

**Сфералық потенциалдық шұңқыр.
Үшөлшемді осциллятор. Ядролық
қабықшалар туралы түсінік. Сутегі
тәріздес атом теориясы**

Лекция №10



Сфералық потенциалдық шұңқыр

- Табиғатта кездесетін көптеген бөлшектердің әсерлесу потенциалдары $r \rightarrow \infty$ кезде өте тез ($1/r$ -мен салыстырғанда тезірек) кеміп кетеді. Қандай да бір R аралығынынан тысқары аймақта оларды тіпті ескермеседе, яғни $r > R$ болған кезде оларды $V(r)$ деп есептесе де болады. Мұндай потенциалдарды, әдетте, *аз аралықта әсер ететін потенциалдар* деп атайды.

Осындай тез кемитін потенциалдардың бір мысалы- Вудс-Саксон потенциалы. Ол былайша анықталған:

$$V(r) = -V_0 \left(1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right) \right)^{-1} \quad (15)$$

Мұндағы V_0 – потенциалдар тереңдігі, R - потенциалдар әсер ету аймағы, a - потенциалдар шекарасындағы оның нөлге дейінгі тез кемитін аймағының өлшемі. Бұл потенциал ядролық физикада нейтрондардың ядромен әсерлесуін сипаттауда кеңінен қолданылады. Егер бұл потенциалда a -ның мәнін нөлге дейін кемітсек, онда радиусы R -ға тең сфералық симметриялы потенциалдық шұңқыр аламыз.

- Енді Шредингер теңдеуін сфералық координат жүйесінде шешудің қарапайым, бірақ аса маңызды мысалы ретінде бөлшектің осы сфералық симметриялы тікбұрышты потенциалдық шұңқырдағы қозғалысы жөніндегі мәселені қарастырайық. Мұндай шұңқырдың потенциалдық энергиясы мына өрнекпен анықталады:

$$V(r) = -V_0, \text{ егер } r \leq R \text{ болса} \quad (16)$$

$$V(r) = 0, \text{ егер } r \geq R \text{ болса}$$

Бұл есепте жүйенің толық энергиясының мәніне байланысты екі түрлі жағдай болуы мүмкін. Оның бірі энергияның оң болған, ал екіншісі теріс болған жағдайы. $E > 0$ жағдайында қозғалыс инфинитті болып, жүйенің энергиясы үздіксіз мән қабылдап, спектр тұтас болады. Біз бұл жерде $-E < 0$ болатын жағдайды қарастырамыз. Онда жүйенің толық энергиясы потенциалдық энергияның шексіздіктегі мәнінен аз болады да, бөлшектің қозғалысы финитті, ал энергия деңгейлерінің спектрі дискретті болады. Жүйенің бұл жағдайдағы энергиялық күйі байланысқан күй болып табылады.

Алдымен $l=0$ болатын қарапайым жағдайды қарастырамыз. Бұл жағдай үшін Шредингердің радиал теңдеуі мынадай:

$$\frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] U(r) = 0 \quad (17)$$

Толық энергияның мәні $E < 0$ болғандықтан, $r \leq R$ болатын сфераның ішкі аймағында бұл теңдеу мына түрде жазылады:

$$\frac{d^2 U_1(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 - |E|] * U_1(r) = 0 \quad (18)$$



• Мұндағы $\frac{2\mu}{\hbar^2} [V_0 - |E|] = k^2 \geq 0$ деп белгілесек, онда теңдеудің шешімін мына түрде жазуға болады:

$$U_1(r) = A * \sin kr + B * \cos kr$$

Ал $U_1(0) = 0$ шекаралық шартынан $B=0$ екені шығады да, шешім мына түрде жазылады: $U_1(r) = A * \sin kr$

Енді потенциалдық шұңқырдан тысқары $r > R$ аймағын қарастыралық. Бұл аймақ үшін Шредингер теңдеуі мынадай:

$$\frac{d^2 U_2(r)}{dr^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} |E| * U_2(r) = 0 \quad (19)$$

