį laiką dt yra lygi

$$dP_{nm}^{(s)} = A_{nm} dt; \quad (5.1.2)$$

čia A_{nm} yra konstanta, kuri nusako atomo savaiminio šuolio tarp lygmenų E_n ir E_m tikimybę per laiko vienetą.

2. Atomas gali pereiti iš lygmens E_m į lygmenį E_n sugėręs energijos $\hbar\omega_{nm}$ fotoną (žr. 5.1b pav.). Kvantinius šuolius, kuriuos sukelia išorinė spinduliuotė, vadinsime **priverstiniais šuoliais**. Priverstinio šuolio iš lygmens E_m į lygmenį E_n (tokių šuolių sutrumpintai žymėsime „ $m \rightarrow n$ “) tikimybė per laiką dt yra lygi

$$dP_{mn}^{(p)} = B_{mn} W_{\omega}(\omega_{nm}) dt; \quad (5.1.3)$$

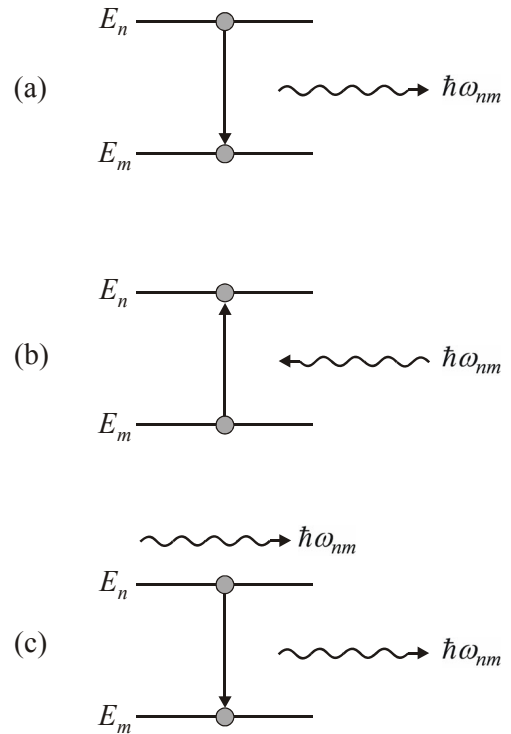
čia $W_{\omega}(\omega_{nm})$ yra spinduliuotės energijos spektrinis tankis, kuris atitinka dažnį ω_{nm} , o B_{mn} yra konstanta, kuri nusako priverstinio šuolio iš lygmens E_m į lygmenį E_n tikimybę per laiko vienetą energijos spektrinio tankio vienetui.

3. Dėl atomo sąveikos su išorine spinduliuote gali įvykti ir priešingos krypties priverstinis šuolis: atomas gali pereiti iš aukštesniojo lygmens E_n į žemesnįjį lygmenį E_m išspinduliuodamas energijos $\hbar\omega_{nm}$ fotoną (žr. 5.1c pav.). Toks spinduliavimas vadinamas **priverstiniu spinduliavimu**. Tokio priverstinio šuolio tikimybė per laiką dt yra lygi

$$dP_{nm}^{(p)} = B_{nm} W_{\omega}(\omega_{nm}) dt; \quad (5.1.4)$$

čia B_{nm} yra konstanta, kuri nusako priverstinio šuolio iš lygmens E_n į lygmenį E_m tikimybę per laiko vienetą energijos spektrinio tankio vienetui. Fotonas, kuris emituojamas priverstinio šuolio $n \rightarrow m$ metu, yra visais atžvilgiais tapatus tą šuolį stimuliuojamam fotonui (yra to paties dažnio, tos pačios poliarizacijos ir apibūdinamas tuo pačiu intensyvumo kampiniu pasiskirstymu). Taigi, po priverstinio šuolio $n \rightarrow m$ vietoj vieno fotono turime du visiškai vienodus fotonus.

Dydžiai A_{nm} , B_{mn} ir B_{nm} , kurie įeina į (5.1.2)–(5.1.4) formules, yra vadinami **Einšteino koeficientais**. Išvesime du šių koeficientų sąryšius. Atomų, kurių energija E_n , skaičių žymėsime N_n , o atomų, kurių energija E_m , skaičių žymėsime N_m (šiuos skaičius vadinsime tų energijos lygmenų **užpildomis**). Pagal tikimybės prasmę skaičiaus N_m pokytis per laiką dt dėl savaiminių šuolių $n \rightarrow m$ yra lygus $N_n dP_{nm}^{(s)}$, pokytis dėl priverstinių šuolių $m \rightarrow n$ yra lygus $-N_m dP_{mn}^{(p)}$, o pokytis dėl priverstinių



5.1 pav. Trijų rūšių spinduliuojamieji kvantiniai šuoliai: (a) savaiminiai šuoliai (savaiminė spinduliuotė); (b) priverstiniai šuoliai, kurių metu spinduliuotė sugerama; (c) priverstiniai šuoliai, kurių metu atsiranda priverstinė spinduliuotė

šiuolių $n \rightarrow m$ yra lygus $N_n dP_{nm}^{(p)}$. Analogiškai skaičiuojamas ir skaičiaus N_n pokytis per laiką dt . Taip gauname, kad abiejų lygmenų užpildų pokyčiai per laiką dt yra

$$dN_n = -(A_{nm} + B_{nm}W_\omega(\omega_{nm}))N_n dt + B_{mn}W_\omega(\omega_{nm})N_m dt, \quad (5.1.5)$$

$$dN_m = -dN_n = -B_{mn}W_\omega(\omega_{nm})N_m dt + (A_{nm} + B_{nm}W_\omega(\omega_{nm}))N_n dt. \quad (5.1.6)$$

Tarkime, kad atomų sistema yra termodinaminės pusiausvyros. Tada atomų priverstiniai kvantiniai šuoliai vyksta dėl sąveikos su šilumine spinduliuote, kuri yra izotropinė ir nepoliarizuota. Todėl nuo šiol teigiame, kad koeficientai B_{nm} ir B_{mn} atitinka izotropinę ir nepoliarizuotą elektromagnetinę spinduliuotę. Termodinaminės pusiausvyros sąlygomis N_m ir N_n nekinta:

$$\frac{dN_n}{dt} = 0. \quad (5.1.7)$$

Išrašę (5.1.5) į (5.1.7) ir išreiškę W_ω , išvedame:

$$W_\omega(\omega_{nm}) = \frac{A_{nm}}{B_{mn} \frac{N_m}{N_n} - B_{nm}}. \quad (5.1.8)$$

Antra vertus, termodinaminės pusiausvyros N_n ir N_m vertes galima išreikšti taikant Bolcmano pasiskirstymo formulę (1.3.12). Bendruoju atveju kiekvienas iš lygmenų E_m ir E_n gali būti išsigimęs, t. y. kiekvieną iš tų lygmenų gali atitikti kelios kvantinės būsenos. Bolcmano pasiskirstymo formulė (1.3.12) nusako vienos kvantinės būsenos tikimybę, kai sistema yra termodinaminės pusiausvyros. Norint gauti tikimybę P , kad atomas bus duotajame *energijos lygmenyje* (nekonkretizuojant kvantinės būsenos), tą išraišką reikia padauginti iš to lygmens išsigimimo laipsnio. Todėl tikimybės $P(E_n)$ ir $P(E_m)$ yra

$$P(E_m) = \frac{g_m}{Z} \exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right) \text{ ir } P(E_n) = \frac{g_n}{Z} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right); \quad (5.1.9)$$

čia g_m ir g_n yra lygmenų E_m ir E_n išsigimimo laipsniai. Jeigu pilnutinis atomų skaičius yra lygus N , tada $N_n = N \cdot P(E_n)$ ir $N_m = N \cdot P(E_m)$. Vadinasi,

$$\frac{N_m}{N_n} = \frac{g_m}{g_n} \exp\left(\frac{E_n - E_m}{k_B T}\right) = \frac{g_m}{g_n} \exp\left(\frac{\hbar \omega_{nm}}{k_B T}\right); \quad (5.1.10)$$

čia pasinaudota (5.1.1) sąryšiu. Išrašę (5.1.10) į (5.1.8), matome:

$$W_\omega(\omega_{nm}) = \frac{A_{nm}}{\frac{g_m}{g_n} B_{mn} \exp\left(\frac{\hbar \omega_{nm}}{k_B T}\right) - B_{nm}}. \quad (5.1.11)$$

Kadangi ši išraiška gauta remiantis prielaida, kad atomų sistema yra termodinaminės pusiausvyros, tai (5.1.11) yra *šiluminės spinduliuotės* energijos spektrinis tankis. Vadinasi, (5.1.11) reiškinytis turi būti lygus (1.3.18) reiškiniai esant visoms temperatūroms T . Įsitikinsime, kad iš šio reikalavimo išplaukia du sąryšiai tarp Einšteino koeficientų A_{nm} , B_{nm} ir B_{mn} . Visų pirma iš Planko formulės (1.3.18) išplaukia, kad, kai $T \rightarrow \infty$, energijos spektrinis tankis $W_\omega(\omega_{nm})$ turi artėti į begalybę. Tai reiškia, kad trupmenos (5.1.11) vardiklis turi artėti į nulį. Todėl

$$g_m B_{mn} = g_n B_{nm}. \quad (5.1.12)$$

Padauginus (5.1.11) trupmenos skaitiklį ir vardiklį iš g_n ir atsižvelgus į (5.1.12), gaunama tokia lygybė:

$$W_\omega = \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \cdot \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_{nm}}{k_B T}\right) - 1} \quad (5.1.13)$$

Palyginus (5.1.13) su Planko formule (1.3.18), akivaizdu, kad abiejų reiškinų antroji trupmena yra viena. Vadinasi, abu šie reiškiniai gali tapačiai sutapti tik tada, kai ir pirmoji trupmena yra viena:

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar \omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3}. \quad (5.1.14)$$

Du sąryšiai (5.1.12) ir (5.1.14) dar neleidžia vienareikšmiškai apskaičiuoti trijų Einšteino koeficientų. Juos galima apskaičiuoti tik kvantinės mechanikos metodais.

Einšteino elementarioji kvantinė spinduliavimo teorija yra „fenomenologinės teorijos“ pavyzdys. Fizikoje taip vadinamos teorijos, kurios nagrinėjamojo fizikinio objekto arba vyksmo (šiuo atveju atomų sąveikos su elektromagnetine spinduliuote) savybes išveda ne iš „pirmųjų principų“ (tokių kaip 3.1.2 po-

skyryje suformuluoti kvantinės mechanikos postulatai), o iš reikalavimo, kad tos savybės atitiktų žinomus eksperimentinius dėsningumus (šiuo atveju šiluminės spinduliuotės savybės).

5.2*. Kvantinių šuolių teorija

5.2.1. Priverstinių kvantinių šuolių tikimybė per laiko vienetą

Tarkime, kad laiko momentu $t = 0$ sistemos banginė funkcija yra hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$ tikrinė funkcija $\Psi_m^{(0)}$, o sistemos energija lygi atitinkamai tikrinei vertei E_m . Kvantinė mechanika teigia, kad tuo atveju, kai sistemos hamiltonianas yra tiksliai lygus $\hat{H}^{(0)}$ (t. y. kai nėra jokių trikdžių), sistemos būseną nesi-keis neribotai ilgai (t. p. žr. 5.2.2 poskyrį). Todėl tokia sistemos būseną, kai sistemos energija turi tiksliai apibrėžtą vertę, yra vadinama **nuostoviąja būsena**. Nuostoviųjų būsenų banginės funkcijos ir energijos yra nuostoviosios Šrėdingerio lygties sprendiniai. Jeigu sistemos hamiltonianas yra tik apytiksliai lygus $\hat{H}^{(0)}$ (t. y. jeigu egzistuoja trikdžiai), tada po tam tikro laiko t sistemos būseną gali pasikeisti. Bendroju atveju naujoji sistemos būseną jau nebus apibūdinama apibrėžta energijos E verte, ir jos banginė funkcija bus lygi „nesutrikdytųjų“ tikrinių funkcijų tiesiniam dariniui, kurį nusako A priedo (A.1.5) formulė:

$$\Psi = \sum_n C_n(t) \Psi_n^{(0)}. \quad (5.2.1)$$

Pagal kvantinės mechanikos III postulatą (žr. 3.1.2 poskyrį) dydis $|C_n(t)|^2$ nusako tikimybę, kad, laiko momentu t atlikus matavimą, sistemos kvantinė būseną atitiks vieną iš hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$ tikrinių verčių E_n . Jeigu išmatuotoji sistemos energijos vertė $E_n \neq E_m$, tada sakoma, kad įvyko sistemos **kvantinis šuolis** iš lygmens E_m į lygmenį E_n . Atitinkamai dydį $|C_n(t)|^2$ galima vadinti **kvantinio šuolio $E_m \rightarrow E_n$ tikimybe per laiką t** ir žymėti $P_{mn}(t)$:

$$P_{mn}(t) = |C_n(t)|^2. \quad (5.2.2)$$

Kai trikdys yra pakankamai silpnas, koeficientus $C_n(t)$ galima skaičiuoti pagal nenuostoviosios trikdymų teorijos pirmojo artinio formulę (A.3.7) (A priedas).

