ВОДОРОД АТОМИ СПЕКТРИНИНГ КВАНТ МЕХАНИК ТАЛҚИНИ

П.М.Жалолова

Мақолада водород атомининг орбиталари Шредингер тенгламаси асосида талқин қилиниб, квант параметрларни тушунтиришга имкон берувчи виртуал лаборатория яратишдаги натижалар келтирилган ва назарий маълумотлар билан таққосланган.

Таянч сўзлар: *квант, спектр, электрон, фотон, потенциал, тўлқин, энергия, атом, эффект, орбита.*

В статье дана интерпретация орбит атомов водорода на основе уравнения Шредингера, приведены результаты работы по созданию виртуальной лаборатории, дающей возможность объяснения квантовых параметров, и сопоставлены с теоретическими положениями.

Ключевые слова: *квант, спектр, электрон, фотон, потенциал, волна, энергия, атом, эффект, орбита.*

The article gives the interpretation of the orbit of hydrogen atoms on the basis of Shredenger equation, as well as the results concerning the creation of virtual laboratory, that helps to explain quantity parameters. The results are compared with theoreatical thosits.

Key words: *quantum, spectrum, electron, foton, potensial,current, wave, atom, effect, orbit.*

Маълумки, бугунги кун физика ва техника тараққиётида квант механикаси етакчи ва муҳим соҳа бўлиб хизмат қилмоқда. Олий таълим муассасаларида ўқитилаётган квант механикаси фани математик ҳисоблаш усуллари ва қонуниятларининг мураккаблиги талабаларнинг фанни ўзлаштиришида муаммолар туғдирмоқда. Бу эса келажак авлоднинг фан ва техника тараққиётидаги ўз ўрнини топишига жиддий таъсир кўрсатади.

Ушбу мақолада водород атомидаги электронлар ҳолатини ёритувчи стационар тенгламалар моҳияти ва ечимлари билан таништирилиб, лаборатория экспериментларида олинган натижалар ва муаллиф томонидан яратилган виртуал лаборатория иши натижалари таққосланади.

Электроннинг марказий майдондаги ҳаракати – квант механикаси орқали баён қилиниб, Шредингер тенгламасини ечиш орқали топилади.

$$\Delta\Psi+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]\Psi=0 \qquad (1)$$

Бунда *U* – электроннинг ташқи майдондаги потенциал энергияси, *m* – массаси, Ψ – тўлқин функцияси, *E* – тўла энергияси, *h* – Планк доимийси, Δ – Лаплас оператори. Умумий ҳолда тўлқин функцияси (Ψ) физик маъно касб этиши учун қаралаётган системага тегишли бутун фазода чекли, бир қийматли ва узлуксиз бўлиши зарур. Унинг квадрати заррани фазонинг берилган соҳасида топиш эҳтимоллигини билдиради:

$$W=[\Psi(x,y,z)]^2=\Psi^*(x,y,z)\Psi(x,y,z) \qquad (2)$$

Ψ микро заррани фазонинг *x,y,z* нуқтасида топиш эҳтимоли – заррача булути зичлиги деб ҳам юритилади.

Водород атомида протон атрофида айланаётган электронни тасаввур қилайлик. Классик механикага кўра, орбитада ҳаракатланаётган электронни ойга, протонни ерга қиёслаш мумкин. Квант механикасидаги электронни булут деб тасаввур қиламиз. Биринчи орбитадаги булут зичлиги фазонинг кичик радиусли айланасида қуюқроқ, катта радиусли нуқталарида сийракроқ бўлади ва марказдан узоқлашган сари сийраклашиб боради. Булут зичлигининг бутун фазо бўйича йиғиндиси бирга тенг деб нормал ҳолга келтирилади [2].

Ўзгарувчиларни ажратиш учун тўлқин функцияни қуйидагича қидирамиз:

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\Theta(\theta)\$\ (\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi) \qquad (3)$$

У ҳолда 1-тенгламанинг радиал қисми қуйидаги кўринишга эга бўлади [1]:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_0}{dr}\right)+\frac{2m_0}{\hbar^2}(E+\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r})R_0=0 \qquad (4)$$

Қуйида бурчакларга боғлиқ сферик функция $Y_{B,l}(\theta,\varphi)$ ва радиусга боғлиқ радиал тўлқин функция *R(r)* нинг уйғонган ҳолатлари учун ҳисобланган кўринишлари келтирилган:

$\Psi_{4,2,\pm2}$	$Y(\theta,\varphi)=\pm\sqrt{\frac{7}{5}}(5\cos^3\theta-2\cos^2\theta)$	$\mathrm{R(r)}=\frac{7}{8}(5\cos^3\theta-2\cos^2\theta)e^{-i\varphi}$
$\Psi_{4,3,\pm1}$	$Y(\theta,\varphi)=\pm\sqrt{20}(5\cos^2\theta(5\sin^2\theta\ -1))$	$\mathrm{R(r)}=\frac{21}{32}(5\cos^2\theta(5\sin^2\theta\ -1)e^{i\varphi}$
$\Psi_{4,3,\pm2}$	$Y(\theta,\varphi)=\pm18\pi\sin^4\theta\ \cos^2\theta$	$\mathrm{R(r)}=\frac{105}{16}\sin^4\theta\cos^2\theta e^{-i\varphi}$
$\Psi_{4,3,\pm3}$	$Y(\theta,\varphi)=\pm\frac{17}{2}((5\cos^3\theta-2\cos^2\theta))$	$\mathrm{R(r)}=\frac{35}{32}((5\cos^3\theta-2\cos^2\theta)e^{-i\varphi}$
$\Psi_{4,3,0}$	$Y(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{1}{3}}(\sin^2\theta(5\cos^3\theta-1)$	$\mathrm{R(r)}=\frac{7}{8}(\sin^2\theta(5\cos^3\theta-1)e^{i\varphi}$

Ушбу назарий маълумотлар талабаларнинг лаборатория машғулотларида водород атоми спектрини кузатиб ва таққослаб, таҳлил қилиш асосида илмий тасаввурини кенгайтиришга замин ҳосил қилади.

Лаборатория ишини бажаришдан олдин талабалар қуйидаги назарий маълумотлар билан танишган бўлишлари зарур.

Водород атоми битта протон ва унинг атрофида айланувчи битта электрондан иборат энг оддий атом бўлгани учун унинг нурланиш спектри ҳам содда қонуниятлар билан ифодаланади. 1885 йилда Бальмер водород атомининг кўзга кўринадиган спектр чизиқлари қуйидаги қонуниятга бўйсунишини кўрсатди:

$$\nu^* = R(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2})\ \text{n=3, 4, 5...,}$$

бу ерда $\nu^* = \frac{1}{\lambda}$ - тўлқин сони, l - тўлқин узунлиги, R - Ридберг доимийси (R=109678см$^{-1}$ бўлганда тажриба натижалари яхши тушунтирилади). Кейинчалик водород атоми нурланиш спектрининг бошқа сериялари ҳам ўрганилди. Бу нурланиш чизиқлари спектрнинг ультрабинафша қисмида ётувчи Лайман, инфрақизил қисмида ётувчи Пашен, Брэккет, Пфунд, Хемфри сериялари деб аталади:

$$\nu^* = R(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}),\ \text{n=2,3,4,...}\quad \text{Лайман, 1906}$$

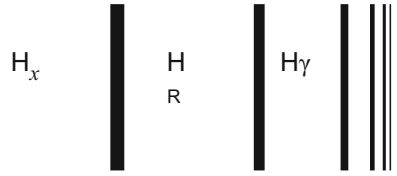
$$\nu^* = R(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}),\ \text{n=4,5,6,...}\quad \text{Пашен, 1908}$$

$$\nu^* = R(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}),\ \text{n=5,6,7,...}\quad \text{Брэккет, 1922}$$

$$\nu^* = R(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}),\ \text{n=6,7,8,...}\quad \text{Пфунд, 1924}$$

$$\nu^* = R(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2}),\ \text{n=7,8,9,...}\quad \text{Хемфри, 1953}$$

Ҳар бир серияга тегишли биринчи чизиқ *n* нинг минимал қиймати билан аниқланиб, минимал частотага эга бўлади. *n* ортиши билан серия чизиқлари бир-бирига яқинлашиб, спектрал чизиқ частотаси эса ортиб боради. $n\to\infty$ да H_∞ - серия чегараси ҳосил бўлади.



1-расм.

Лаборатория ишида фойдаланиладиган оптик спектрометрда Бальмер сериясининг биринчи тўртта чизиғи яхши кузатилади (1-расм).

Водород атоми спектрал серияларини умумлашган Бальмер формуласи билан ифодалаш мумкин:

$$\nu^* = R(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}), \qquad (5)$$

m=1,2,3,... ва *n=m+1,m+2,...* Бу формулада *m* берилган серия учун ўзгармас бўлади. (2) формуладан Ридберг – Ритц комбинация принципи келиб чиқади. Бу принципга кўра, бирор серияга тегишли иккита тўлқин сонлари айирмаси бошқа серияга тегишли бирор спектрал чизиқ тўлқин сонига тенг бўлади. Умумлашган Бальмер формуласини қуйидаги кўринишда ҳам ёзиш мумкин:

$$\nu^* = R(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}) = T(m) - T(n), \qquad (6)$$