Мұндағы $\frac{2\mu}{\hbar^2} |E| = k^2 \geq 0$ деп белгілеп алып, теңдеудің шешімін мына түрде жазамыз: $U_2 = C * e^{-kr} + D * e^{kr}$. Шексіздіктегі функцияның шектілік шартынан $D=0$ екені шығады. Онда есептің жалпы шешімі мына түрде жазылады:

$$U(r) = A * \sin kr, \text{ егер } r \leq R \text{ болса}$$

$$U(r) = C * e^{-kr}, \text{ егер } r > R \text{ болса} \quad (20)$$

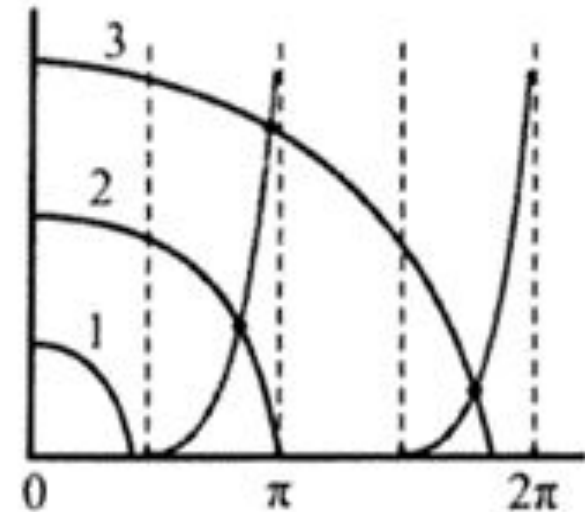
- Екі аймақтың шекарасындағы шешімдерді жымдастыру шарты:
 $U_1(R) = U_2(R)$ және $U_1'(R) = U_2'(R)$ мынадай трансценденттік теңдеуді алуға мүмкіндік береді:

$$-k * ctg(kr) = \kappa$$

Бұл теңдеуді R -ға көбейтіп, одан әрі $\xi = kR \geq 0$ және $\eta = \kappa R \geq 0$ деп белгілеп ала отырып, мынадай теңдеулер жүйесін аламыз:

$$\begin{cases} \eta = -\xi * ctg(\xi), \\ \xi^2 + \eta^2 = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} R^2 \end{cases} \quad (21)$$

Бұл теңдеулер жүйесін графиктің әдіспен шешкен кезде бұл теңдеулер жүйесін қанағаттандыратын ξ және η -ның мәндері $\eta = \xi - ctg(\xi)$ қисығы мен радиусы $\frac{a}{\hbar} \sqrt{2\mu V_0}$ -ға тең шеңбердің қиылысу нүктелері түрінде анықталады. Котангестің мәні теріс шама болғандықтан $\eta = \xi - ctg(\xi)$ қисығы II және IV ширектерде жатады (сурет).



- Енді орбиталық моментінің мәні нөлден ерекше, яғни $l \neq 0$ болатын бөлшектің сфералық шұңқырдағы қозғалысын қарастыралық. Бұл есепті қарастыру үшін Шредингердің радиал теңдеуін пайдалану ыңғайлы. Алдымен $r \leq R$ жағдайын қарастырамыз. $2\mu[V_0 - |E|]/\hbar^2 = k^2$ деп белгілеп алып, $\rho = kr$ өлшемсіз айнымалысына өтсек, радиал теңдеу мына түрде жазылады:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l-1)}{\rho^2} \right) \right] R_l(\rho) = 0 \quad (22)$$

Бұл теңдеудің шешімі: $R_l(\rho) = A * j_l(\rho) + B * \eta_l(\rho)$.

Координаттың бас нүктесіндегі толқындық функцияның шеткілік шартынан $B=0$ екені шығады да, шешім мына түрде жазылады: $R_l(\rho) = A * j_l(kr)$

$r > R$ аймағы үшін радиал теңдеу мына түрде жазылады:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \left(-\kappa^2 - \frac{j(l+1)}{r^2} \right) \right] R_l(r) = 0 \quad (23)$$

Мұндағы $\kappa^2 = 2\mu[|E|]/\hbar^2 \geq 0$.

•Бұдан әрі $\rho=ikr$ айнымалысына өтіп, түрі жағынан дәл $r \leq R$ жағдайындағы теңдеуге сәйкес келетін теңдеу аламыз. Бірақ бұл жағдайда аргументтің өзгеру аймағы нөл нүктесін қамтымайтын болғандықтан, соңғы теңдеудің шешімінен алғашқыдағы тәрізді $\eta_l(\rho)$. Нейнман функциясын шығарып тастауға негіз жоқ. Бұл кезде толқындық функцияның шексіздіктегі шекаралық шартына сәйкес, $j_l(\rho)$ және $\eta_l(\rho)$. функцияларынан шексіздікте экспонента түрінде кемитін комбинация құру керек. Мұндай функция $h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + i \eta_l(\rho)$ түрінде анықталған Хенкельдің бірінші текті сфералық функциялары болып табылады.