Kaip pavyzdį, aptarsime harmoninio trikdžio atvejį:

$$\hat{H}_{tr}(t) = \hat{H}'_{tr} \sin \omega t; \quad (5.2.3)$$

čia ω yra trikdžio kampinis dažnis (teigiamas dydis), o $\hat{H}'_{tr}$ yra trikdžio amplitudė, kuri nepriklauso nuo laiko. Pasinaudoję tuo, kad $\exp(i\omega t) = \cos(\omega t) + i \sin(\omega t)$, (5.2.3) lygybę užrašome kompleksiniu pavidalu:

$$\hat{H}_{tr}(t) = \frac{1}{2i} \hat{H}'_{tr} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}); \quad (5.2.4)$$

Vadinasi, harmoninį trikdį (5.2.3) galima laikyti dviejų tokio pavidalo trikdžių suma:

$$\hat{V}(t) = \hat{V}' e^{\pm i\omega t} \quad (5.2.5)$$

(pvz., (5.2.4) trikdžio atveju $\hat{V}' = \hat{H}'_{tr}/(2i)$). Šio trikdžio matricos elementas, kuris įeina į (A.3.7), yra lygus

$$V_{nm}(t) = V'_{nm} e^{\pm i\omega t}; \quad (5.2.6)$$

čia V'_{nm} yra trikdžio amplitudės matricos elementas:

$$V'_{nm} \equiv \int \Psi_n^{(0)*} \hat{V}' \Psi_m^{(0)} dv. \quad (5.2.7)$$

Irašę (5.2.6) į (A.3.7) ir integravę laiko atžvilgiu, išvedame:

$$C_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V'_{nm} \frac{\exp[i(\omega_{nm} \pm \omega)t] - 1}{i(\omega_{nm} \pm \omega)}; \quad (5.2.8)$$

čia dažnis ω_{nm} apibrėžiamas (5.1.1) lygybe. Irašę (5.2.8) į (5.2.2), gauname šuolio $E_m \rightarrow E_n$ tikimybės per laiką t išraišką. Diferencijavus tą išraišką laiko atžvilgiu, gaunama priverstinio kvantinio šuolio tikimybė per laiko vienetą:

$$\lambda_{mn} \equiv \frac{dP_{mn}^{(p)}}{dt} = \frac{2|V'_{nm}|^2}{\hbar^2} \cdot \frac{\sin[(\omega_{nm} \pm \omega)t]}{\omega_{nm} \pm \omega}; \quad (5.2.9)$$

čia vartojamas žymuo V_{nm} , o ne V'_{nm} , nes $|V_{nm}| = |V'_{nm}|$. Antrosios trupmenos kaip dydžio $x \equiv \omega_{nm} \pm \omega$ funkcijos pavidalas yra toks, kaip parodyta E priedo E.1b pav. (šiuo atveju parametras a yra atvirkštinis

laikui t : $a \equiv 1/t$). Jeigu tiriamasis argumento verčių intervalas $\Delta\omega$ yra daug platesnis už centrinio maksimumo plotį $2\pi/t$ (t. y. jeigu $t \gg 2\pi/\Delta\omega$), tada šią funkciją galima aproksimuoti Dirako delta funkcija pagal E priedo (E.11) formulę. Tipiški energijų intervalai, kurie tiriami atomo fizikoje, yra platesni už 0,01 eV, t. y. $\Delta\omega > 0,01 \text{ eV} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} / \hbar \approx 1,5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$. Vadinasi, jeigu mus domina sistemos būsenos pokytis per laiką t , kuris yra daug didesnis už $2\pi / (1,5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}) \approx 4 \cdot 10^{-13} \text{ s}$, tada (5.2.9) reiškinyje galima pereiti prie ribos $t \rightarrow \infty$ ir pasinaudoti δ funkcijos asimptotine išraiška (E.11):

$$\lambda_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{nm}|^2 \delta(\omega_{nm} - \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nm}|^2 \delta(E_n - E_m - \hbar\omega), \quad \text{kai } E_n > E_m; \quad (5.2.10a)$$

čia pasinaudota δ funkcijos savybe (E.4). Analogišką išraišką gauname, kai $E_n < E_m$ (t. y. kai $\omega_{nm} < 0$):

$$\lambda_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{nm}|^2 \delta(\omega_{nm} + \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nm}|^2 \delta(E_n - E_m + \hbar\omega), \quad \text{kai } E_n < E_m. \quad (5.2.10b)$$

Vadinasi, *harmoninis trikdys gali sukelti tik tuos kvantinius šuolius, kurių metu energijos pokytis yra lygus arba priešingas Planko konstantos ir trikdžio dažnio sandaugai*:

$$E_n - E_m = \pm \hbar\omega. \quad (5.2.11)$$

Ši sąlyga atspindi energijos tvermės dėsni: nors sistemos energija pasikeičia, tačiau *pilnutinė* energija, į kurią dar įeina ir trikdžių šaltinio (pvz., elektromagnetinės spinduliuotės) energija, turi likti nepakitusi. Todėl sistemos energijos pokytis ($E_n - E_m$) yra priešingas trikdžių šaltinio energijos pokyčiui. Jeigu trikdys yra dažnio ω elektromagnetinė banga, tada to trikdžio sukeltas šuolis į aukštesnį energijos lygmenį (kai $E_n > E_m$) vyksta sugeriant dažnio ω_{nm} fotoną. Šuolis į žemesnį lygmenį (kai $E_n < E_m$) vyksta išspinduliuojant dažnio ω_{nm} fotoną. Tai yra vadinamasis priverstinis spinduliavimas. Įvykus priverstiniam kvantiniam šuoliui į žemesnį energijos lygmenį, pilnutinis fotonų skaičius padidėja, nes šuolį sukėlęs fotonas neišnyksta. Taigi, spinduliuotė yra sustiprinama. Šiuo principu veikia lazeriai.

Naudodamiesi (5.2.10a) lygybe, išreikšime atomo elektrono kvantinio šuolio tikimybę išoriniame kintamajame elektriniame lauke, kurio kampinis dažnis ω . Tokio elektrinio lauko stiprio išraiška yra

$$\mathcal{E}_0 \sin(\omega t) = \mathcal{E}_0 \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}; \quad (5.2.12)$$

čia $\mathcal{E}_0$ yra elektrinio lauko amplitudės vektorius. Šiuo atveju hamiltoniano trikdys yra elektrono potencinė energija tame lauke:

$$\hat{H}_{tr}(t) = e(\mathbf{r} \cdot \mathcal{E}_0) \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}; \quad (5.2.13)$$

čia $\mathbf{r}$ yra elektrono spindulys vektorius. Taigi, šį trikdį galima išreikšti dviejų (5.2.5) pavidalo dėmenų suma. Vieno tokio dėmens amplitudė yra lygi

$$\hat{V}' = \frac{e(\mathbf{r} \cdot \mathcal{E}_0)}{2i}. \quad (5.2.14)$$

Todėl trikdžio matricos elemento modulis yra lygus

$$|V_{nm}| = \frac{1}{2} e |\mathbf{r}_{nm} \cdot \mathcal{E}_0| = \frac{1}{2} e |\mathbf{r}_{nm}| \mathcal{E}_0 \cos \Theta_{nm}; \quad (5.2.15)$$

čia $\mathbf{r}_{nm}$ yra spindulio vektoriaus matricos elementas:

$$\mathbf{r}_{nm} \equiv \int \psi_n^* \mathbf{r} \psi_m d\mathbf{v} \quad (5.2.16)$$

(toliau banginių funkcijų žymenyse nerasysime viršutinio indekso „(0)“, o Θ_{nm} yra kampas tarp vektorių $\mathcal{E}_0$ ir $\mathbf{r}_{nm}$. Įrašę (5.2.15) į (5.2.10a) ir pasinaudoję tuo, kad δ funkcija yra lyginė, matome:

$$\lambda_{mn} = \frac{\pi}{2\hbar^2} e^2 |\mathbf{r}_{nm}|^2 \mathcal{E}_0^2 \cos^2 \Theta_{nm} \cdot \delta(\omega - \omega_{nm}). \quad (5.2.17)$$

Matome, kad kvantinių šuolių, kuriuos sukelia kintamasis elektrinis laukas, tikimybė per laiko vienetą yra proporcinga spindulio vektoriaus matricos elemento modulio kvadratui $|\mathbf{r}_{nm}|^2$. Kintamojo elektrinio lauko šaltinis gali būti, pvz., elektromagnetinė banga, kurios bangos ilgis yra daug didesnis už atomo matmenis. Kadangi tipiški intervalai tarp gretimų atomo energijos lygmenų yra (1–10) eV eilės, tai elektromagnetinės spinduliuotės, kuri sukelia kvantinius šuolius tarp tų lygmenų, bangos ilgis yra (10–100) nm eilės, t. y. 2–3 eilėmis didesnis už atomo matmenis ($\sim 0,1 \text{ nm}$). Todėl priverstinių kvantinių šuolių tarp atomo energijos lygmenų tikimybėms apytiksliai galioja (5.2.17) sąryšis. Kampą Θ_{nm} patogiau pakeisti kampu θ_{nm} tarp spinduliuotės *sklidimo* krypties ir $\mathbf{r}_{nm}$. Tam reikia apibrėžti spinduliuotės poliariz-

$$\Theta_{nm} = \frac{\pi}{2} - \theta_{nm} ; \quad (5.2.18)$$
$$\lambda_{mn}^{(1)} = \frac{\pi}{2\hbar^2} e^2 |\mathbf{r}_{nm}|^2 \mathcal{E}_0^2 \sin^2 \theta_{nm} \cdot \delta(\omega - \omega_{nm}); \quad (5.2.19a)$$
$$\lambda_{\text{III}}^{(2)} = 0. \quad (5.2.19b)$$
$$\lambda_{mn} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\lambda_{mn}^{(1)} + \lambda_{mn}^{(2)}}{2} d\Omega = \frac{1}{8\pi} \int \lambda_{mn}^{(1)} d\Omega; \quad (5.2.20)$$
$$d\Omega = \sin \theta_{nm} d\theta_{nm} d\phi_{nm}. \quad (5.2.21)$$
$$\lambda_{mn} = \frac{\pi}{6\hbar^2} e^2 |\mathbf{r}_{nm}|^2 \mathcal{E}_0^2 \cdot \delta(\omega - \omega_{nm}). \quad (5.2.22)$$

Tarkime, kad trikdžio dažnis ω yra tiksliai apibrėžtas, o energijos lygmenų pasiskirstymui nėra jokių apribojimų. Tokiu atveju (5.2.10a,b) reiškiniuose delta funkciją reikia pakeisti galutinių būsenų energiniu tankiu $\rho(E_n)$. Būsenų tankio ρ prasmė – tai nuostoviųjų būsenų skaičius vienetiniame energijos

intervale. Esant tolydžiam galutinių būsenų energiniam pasiskirstymui, priverstinio šuolio iš energijos lygmens E_m į lygmenį E_n tikimybė per laiko vienetą yra lygi

$$\lambda_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{nm}|^2 \rho(E_n). \quad (5.2.23)$$

Taigi, kvantinio šuolio tikimybė per laiko vienetą yra tiesiog proporcinga trikdžio matricos elemento modulio kvadratui ir galutinių būsenų tankiui.

Dabar tarkime, kad dažnis ω_{nm} yra tiksliai apibrėžtas, o trikdžio dažnių spektrui nėra jokių apribojimų. Kaip ir anksčiau aptartu atveju, šuolio tikimybės per laiko vienetą išraiškoje nelieka δ funkcijos, tačiau šiuo atveju šuolio tikimybė per laiko vienetą λ_{nm} yra proporcinga ne sistemos būsenų energiniam tankiui, o trikdžio energijos spektriniam tankiui. Kaip pavyzdį, vėl aptarsime elektromagnetinės spinduliuotės atvejį. Pagal elementariąją kvantinę spinduliuotės teoriją (žr. 5.1 poskyrį) priverstinio šuolio $m \rightarrow n$ tikimybė per laiko vienetą yra lygi

$$\lambda_{mn} = B_{mn} W_{\omega}(\omega_{nm}); \quad (5.2.24)$$

čia B_{mn} yra vienas iš Einšteino koeficientų, o $W_{\omega}(\omega_{nm})$ yra šuolį stimuliuojančios spinduliuotės energijos spektrinis tankis esant dažniui ω_{nm} (žr. (5.1.3)). (5.2.24) lygybė galioja esant bet kokio pavidalo energijos spektriniam tankiui W_{ω} . Vadinasi, ji turi galioti ir monochromatinės spinduliuotės atveju. Didelio bangos ilgio monochromatinės, izotropinės ir nepoliarizuotos spinduliuotės atveju priverstinio kvantinio šuolio tikimybė per laiko vienetą nusako (5.2.22) reiškinys. Vadinasi, norint gauti Einšteino koeficiento B_{mn} išraišką didelio bangos ilgio spinduliuotės atvejui, pakanka (5.2.22) reiškinį padalyti iš $W_{\omega}(\omega)$, kai elektromagnetinė spinduliuotė yra monochromatinė, o jos dažnis yra lygus ω_{nm} . Iš elektrodinamikos žinoma, kad plokščiojoje elektromagnetinėje bangoje elektrinio ir magnetinio laukų energijos tankių suma yra lygi $\epsilon_0 \mathcal{E}^2$, kur $\mathcal{E}$ yra elektrinio lauko stiprio modulis. Kadangi elektrinis laukas kinta laike harmoniniu dėsniu, tai šio reiškinio laikinis vidurkis yra lygus $\epsilon_0 \mathcal{E}_0^2 / 2$, kur $\mathcal{E}_0$ yra lauko amplitudės modulis. Kadangi dažnis yra tiksliai apibrėžtas ir lygus ω_{nm} , tai elektromagnetinio lauko energijos spektrinis tankis yra gaunamas padauginus tūrinį tankį iš $\delta(\omega - \omega_{nm})$:

$$W_{\omega}(\omega) = \frac{1}{2} \epsilon_0 \mathcal{E}_0^2 \delta(\omega - \omega_{nm}). \quad (5.2.25)$$

Padaliję (5.2.22) iš (5.2.25), gauname Einšteino koeficiento B_{mn} išraišką didelių bangos ilgių atveju:

$$B_{mn} = \frac{\pi}{3\epsilon_0 \hbar^2} e^2 |\mathbf{r}_{nm}|^2. \quad (5.2.26)$$

5.2.2. Savaiminių kvantinių šuolių tikimybė per laiko vienetą

5.2.1 poskyrio pradžioje buvo minėta, kad kvantinės mechanikos požiūriu sistema bus nuostovios būsenos tol, kol nėra išorinių poveikių (trikdžių). Tačiau tikrovėje šis teiginys galioja tik pagrindinei (mažiausios energijos) būsenai. Sužadintosios būsenos atomas visada pereina į pagrindinę būseną – net ir tada, kai nėra jokių išorinių poveikių. Šis prieštaravimas aiškinamas tuo, kad kvantinė mechanika nagrinėja grynai mechaninę problemą: dalelių judėjimą išoriniuose laukuose, kurie yra žinomi (pvz., elektrono judėjimą branduolio elektrostatiiniame lauke arba išoriniame elektromagnetiniame lauke). Taigi, neatsižvelgiama į tai, kad judanti elektringoji dalelė pati sukuria elektromagnetinį lauką, kuris veikia ją pačią. Šį poveikį galima apskaičiuoti tik kvantinės elektrodinamikos metodais¹.