Бу ерда *T(m)* ва *T(n)* – спектр термлари ёки термлар деб аталади. Борнинг иккинчи постулатига кўра

$$h\nu = h\nu^* = E_m - E_n$$

Иккинчи томондан,

$$h\nu = h\nu^* c = hcT(m) - hcT(n) = hcR(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}) \qquad (7)$$

Демак, терм маълум стационар ҳолатни, термлар айирмаси эса икки стационар ҳолат айирмасини ёки нурланиш энергиясини ифода қилар экан, чунки:

$$E_m = \frac{hcR}{m^2} \text{ ва } E_n = \frac{hcR}{n^2} \quad (8)$$

Электроннинг водород атомидаги ҳолати Шредингер тенгламаси билан ифода қилинади. Шредингер тенгламасининг ечими эса электроннинг энергия ҳолатлари учун қуйидаги формулани беради:

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{2\pi^2 m_e e^4}{h^2}\frac{1}{n^2} \quad (9)$$

Бу формулада m_e – электроннинг массаси, e – унинг заряди, $n=1,2,3...$ бош квант сони деб аталади [1]. E_n қийматлари эса атомнинг стационар ҳолатларидаги энергия қийматини кўрсатади. (8)дан E_n ва E_m ҳолатлар энергия фарқлари учун

$$h\nu^* c = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 h^2}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (10)$$

ҳосил бўлади. Бу формулани (7) билан таққосласак, Ридберг доимийси учун қуйидаги ифодани оламиз:

$$R_\infty = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 h^3 c} \quad (11)$$

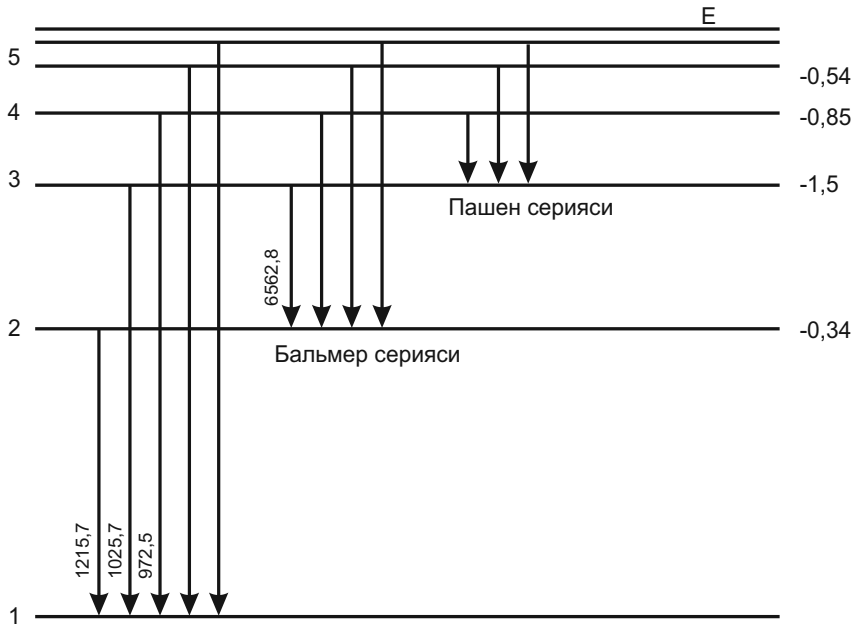
Бу ерда Ридберг доимийсига ∞ индекси қўйилди, чунки бу формулани олишда водород атомининг ядроси тинч туради ва унинг массаси чексиз катта деб ҳисобланган. Аслида эса водород атомининг ядроси чекли массага эга ва у билан электрон умумий масса маркази атрофида ҳаракатланади. Бу ҳолни эътиборга олиш учун (11) формуладаги электрон массаси m_e ни қуйида келтирилган масса билан алмаштириш керак:

$$\mu = \frac{M_H m_e}{M_H + m_e} \quad (12)$$

бу ерда M_H – водород атоми ядросининг массаси. У ҳолда

$$R = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m_e}{M_H}} \quad (13)$$

бўлади. Водород атоми учун $R=109677,6\ см^{-1}$ келиб чиқади. Бу қиймат Ридберг доимийсининг назарий қиймати $R_\infty=109737,3\ с^{-1}$ дан бироз фарқ қилади. 2-расмда водород атомининг энергия сатҳлари диаграммаси кўрсатилган. Сатҳлар орасидаги ўтишлар стрелкалар билан ифодаланган.



2-расм.

Берилган серия чизиклари учун m нинг қиймати ўзгармас бўлиб, n эса m+1 дан ¥ га қадар ўзгаради [3]. Биз кузатадиган Бальмер серияси учун m=2 ва яхши кузатиладиган биринчи тўрт спектрал чизиқлар учун n=3,4,5,6 қийматларни қабул қилади.

Лаборатория экспериментини ўтказиш тартиби

Тажриба схемаси йиғилади.