Сонымен $l \neq 0$ болғандағы жалпы шешім:

$$R(r) = \begin{cases} A * j_l(\rho), & \text{егер } r \leq R \text{ болса,} \\ C * \eta_l(\rho) & \text{егер } > R \text{ болса} \end{cases} \quad (24)$$

Энергияның квантталған деңгейлерін табу үшін шешімдерді аймақтардың шекарасында жымдастыру шартын пайдалана отырып, мына теңдуді аламыз:

$$\frac{k * j_l'(ka)}{j_l(ka)} = \frac{ik * h_l^{(1)'}(ika)}{h_l^{(1)}(ika)} \quad (25)$$



Осы трансцендентті теңдеудің k_1, k_2, \dots шешімдері сәйкес $E_1^{(l)}, E_2^{(l)}, \dots$ энергия деңгейлерін және R_1^l, R_2^l, \dots толқындық функцияларын анықтауға болады. Сфералық шұңқырдағы деңгейлердің реті мынадай:

$$(nl) \rightarrow (1s); (1p); (2s, 1d); \dots$$

Энергия деңгейлері $(2l+1)$ еселі айныған.



Үшөлшемді гармоникалық осциллятор

- Кейбір атом ядроларының қасиеттерін зерттегенде ядро құрамындағы нуклондар

$$V(r) = \frac{\mu w^2}{2} r^2 \quad (26)$$

Потенциалдық өрісте қозғалып жүр деп қарастыру орынды. Мұндай өрісті әдетте үшөлшемді немесе сфералық гармоникалық осциллятор деп атайды. Бұл жағдай үшін Шредингердің радиал теңдеуі мына түрде жазылады:

$$\frac{d^2 U_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - \frac{mw^2}{2} r^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] U_{nl}(r) = 0 \quad (27)$$

Бұл теңдеуге $r_0 = \sqrt{\hbar/mw}$ түріндегі осцилляторлық параметрді енгізе отырып $\xi = r/r_0$ және $\varepsilon = E/\hbar w$ өрнектері арқылы анықталған жаңа, өлшемсіз айнымалыларға өтеміз. Бұл айнымалыларды (27) теңдеуі мына түрде жазылады:

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 - \frac{l(l+1)}{\xi^2} + 2\varepsilon \right] U_{nl}(\xi) = 0 \quad (28)$$

- Бұдан әрі $\varepsilon = 2(n + s + \frac{1}{4})$ және $l(l+1)=4s(s-1/2)$ теңдіктерімен анықталған жаңа n және s айнымалыларын енгізіп және $z=\xi^2$ деп белгілеп, одан соң

$$U(z) = \exp\left(-\frac{z}{2}\right) * z^s * W(z) = 0 \quad (29)$$

Өрнегімен анықталған $W(z)$ функциясын енгізе отырып, осы белгісіз функцияға қатысты мынадай теңдеу аламыз:

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + \left(2s + \frac{1}{2} - z \right) \frac{d}{dz} + n \right] * W(z) = 0 \quad (30)$$

Бұл теңдеу айнымаған гипергеометриялық функцияның мына теңдеуіне сәйкес:

$$z \frac{d^2}{dz^2} + (c - z) \frac{d\Phi}{dz} - a\Phi \quad (31)$$

Ал бұл теңдеудің кез келген a және нөлге тең емес теріс c саны үшін шешімі мынадай:

$$\Phi = F(a, c, z) = 1 + \frac{a}{z} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (32)$$

Біз қарастырып отырған (30) теңдеуі жоғарыдағы (31) теңдеуімен сәйкес. Олай болса (32)-ге сәйкес (30) ның шешімі мынадай:

$$W(z) = F\left(-n, 2s + \frac{1}{2}, z\right) \quad (33)$$

- z шексіздікке ұмтылғанда бұл шешім нөлге ұмтылу үшін мұндағы қатар қандай да бір мүшесінде үзілуі тиіс. Бұл талап $n=0,1,2,\dots$ болғанда орындалады. Жоғарыдағы $l(l+1)=4s(s-1/2)$ теңдеуінен $s_1 = \frac{l+1}{2}$ және $s_2 = -\frac{l}{2}$ екені шығады. Энергияны потенциалдық шұңқырдың түбінен бастап есептей бастасақ, энергия әрқашанда оң шама болады, онда $s=(l+1)/2$ деп ала отырып, $\varepsilon = 2(n + s + \frac{1}{4})$ теңдеуінен

$$E_{nl} = \left(2n + l + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega \quad (34)$$