Nors vien tik kvantinės mechanikos metodais negalima apskaičiuoti savaiminio spinduliuojamojo kvantinio šuolio tikimybės per laiko vienetą (t. y. Einšteino koeficiento A_{nm}), tačiau tą tikimybę galima išreikšti pasinaudojus žinomu sąryšiu tarp savaiminio ir priverstinio spinduliavimo Einšteino koeficientų (žr. (5.1.14)):

$$A_{nm} = \frac{\hbar \omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3} B_{nm}. \quad (5.2.27)$$

Jeigu energijos lygmenys E_n ir E_m nėra išsigimę, tada $B_{nm} = B_{mn}$ (žr. (5.1.12)). Jeigu spinduliuotės, kuri atsiranda dėl šuolio $n \rightarrow m$, bangos ilgis yra daug didesnis už atomo matmenis, tada koeficientą B_{mn} galima apskaičiuoti pagal (5.2.26). Įrašę (5.2.26) reiškinį į (5.2.27), išvedame:

¹ Panaši padėtis egzistuoja ir klasikinėje fizikoje: klasikinė mechanika teigia, kad, dalelei judant potencialiniame jėgų lauke, jos pilnutinė mechaninė energija yra tvari. Tokio judėjimo pavyzdys yra elektringosios dalelės judėjimas elektrostatiiniame lauke. Tačiau klasikinėje elektrodinamikoje įrodoma, kad tokiu atveju dalelės energija turi mažėti, nes su pagreičiu judanti elektringoji dalelė spinduliuoja elektromagnetines bangas.

$$A_{nm} = \frac{\omega_{nm}^3}{3\pi\epsilon_0 c^3 \hbar} e^2 |\mathbf{r}_{nm}|^2. \quad (5.2.28)$$

Matome, kad savaiminio kvantinio šuolio tikimybė per laiko vienetą yra proporcinga spindulio vektoriaus matricos elemento modulio kvadratui (kaip ir kvantinių šuolių, kuriuos stimuliuoja kintamasis elektrinis laukas, tikimybė: žr. (5.2.22)). Iš šio matricos elemento išraiškos (5.2.16) matome, kad jis priklauso nuo funkcijų ψ_n ir ψ_m sanklotos erdvėje. T. y. šuolio tikimybė yra tuo mažesnė, kuo mažesnė erdvės sritis, kurioje abi banginės funkcijos ψ_n ir ψ_m kartu pastebimai skiriasi nuo nulio.

Jeigu spindulio vektoriaus matricos elementas lygus nuliui, tada atitinkamas kvantinis šuolis yra vadinamas **draudžiamuoju šuoliu**. Šuoliai, kuriuos atitinkantis spindulio vektoriaus matricos elementas skiriasi nuo nulio, vadinami **leidžiamaisiais šuoliais**. Taisyklės, kurios nusako leidžiamuosius ir draudžiamuosius šuolius, vadinamos **atrankos taisyklėmis**. Pvz., išreiškus harmoninio osciliatoriaus spindulio vektoriaus matricos elementą, gaunama, kad jis skiriasi nuo nulio tik tada, kai šuolis vyksta tarp gretimų kvantinio osciliatoriaus energijos lygmenų, kuriuos nusako kvantinis skaičius n (2.3.36) reiškinyje. Tai reiškia, kad harmoninio osciliatoriaus atrankos taisyklė yra

$$\Delta n = \pm 1. \quad (5.2.29)$$

Analogiškai gaunamos ir atomo kvantinių šuolių atrankos taisyklės (jos bus suformuluotos 5.3 poskyryje).

Jeigu šuolis yra draudžiamasis, tai nereiškia, kad jis yra negalimas. Tačiau draudžiamųjų šuolių tikimybė per laiko vienetą yra daug mažesnė negu leidžiamųjų. Šią tikimybę taip pat galima apskaičiuoti trikdymų teorijos pirmajame artinyje, tačiau skaičiuojant reikia atsižvelgti į elektros krūvių ir srovių pasiskirstymą atomo viduje bei į spinduliuotės lauko priklausomybę nuo koordinatės. Klasikinėje elektrodinamikoje įrodoma, kad bet kokios konfigūracijos elektromagnetinį lauką vienareikšmiškai nusako dvi spindulio vektoriaus $\mathbf{r}$ funkcijos: skaliarinis potencialas $\varphi(\mathbf{r})$ ir vektorinis potencialas $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Toliau pateiktos elektrinio lauko stiprio ir magnetinės indukcijos vektorių išraiškos skaliarinio ir vektorinio potencialais:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}; \quad (5.2.30a)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (5.2.30b)$$

Esant elektromagnetiniam laukui ir nepaisant dalelės sukininio magnetinio momento sąveikos su išoriniu magnetiniu lauku, elektringosios dalelės hamiltonianas yra

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2 + q\varphi + U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2M}(\hbar\nabla + q\mathbf{A})^2 + q\varphi + U(\mathbf{r}); \quad (5.2.31)$$

čia M yra dalelės masė, q yra jos elektros krūvis, $\hat{\mathbf{p}}$ yra dalelės judesio kiekio operatorius (3.1.16), o $U(\mathbf{r})$ yra dalelės potencinė energija, kai nėra elektromagnetinio lauko [6]. Jeigu sistemą sudaro kelios vienodo krūvio ir masės dalelės, tada (5.2.31) reiškinyje $\hat{\mathbf{p}}$ reiškia jų judesio kiekio operatorių sumą, o U yra sistemos pilnutinė potencinė energija (įskaitant ir dalelių tarpusavio sąveikos energiją). Vektorinį potencialą $\mathbf{A}$ visada galima pasirinkti taip, kad jo divergencija būtų tapachiai lygi nuliui ($\nabla \cdot \mathbf{A} \equiv 0$). Jeigu išorinis laukas – tai elektromagnetinės bangos laukas, tada galima teigti, kad jo skaliarinis potencialas taip pat tapachiai lygus nuliui ($\varphi \equiv 0$). Be to, jeigu išorinis laukas yra pakankamai silpnas (t. y. jeigu $\mathbf{A}$ yra pirmosios mažumo eilės dydis), tada hamiltoniano išraiškoje (5.2.31) galima atmesti dėmenį, kuris proporcingas $\mathbf{A}^2$. Atlikus šiuos pakeitimus, hamiltonianas (5.2.31) įgyja tokį pavidalą:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + U(\mathbf{r}) - \frac{q}{2M} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{H}^{(0)} - \frac{q}{2M} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}; \quad (5.2.32)$$

čia $\hat{H}^{(0)}$ yra „nesutrikdytasis“ dalelės hamiltonianas, t. y. hamiltonianas be išorinio elektromagnetinio lauko. Vadinas, esant bet kokio pavidalo išoriniam elektromagnetiniam laukui ir nepaisant dalelės sukinio, dalelės hamiltoniano trikdys $\hat{V}'$ yra proporcingas to lauko vektorinio potencialo ir dalelės judesio kiekio operatoriaus skaliarinei sandaugai $\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}$:

$$\hat{V}' = -\frac{q}{2M} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}; \quad (5.2.33)$$

čia trikdžio žymens indeksas „0“ nurodo, kad nepaisoma dalelės sukinio. Atsižvelgus į dalelės sukininį magnetinį momentą, trikdžio išraiškoje atsiranda dėmuo, kuris lygus to momento energijai magnetiniame lauke. Klasikinėje elektrodinamikoje įrodoma, kad magnetinio momento $\boldsymbol{\mu}$ potencinė energija magnetiniame lauke, kurio magnetinė indukcija $\mathbf{B}$, yra lygi $-(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})$. Dalelės magnetinio momento operatorius yra

$$\hat{\mu} = g_s \frac{q}{2M} \hat{\mathbf{L}}_s ; \quad (5.2.34)$$

čia g_s yra dalelės sukininis g faktorius (žr. 3.3.1 poskyrį), o $\hat{\mathbf{L}}_s$ yra dalelės sukinio operatorius (jeigu dalelės sukinio kvantinis skaičius lygus $1/2$, tada operatoriaus $\hat{\mathbf{L}}_s$ Dekarto komponentės yra (3.3.34)). Vadinasi, turinčios sukinį dalelės hamiltoniano trikdys bet kokio pavidalo elektromagnetiniame lauke yra

$$\hat{V} = -\frac{q}{2M} (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + g_s \hat{\mathbf{L}}_s \cdot \mathbf{B}) = -\frac{q}{2M} (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + g_s \hat{\mathbf{L}}_s \cdot (\nabla \times \mathbf{A})) . \quad (5.2.35)$$

Žinant šio trikdžio matematinį pavidalą, priverstinių kvantinių šuolių tikimybes galima apskaičiuoti trikdymų teorijos metodais (žr. A priedą). Savaiminių šuolių, kurių metu išspinduliuojama to paties pavidalo elektromagnetinė spinduliuotė, tikimybes galima apskaičiuoti pasinaudojus savaiminio ir priverstinio spinduliavimo Einšteino koeficientų sąryšiu (5.2.27).

Kitas savaiminių draudžiamųjų šuolių tikimybių skaičiavimo būdas remiasi klasikine daugiapolės spinduliuotės teorija. Kadangi draudžiamieji spinduliuojamieji šuoliai atomo fizikoje yra daug mažiau svarbūs negu branduolio fizikoje, smulkesnę kvantinių šuolių tikimybių analizę atidėsime iki 10 skyriaus.

5.2.3. Spinduliuotės linijos forma. Natūralusis linijos plotis

Tarkime, turime didelį skaičių N_0 atomų, kurie sužadinti į tą patį energijos lygmenį E_n . Jeigu ši būsena būtų nuostovioji, tada visų atomų energija nesikeistų neribotai ilgai ir kiekvieno atomo banginė funkcija būtų lygi

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t / \hbar} . \quad (5.2.36)$$

Tačiau kiekvienas atomas po tam tikro laiko savaime pereina į pagrindinį energijos lygmenį E_m išspinduliuodamas energijos kvantą. Šis laikas skirtingiems atomams gali būti labai įvairus; jo vidurkis yra lygus sužadintosios būsenos n vidutinei gyvavimo trukmei τ_n . Pagal kvantinio šuolio tikimybės per laiko vienetą prasmę sužadintųjų atomų skaičiaus pokytis per nykstantįjį laiką dt (t. y. per tą laiką įvykusių kvantinių šuolių skaičius su minuso ženklu) yra

$$dN = -\lambda_n N dt ; \quad (5.2.37)$$

čia N yra sužadintųjų atomų skaičius duotuoju laiko momentu, o λ_n yra savaiminio šuolio iš lygmens E_n tikimybė per laiko vienetą ($\lambda_n = 1 / \tau_n$). Padaliję abi puses iš dt , gauname diferencialinę lygtį, kurios sprendinys yra eksponentinė laiko funkcija:

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda_n t} ; \quad (5.2.38)$$

čia laikas t atskaitomas nuo laiko momento, kai visi N_0 atomų buvo sužadinti (t. y. kai kiekvieno atomo banginė funkcija buvo (5.2.36)). Santykis $N(t) / N_0 = e^{-\lambda_n t}$ nusako tikimybę, kad atsitiktinai pasirinktas atomas laiko momentu t dar yra sužadintosios būsenos. Antra vertus, yra žinoma, kad banginės funkcijos modulio kvadrato integralas koordinačių atžvilgiu taip pat turi nusakyti tikimybę, kad atomo energija lygi duotai vertei E_n . Vadinasi, banginės funkcijos modulio kvadratas taip pat turi mažėti eksponentiškai:

$$|\Psi_n(t)|^2 = |\Psi_n(t=0)|^2 e^{-\lambda_n t} . \quad (5.2.39)$$

Tai reiškia, kad į nenuostoviosios būsenos banginės funkcijos išraišką turi įeiti daugiklis, kurio modulio kvadratas lygus $e^{-\lambda_n t}$. Tas daugiklis lygus $e^{-\lambda_n t / 2}$:

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t / \hbar} e^{-\lambda_n t / 2} . \quad (5.2.40)$$

Kadangi banginės funkcijos modulis priklauso nuo laiko, tai būsenos energija nėra tiksliai apibrėžta. Tai reiškia, kad fotonų, kuriuos išspinduliuavo skirtingi atomai savaiminių šuolių metu, energijos šiek tiek skiriasi. Šio teiginio matematinė išraiška yra energijos ir laiko neapibrėžtumų sąryšis (3.1.30). Energijos neapibrėžtumą patogiausia apibūdinti energijos tikimybės tankiu $P(E)$ (atsitiktinio dydžio tikimybės tankis apibrėžtas G priedo G.4.3 skyrelyje). Energijos tikimybės tankis – tai normuotas į vienetą energijos spektrinis tankis. Bet kurio signalo energijos spektrinis tankis yra proporcingas to signalo Furjė transformacijos modulio kvadratui (žr. F priedas, F.2 skyrelis). Apskaičiavę (5.2.40) reiškinių Furjė transformacijos modulio kvadratą ir normavę į vienetą, gauname, kad tikimybė aptikti atomą energijos intervale nuo E iki $E + dE$ yra lygi¹

¹ Šis rezultatas gaunamas pasinaudojus sąryšiu tarp Furjė transformacijos parametro ω (kampinio dažnio) ir energijos: $\omega = -E / \hbar$ (čia minuso ženklas reikalingas todėl, kad banginės funkcijos išraiškoje (5.2.40) prieš E yra minusas).