1. Симоб, водород ва неон лампаларидан фойдаланиб, спектрометр градуировкаланади.

2. Водород спектр чизиқларининг ($H_aH_bH_g$ ва H_d) тўлқин узунлиги ўлчанади ва Бальмер формуласининг тўғри бажарилиши текширилади.

3. Водород учун олинган ҳар бир спектр чизиқ тўлқин узунлиги учун Ридберг доимийси аниқланади ва ўртачаси унинг жадвалда берилган қиймати билан таққосланади [2].

Ушбу экспериментда олинган натижалар аввал виртуал лабораторияда кузатилса ва эксперимент натижалари билан таққосланса, талабаларнинг фанни ўзлаштириш самарадорлиги ошишига эришилган бўлар эди.

Шунинг учун юқорида кўриб ўтилган экспериментнинг виртуал лабораториясини яратиш мақсадида Maple дастуридан фойдаландик.

Дастурлаш воситалари асосида қуйидаги ифодаларнинг Mapleдаги амаллар кетма-кетлиги бажарилди:

$$P(x,l,m):=\left[\left[l=0,1\frac{1}{2^l l!}\cdot(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\cdot\left[\frac{d^l+m}{dx^l+m}(x^2-1)^l\right]\right]\right] \tag{14}$$

$$\mathrm{Y}=(,,\varphi,l,m)\to\sqrt{\frac{1}{4}\frac{(2l+1)(l-m)!}{\pi(l+m)!}}P(\cos(\theta),l,m)e^{im\varphi} \tag{15}$$

ифодалари, ҳар бир орбиталга мос келувчи функциялар ва квант сонлар киритиб ўтилди

$$\frac{1}{4}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\sqrt{6}\left[1=0,1,\frac{1}{2}\sqrt{1-\cos(\theta)^2}\left[\frac{d^2(\cos(\theta)^2-1)}{dx^2}\right]\right]e^{i\varphi}\right)$$

$$Y1\,1(\mathrm{theta},\mathrm{phi}):=-\frac{\mathrm{sqrt}(3)}{\mathrm{sqrt}(4\cdot\mathrm{pi})}\cdot(\sin(\mathrm{theta})(\cos^2(\mathrm{theta}))-1)\cdot\exp(-i\cdot\mathrm{phi})$$

$$(\theta,\varphi)\to-\frac{\sqrt{3(\sin(\theta)(\cos(\theta)^2)-1)e^{-i\varphi}}}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y1\,1(\mathrm{theta},\mathrm{phi}):=(\left|Y1\,1(\mathrm{theta},\mathrm{phi})\right|)^2$$

$$(\theta,\varphi)\to\left|Y1\,1(\theta,\varphi)\right|^2$$

$$Y1\,1(\mathrm{theta},\mathrm{phi}):=-\frac{\mathrm{sqrt}(9)}{\mathrm{sqrt}(2)}\cdot((\sin^2(\mathrm{theta}))-1))$$

$$(\theta,\varphi)\to-\frac{\sqrt{9}((\sin^2)(\theta)(\cos(\theta)^2)-1)}{\sqrt{2}}$$

ва текисликда атом орбитали графигини чизиш буйруғи [3]:

$$plot(YY1\,1(\mathrm{theta},\mathrm{phi}),coords=\mathrm{polar},axiscoordinates=\mathrm{polar})$$

асосида водород атоми орбиталларининг квант сонларига боғлиқ ўзгариш графикларини тасвирлаш мумкин.

Шундай қилиб, талабалар биз яратган виртуал лаборатория ишлари билан танишиб, сўнг атом физикасига оид лаборатория эксприментларини ўтказишса, уларнинг фанга қизиқишлари ортади, физик ҳодиса ва қонуниятларни чуқурроқ англаб етишларига имкон яратилади ва илмий дунёқарашларининг ошишига зарурий манба бўлиб хизмат қилади.

Адабиётлар:

1. Шпольский Э.В. Атом физикаси. I том. - Т.: Ўқитувчи, 1970.
2. Ландсберг Г.С. Оптика. - М.: Наука, 1976.
3. Тихоненко А.В. Компьютерный практикум по общей физике. Часть 5. Квантовая физика: Учебное пособие по курсу «Общая физика».- Обнинск: ИАТЭ, 2004.
4. Мултановский В.В., Василевский А.С. Курс теоретической физики. Квантовая механика.-М.: Просвещение, 1991.
5. Расулов Э. ва б. Квант физикаси. - Т.: Фан ва технология, 2009.-17б б.
6. Расулов Э. ва б. Квант физикасидан масалалар тўплами. - Т.: Фан, 2006.- 270 б.

Наманган давлат университети,
2018 йил 23 майда қабул қилинган
(Тақризчи: доц. Носиров)