Екенін аламыз. Бұл үшөлшемді осциллятордың квантталған энергия деңгейлері. Мұндағы $n, l=0,1,2,\dots$ мәндерін қабылдайды. (27)-ге сәйкес нормаланған радиал функция мынадай:

$$U_{nl}(\xi) = N_{nl} * e^{-\frac{\xi^2}{2}} * \xi^{l+1} F(-n, l + \frac{3}{2}, \xi^2) \quad (35)$$

Онда қарастырылып отырған жүйенің толық толқындық функциясы мынадай:

$$\Psi_{nim}(r) = \frac{r_0}{r} * U_{nl}\left(\frac{r}{r_0}\right) * Y_{im}(\theta, \varphi) \quad (36)$$

Энергияның (34) өрнегіне n, l кванттық сандары $2n+l=L$ түрінде кіреді де $L = 0,1,2,\dots$ мәндерін қабылдайды. Онда $L \geq 2$ мәндерін әрқайсысын n және l -дің әр түрлі комбинациялар арқылы табуға болады, яғни $L \geq 2$ болатын энергия деңгелерінің әрқайсысы айныған.

- Сфералық осциллятордың шұңқырдағы бөлшектердің стационар күйлерін белгілеу үшін оның $l=0,1,2,\dots$ орбиталық моменттерінің орнына сәйкес s,p,d -латын әріптерін қолданады. Ал бұл әріптердің алдына n -нің мәнінен 1-ге артық болатын сан қойылады, яғни стационар күйлерді $(n+1, l)$ символымен белгілейді. Ол сан F көпмүшелігінің ξ^2 айнымалысына қатысты дәрежесін анықтайды.

Мына кестеде үшөлшемді гармоникалық осцилляторды төменгі стационарлық күйлерінің сипаттамалары келтірілген:

Λ	n	l	Күй символы	$R_{nl}(r)$	$E_\Lambda/\hbar\omega$	N_Λ
0	0	0	1s	$\frac{2}{\pi^{1/4}r_0^{3/2}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$	3/2	1
1	0	1	1p	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4}r_0^{3/2}} \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$	5/2	3
2	1	0	2s	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4}r_0^{3/2}} \left(\frac{r^2}{r_0^2} - \frac{3}{2}\right) \times$ $\times \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$	7/2	6
	0	2	1d	$\frac{\sqrt{16/15}}{\pi^{1/4}r_0^{3/2}} \frac{r^2}{r_0^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$		

- Бұл кестеден үшөлшемді гармоникалық осциллятордың энергия спектрлерінің эквидисантты, яғни бірдей аралықта орналасқан деңгейлер жүйесін құрайтыны көрініп тұр. Деңгейлер аралығы $\hbar\omega$, ал энергияның ең төменгі мәні - $3\hbar\omega/2$. Оның үстіне $\Lambda \geq 2$ мәнінен бастап l бойынша «кездейсоқ айну» орын алады. Бұл әсерлесу ерекшелігіне байланысты. Сонымен қатар әрбір меншікті мәнге тек жұптылықтары бірдей болатын меншікті меншікті функциялар ғана сәйкес келеді. Ал толқындық функцияның жұптылығы $P = (-1)^l$ мәнімен анықталады.

Λ	n	l	Күй символы	$R_{nl}(r)$	$E_\Lambda/\hbar\omega$	N_Λ
0	0	0	1s	$\frac{2}{\pi^{1/4}r_0^{3/2}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$	3/2	1
1	0	1	1p	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4}r_0^{3/2}} \cdot \frac{r}{r_0} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$	5/2	3
2	1	0	2s	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4}r_0^{3/2}} \left(\frac{r^2}{r_0^2} - \frac{3}{2}\right) \times$ $\times \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$	7/2	6
	0	2	1d	$\frac{\sqrt{16/15}}{\pi^{1/4}r_0^{3/2}} \frac{r^2}{r_0^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$		

Атомдағы ядро қозғалысын ескеру

- Ядро массасы электрон массасымен салыстырғанда аса үлкен болғанымен, бәрібір ол шекті. Осыған байланысты жүйенің қозғалысы ядро маңында емес, ядро мен электронның ортақ массалар центрінің маңында болады. Есепті осылай қарастыру бұған дейін анықталған энергия спектрлерін бір-бірін өзгертеді. Енді осы мәселені қарастырайық.