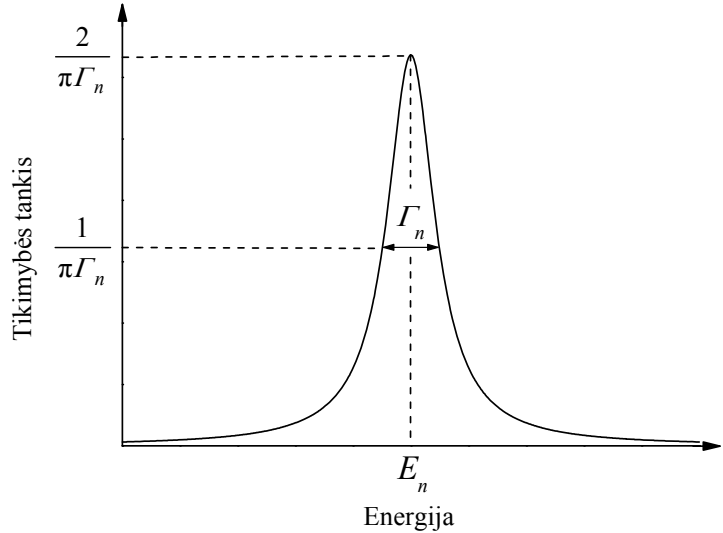
$$P(E)dE = \frac{2\Gamma_n}{\pi} \cdot \frac{1}{4(E - E_n)^2 + \Gamma_n^2} dE; \quad (5.2.41)$$

čia

$$\Gamma_n = \hbar / \tau_n. \quad (5.2.42)$$

Pastovus daugiklis $2\Gamma_n / \pi$ (5.2.41) lygybės dešiniojoje pusėje – tai normavimo konstanta, kuri užtikrina lygybę $\int_{-\infty}^{\infty} P(E)dE = 1$. Tikimybės tankio funkcija $P(E)$ pavaizduota 5.3 pav. Tokio pavidalo skirstinys,

kuri nusako (5.2.41) formulė, turi tris pavadinimus: tikimybių teorijoje jis vadinamas **Koši skirstiniu** (angl. *Cauchy distribution*), o fizikai jį vadina **Lorenzo skirstiniu** arba **Breito ir Vignerio skirstiniu** (angl. *Breit-Wigner distribution*). Matome, kad dydžio Γ_n prasmė – tai energijos pasiskirstymo plotis pusės maksimumo aukštyje, kai sistema yra būsenos n . Šis dydis yra energijos neapibrėžtumo matas. Iš (5.2.42) išplaukia, kad energijos neapibrėžtumas yra atvirkščiai proporcingas duotosios būsenos gyvavimo trukmei: kuo nestabilesnė būsena, tuo platesnis jos energijos pasiskirstymas. Dydis Γ_n vadinamas **energijos lygmens pločiu**. Kai Γ_n artėja į nulį, energijos tikimybės tankis artėja prie Dirako δ funkcijos (žr. E priedas, δ funkcijos asimptotinė išraiška (E.10)).



5.3 pav. Energijos pasiskirstymas dėl kvantinės būsenos nenuostovumo

Išspinduliuotų fotonų energijos pasiskirstymo plotis pusės maksimumo aukštyje vadinamas **natūraliuoju linijos pločiu**. Jeigu galutinė būsena (m) yra stabili, tada fotonų energijos pasiskirstymas yra tokios pačios formos ir tokio paties pločio kaip pradinio lygmens (E_n) energijos pasiskirstymas. Taigi, šiuo atveju natūralusis linijos plotis yra lygus sužadintojo energijos lygmens pločiui Γ_n . Bendresniu atveju, kai kvantinis šuolis vyksta tarp dviejų nestabiliųjų būsenų, kurių pločiai yra Γ_1 ir Γ_2 , natūralusis linijos plotis lygus abiejų būsenų pločių sumai:

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2. \quad (5.2.43)$$

5.3. Atomo kvantinių šuolių atrankos taisyklės

Skirtingų kvantinių šuolių tikimybės (taigi, ir atitinkamų linijų intensyvumai) yra skirtingos. Kai kurių šuolių tikimybė yra tokia maža, kad ją galima laikyti lygia nuliui. Tokie šuoliai vadinami „draudžiamaisiais šuoliais“, o kiti kvantiniai šuoliai (kurių tikimybė yra palyginti didelė), vadinami „leidžiamaisiais šuoliais“ (tikslesnė leidžiamųjų ir draudžiamųjų šuolių apibrėžtis bus pateikta toliau). Taisyklės, kurios nusako, kurie šuoliai yra draudžiamieji, o kurie – leidžiamieji, vadinamos **kvantinių šuolių atrankos taisyklėmis**. Atrankos taisyklės gaunamos iš judesio kiekio momento tvermės dėsnio. Mat, vykstant elektrono spinduliuojamajam kvantiniam šuoliui tarp dviejų energijos lygmenų, kurie atitinka elektrono pilnutinio judesio kiekio kvantinius skaičius (j, m_j) ir (j', m'_j), išspinduliuojamas arba sugeriamas vadinamosios **daugiapolės spinduliuotės** fotonas, t. y. fotonas, kuris turi apibrėžtą judesio kiekio momentą L_f ir apibrėžtą to momento projekciją L_{fz} . Pagal judesio kiekio momento tvermės dėsnį

$$L_f = L'_j - L_j; \quad (5.3.1)$$

čia L'_j yra elektrono aukštesniojo energijos lygmens judesio kiekio momento vektorius, o L_j yra elektrono žemesniojo lygmens judesio kiekio momento vektorius. Fotono judesio kiekio momento ir jo projekcijos kvantinius skaičius žymėsime l_f ir m_f . Kvantinis skaičius l_f nusako daugiapolės spinduliuotės eilę. L -tosios eilės daugiapolė spinduliuotė taip pat vadinama „ 2^L -poline spinduliuote“. Daugiapolės spinduliuotės teorinė analizė bus pateikta 10 skyriuje ir D priede. Čia paminėsime tik keletą tos analizės išvadų. Pasiūdojus bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę (3.3.20) ir atsižvelgus į tai, kad daugiapolė spinduliuotė su $l_f = 0$ neegzistuoja, gaunamos tokios sąlygos, kurias turi atitikti skaičiai l_f ir m_f :

$$\text{kai } j \neq j': |j - j'| \leq l_f \leq |j + j'|, \quad (5.3.2a)$$

$$\text{kai } j = j': 1 \leq l_f \leq |j + j'|, \quad (5.3.2b)$$

$$m_f = m'_f - m_j, \quad (5.3.3)$$

$$-l_f \leq m_f \leq l_f; \quad (5.3.4)$$

čia brūkšniuotieji žymenys atitinka aukštesnįjį energijos lygmenį.

Be to, kvantiniai šuoliai ir jų metu išspinduliuotieji fotonai klasifikuojami pagal spinduliuotės lauko lyginumą. Spinduliuotės lyginumą susitarta tapatinti su jos magnetinio lauko lyginiu. Daugiapolė spinduliuotė, kurios magnetinis laukas keičia ženklą, atlikus koordinačių inversiją, vadinama „nelygine daugiapole spinduliuote“ (kitais sakant, jos lyginumas yra -1), o daugiapolė spinduliuotė, kurios magnetinis laukas nekeičia ženklo po inversijos, vadinama „lygine daugiapole spinduliuote“ (kitais sakant, jos lyginumas yra $+1$). L -tosios eilės daugiapolė spinduliuotė, kurios lyginumas yra $(-1)^L$, vadinama **elektrine daugiapole spinduliuote**. L -tosios eilės daugiapolė spinduliuotė, kurios lyginumas yra $(-1)^{L+1}$, vadinama **magnetine daugiapole spinduliuote**. Kvantiniai šuoliai, kurių metu atsiranda arba sugerama L -tosios eilės elektrinė daugiapolė spinduliuotė, yra vadinami „elektriniais šuoliais“ ir žymimi „ EL “ (t. y. $E1$, $E2$ ir t. t.), o šuoliai, kurių metu atsiranda arba sugerama L -tosios eilės magnetinė daugiapolė spinduliuotė, yra vadinami „magnetiniais šuoliais“ ir žymimi „ ML “ (t. y. $M1$, $M2$ ir t. t.). Kiekvieną galimą spinduliuotės eilę L atitinka tik vieno tipo šuolis (t. y. duotos daugiapoliškumo eilės L šuolis gali būti tik elektrinis arba tik magnetinis). Leidžiamą kvantinio šuolio (ir spinduliuotės) tipą nusako ši „**lyginumo atrankos taisyklė**“: jeigu šuolio metu atomo būsenos lyginumas nepakinta, tada šuolyje gali dalyvauti tik lyginė daugiapolė spinduliuotė (t. y. esant nelyginei spinduliuotės eilei L yra galimas tik ML šuolis, o esant lyginei eilei L yra galimas tik EL šuolis), o jeigu šuolio metu būsenos lyginumas pakinta, tada šuolyje gali dalyvauti tik nelyginė daugiapolė spinduliuotė (t. y. esant nelyginei spinduliuotės eilei L yra galimas tik EL šuolis, o esant lyginei eilei L yra galimas tik ML šuolis).

(5.3.2)–(5.3.4) lygybės nusako daugiapolės spinduliuotės, kuri gali atsirasti duotojo kvantinio šuolio metu, galimą eilę. Todėl tas lygybes galima pavadinti **daugiapolių atrankos taisyklėmis** (nepainioti su *kvantinių šuolių* atrankos taisyklėmis, kurios bus suformuluotos toliau). Matome, kad bendroju atveju duotojo šuolio metu gali atsirasti įvairių eilių daugiapolė spinduliuotė. Pvz., vykstant šuoliui iš būsenos su $j' = 5/2$ į būseną su $j = 3/2$, gali atsirasti daugiapolė spinduliuotė, kurios eilė kinta nuo $j' - j = 5/2 - 3/2 = 1$ iki $j' + j = 4$. Tačiau, kaip bus įrodyta 10 skyriuje, daugiapolės spinduliuotės intensyvumas (t. y. atitinkamo šuolio tikimybė) sparčiai mažėja didėjant daugiapoliškumo eilei l_f . Pvz., jeigu iš duotojo sužadintojo energijos lygmens yra galimi du savaiminiai kvantiniai šuoliai, kurių vienas yra elektrinis dipolinis, o kitas – elektrinis kvadrupolinis, ir jeigu abiejų šuolių atveju atsirandančios spinduliuotės bangos ilgiai yra artimi vienas kitam, tada dipolinės spinduliuotės intensyvumas yra maždaug $\lambda^2/(2\pi a)^2$ kartų didesnis už kvadrupolinės spinduliuotės intensyvumą; čia a yra spinduliuojančios sistemos (pvz., atomo arba branduolio) matmenys, o λ yra spinduliuotės bangos ilgis ($\lambda/2\pi = c/\omega$, kur c yra šviesos greitis). Pvz., jeigu atomas ($a = 1 \text{ Å}$) tų šuolių metu spinduliuoja regimąją šviesą ($\lambda = 5000 \text{ Å}$), tada dipolinės spinduliuotės intensyvumas yra 10^5 – 10^6 kartų didesnis už kvadrupolinės spinduliuotės intensyvumą. Todėl, nagrinėjant daugelį atomo fizikos reiškinių, pakanka atsižvelgti tik į elektrinę dipolinę spinduliuotę ($E1$ šuoliai). Taigi, **leidžiamieji šuoliai** – tai elektriniai dipoliniai šuoliai. Visi kiti šuoliai vadinami **draudžiamaisiais šuoliais**. Elektrinio dipolinio šuolio metu elektrono šalutinis kvantinis skaičius l pakinta dydžiu ± 1 ir pasikeičia banginės funkcijos lyginumas¹. Elektrinio dipolinio kvantinio šuolio tikimybę per laiko vienetą nusako Einšteino koeficientas A_{nm} , kurio išraiška yra (5.2.28). Toje išraiškoje matome, kad elektrinio dipolinio (leidžiamojo) šuolio tikimybė yra proporcinga krūvininko elektrinio dipolinio momento operatoriaus er matricos elemento modulio kvadratui. Apskritai duotosios eilės daugiapolių kvantinio šuolio tikimybė yra proporcinga atitinkamo daugiapolių momento operatoriaus matricos elemento modulio kvadratui.

Kvantinių šuolių atrankos taisyklės nusako leidžiamojo (t. y. elektrinio dipolinio) kvantinio šuolio sąlygas. Iš daugiapolių atrankos taisyklių (5.3.2a,b), (5.3.3) ir iš lyginumo atrankos taisyklės išplaukia, kad elektrono pilnutinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus j ir šalutinio kvantinio skaičiaus l pokyčiai elektrinio dipolinio šuolio metu yra

¹ Šis lyginumo pokytis atitinka žinomas elektrono banginės funkcijos savybes: atomo elektrono orbitinės banginės funkcijos kampinė dalis yra sferinė harmonika, kurios lyginumas yra $(-1)^l$. Vadinasi, elektrinio dipolinio šuolio metu elektrono orbitinės banginės funkcijos lyginumas visada pasikeičia.

$$\Delta j = 0, \pm 1, \quad (5.3.5a)$$

$$\Delta l = \pm 1. \quad (5.3.5b)$$

Tai yra *vieno elektrono* kvantinių šuolių atrankos taisyklės. Jos neriboja pagrindinio kvantinio skaičiaus n pokyčio. Daugiaelektronio atomo, kuriame egzistuoja LS ryšys (žr. 4.2 poskyrį), kvantinių šuolių atrankos taisyklės yra tokios:

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\text{tačiau šuoliai tarp lygmenų su } J = 0 \text{ yra draudžiamieji}), \quad (5.3.6a)$$

$$\Delta S = 0, \quad (5.3.6b)$$

$$\Delta L = 0, \pm 1 \quad (\text{tačiau šuoliai tarp lygmenų su } L = 0 \text{ yra draudžiamieji}), \quad (5.3.6c)$$

$$\Delta m_J = 0, \pm 1 \quad (\text{tačiau šuoliai tarp lygmenų su } m_J = 0 \text{ ir vienodais } J \text{ yra draudžiamieji}), \quad (5.3.6d)$$

$$\Pi = -\Pi'; \quad (5.3.6e)$$

čia Π ir Π' yra pradinės ir galutinės būsenų lyginumai. Toks vieno elektrono ir atomo kvantinių šuolių atrankos taisyklių panašumas yra susijęs su tuo, kad atomo, kuriame egzistuoja LS ryšys, tikimiausi kvantiniai šuoliai yra tie šuoliai, kurių metu kinta tik *vieno* elektrono būsena.

Atomo kvantinių skaičių J ir m_J atrankos taisyklės (5.3.6a) ir (5.3.6d) bei lyginumo atrankos taisyklė (5.3.6e) tinka visiems atomams. Tačiau kvantinių skaičių S ir L atrankos taisyklės (5.3.6b) ir (5.3.6c) tinka tik esant LS ryšiui. Jeigu yra tarpinis ryšys (pvz., sunkesniųjų atomų atveju), tada yra galimi elektriniai dipoliniai šuoliai, kurių metu $\Delta S \neq 0$. Elektriniai dipoliniai kvantiniai šuoliai, kurių metu pasikeičia atomo sukinio kvantinis skaičius S , yra vadinami **interkombinaciniais šuoliais**. Jeigu

$$\Delta S = \pm 1, \quad (5.3.7a)$$

tada interkombinacinio šuolio atveju

$$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (5.3.7b)$$

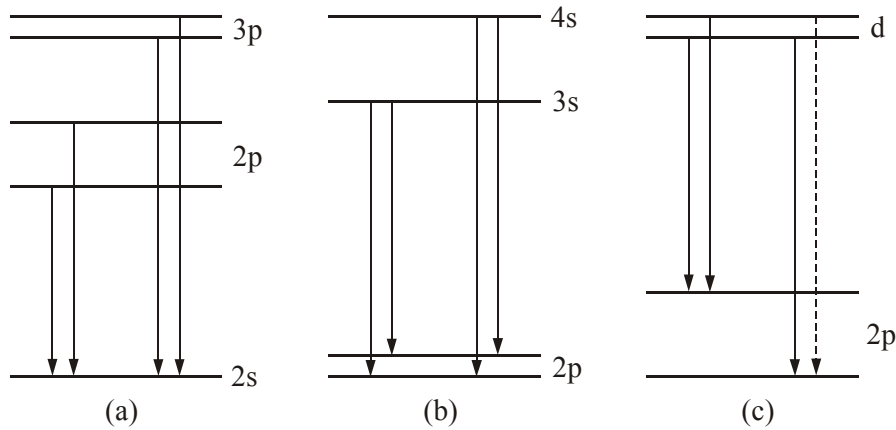
Kvantinių šuolių atrankos taisyklės (5.3.5)–(5.3.7) nėra absoliučiai griežtos. Draudžiamųjų spinduliuojamųjų šuolių tikimybė per laiko vienetą nėra tiksliai lygi nuliui, tačiau ji būna daug mažesnė už leidžiamųjų spinduliuojamųjų šuolių tikimybę per laiko vienetą. Galimi atvejai, kai nėra galimų leidžiamųjų spinduliuojamųjų šuolių į žemesnį energijos lygmenį. Tada įvyksta kuris nors iš draudžiamųjų spinduliuojamųjų šuolių arba įvyksta nespinduliuojamasis kvantinis šuolis dėl sąveikos su aplinkos atomais. Pastarasis atomo sužadavimo energijos netekimo mechanizmas dažniausiai būna daug labiau tikėtinas negu draudžiamasis spinduliuojamasis šuolis, nes praktiškai sunku gauti tokį didelį vakuumą, kad draudžiamasis spinduliuojamasis savaiminis šuolis spėtų įvykti prieš nespinduliuojamąjį šuolį dėl netampriojo susidūrimo su kitu atomu. Todėl atomų draudžiamieji spinduliuojamieji šuoliai praktikoje pasitaiko gana retai. Draudžiamieji spinduliuojamieji šuoliai daug dažniau pasitaiko branduolio fizikoje (branduolių elektromagnetinė spinduliuotė bus aptariama 10 skyriuje). Tačiau, net ir esant nespinduliuojamiesiems šuoliams, jeigu nėra galimų leidžiamųjų savaiminių spinduliuojamųjų šuolių, atomas būna sužadintas daug ilgiau negu įprasta, todėl tokios sužadintosios būsenos vadinamos **metastabiliosiomis būsenomis**.

5.4. Atomų spektro linijų smulkioji sandara

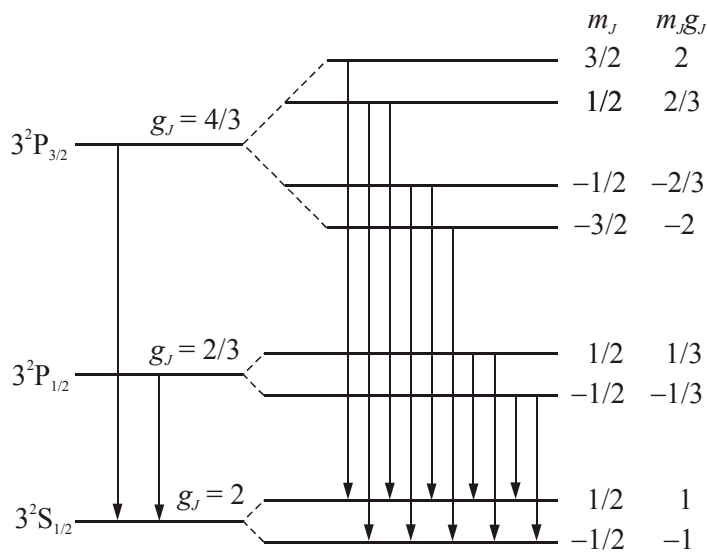
Kiekviena atomo spinduliuotės spektro linija atitinka atomo kvantinį šuolį tarp dviejų energijos lygmenų. Linijos dažnis yra lygus lygmenų energijų skirtumui, padalytam iš Planko konstantos. Todėl 3.3 ir 4.2 poskyriuose minėtasis energijos lygmenų skilimas dėl sukinio ir orbitos sąveikos arba dėl atomo magnetinio momento sąveikos su išoriniu magnetiniu lauku lemia spektro linijų skilimą į dvi arba daugiau artimų linijų. Šis skilimas vadinamas **spektro linijų multiptetiškumu**, o spektro linija, kuri sudaryta iš kelių artimų linijų, apibendrinamai vadinama multiptetu. Dviguba linija vadinama dubletu, triguba – tripletu ir t. t. Spektro linijų multiptetinė sandara, kuri atsiranda dėl sukinio ir orbitos sąveikos, dėl atomo magnetinio momento sąveikos su išoriniu magnetiniu lauku ir dėl kitų veiksnių, yra vadinama spektro **smulkiaja sandara**.

Sukinio ir orbitos sąveika bei atrankos taisyklės (5.3.6a–c) visiškai paaiškina šarminių metalų atomų spinduliuotės spektrų dėsningumus. Pvz., 5.4 pav. pavaizduoti ličio atomo valentinio elektrono šuoliai iš p lygmenų į $2s$ lygmenį (a), iš s lygmenų – į $2p$ lygmenį (b) ir iš d lygmenų – į $2p$ lygmenį (c). Šuolis, kuris pavaizduotas brūkšnine rodykle, yra draudžiamasis (jis atitinka $\Delta j = -2$).

4.2 poskyryje minėta, kad, esant magnetiniam laukui, šalia energijos lygmenų skilimo, kurį sukelia sukinio ir orbitos sąveika, atsiranda lygmenų skilimas, kuris pašalina lygmenų išsigimimą magnetinio kvantinio skaičiaus m_J atžvilgiu. Todėl magnetiniame lauke šalia anksčiau minėtos spinduliuotės spektro linijų smulkiosios sandaros atsiranda papildomas spektro linijų skilimas. Šis atomo spinduliuotės spektro linijų skilimas magnetiniame lauke vadinamas **Zemano efektu**. Kiekvienos linijos sandų skaičius išplaukia iš atrankos taisyklių (5.3.6a–d). Pvz., 5.5 pav. pavaizduoti natrio atomo lygmenų $3^2S_{1/2}$, $3^2P_{1/2}$ ir $3^2P_{3/2}$



5.4 pav. Ličio atomo valentinio elektrono kvantiniai šuoliai atsižvelgiant į smulkiają sandarą: (a) šuoliai iš p lygmenų į 2s lygmenį, (b) šuoliai iš s lygmenų į 2p lygmenis, (c) šuoliai iš d lygmenų į 2p lygmenis (šuoilis, kuris pavaizduotas brūkšnine linija, yra draudžiamasis)



5.5 pav. Natrio atomo energijos lygmenų skilimas magnetiniame lauke ir atitinkamas spektro linijų skilimas (Zėmano efektas)

skilimas ir spinduliuotės spektro linijų, kurios atitinka šuolius tarp 3^2P ir 3^2S būsenų, smulkioji sandara esant Zėmano efektui. Kaip matome, dėl Zėmano efekto dubletas virsta 10 artimų linijų.

Uždaviniai

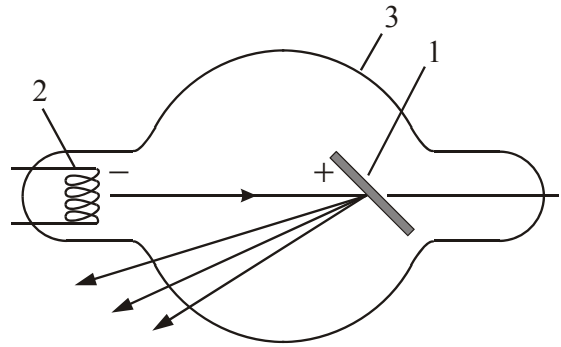
1. Apskaičiuokite sužadintųjų atomų vidutinę gyvavimo trukmę, jeigu yra žinoma, kad spektro linijos, kurią sąlygoja kvantiniai šuoliai į pagrindinę būseną, intensyvumas sumažėja $\eta = 25$ kartus $l = 2,5$ mm atstumu išilgai atomų pluošto, kurio greitis $v = 600$ m/s.
2. Praretintieji gyvsidabrio garai, kurių visi atomai yra pagrindinės būsenos, buvo apšviesti gyvsidabrio lempos šviesa, kurios bangos ilgis $\lambda = 253,65$ nm. Šitaip sužadintų garų atomų spinduliuotės galia $P = 0,035$ W. Apskaičiuokite sužadintųjų atomų skaičių, jeigu yra žinoma, kad sužadintosios būsenos vidutinė gyvavimo trukmė lygi $\tau = 0,15$ μ s.
3. Vienatomio Li garų koncentracija $n = 3,6 \cdot 10^{16}$ cm^{-3} ; garų temperatūra $T = 1500$ K. Spektro linijos, kurios bangos ilgis $\lambda = 671$ nm (šuoilis $2P \rightarrow 2S$) spinduliuotės galia garų tūrio vienetui lygi $P = 0,30$ W/ cm^3 . Apskaičiuokite $2P$ būsenos Li atomų vidutinę gyvavimo trukmę.
4. Vienatomis vandenilis yra termodinaminės pusiausvyros su savo spinduliuote. Apskaičiuokite:
 - (a) savaiminio ir priverstinio spinduliavimo iš lygmens $2P$ intensyvumų santykį 3000 K temperatūroje;
 - (b) temperatūrą, kurioje šie intensyvumai sutampa.
5. Nustatykite, kuriuos iš šių kvantinių šuolių draudžia atrankos taisyklės: $^2D_{3/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$, $^3P_1 \rightarrow ^2S_{1/2}$, $^3F_3 \rightarrow ^3P_2$, $^4F_{7/2} \rightarrow ^4D_{5/2}$.

6. Rentgeno spinduliuotė

6.1. Rentgeno spinduliuotės šaltiniai

1895 m. vokiečių fizikas Vilhelmas Konradas Rentgenas (*Röntgen*), tirdamas aukštos įtampos elektros išlydžius vakuumu, pastebėjo bario platinocianido plokštelės švytėjimą, kai ji yra šalia kartonu uždengtos vakuuminės lempos. Vėliau paaiškėjo, kad tą švytėjimą sukelia elektromagnetinės bangos, kurių bangos ilgis kinta nuo kelių šimtų angstromų iki šimtųjų angstromo dalių. Tos bangos buvo pavadintos **Rentgeno spinduliuote**. Rentgeno spinduliuotės diapazonas iš dalies persikloja su γ spinduliuotės diapazonu (žr. 12.1 lentelę 12 skyriaus pradžioje ir 9.4 poskyrį). Rentgeno spinduliuotė yra nematoma, tačiau veikia fotografinę plokštelę, jonizuoja dujas, sukelia kai kurių medžiagų švytėjimą (fluorescenciją). Šios savybės panaudojamos kuriant įvairius registravimo prietaisus.

Rentgeno spinduliuotės šaltinio vaidmenį dažniausiai atlieka specialūs (rentgeno) vamzdžiai. Rentgeno vamzdžio supaprastinta schema pavaizduota 6.1 pav. Tai yra dviejų elektrodų elektrovakuuminis prietaisas, sudarytas iš teigiamojo elektrodo – anodo (1), neigiamojo elektrodo – katodo (2) ir kolbos (3). Tarp katodo ir anodo sudaromas didelis potencialų skirtumas (aukšta įtampa). Rentgeno spinduliuotė atsiranda greitiams elektronams bombarduojant anodo paviršių. Naudojami dviejų tipų rentgeno vamzdžiai, kurie skiriasi elektronų pluoštelio sužadinimo būdu: joniniai ir elektroniniai. **Joniniuose vamzdžiuose** laisvieji elektronai susidaro praretintųjų dujų teigiamiesiems jonams bombarduojant šaltą katodą. Šie jonai atsiranda dėl rusenančiojo išlydžio praretintose dujose. **Elektroniniuose vamzdžiuose** laisvieji elektronai atsiranda dėl termoelektroninės emisijos iš katodo (termoelektroninė emisija – tai elektronų išlaisvinimas iš metalo jį kaitinant). Įprastuose rentgeno vamzdžiuose spinduliuotę sužadinančiųjų elektronų energija yra $(10^4\text{--}10^5)$ eV. Ypač trumpo bangos ilgio rentgeno spinduliai gaunami naudojant elektronų greitintuvus. Pastaruoju atveju elektronų, generuojančių rentgeno spindulius, energija gali siekti $\sim 10^9$ eV. Rentgeno spindulius taip pat skleidžia radioaktyvieji elementai, sklyantys K arba L elektrono pagavimo būdu. Daugelis dangaus kūnų skleidžia rentgeno spinduliuotę (Saulė, žvaigždės). Plazma taip pat yra rentgeno spinduliuotės šaltinis.



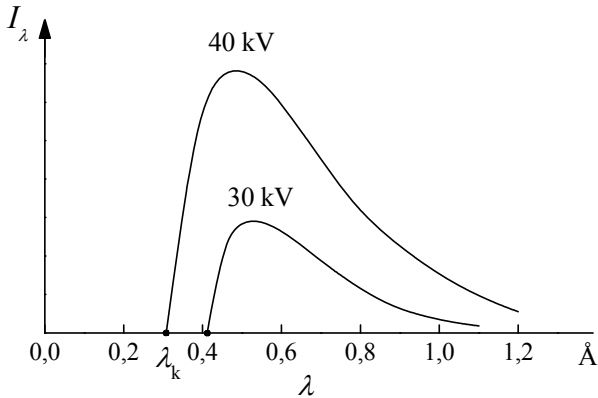
6.1 pav. Rentgeno vamzdžio schema. 1 – anodas, 2 – katodas, 3 – kolba

Elektronams smogiant į anodo medžiagos atomus, yra sužadinama dviejų rūšių rentgeno spinduliuotė: stabdomoji ir būdingoji. **Stabdomoji spinduliuotė** atsiranda dėl to, kad elektronas anodo medžiagoje yra stabdomas, t. y. juda su pagreičiu. Kaip teigia klasikinė elektrodinamika, elektringajai dalelei judant su pagreičiu, yra spinduliuojamos elektromagnetinės bangos. Tai ir yra stabdomoji rentgeno spinduliuotė. Stabdomosios rentgeno spinduliuotės spektras yra ištisinis, t. y. į spinduliuotės sudėtį įeina visi bangų ilgiai tam tikrame intervale (pvz., visi bangos ilgiai, kurie atitinka sąlygą $\lambda > 1 \text{ \AA}$). **Būdingoji spinduliuotė** atsiranda dėl to, kad didelės energijos elektronas gali išlaisvinti elektroną iš anodo medžiagos atomo vidinio elektronų sluoksnio. Tada šiame sluoksnyje atsiranda vakansija, į kurią peršoka elektronas iš aukštesnio elektronų sluoksnio. Tokio šuolio metu išspinduliuojamas fotonas, kurio energija lygi abiejų elektronų sluoksnių energijų skirtumui. Šie fotonai ir yra būdingoji rentgeno spinduliuotė. Būdingosios rentgeno spinduliuotės spektras yra linijinis, t. y. į spinduliuotės sudėtį įeina keli tiksliai apibrėžti bangos ilgiai. Šie bangos ilgiai priklauso tik nuo anodo medžiagos, t. y. „apibūdina“ ją (iš čia – pavadinimas „būdingoji“ spinduliuotė).