Электрон массасы $-m$ оның орнын анықтайтын радиус вектор \vec{r}_1 ал сәйкес ядро үшін M_0 және \vec{r}_2 болсын. Онда мұндай жүйенің Гамильтон операторы:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2M_0} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (37)$$

түрінде жазылады. Енді электрон мен ядроның жекелеген координаттарынан олардың салыстырмалы координаты мен атом массалар центрінің координаттарына көшелік. Яғни мына түрлендірулерді жасалық:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 + \vec{r}_2 \text{ және } \vec{R} = \frac{m\vec{r}_1 + M_0\vec{r}_2}{m + M_0} \quad (38)$$



- Онда бұл айнымалыларда жүйенің Гамильтон операторы түрде жазылады:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{Ze^2}{r} \quad (39)$$

Мұндағы $\mu = mM_0/(m + M_0)$ жүйенің келтірілген, $M = m + M_0$ толық массасы. Бұдан әрі осы гамильтонианмен Шредингердің $\hat{H}\Psi(r, R) = E\Psi(r, R)$ стационар теңдеуін шешу керек. Жоғарыдағы (39) гамильтонианында айнымалылар ажыратылып тұрғандықтан, жүйенің толық энергиясын $E = E_r + E_R$,

ал толқындық функциясын $\psi(r, R) = \psi(r) \cdot \psi(R)$ түрінде іздестірудің мүмкіндігі бар. Мұндағы E_r бөлшектердің салыстырмалы қозғалысының, ал E_R олардың массалар центрі қозғалысының энергиясы. Онда мұндай жүйенің Шредингер теңдеуін бір-бірінен тәуелсіз мынадай екі теңдеулер жүйесі түрінде жазуға болады:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi(r) - \frac{Ze^2}{r} \psi(r) = E_r \psi(r) \\ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi(R) = E_R \psi(R) \end{cases} \quad (40)$$

Бұл жердегі екінші теңдеу жүйесінің массалар центрінің еркін қозғалатынын көрсетеді.

Бұл теңдеудің шешімі мынадай $\psi(R) = \exp(i\vec{K}\vec{R})$ жазық толқын. Мұндағы $K = \sqrt{2ME_R/\hbar^2}$. Ал бірінші теңдеу массасы келтірілген массаға тең бөлшектің кулондық өрістегі қозғалысын сипаттайды. Бөлшектердің салыстырмалы қозғалысының энергиясы:

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \frac{1}{1+m/M_0} \approx \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \left(1 - \frac{m}{M_0}\right) \quad (41)$$

Бұл өрнектен көрініп тұрғандай, энергия деңгейлері ядро массасының шектілігін

Сутегі тәрізді атомдардың теориясы

- Изотоптар деп зарядтары бірдей, ал массалары әр түрлі ядроларды айтатыны белгілі. Изотоптар бір-бірінен ядро құрамындағы нейтрондардың санымен өзгешеленеді. Мысал ретінде сутегі ядросының изотоптарын қарастыралық. Сутегі атомы ${}^1_1\text{H}$, бұл атомның ядросы бір протоннан ғана тұрады. Дейтерий атомы ${}^2_1\text{H}$ бұл атомның ядросы бір протон және бір нейтроннан тұрады. Тритий атомы ${}^3_1\text{H}$. Ядролардың массаларының әр түрлі болуымен байланысты бұл атомдардың ядро-электрон жүйелерінің келтірілген массалары да әр түрлі болады. Осыдан келіп олардың спектр сызықтарының бір-біріне қатысты ығысатыны шығады. Бұл құбылыс *спектр сызықтарының изотоптық ығысуы* деп аталады. Әрине, ығысудың шамасы аса үлкен емес, дегенмен де қазіргі заманның спектрлік құралдары оларды байқауға мүмкіндік береді. Кезінде мәселе керісінше қойылып, осы ығысудың шамасы арқылы сутегі изотоптарының массасы анықталған болатын. Бұл ығысумен қатар спектр сызықтарының қарқындылықтары арқылы қоспадағы сәйкес изотоптардың салыстырмалы концентрациясын да анықтайды.