Toliau pateiktas smulkesnis stabdomosios ir būdingosios rentgeno spinduliuotės aprašymas.

6.2. Stabdomoji rentgeno spinduliuotė

Kol anode stabdomų elektronų energija neviršija tam tikros ribinės anodo medžiagai būdingos vertės, sužadinama tik stabdomoji spinduliuotė. Stabdomosios spinduliuotės spektras yra ištisinis. Spektro intensyvumo I_λ (pro vienetinio ploto paviršių per laiko vienetą perėjusio energijos kiekio vienetiniame bangos ilgių intervale, t. y. $dI/d\lambda$, kur I yra intensyvumas) priklausomybė nuo bangos ilgio λ esant dviem greitimo įtampos vertėms pateikta 6.2 pav. Ši funkcija turi maksimumą. Spektro intensyvumo



6.2 pav. Stabdomosios rentgeno spinduliuotės spektras

Kvantinė mechanika teigia, kad elektromagnetinę spinduliuotę (taigi, ir rentgeno spinduliuotę) galima aprašyti kaip elementariųjų dalelių – fotonų – srautą (žr. 1.4 poskyrį). Fotono energija lygi $h\nu = hc/\lambda$; čia ν yra spinduliuotės dažnis, h yra Planko konstanta, o c yra šviesos greitis. Pvz., 2 Å bangos ilgio rentgeno spinduliuotės fotono energija lygi maždaug 6,2 keV (palyginimas – regimosios šviesos fotonų energija yra kelių elektronvoltų eilės). Taigi, galima teigti, kad, pataikius į anodą didelės energijos elektronui, atsiranda didelės energijos fotonai. Šis reiškinys yra atvirkštinis fotoefektui – elektronų išlaisvinimui iš metalo paviršiaus, kai metalas apšviečiamas ultravioletine šviesa arba mažesnio bangos ilgio elektromagnetine spinduliuote (žr. 1.5 poskyrį). Fotoefekto Einšteino lygtį (1.5.2) užrašysime šitaip:

$$\frac{mv^2}{2} = eU = h\nu + A_1; \quad (6.2.2)$$

čia $h\nu$ yra krintančiojo fotono energija, $A_1 = -A$ yra elektrono išlaisvinimo darbas su minuso ženklu, $mv^2/2 = eU$ – išlaisvintojo elektrono kinetinė energija, U yra lėtinančioji įtampa, kuri reikalinga visiškam išlaisvintojo elektrono sustabdymui. Fotoefekto atveju $A_1 = -A < 0$. Tačiau (6.2.2) lygybė galioja ir tuo atveju, kai vyksta atvirkštinis vyksmas: kai įtampos U pagreitinamas elektronas sąveikauja su medžiagos atomu, dalis jo energijos išspinduliuojama fotono $h\nu$ pavidalu, o likusioji dalis A_1 perduodama medžiagos atomams ($A_1 > 0$). Šis greitai judančių elektronų energijos vartimas fotonų energija ir yra stabdomosios rentgeno spinduliuotės atsiradimo priežastis. Elektronas anodo medžiagoje yra stabdomas dėl Kulono sąveikos su anodo medžiagos elektringosiomis dalelėmis – atomų branduoliais ir elektronais. Ši sąveika mažina elektrono judėjimo greitį, t. y. suteikia jam pagreitį. Kaip teigia klasikinė elektrodinamika, elektringajai dalelei judant su pagreičiu, yra spinduliuojamos elektromagnetinės bangos, kurių energijos srautas (energijos kiekis per laiko vienetą) yra proporcingas dalelės pagreičio kvadratui.

Fotono, kuris išspinduliuojamas elektrono sąveikos su branduoliu metu, energija yra didžiausia tada, kai fotonas gauna visą elektrono kinetinę energiją ($A_1 = 0$), t. y.

$$eU = h\nu. \quad (6.2.3)$$

Vadinasi, trumpabangio krašto bangos ilgis yra lygus

$$\lambda_k = \frac{ch}{eU}. \quad (6.2.4)$$

Irašę c , e ir h vertes į (6.2.4) formulę, matome:

$$\lambda_k = \frac{12,345}{U(\text{kV})} \text{Å}.$$

Ši formulė tiksliai sutampa su eksperimentine išraiška (6.2.1).

(6.2.4) lygtį galima panaudoti nustatant Planko konstantą h . Tai yra vienas tiksliausių Planko konstantos matavimo būdų.

Stabdomojo spektro maksimumą atitinkantis bangos ilgis $\lambda_{\max}$ yra šitaip susijęs su trumpabangio krašto bangos ilgiu λ_k :

$$\lambda_{\max} = \frac{3}{2} \lambda_k. \quad (6.2.5)$$

Eksperimentiškai buvo nustatyta, kad stabdomosios spinduliuotės intensyvumas didėja didėjant anodo atomų branduolių krūviui. Taip pat buvo nustatyta, kad sunkiųjų elektringųjų dalelių (pvz., protonų) stabdomosios spinduliuotės intensyvumas tomis pačiomis sąlygomis yra mažesnis negu lengvųjų dalelių – elektronų. Išsiaiškinsime, kodėl taip yra.

mažėjimas einant nuo šio maksimumo į ilgų ir trumpų bangų pusę yra skirtingas. Į ilgų bangų pusę kreivė asimptotiškai artėja į nulį didėjant bangos ilgiui ($\lambda \rightarrow \infty$). Į trumpų bangų pusę kreivė krinta staiga ir nutrūksta esant tam tikram bangos ilgiui λ_k , kuris nusakos spektro **trumpabangio kraštą**. Empiriškai nustatyta, kad trumpabangio krašto bangos ilgis λ_k lygus

$$\lambda_k = \frac{12,345}{U} \text{Å}; \quad (6.2.1)$$

čia U yra vamzdelio elektrodų potencialų skirtumas (kV). Taigi, trumpabangio krašto bangos ilgis nepriklauso nuo anodo medžiagos, o priklauso tik nuo greitinimo įtampos.

Elektringajai dalelei judant atomo branduolio, kurio krūvis Ze , elektriniame lauke, ji nukrypsta veikiamą jėgos

$$ma = -e\mathcal{E}; \quad (6.2.6)$$

čia m , e yra dalelės masė ir krūvis, a – jos pagreičio vektorius, $\mathcal{E}$ – branduolio elektrinio lauko stiprio vektorius:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze}{r^3} \mathbf{r}; \quad (6.2.7)$$

čia $\mathbf{r}$ yra dalelės spindulys vektorius koordinatinių sistemoje, kurios centre yra branduolys, r yra atstumas iki branduolio: $r = |\mathbf{r}|$; $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ F/m yra elektrinė konstanta. Įrašę (6.2.7) į (6.2.6), gauname pagreičio išraišką:

$$\mathbf{a} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Ze^2}{mr^3} \mathbf{r}. \quad (6.2.8)$$

Pagal klasikinę elektrodinamiką įrodoma, kad su pagrečiu a judanti dalelė per laiką dt išspinduliuoja energijos kiekį

$$dE = \frac{1}{6\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{c^3} a^2 dt. \quad (6.2.9)$$

Taigi, branduolio elektriniame lauke judanti dalelė per laiką dt išspinduliuoja energijos kiekį

$$dE = \frac{1}{96\pi^3\epsilon_0^3} \cdot \frac{e^6 Z^2}{c^3 m^2 r^4} dt. \quad (6.2.10)$$

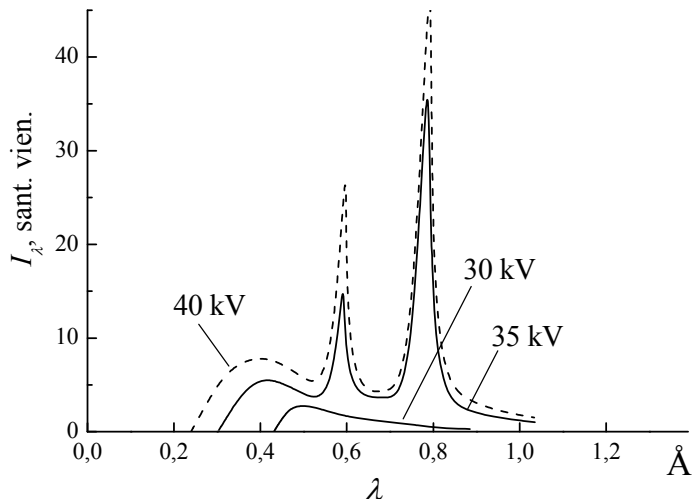
Šie energijos nuostoliai sparčiai mažėja didėjant stabdomosios dalelės masei ($\sim 1/m^2$). Todėl lengvųjų dalelių (elektronų) energijos nuostoliai yra daug didesni negu sunkiųjų dalelių (protonų). Be to, iš (6.2.10) lygties išplaukia, kad iš sunkiųjų elementų sudarytame taikinyje elektringosios dalelės energijos nuostoliai yra didesni negu taikinyje iš lengvųjų elementų ($\sim Z^2$). Jeigu tyrimams reikalingas ištisinis rentgeno spinduliuotės spektras, tai spinduliuotės žadinimui naudingiau panaudoti sunkiuosius elementus.

Iš anodo į aplinką išeinantis stabdomosios spinduliuotės srautas (dE/dt) yra daug mažesnis už tą, kuris išplaukia iš (6.2.10) formulės, nes didžioji stabdomosios spinduliuotės energijos dalis sugerama anodo medžiagoje virsdama šiluma.

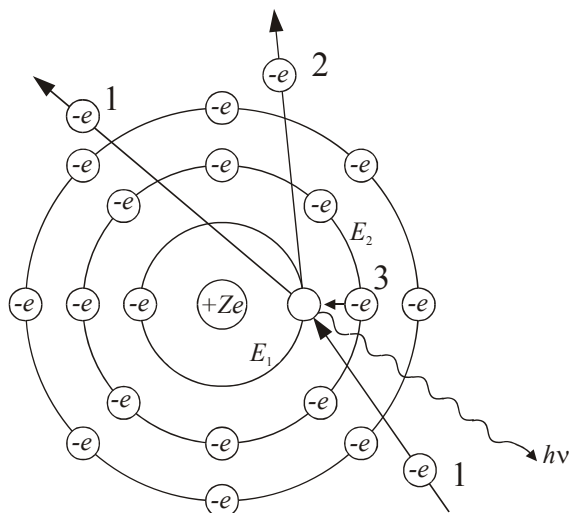
6.3. Būdingoji rentgeno spinduliuotė

Į anodą krįstančių elektronų energijai viršijus tam tikrą ribą, ištisinio spektro fone pasirodo spinduliuotės spektras, kuris sudarytas iš atskirų linijų (6.3 pav.). Ši spinduliuotė yra vadinama **būdingąja rentgeno spinduliuote**, nes ji „apibūdina“ anodo medžiagą: kiekvieną liniją atitinkantis bangos ilgis priklauso tik nuo medžiagos prigimties ir nepriklauso nuo greitinimo įtampos. Didinant greitinimo įtampą, linijų intensyvumas didėja; be to, trumpabangėje spektro dalyje gali atsirasti naujų linijų. Tačiau jau esančių linijų padėtis spektre nesikeičia.

Būdingosios rentgeno spinduliuotės atsiradimo schema pavaizduota 6.4 pav. Į anodą krįstantis elektronas (**pirminis elektronas**) 1, jeigu jo energija yra pakankamai didelė, gali savo energiją perduoti vienam iš vidinių medžiagos atomo elektronų 2 ir jį iš atomo išlaisvinti. Dėl to atomas yra jonizuojamas: viename iš vidinių elektronų sluoksnių (pvz., K sluoksnyje, kaip pavaizduota 6.4 pav.) atsiranda vakansija (skylė). Į šią laisvąją būseną pereina vienas iš tolesnių sluoksnių elektronų 3 (pvz., L sluoksniu elektronas, kaip pavaizduota 6.4 pav.). Pereinant elektronui 3 iš energijos E_2 būsenos į mažesnės energijos E_1 būseną, energijų skirtumas išspinduliuojamas fotono $h\nu = E_2 - E_1$ pavidalu. Kadangi šis energijų skirtumas yra tiksliai apibrėžtas, tai spinduliuojama tiksliai apibrėžto dažnio ν spinduliuotės spektro linija.



6.3 pav. Būdingosios rentgeno spinduliuotės spektras



6.4 pav. Būdingosios rentgeno spinduliuotės atsiradimo schema

Taigi, pirminio elektrono energijos virsmas būdingosios rentgeno spinduliuotės kvantu vyksta dviem etapais:

- 1) iš pradžių pirminis elektronas atomą jonizuoja, t. y. dalis pirminio elektrono energijos išsekvojama elektrono ryšio atome nutraukimui, o likusioji energijos dalis virsta išlaisvinto laisvojo elektrono (**antrinio elektrono**) kinetine energija;
- 2) kadangi susidaręs teigiamasis jonas yra nestabilios sužadintosios būsenos, atomo elektronai persiskirsto tarp būsenų, kartu emituodami fotoną, t. y. sužadinto energija virsta fotono energija (būdingosios rentgeno spinduliuotės energijos kvantu).

Apskritai būdingoji rentgeno spinduliuotė atsiranda visada, kai vidiniuose atomo elektronų sluoksniuose atsiranda vakansijos. Anksčiau aprašytasis tų vakansijų kūrimo būdas (panaudojant greituosius elektronus)

yra plačiausiai taikomas būdingosios rentgeno spinduliuotės generatoriuose. Tačiau minėtas vakansijas gali kurti ne vien elektronai, bet ir kitos elektringosios dalelės (pvz., alfa dalelės arba protonai). Būdingasis rentgeno spinduliavimas dėl taikinio apšaudymo elektringosiomis dalelėmis yra vadinamas **dalelių skatintuoju rentgeno spinduliavimu** (angliška santrumpa – PIXE: *particle-induced X-ray emission*). Be to, vakansijas gali kurti fotonai (atitinkamas būdingasis rentgeno spinduliavimas vadinamas **rentgeno fluorescencija**). Kitas vyksmas, kurio metu gali atsirasti būdingoji rentgeno spinduliuotė – tai vyksmas, kurio metu teigiamasis jonas pagauna elektroną (atominis elektrono pagavimas). Jeigu tas jonas turi didelį elektronų trūkumą, o pagautasis elektronas atsiduria viename iš išorinių elektronų sluoksnių, tada taip pat atsiranda būdingoji rentgeno spinduliuotė. Vakansijos atsiranda ir dėl kai kurių branduolinių vyksmų – vidinės konversijos (ji bus aprašyta 9.4 poskyryje) ir elektrono pagavimo į atomo branduolį (toks elektrono pagavimas bus aprašytas 9.3.1 poskyryje).

Elemento būdingosios spinduliuotės spektras nepriklauso nuo to, ar elementas yra laisvas, ar cheminio junginio sudėtyje. Pvz., jodo atomo ir jodo molekulės būdingieji rentgeno spektrai yra vienodi. Tuo būdingieji rentgeno spektrai skiriasi nuo optinių.

Būdingosios rentgeno spinduliuotės linijų išsidėstymas spektruose yra dėsningas: linijos sudaro serijas, esančias įvairiose spektro vietose. Būdingosios spinduliuotės spektro pavidalas aiškinamas šitaip. Jeigu pirminis elektronas išlaisvina vieną iš dviejų giliausio vidinio K sluoksnio elektronų, tai atsiradusi vakansija gali būti užpildyta elektronu iš kurio nors negilesnio sluoksnio L, M, N. Atitinkama linijų serija žymima raide K – taip pat kaip elektronų sluoksnis, kuriame yra vakansija. K serijos kraštas $h\nu_{kr}$ atitinka laisvo, esančio už atomo ribų, elektrono ($E = 0$) perėjimą į K sluoksnyje esančią vakansinę vietą (žr. 6.5 pav.). Laisvųjų elektronų, kurie už atomo ribų gali turėti bet kokią kinetinę energiją ($E > 0$), perėjimas į K sluoksnyje esančią laisvą vietą yra lydimas ištisinio spektro (prigludusio prie K serijos ribos) fotonų su energijomis $h\nu > h\nu_{kr}$ spinduliuotės (6.5 pav.). K seriją sudaro mažiausio bangos ilgio linijos. Linijų serija, kuri atsiranda dėl elektronų šuolių į L sluoksnį, yra žymima raide L ir t. t.

Būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro linijos žymimos taip, kad būtų aiškūs pradinis ir galutinis elektronų sluoksniai. Šiuo metu labiausiai paplitusios dvi linijų žymėjimo sistemos – vadinamoji Zybano (*Siegbahn*) sistema ir naujesnioji sistema, kurią 1991 m. rekomendavo Tarptautinė grynosios ir taikomosios chemijos sąjunga (angl. IUPAC: *International Union of Pure and Applied Chemistry*). Naudojant Zybano sistemą, linija žymima raide K, L, M ir t. t., kuri nusako galutinį sluoksnį (kuriame buvo vakansija), ir indeksu α , β ir t. t., kuris nusako pradinį sluoksnį (iš kurio peršoko elektronas), pvz., „ L_{α} “. Vartojant IUPAC sistemą, galutinis ir pradinis elektronų sluoksniai nurodomi raidėmis K, L, M ir t. t., kurių atskirtos brūkšneliu. Pvz., žymuo „K-L“ reiškia šuolį iš L sluoksnio į K sluoksnį (atitinkamas Zybano sistemos žymuo yra „ K_{α} “). Kadangi IUPAC žymėjimo sistema yra aiškesnė, ją toliau ir vartosime.

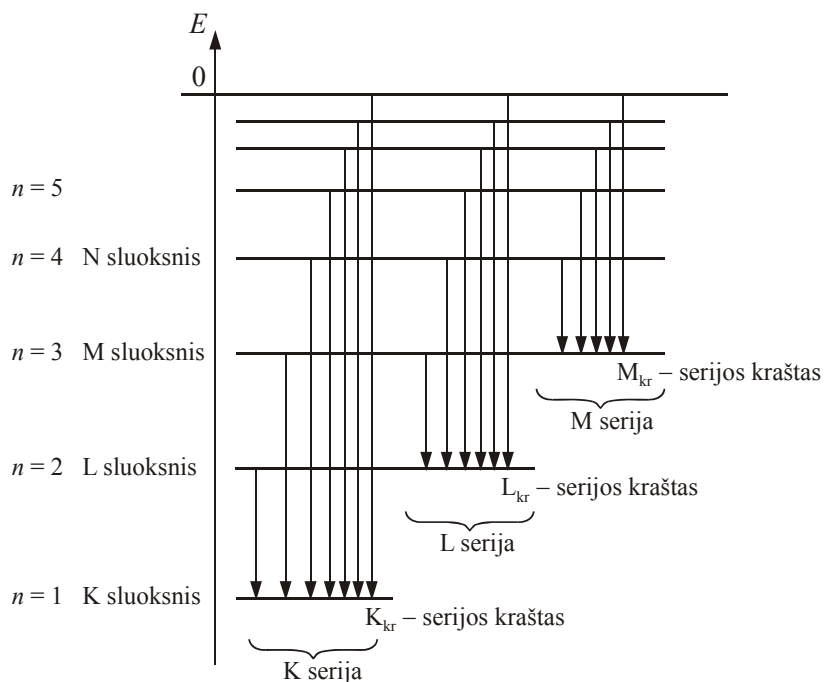
Didėjant anodo elemento atominiam numeriui, didėja spektre sužadinamų serijų skaičius. Elementų rentgeno spektrai yra paprasti, sudaryti iš palyginti mažo linijų skaičiaus. Palyginimas – optiniai spektrai dažniausiai yra sudėtingi. Juos sudaro šimtai ir tūkstančiai linijų. Be to, skirtingų elementų būdingieji rentgeno spektrai yra labai panašūs. Vienintelis pakitimas, kuris yra pastebimas būdinguosiuose rentgeno spektruose pereinant nuo lengvųjų elementų prie sunkesnių, yra laipsniškas linijų poslinkis į

trumpųjų bangų pusę. 6.6 pav. yra pavaizduotos kai kurių elementų K serijos. K seriją sudaro trys linijos: K-L, K-M ir K-N. K-L linija šioje serijoje yra didžiausio bangos ilgio ir turi dubletinę sandarą, t. y. sudaryta iš dviejų artimų linijų. K-M ir K-N linijos irgi yra dubletai, bet išskirti jų smulkiąją sandarą yra sunku. Kitos elementų būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro serijos (L, M, N) turi sudėtingesnę sandarą ir taip pat yra sudarytos iš mažo skaičiaus linijų.

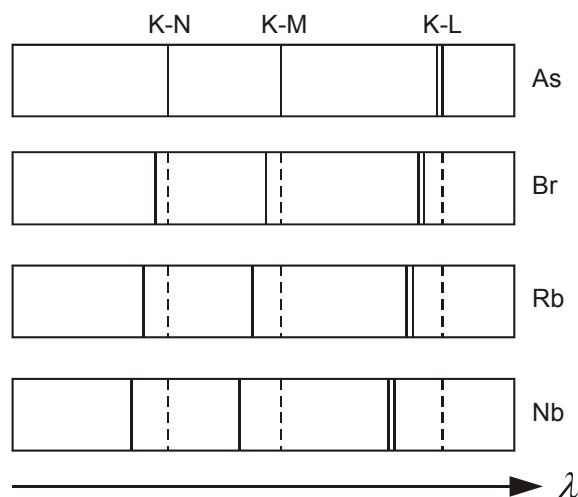
K serijoje intensyviausia yra K-L linija, antroji pagal intensyvumą yra K-M, trečioji – K-N, t. y. linijos intensyvumas serijoje mažėja nuo pirmos linijos link serijos krašto. Linijos intensyvumas yra proporcingas atitinkamo šuolio tikimybei per laiko vienetą. Vakansijos užpildymo, vykstant kvantiniam šuoliui iš duotojo aukštesniojo elektronų sluoksnio, tikimybė tuo didesnė, kuo mažesnis pradinio ir galutinio sluoksnių energijų skirtumas. Taip yra todėl, kad, kaip minėta 5.2.2 poskyryje, kvantinio šuolio tikimybė per laiko vienetą yra proporcinga elektrono spindulio vektoriaus matricos elemento, atitinkančio duotąsias pradinę ir galutinę elektrono būsenas, modulio kvadratui (žr. (5.2.28) formulę). Šis matricos elementas priklauso nuo pradinės

ir galutinės banginių funkcijų erdvinės sanklotos: kuo mažesnė erdvės sritis, kurioje abi tos funkcijos pastebimai skiriasi nuo nulio, tuo mažesnis spindulio vektoriaus matricos elementas (žr. matricos elemento išraišką (5.2.16)). Kadangi, didėjant sluoksnio numeriui, elektrono radialiojo tikimybės tankio maksimumas tolsta nuo branduolio (pvz., žr. 3.2 poskyris, 3.6 pav.), tai, didėjant pradinę ir galutinę būsenas atitinkančių sluoksnių numerių skirtumui, banginių funkcijų erdvinė sanklota mažėja, todėl mažėja ir spindulio vektoriaus matricos elementas bei kvantinio šuolio tikimybė.

Vykstant elektrono šuoliui iš aukštesnio elektronų sluoksnio į gilesniajame sluoksnyje esančią vakansiją, išsiskyrusi energija gali būti ne vien išspinduliuota fotono pavidalu, bet ir gali būti tiesiogiai perduota vienam iš išorinių (valentinių) elektronų, kuris dėl to išlekia iš atomo (taigi, atomas netenka dar vieno elektrono). Šis reiškinys vadinamas **Ožė reiškiniu** (angl. *Auger effect*), o tie elektronai vadinami **Ožė elektronais** (tą reiškinį atradusio prancūzų fiziko Pjero Ožė vardu). Ožė elektrono energija lygi pradinio šuolio metu išsiskyrusios energijos ir išlaisvintojo elektrono ryšio energijos skirtumui. Ožė reiškinių ir būdingosios rentgeno spinduliuotės fotono atsiradimo tikimybių santykis didėja mažėjant atominiam numeriui Z , nes tada mažėja elektronų ryšio energija. Kai $Z = 30$ (cinkas), Ožė reiškinių tikimybė yra apytiksliai lygi būdingosios rentgeno spinduliuotės tikimybei. Didesnio Z medžiagose būdingosios rentgeno spinduliuotės tikimybė yra didesnė negu Ožė reiškinių tikimybė. Pvz., jodo (I) (kai $Z = 53$), būdingosios rentgeno spinduliuotės tikimybė yra 7,3 karto didesnė negu Ožė reiškinių tikimybė.



6.5 pav. Būdingosios rentgeno spinduliuotės serijų atsiradimo schema



6.6 pav. As, Br, Rb ir Nb būdingosios rentgeno spinduliuotės K serijos

6.4. Mozlio dėsnis

Kvantinės mechanikos metodais (žr. 3.2 poskyrį) arba naudojant Boro atomo modelį (žr. 1.10 poskyrį) įrodoma, kad nejudančio vandeniliškojo atomo (t. y. vandenilio atomo arba jono, turinčio tik vieną elektroną) pilnutinė mechaninė energija gali būti lygi tik vertėms, kurias nusako (3.2.25) formulė:

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \approx -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13,6 \text{ eV} \quad (n = 1, 2, \dots); \quad (6.4.1)$$

čia Ze yra branduolio krūvis, $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$ yra elektrinė konstanta, $m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ yra elektrono masė (tiksliau, elektrono ir branduolio sistemos redukuotoji masė (1.10.9), kuri yra nedaug mažesnė už elektrono masę). Sveikasis skaičius n nusako elektronų sluoksnio numerį: $n = 1$ atitinka K sluoksnį, $n = 2$ atitinka L sluoksnį ir t. t. Vadinasi, fotono, kuris emituojamas L elektronui pereinant į vakansiją K sluoksnyje, energija lygi

$$h\nu_{K-L} = E_L - E_K = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} Z^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right). \quad (6.4.2)$$

Tačiau ši formulė tiksliai gali būti taikoma tik vandeniliškiems atomams. Jeigu atomas turi daugiau negu vieną elektroną, tada, skaičiuojant šuolio energiją, reikia atsižvelgti į elektronų tarpusavio sąveiką. Į K sluoksnyje esančią vakansiją pereinantį elektroną veikia branduolio krūvio $+Ze$ laukas, susilpnintas K sluoksnyje esančio antro elektrono lauko. Todėl branduolio efektyvus krūvis $+Z_1e$, kuris lemia elektrinį lauką, kuriame vyksta elektrono šuolis iš L (M, N) sluoksnio į K sluoksnį, yra mažesnis už branduolio krūvį $+Ze$ dydžiu, apytiksliai lygiu elementariajam krūviui e . T. y.

$$Z_1 = Z - \sigma;$$

čia σ yra **ekranavimo konstanta**. Ekranavimo konstanta priklauso nuo to, į kurį sluoksnį pereina elektronas. Jeigu elektronas pereina į K sluoksnį, tada $\sigma = \sigma_K \approx 1$, o jeigu į L sluoksnį, tada $\sigma = \sigma_L \approx 7,4$. Ekranavimo konstanta silpnai priklauso nuo Z .

Atsižvelgus į anksčiau minėtą ekranavimo efektą, (6.4.2) formulėje branduolio krūvio skaičių Z reikia pakeisti efektyviu krūvio skaičiumi $Z - \sigma_K$:

$$h\nu_{K-L} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} (Z - \sigma_K)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right). \quad (6.4.3)$$

Iš čia K-L linijos bangos skaičius¹

$$k_{K-L} \equiv \frac{1}{\lambda_{K-L}} = \frac{\nu}{c} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} (Z - \sigma_K)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) = R(Z - \sigma_K)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right); \quad (6.4.4)$$

čia R yra **Rydbergo konstanta**, kuri apibrėžiama šitaip:

$$R = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \approx 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (6.4.5)$$

(t. p. žr. 1.8 ir 1.10 poskyrius)². Taip pat galima gauti bangos skaičiaus išraiškas kitoms būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro linijoms. Pvz., K-M linijos, kuri spinduliuojama, kai M elektronas ($n = 3$) pereina į vakansiją K sluoksnyje ($n = 1$), bangos skaičius

$$k_{K-M} = \frac{1}{\lambda_{K-M}} = R(Z - \sigma_K)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right); \quad (6.4.6)$$

L-M linijos, kuri spinduliuojama, kai M elektronas ($n = 3$) pereina į vakansiją L sluoksnyje ($n = 2$), bangos skaičius

$$k_{L-M} = \frac{1}{\lambda_{L-M}} = R(Z - \sigma_L)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right); \quad (6.4.7)$$

M-N linijai vietoj σ_L , $1/2^2$ ir $1/3^2$ yra atitinkamai σ_M , $1/3^2$ ir $1/4^2$ ir t. t.

¹ Bangos skaičius dažniau apibrėžiamas su daugikliu 2π , t. y. $k = 2\pi / \lambda$. Bangos skaičiaus apibrėžtis, kuri duota šiame skyriuje ($k = 1 / \lambda$), yra paplitusi spektroskopijoje.

² Kadangi redukuotoji masė m priklauso nuo branduolio masės, tai tikslioji Rydbergo konstantos vertė skirtingiems atomams yra šiek tiek skirtinga. Rydbergo konstantos vertė, kuri gaunama pakeitus redukuotąją masę m tiksliaja elektrono mase, yra žymima R_∞ , o jos vertė yra $R_\infty = 1.09737315685 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ (ši vertė atitinka atomą, kurio branduolio masė yra be galo didelė).

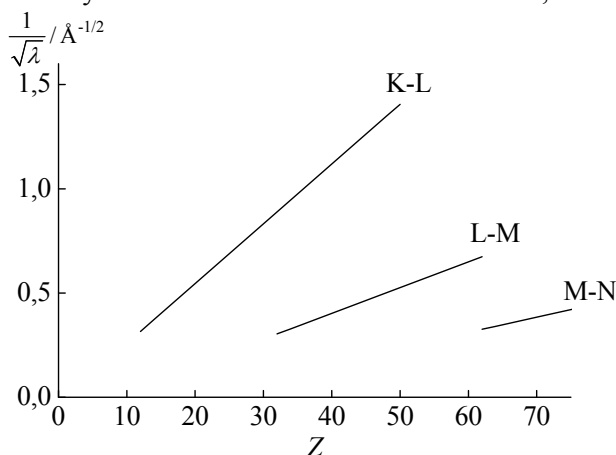
Iš (6.4.4), (6.4.6) ir (6.4.7) lygybių matyti, kad kvadratinė šaknis iš bangos skaičiaus yra tiesiog proporcinga atominiam numeriui Z . Ši sąryšį tarp būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro linijos bangos skaičiaus k ir atominio numerio 1913 m. atrado anglų fizikas Henris Mozlis (*Moseley*). Todėl šis dėsnis vadinamas **Mozlio dėsniu**. Mozlio dėsnį galima užrašyti taip:

$$Z - \sigma = A \frac{1}{\sqrt{\lambda}} = A\sqrt{k}; \quad (6.4.8)$$

čia K-L linijos $A = 1/\sqrt{R[(1/1^2) - (1/2^2)]}$, L-M linijos $A = 1/\sqrt{R[(1/2^2) - (1/3^2)]}$ ir t. t. 6.7 pav. pavaizduota empirinė K-L, L-M ir M-N linijų $1/\sqrt{\lambda}$ priklausomybė nuo atominio numerio Z . Matome, kad ši priklausomybė periodinės elementų lentelės pradžioje esančių elementų atveju (t. y. kai $Z < 70$) yra tiesinė. Buvo nustatyta, kad, didėjant numeriui Z , nukrypimas nuo šios tiesės nėra ryškus ir tampa pastebimas tik M ir N serijų.

Mozlio dėsnis leido paaiškinti elemento atominio numerio fizikinę prasmę: tai yra elementariųjų krūvių skaičius atomo branduolyje. Mozlio dėsnis parodė, kad elemento chemines savybes lemia ne atomo masė, o atomo branduolio elektros krūvis.

Remiantis Mozlio dėsniu, galima nustatyti elemento atominį numerį. Tam reikia išmatuoti būdingosios spinduliuotės bangos ilgį, o paskui taikyti (6.4.8) formulę.



6.7 pav. Mozlio diagramos

6.5. Būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro smulkioji sandara

Naudojant didelės skiriamosios gebos prietaisus, buvo pastebėta būdingojo rentgeno spektro smulkioji sandara: kiekviena linija sudaryta iš dviejų arba daugiau artimų linijų. Paaiškėjo, kad K serijos linijos yra dubletai. Kitų serijų linijos yra sudėtingesnės sandaros (multipletai).

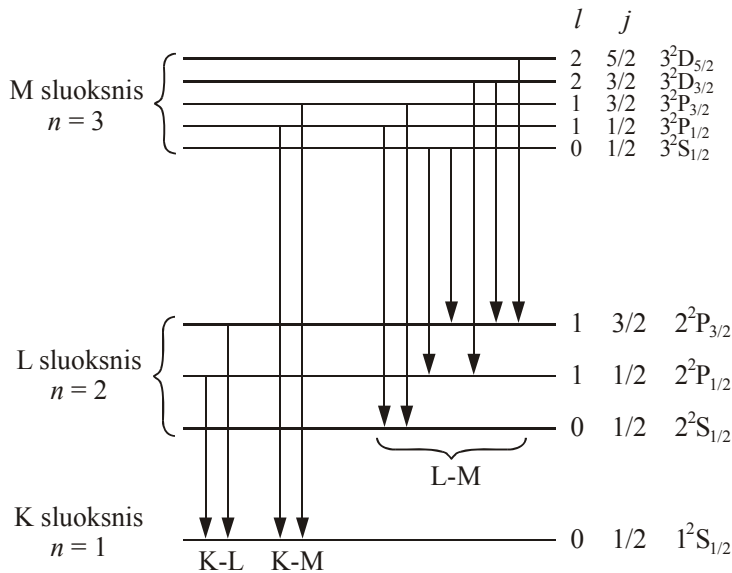
Būdingojo rentgeno spektro linijų sudėtinga sandara atsiranda dėl atomo energijos lygmenų multipletiško (žr. 3.3, 4.2, 5.3 ir 5.4 poskyrius). Kaip minėta 4.2 poskyryje, daugiaelektronio atomo energijos lygmenys klasifikuojami pagal orbitinio mechaninio momento kvantinį skaičių L , sukinio kvantinį skaičių S ir pilnutinio mechaninio momento kvantinį skaičių J . Atomo rentgeno spinduliavimo būsenų momentų skaičiavimas yra ypač paprastas dėl to, kad pradinis elektronų sluoksnis yra visiškai užpildytas, o galutiniam sluoksniui, kad būtų visiškai užpildytas, trūksta tik vieno elektrono (žr. 6.4 pav.). Užpildyto posluoksnio (vadinasi, ir užpildyto sluoksnio) sukininis ir orbitinis momentai lygūs nuliui: elektronų momentai kompensuoja vienas kitą. Taip yra todėl, kad visiškai užpildyto sluoksnio visi elektronai yra „suporuoti“: kiekvienam elektronui galima rasti kitą to paties posluoksnio elektroną, kurio sukinys ir orbitinis momentas tiksliai kompensuoja atitinkamus pirmojo elektrono momentus (žr. 4.4 poskyrį). Sluoksnyje, kuriam trūksta vieno elektrono, yra tik vienas nesuporuotas elektronas. Todėl sukininis ir orbitinis momentai lygūs atitinkamiems šio elektrono momentams: $S = s = 1/2$, $L = l$, $J = j$.

K sluoksnyje yra du s elektronai. Jų $n = 1$, $l = 0$. Jeigu vienas šio sluoksnio elektronas pašalintas, atomo energinė būsena atitinka K sluoksnio vakansiją, t. y. nusakoma kvantiniais skaičiais $n = 1$, $l = 0$, $j = 1/2$. Šio lygmens žymuo yra $1^2S_{1/2}$ (atomo energijos lygmenų žymenys paaiškinti 4.2 poskyryje).

L sluoksnyje yra 8 elektronai, kurių pagrindinis kvantinis skaičius $n = 2$, orbitinis kvantinis skaičius l lygus 0 arba 1. Iš aštuonių L sluoksnio elektronų du yra s posluoksnyje, o likusieji šeši – p posluoksnyje. Jeigu vienas iš šių dviejų s elektronų pašalintas, atomo būseną lemia s posluoksnyje esanti vakansija, kurios $n = 2$, $l = 0$, $j = 1/2$. Atitinkamo energijos lygmens žymuo yra $2^2S_{1/2}$. Jeigu L sluoksnyje pašalintas vienas iš šešių p posluoksnio elektronų, atomo būseną nusako $n = 2$, $l = 1$, $j = 1/2$ (žymuo $2^2P_{1/2}$) arba $n = 2$, $l = 1$, $j = 3/2$ ($2^2P_{3/2}$). Todėl vienašak jonizuotas L sluoksnis turi tris energijos lygmenis: $2^2S_{1/2}$, $2^2P_{1/2}$, $2^2P_{3/2}$.

Taip pat galima įrodyti, kad vienašak jonizuotas M sluoksnis turi penkis energijos lygmenis: $3^2S_{1/2}$, $3^2P_{1/2}$, $3^2P_{3/2}$, $3^2D_{3/2}$, $3^2D_{5/2}$. Jonizuotas N sluoksnis turi septynis energijos lygmenis ir t. t.

Vienašak jonizuotų atomo K, L ir M sluoksnių energijos lygmenys pavaizduoti 6.8 pav. Rodyklėmis parodyti K-L, K-M, L-M linijas atitinkantys šuoliai. Jeigu šuolis galėtų vykti iš bet kurio pradinio sluoksnio polygmenio į bet kurį galutinio sluoksnio polygmenį, tada linijos multipletiškas būtų lygus



6.8 pav. Būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro smulkioji sandara

sluoksnių polygmenio numerį po tą sluoksnį žyminčios raidės „L“, „M“, „N“ (po raidės „K“ numeris nėra įterpiamas, nes K lygmuo nėra suskilęs). Polygmeniai sunumeruoti ta pačia tvarka, kuria jie išdėstyti 6.8 pav., iš apačios į viršų. Pvz., K-L linijos žymimos K-L₂ ir K-L₃ (vartojant Zybano žymenis, tos dvi linijos žymimos atitinkamai K_{α2} ir K_{α1}). Kai kurių linijų Zybano žymenys yra pateikti 6.1 lentelėje.

6.1 lentelė. Kai kurių būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro linijų Zybano ir IUPAC žymenys

Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC
K _{α1}	K-L ₃	K _{β1}	K-N ₃	L _{α1}	L ₃ -M ₅	L _{β2}	L ₃ -N ₅	L _{β5}	L ₃ -O _{4,5}
K _{α2}	K-L ₂	K _{β2}	K-N ₂	L _{α2}	L ₃ -M ₄	L _{β3}	L ₁ -M ₃	L _η	L ₂ -M ₁
K _{β1}	K-M ₃	K _{β3}	K-M ₂	L _{β1}	L ₂ -M ₄	L _{β4}	L ₁ -M ₂	L _ι	L ₃ -M ₁

Praktikoje lengviausia išskirti K-L linijų smulkiają sandarą. Kitos K serijos linijos gali atrodyti singuletinės (viengubos), nes atstumas tarp M, N ir aukštesnių sluoksnių energijos polygmenių yra mažesnis už atstumą tarp L sluoksnių energijos polygmenių (žr. 6.8 pav.). Šis atstumo tarp polygmenių mažėjimas, didėjant kvantiniam skaičiui n , paaiškintas 3.2.5 ir 3.3.5 poskyriuose.

Didinant pirminių elektronų energiją, būdingojo spektro linijų serijos pasirodo ne vienu metu, o paeiliui. Iš pradžių pasirodo ilgabangės serijos, o pačių trumpiausių bangų (su didžiausia energija) K serija pasirodo paskutinė. Pirminis eU energijos elektronas gali išlaisvinti elektroną iš atomo tik tada, kai jo kinetinė energija yra didesnė už elektrono ryšio energiją, kuri lygi mažiausios laisvojo elektrono energijos ir elektrono energijos atome skirtumui. Kadangi mažiausia laisvojo elektrono kinetinė energija lygi nuliui, tai jonizacijos sąlygą galima užrašyti šitaip:

$$eU > -E(nlj);$$

čia $E(nlj)$ yra elektrono energijos lygmuo, kurį nusako kvantinių skaičių trejetas n, l ir j (čia $E < 0$).

Uždaviniai

- Remdamiesi Mozlio dėsniu, apskaičiuokite:
 - aliuminio ir kobalto K-L linijos bangos ilgį;
 - vanadžio K ir L elektronų ryšio energijų skirtumą.
- Apskaičiuokite rentgeno vamzdžio su nikelio anodu įtampą, jeigu K-L linijos ir ištisinio rentgeno spektro trumpabangio krašto bangų ilgių skirtumas lygus $8,4 \cdot 10^{-11}$ m.
- Esant tam tikrai rentgeno vamzdžio su aliuminio anodu įtampai, ištisinio rentgeno spektro trumpabangio krašto bangos ilgis lygus 5 Å. Ar tomis sąlygomis bus matoma būdingosios spinduliuotės K serija, kurios sužadinimo įtampa lygi 1,56 kV?
- Apskaičiuokite titano L elektronų ryšio energiją, jeigu K serijos pirmosios linijos ir K serijos trumpabangio krašto bangų ilgių skirtumas yra lygus $\Delta\lambda = 2,6 \cdot 10^{-11}$ m.
- Apskaičiuokite fotoelektronų, kuriuos išlaisvina cinko K-L spinduliuotė iš geležies atomų K sluoksnio, kinetinę energiją ir greitį.